Uma breve introdução à

Análise Numérica

Notas de Aula by Sid

Estas notas devem ser usadas apenas como um guia para o curso e não como referência principal.
Estas notas estão em fase de desenvolvimento, logo podem conter (muitos) erros. Use com moderação.

Versão 0.1461, 15 de maio de 2019

1 | Aproximando raízes de equações de uma variável

em breve...

1.1 Soluções de equações de uma variável

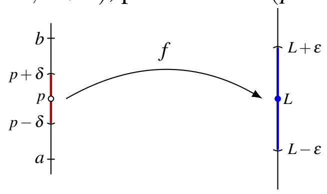
Nesta seção vamos nos ocupar com a terefa de encontrar (ou pelo menos aproximar) raízes para funções reais. Uma ***raíz*** para uma função f é um valor p para o qual $f(p) = 0$, de maneira equivalente, uma raíz p para f é uma solução para a equação $f(x) = 0$.

Antes de começarmos, vale a pena relembrar alguns fatos importantes.

Seja $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ uma função. Diz-se que o número L é o ***limite*** de f no ponto $p \in [a,b]$, i.e.,

$$\lim_{x \to p} f(x) = L,$$

se para todo intervalo $(L-\varepsilon, L+\varepsilon)$, $\varepsilon > 0$, em torno de L, existir um intervalo $(p-\delta, p+\delta)$, $\delta > 0$, em torno de p, tal que $f(x) \in (L-\varepsilon, L+\varepsilon)$, para todo $x \in (p-\delta, p+\delta)$ com $x \neq p$ (veja a figurinha abaixo).



Intuitivamente: f leva pontos próximos a p para pontos próximos a L.

Note que na definição de limite, não é necessário saber o valor de f no ponto p. Mais que isso, nem é preciso que a função f esteja definida em p. Afinal, estamos apenas interessados no comportamento de f nas proximidades do ponto.

No caso em que a função está definida no ponto p e o limite de f em p coincide com $f(p)$, dizemos que a função é ***contínua no ponto p***. Se ela é contínua para todo ponto em seu domínio, dizemos que f é ***contínua***. Intuitivamente, isso significa que o gráfico da função f não possui nenhum furo[1].

Uma propriedade bem legal de funções contínuas é que elas preservaram compacidade[2], de maneira mais simples, se $[a,b]$ é um intervalo (fechado!) contido no domínio de f, então a imagem desse intervalo pela função f é também um intervalo.

Assumindo[3] que isso seja verdade, seja $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ uma função contínua. Então a imagem de f, i.e., $f([a,b])$ é um intervalo. Denotemos esse intervalo por $[c,d] := f([a,b])$. É claro que $f(a), f(b)$ estão contidos[4] em $[c,d]$. Sabemos ainda que o número 0 está entre $f(a)$ e $f(b)$ se, e somente se, $f(a)f(b) \leq 0$ (essa desigualdade implica que $f(a)$ e $f(b)$ têm sinais opostos ou que pelo menos um deles é zero). Isso significa, então, que deve existir um número $p \in [a,b]$ tal que $f(p) = 0$ (por que?).

Theorem 1.1.1 Seja f uma função contínua. Se $[a,b]$ é tal que $f(a)f(b) < 0$, então existe $p \in (a,b)$ tal que $f(p) = 0$.

Demonstração. em breve... □

O teorema acima se chama Teorema de Bolzano e foi provado por Bolzano uns 200 anos atrás.[5] Intuitivamente: se uma função contínua muda de sinal em dois pontos, a e b, então o gráfico dessa função deve intersectar o eixo x entre a e b (veja figura).

Com o uso do teorema acima, a tarefa de encontrar uma raíz para uma função f se torna bem mais simples.[6] Comece encontrando um intervalo que contenha a raíz (usando o teorema de Bolzano), para só então tentar encontrar (ou aproximar) a raíz que está contida nesse intervalo.

Método da Bisseção

Um dos métodos mais simples para aproximar zeros de funções é chamado de ***método da bisseção***. Dada uma função contínua f, o método da bisseção é descrito a seguir.

Encontre dois pontos a e b (eles são chamados de ***estimativas iniciais***) satisfazendo $f(a)f(b) < 0$.

1. Dê novos nomes a esses pontos: $a_1 = a$ e $b_1 = b$ (para indicar que estamos no passo[7] 1)

[1] nenhum ponto está faltando

[2] Se essa palavra soou estranho para você, visite o link https://pt.wikipedia.org/wiki/Espaço_compacto e descubra o que isso significa

[3] Se o resultado acima te parece pouco intuitivo, veja uma prova nest link

[4] afinal esse intervalo é a imagem de f

[5] e uma prova desse teorema pode ser encontrada no wikipedia.com. Esse teorema é um caso particular do Teorema do Valor Intermediário.

[6] ou não, tente encontrar um intervalo que contenha uma raíz para $f(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{1+10^{100}|x-1.01|}$

[7] Se você já passou do passo 1, o índice deve ser igual ao passo em que você está

2. Calcule o ponto médio do intervalo $[a_1, b_1]$, i.e., $p_1 = \frac{a_1+b_1}{2}$.
3. Calcule o valor de f em p_1. Se $f(p_1) = 0$, então você encontrou uma raíz para f em $[a,b]$. Tarefa cumprida.
4. Se $f(p_1) \neq 0$, então deve existir uma raíz em $[a_1, p_1]$ ou em $[p_1, b_1]$; neste caso, faça o seguinte:
   - Se $f(a_1)f(p_1) < 0$, então f tem um raíz em $[a_1, p_1]$. Se isso acontecer, os pontos $a_2 = a_1$ e $b_2 = p_1$ serão suas novas estimativas iniciais.
   - Se $f(p_1)f(b_1) < 0$, então f tem um raíz em $[p_1, b_1]$. Se isso acontecer, os pontos $a_2 = p_1$ e $b_2 = b_1$ serão suas novas estimativas iniciais.
5. Repita os passos 2 a 4 com as novas estimativas iniciais a_2 e b_2.

O método acima vai produzir uma sequência de pontos (médios) $p_1, p_2, p_3, p_4, \ldots$ que vai convergir para um ponto p. Esse ponto é uma raiz da função f contida no intervalo $[a,b]$.

Exemplo 1

Vamos aproximar o valor da raíz da função $f(x) = x^2 - 2$, usando como estimativas iniciais $a = 1$ e $b = 2$.

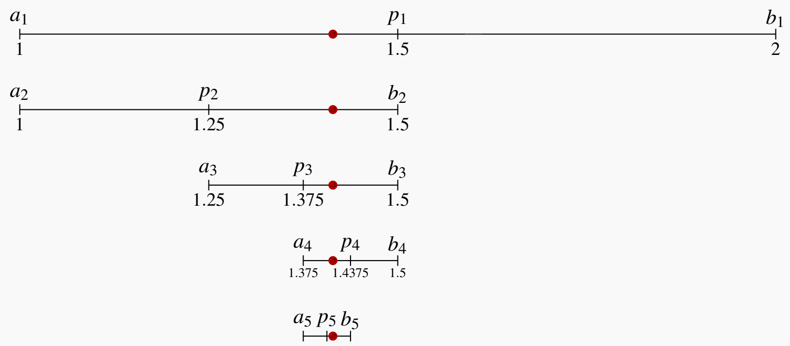
Começamos chamando a de a_1 e b de b_1. Em seguida, vamos determinar os demais elementos da sequência:

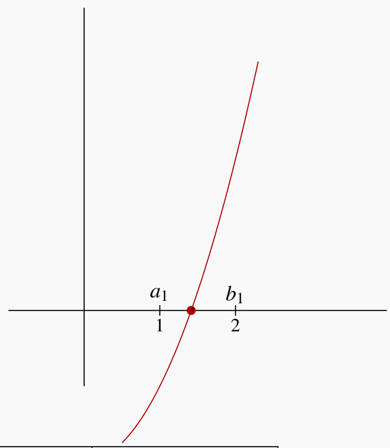
$p_1 = \frac{a_1+b_1}{2} = 1.5$, como $f(p_1) = 0.25$, f tem uma raiz entre 1 e 1.5. Chame $a_2 = 1$ e $b_2 = 1.5$.

$p_2 = \frac{a_2+b_2}{2} = 1.25$, como $f(p_2) = -0.4375$, f tem uma raiz entre 1.25 e 1.5. Chame $a_3 = 1.25$ e $b_3 = 1.5$.

$p_3 = \frac{a_3+b_3}{2} = 1.375$, como $f(p_3) = -0.109375$, f tem uma raiz entre 1.375 e 1.5. Chame $a_4 = 1.375$ e $b_4 = 1.5$.

e assim por diante ...





Note que a cada corte, o ponto médio do intervalo se aproxima mais da raíz exata da função.

n	a_n	p_n	b_n	$f(a_n)$	$f(p_n)$	$f(b_n)$
1	1	1.5	2	-1	0.25	2
2	1	1.25	1.5	-1	-0.4375	0.25
3	1.25	1.375	1.5	-0.4375	-0.109375	0.25
4	1.375	1.4375	1.5	-0.109375	0.06640625	0.25
5	1.375	1.40625	1.4375	-0.109375	-0.0224609375	0.06640625
6	1.40625	1.421875	1.4375	-0.0224609375	0.0217285156	0.06640625
7	1.40625	1.4140625	1.421875	-0.0224609375	-0.0004272461	0.0217285156
8	1.4140625	1.41796875	1.421875	-0.0004272461	0.010635376	0.0217285156
9	1.4140625	1.416015625	1.41796875	-0.0004272461	0.0051002502	0.010635376
10	1.4140625	1.4150390625	1.416015625	-0.0004272461	0.0023355484	0.0051002502
11	1.4140625	1.4145507812	1.4150390625	-0.0004272461	0.0009539127	0.0023355484
12	1.4140625	1.4143066406	1.4145507812	-0.0004272461	0.0002632737	0.0009539127

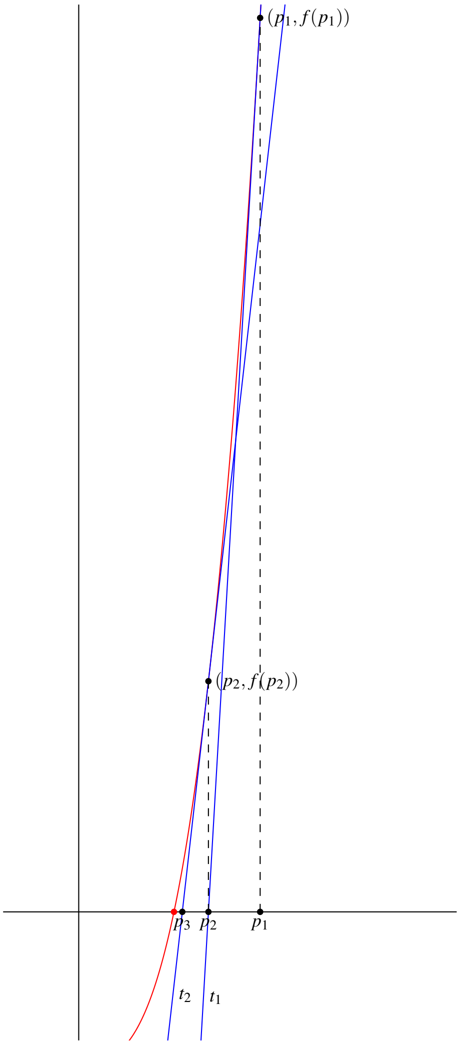
As 12 primeiras iterações (repetições) do método da bisseção para a função $f(x) = x^2 - 2$ com $a = 1$ e $b = 2$.

Mesmo sem saber quem é a raíz exata p da função f, é possível estimar a distância entre p_n (o ponto médio do n-ésimo intervalo) e p. Como cada novo intervalo tem metade do comprimento do intervalo anterior, são verdadeiras as seguintes igualdades: $|b_2 - a_2| = \frac{|b_1-a_1|}{2}$, $|b_3 - a_3| = \frac{|b_2-a_2|}{2} = \frac{|b_1-a_1|}{2^2}$, $|b_4 - a_4| = \frac{|b_3-a_3|}{2} = \frac{|b_1-a_1|}{2^3}$, em geral, $|b_n - a_n| = \frac{|b_1-a_1|}{2^{n-1}}$. E assim

$$|p_n - p| \leq \frac{|b_n - a_n|}{2} = \frac{|b_1 - a_1|}{2^n},$$

pois a distância entre um ponto qualquer em $[a_n, b_n]$ e p_n é no máximo metade do comprimento de $[a_n, b_n]$ (convença-se disso!).

Método de Newton



Suponha agora que a função f para a qual estamos tentando encontar uma raíz seja derivável[a], i.e., que para cada ponto $p \in (a,b)$, o seguinte limite existe

$$f'(p) = \lim_{x \to p} \frac{f(x) - f(p)}{x - p}.$$

Motivação: Escolha um chute inicial p_1 para a raíz de f. Agora, considere a reta t_1 tangente ao gráfico de f no ponto $(p_1, f(p_1))$, como na figura. Note que a reta t_1 intersecta o eixo x num ponto que está mais próximo da raíz da função do que a estimativa inicial p_1 que tomamos, vamos chamar esse ponto de interseção de p_2. Se considerarmos agora a reta t_2 tangente ao gráfico de f no ponto $(p_2, f(p_2))$ vemos que essa reta intersecta o eixo x ainda mais perto da raíz da função; chamamos esse novo ponto de p_3. Prosseguindo com esse raciocínio vamos obter uma sequência de pontos $p_1, p_2, p_3, p_4, \ldots$ que está convergindo[b] para a raíz da função. Essa é basicamente a ideia do método que vamos descrever agora: o ***método de Newton***.

Para encontrar p_2 precisamos da equação da reta t_1, que é dada por: $y - f(p_1) = f'(p_1)(x - p_1)$ (por que?). Para encontrar o ponto de interseção com o eixo x, basta fazer $y = 0$ na equação da reta t_1. Feito isso, concluímos que p_2 é dado por

$$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)}{f'(p_1)}.$$

Repetindo esse argumento para $p_2, p_3, \ldots$, vemos que o método de Newton caracteriza-se pela seguinte expressão recursiva

$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)}{f'(p_n)}, \quad n = 1, 2, 3, 4, \ldots \tag{1.1}$$

Em que p_1 é uma estimativa inicial para a raíz de f.

[a] Supondo que ela era contínua nos rendeu o método da bisseção.

[b] A convergência dessa sequência depende (dentre outros fatores) da estimativa inicial, mas na figura (com a estimativa inicial dada) a sequência em questão, converge.

Exemplo 2: O método de Newton dando certo

Seja $f(x) = x^2 - 2$ e $p_1 = 2$. Vamos usar (1.1) para calcular os demais termos da sequência:

$p_1 = 2$, essa é a estimativa (chute) inicial.

$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)}{f'(p_1)} = 2 - \frac{2}{4} = 1.5$

$p_3 = p_2 - \frac{f(p_2)}{f'(p_2)} = 1.5 - \frac{0.25}{3} = 1.4166666666666667$

e assim por diante ...

n	p_n	$f(p_n)$	$f'(p_n)$	p_{n+1}
1	2	2	4	1.5
2	1.5	0.25	3.0	1.4166666666666667
3	1.4166666666666667	0.006944444444444642	2.8333333333333335	1.4142156862745099
4	1.4142156862745099	6.007304882871267e-06	2.8284313725490198	1.4142135623746899
5	1.4142135623746899	4.510614104447086e-12	2.8284271247493797	1.4142135623730951
6	1.4142135623730951	4.440892098500626e-16	2.8284271247461903	1.414213562373095

As 6 primeiras iterações do método de Newton. Note que $p_5 \simeq \sqrt{2}$ com 15 casas decimais de precisão.

Exemplo 3: O método de Newton dando certo

Seja $f(x) = e^{-x} - x$ e $p_1 = 1$. Vamos usar (1.1) para calcular os demais termos da sequência:

$p_1 = 1$, essa é a estimativa (chute) inicial.

$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)}{f'(p_1)} = 1 - \frac{-0.6321205588285577}{-1.3678794411714423} = 0.5378828427399902$

$p_3 = p_2 - \frac{f(p_2)}{f'(p_2)} = 0.5378828427399902 - \frac{0.04610048629168972 4}{-1.58398332903168} = 0.5669869914054133$

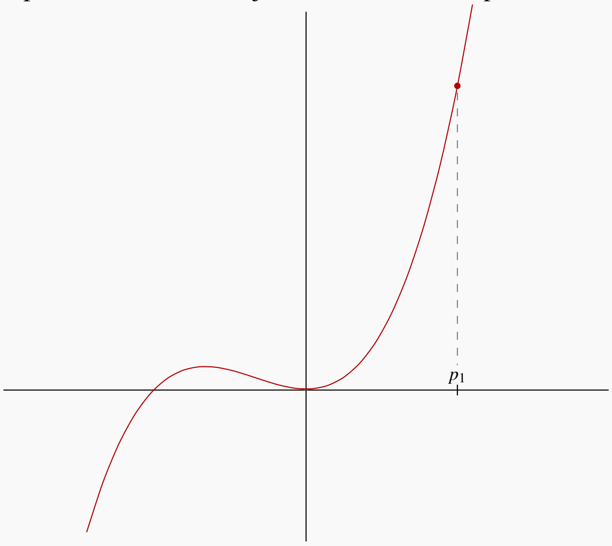
e assim por diante ...

n	p_n	$f(p_n)$	$f'(p_n)$	p_{n+1}
1	1	-0.6321205588285577	-1.3678794411714423	0.5378828427399902
2	0.5378828427399902	0.046100486291689724	-1.58398332903168	0.5669869914054133
3	0.5669869914054133	0.0002449498638371628	-1.5672319412692506	0.567143285989123
4	0.567143285989123	6.927808993140161e-09	-1.567143292916932	0.5671432904097838
5	0.5671432904097838	0.0	-1.567143290409784	0.5671432904097838
6	0.5671432904097838	0.0	-1.567143290409784	0.5671432904097838

As 6 primeiras iterações do método de Newton. Note que $p_5 \simeq p$ com 15 casas decimais de precisão, onde p é a solução exata de $e^{-x} - x = 0$.

Exemplo 4: O método de Newton dando errado

Consideremos a função $f(x) = x^3 + x^2 + 10^{-5}$ (veja figura abaixo). E tomemos como estimativa inicial para a (única) raíz de f o valor $p_1 = 1$. Para este chute inicial, o método de Newton só começa a convergir após $n = 1910$ iterações. Para $n < 1910$ o valor de p_n fica oscilando em torno de 0 (zero). Sendo que a raíz que estamos tentando aproximar é $p = -1.0000099998000072$ (aproximadamente). Veja na tabela 1.1 as 60 primeiras iterações do método de Newton para essa função.



Não se engane, o gráfico de $f(x) = x^3 + x^2 + 10^{-5}$ não passa pela origem. A distância lá é 10^{-5} (dê um zoom no pdf e você vai ver).

Para pensar: A escolha da estimativa inicial é o ponto fraco do método de Newton. Uma má escolha pode fazer com que o método se comporte de maneira estranha. O que você faria[8] para tornar essa escolha sempre adequada, i.e., o que fazer para encontrar uma estimativa inicial (quase) sempre perto o suficiente[9] da raíz da função para que o método de Newton gere uma sequência convergente?

Note que tanto no método da bisseção quanto no método de Newton, obtemos uma sequência de números $p_1, p_2, p_3, \ldots$ que se aproximam gradativamente da raíz da função f. No método da bisseção é fácil perceber que a sequência sempre converge para a raíz da função no intervalo dado, porém no método de Newton, essa convergência já não é um fato trivial.

Para que possamos garantir a convergência do método de Newton é necessário tomar o chute inicial 'suficientemente' próximo de p. E já que não sabemos quem é p, o uso do método de Newton é bastante limitado[10].

Theorem 1.1.2 Seja $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ contínua em $[a,b]$ e derivável em (a,b). Se $p \in (a,b)$ é tal que $f(p) = 0$ e $f'(p) \neq 0$, então existe um número $\delta > 0$ tal que para toda estimativa inicial $p_1 \in (p-\delta, p+\delta)$, a sequência gerada pelo método de Newtom converge para p.

Demonstração. em breve... □

Método das Secantes

Motivação: Agora, ao invés de usar a reta tangente ao gráfico de f para determinar os pontos da sequência (p_n), vamos usar uma reta que está 'próxima' à reta tangente: sejam p_1 e p_2 duas estimativas iniciais para a raíz de f. Considere a reta s_1 passando por $(p_1, f(p_1))$ e $(p_2, f(p_2))$. O ponto de interseção entre s_1 e o eixo x será o próximo ponto na sequência de aproximações, i.e., p_3. Para encontrar p_3 precisamos primeiro encontrar a equação de s_1, que é dada por[11] $y - f(p_1) = m(x - p_1)$, onde

$$m = \tan(\theta) = \frac{f(p_2) - f(f_1)}{p_2 - p_1}.$$

[8] Considere tudo o que já fizemos até aqui.
[9] Tão perto quanto você queira.
[10] nesse sentido
[11] essa é uam das formas de escrever a equação dessa reta

n	p_n	$f(p_n)$	$f'(p_n)$	$p_{n+1} = p_n - f(p_n)/f'(p_n)$
1	1	2.00001	5	0.599998
2	0.599998	0.5760054400112	2.279988800012	0.34736279406909004
3	0.34736279406909004	0.16258402178036863	1.0567083202486351	0.1935038543172824
4	0.1935038543172824	0.044699249962201676	0.49933893354149694	0.10398700121476541
5	0.10398700121476541	0.0119477386897728	0.24041389169444968	0.05429046077958509
6	0.05429046077958509	0.0031174727745941623	0.11742328395414918	0.027741443671432532
7	0.027741443671432532	0.000800937170721131	0.05779165043379086	0.01388239717061099
8	0.01388239717061099	0.0002053963799902803	0.028342957194829745	0.006635574667991248
9	0.006635574667991248	5.4323021175150685e-05	0.013403241889505958	0.002582598408741403
10	0.002582598408741403	1.6687039993253383e-05	0.005185206261105307	-0.0006356033662630657
11	-0.0006356033662630657	1.0403734860759121e-05	-0.0012699947576085165	0.007556347662219947
12	0.007556347662219947	6.752984527807198e-05	0.015283990494416904	0.0031380090547247393
13	0.0031380090547247393	1.9878001119094043e-05	0.006305559411932082	-1.4447344540752596e-05
14	-1.4447344540752596e-05	1.0000208722748746e-05	-2.8894062904212355e-05	0.34608463729789124
15	0.34608463729789124	0.16123671692616642	1.0514930031166214	0.19274389565884906
16	0.19274389565884906	0.044320685381422996	0.496938419258946	0.10355641555313347
17	0.10355641555313347	0.011844463078152873	0.23928462471290673	0.05405694147549961
18	0.05405694147549961	0.0030901155711556077	0.11688034171605599	0.027618658306696083
19	0.027618658306696083	0.000793857530949018	0.05752568747337826	0.013818605394396697
20	0.013818605394396697	0.0002035925710174697	0.028210072353931543	0.0066015884203478635
21	0.0066015884203478635	5.386867329640303e-05	0.01333391974971074	0.0025616156060843283
22	0.0025616156060843283	1.6578683513493305e-05	0.005142916835708661	-0.0006619798832269174
23	-0.0006619798832269174	1.0437927274716486e-05	-0.0013226451143564435	0.007229726789575669
24	0.007229726789575669	6.264683967602356e-05	0.014616260427507063	0.0029436209154544493
25	0.0029436209154544493	1.8690410286822104e-05	0.0059132365431906015	-0.00021715409334256567
26	-0.00021715409334256567	1.0047145660158667e-05	-0.00043416671898436504	0.022924061529222182
27	0.022924061529222182	0.0005475594801034721	0.04742466084943106	0.011378180751246286
28	0.011378180751246286	0.00014093605059086256	0.023144750494116666	0.00528884958188725
29	0.00528884958188725	3.811986922958423e-05	0.010661614953473987	0.0017134185242158955
30	0.0017134185242158955	1.2940833298436867e-05	0.0034356444575491694	-0.0020532207361423378
31	-0.0020532207361423378	1.4207059597065741e-05	-0.0040937943261107005	0.001417168459145625
32	0.001417168459145625	1.2011212635172623e-05	0.002840362017616042	-0.0028115927201260976
33	-0.0028115927201260976	1.7882827832645e-05	-0.005599470279380597	0.00038207149102195475
34	0.00038207149102195475	1.0146034398522366e-05	0.0007645809179166647	-0.012887988172732602
35	-0.012887988172732602	0.00017395954122296467	-0.025277675628043717	-0.006006044445676884
36	-0.006006044445676884	4.585591642545638e-05	-0.011903871181703428	-0.0021538592426029323
37	-0.0021538592426029323	1.4629117647777095e-05	-0.004293801156295026	0.0012531726890760045
38	0.0012531726890760045	1.15724098234053e-05	0.002511056703517947	-0.003355408951948889
39	-0.003355408951948889	2.1220991459740306e-05	-0.006677041596193321	-0.00017720627730347365
40	-0.00017720627730347365	1.003139650007277e-05	-0.0003543183484128	0.02813461145668994
41	0.02813461145668994	0.0008238264925047549	0.05864389199883661	0.014086660946838067
42	0.014086660946838067	0.0002112292893437753	0.028768623943569653	0.006744311526229469
43	0.006744311526229469	5.579250794965345e-05	0.013625080266347433	0.0026494726805857275
44	0.0026494726805857275	1.7038304003078836e-05	0.0053200044776269655	-0.0005532133462273405
45	-0.0005532133462273405	1.0305875698261941e-05	-0.0011055085574353488	0.008769080569045802
46	0.008769080569045802	8.757108803335401e-05	0.017768851460170855	0.0038407323170698143
47	0.0038407323170698143	2.4807880236926654e-05	0.0077257183083337825	0.0006296548163322799
48	0.0006296548163322799	1.03967148239454e-05	0.0012604990282277751	-0.007618439463092177
49	-0.007618439463092177	6.759844090405132e-05	-0.015062757066625953	-0.0031306527581052837
50	-0.0031306527581052837	1.9770303205813283e-05	-0.00623190255613507	4.178182791855821e-05
51	4.178182791855821e-05	1.0001745794083638e-05	8.356889300054907e-05	-0.1196408588649278
52	-0.1196408588649278	0.012611403619647797	-0.1963399124000429	-0.05540835786456043
53	-0.05540835786456043	0.0029099776907661108	-0.10160645736537927	-0.026768665405824652
54	-0.026768665405824652	0.0007073800539752351	-0.05138764646882232	-0.013003099115404766
55	-0.013003099115404766	0.00017688201497892408	-0.025498956470994413	-0.0060662656343903176
56	-0.0060662656343903176	4.657634272707209e-05	-0.01202213253253968	-0.0021920492588008516
57	-0.0021920492588008516	1.479454698105989e-05	-0.004369683277742675	0.0011936759850439543
58	0.0011936759850439543	1.1426563181248522e-05	0.0023916265571597207	-0.00358406121938759
59	-0.00358406121938759	2.2799455784474378e-05	-0.007129585954302226	-0.00038619588322224944
60	-0.00038619588322224944	1.0149089660159924e-05	-0.0007719443246638455	0.012761241484854127

Tabela 1.1: As 60 primeiras iterações da função $f(x) = x^3 + x^2 + 10^{-5}$ com $p_1 = 1$, usando o método de Newton.

Fazendo $y = 0$ na equação dessa reta, concluímos que o ponto de interseção p_3 é dado por

$$p_3 = p_1 - \frac{f(p_1)(p_2 - p_1)}{f(p_2) - f(f_1)}.$$

De maneira análoga, o ponto p_4, será o ponto de interseção da reta s_2 passando pelos ponto $(p_2, f(p_2))$ e $(p_3, f(p_3))$ com o eixo x, e assim por diante. Em geral, p_{n+2} será o ponto de interseção da reta s_n passando $(p_n, f(p_n))$ e $(p_{n+1}, f(p_{n+1}))$ com o eixo x. Daí concluímos que o método das secantes é caracterizados pela seguinte expressão recursiva.

$$p_{n+2} = p_n - \frac{f(p_n)(p_{n+1} - p_n)}{f(p_{n+1}) - f(p_n)}, \; n = 1, 2, 3, \ldots \tag{1.2}$$

A razão pela qual estamos usando uma reta próxima à reta tangente é a seguinte: derivar funções nem sempre é uma tarefa fácil e, infelizmente, essa é uma exigência do método de Newton. Uma alternativa seria trocar as derivadas $f'(p_1), f'(p_2), f'(p_3), \ldots$ por valores aproximados. Lembre-se que a derivada de uma função num ponto, nada mais é do que o coeficiente angular da reta tangente ao gráfico da função naquele ponto. Se p_1 é uma estimativa inicial para a raíz de f, podemos trocar o coeficiente angular da reta tangente ao gráfico de f em $(p_1, f(p_1))$ pelo coeficiente angular de uma outra reta que passa por $(p_1, f(p_1)$ e que está 'próxima' da reta tangente. Como essas retas estão 'próximas', seus coeficientes angulares também devem estar 'próximos'. Para determinar o coeficiente angular dessa outra reta, vamos precisar de mais uma estimativa inicial[12], p_2. É fácil ver que o coeficiente angular m da reta passando por $(p_1, f(p_1))$ e $(p_2, f(p_2))$ é dado por (ver figura - em breve...)

$$m = \tan(\theta) = \frac{\text{cat opo}}{\text{cat adj}} = \frac{f(p_2) - f(p_1)}{p_2 - p_1}$$

Se você (ainda) não apagou completamente o conceito de derivada da sua mente, você lembra que se p_2 está próximo de p_1, então o quociente acima está próximo de $f'(p_1)$ (se f for derivável em p_1, é claro). Trocando a derivada $f'(p_1)$ no método de Newton por esse quociente, ficamos com

$$p_1 - \frac{f(p_1)}{\frac{f(p_2) - f(p_1)}{p_2 - p_1}} = p_1 - \frac{f(p_1)(p_2 - p_1)}{f(p_2) - f(p_1)}.$$

Essa é a mesma expressão que obtivemos antes: a expressão que define o ponto p_3 no método das secantes.

Exemplo 5

Seja $f(x) = x^2 - 2$. Use $p_1 = 0$ e $p_2 = 1$.

$p_1 = 0$

$p_2 = 1$

$p_3 = p_1 - \frac{f(p_1)(p_2 - p_1)}{f(p_2) - f(p_1)} = 0 - \frac{(-2)(1-0)}{(-1)-(-2)} = 2$

$p_4 = p_2 - \frac{f(p_2)(p_3 - p_2)}{f(p_3) - f(p_2)} = 1 - \frac{(-1)(2-1)}{2-(-1)} = 1.3333333333333333$

e assim por diante...

n	p_n	p_{n+1}	$f(p_n)$	$f(p_{n+1})$	p_{n+2}
1	0	1	-2	-1	2.0
2	1	2.0	-1	2.0	1.3333333333333333
3	2.0	1.3333333333333333	2.0	-0.22222222222222232	1.4
4	1.3333333333333333	1.4	-0.22222222222222232	-0.04000000000000026	1.4146341463414633
5	1.4	1.4146341463414633	-0.04000000000000026	0.0011897679952408424	1.41421143847487
6	1.4146341463414633	1.41421143847487	0.0011897679952408424	$-6.007286838860537e-06$	1.4142135620573204

Exemplo 6

Seja $f(x) = e^{-x} - x$. Use $p_1 = 1$ e $p_2 = 2$.

$p_1 = 1$

$p_2 = 2$

$p_3 = p_1 - \frac{f(p_1)(p_2 - p_1)}{f(p_2) - f(p_1)} = 1 - \frac{(-0.6321205588285577)(2-1)}{(-1.8646647167633872)-(-0.6321205588285577)} = 0.4871416534984859$

$p_4 = p_2 - \frac{f(p_2)(p_3 - p_2)}{f(p_3) - f(p_2)} = 2 - \frac{(-1.8646647167633872)(0.4871416534984859-2)}{0.1272383442057926-(-1.8646647167633872)} = 0.5837796851369863$

e assim por diante...

[12] Afinal, para definir uma reta precisamos de pelo menos dois pontos

n	p_n	p_{n+1}	$f(p_n)$	$f(p_{n+1})$	p_{n+2}
1	1	2	−0.6321205588285577	−1.8646647167633872	0.4871416534984859
2	2	0.4871416534984859	−1.8646647167633872	0.1272383442057926	0.5837796851369863
3	0.4871416534984859	0.5837796851369863	0.1272383442057926	−0.025993563780372986	0.5673864490804865
4	0.5837796851369863	0.5673864490804865	−0.025993563780372986	−0.0003810477141589219	0.5671425603070896
5	0.5673864490804865	0.5671425603070896	−0.0003810477141589219	1.1441756897490052$e-06$	0.5671432904419066
6	0.5671425603070896	0.5671432904419066	1.1441756897490052$e-06$	−5.0340953627880936$e-11$	0.5671432904097838

Estimativa do erro

em breve...

Método das Secantes 2

Vamos descrever aqui uma pequena variação do método das secantes.

Seja p_1 uma estimativa inicial para a raíz de f. Quando f é derivável e h é um número qualquer, sabe-se que o quociente

$$\frac{f(p_1+h)-f(p_1)}{h} \tag{1.3}$$

está perto do valor da derivada de f no ponto p_1 se h é suficientemente pequeno (por que?). Sendo assim, faz sentido substituir o valor de $f'(p_1)$ pela aproximação dada por (1.3), obtendo com isso a seguinte expressão

$$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)}{\frac{f(p_1+h)-f(p_1)}{h}} = p_1 - \frac{hf(p_1)}{f(p_1+h)-f(p_1)}.$$

Repetindo o procedimento acima com $p_2, p_3, \ldots$, vamos acabar por obter a seguinte expressão recursiva:

$$p_{n+1} = p_n - \frac{hf(p_n)}{f(p_n+h)-f(p_n)}, \quad n = 1,2,3,\ldots \tag{1.4}$$

que é a expressão que define o método que chamamos de ***método das secantes 2***.

Para pensar: Você consegue encontrar outros métodos que também sirvam para encontrar raízes de funções? (usando ideias como essa).

Método da Posição Falsa

O ***método da posição falsa*** é uma combinação do método das secantes com o teorema de Bolzano, e é descrito pelo seguinte algoritmo:

1. Sejam a e b tais que $f(a)f(b) < 0$. Esses número são chamados de estimativas iniciais. Defina $a_1 = a$ e $b_1 = b$.
2. Calcule p_1, o primeiro elemento da sequência de aproximações, usando usando a equação

   $$p_1 = a_1 - \frac{f(a_1)(b_1-a_1)}{f(b_1)-f(a_1)}.$$

   Essa é a fórmula do método da secante (1.2) com $p_n = a_1$ e $p_{n+1} = b_1$. O ponto p_1 que acabamos de calcular é o ponto de interseção do eixo x com a reta que passa pelos pontos $(a_1, f(p_1))$ e $(b_1, f(b_1))$ (convença-se disso!).
3. Se $f(p_1) = 0$, você encontrou a raíz procurada. Pare aqui.
4. Se $f(p_1) \neq 0$, faça o seguinte:

   5.1. Se $f(a_1)f(p_1) < 0$, chame a_1 de a_2 e p_1 de b_2, i.e., $a_2 \equiv a_1$ e $b_2 \equiv p_1$.

   5.2. Se $f(b_1)f(p_1) < 0$, chame p_1 de a_2 e b_1 de b_2, i.e., $a_2 \equiv p_1$ e $b_2 \equiv b_1$.
5. Repita os passos 2 a 4, agora com a_2 e b_2, para encontrar p_2.

Proseguindo desta maneira, vamos encontrar uma sequência $p_1, p_2, p_3, \ldots$ de pontos definida pela seguinte expressão recursiva

$$p_n = a_n - \frac{f(a_n)(b_n-a_n)}{f(b_n)-f(a_n)}, \quad n = 1,2,3,4,\ldots$$

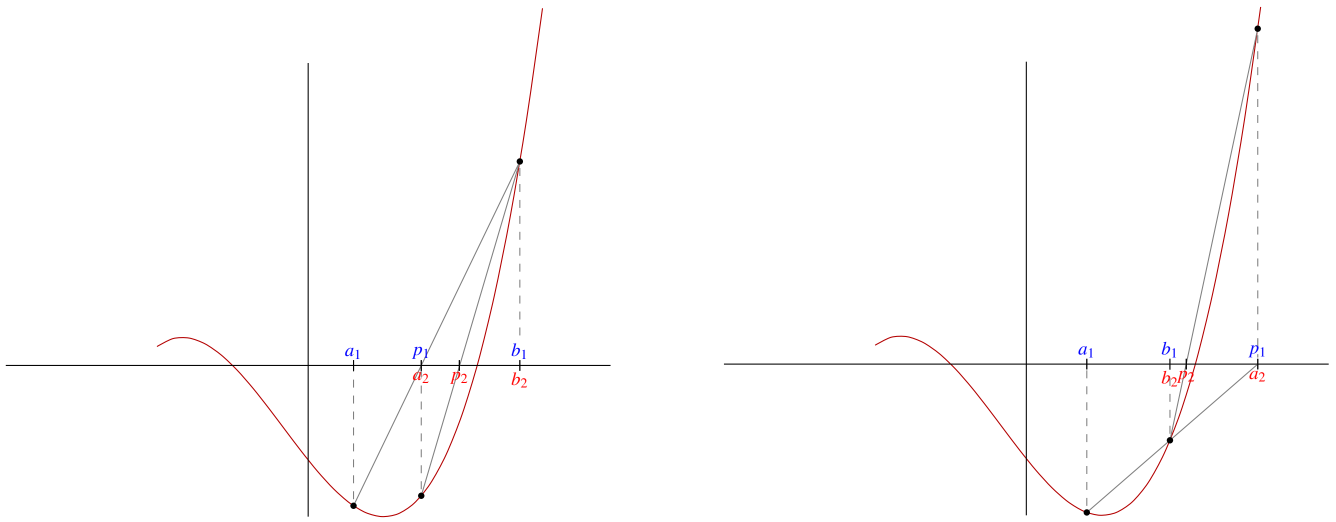


Ilustração do método das secantes com diferentes escolhas de estimativas iniciais a_1 e b_1

Exemplo 7

Seja $f(x) = e^x - 2$. Usaremos o método das secantes para construir uma sequência $p_1, p_2, p_3, p_3, \ldots$ que converge para a raíz da função f. Consideremos $a_1 = 0$ e $b_1 = 1$ como estimativas iniciais (você pode escolher outros valores, se quiser, desde que obedeça à regra 1, acima).

Solução:
Note que $f(a_1)f(b_1) = f(0)f(1) = (-1)(e-2) < 0$, logo existe uma raiz para f entre $a_1 = 0$ e $b_1 = 1$. Para encontrar p_1, usamos:

$$p_1 = a_1 - \frac{f(a_1)(b_1 - a_1)}{f(b_1) - f(a_1)} = 0 - \frac{(-1)(1-0)}{(e-2)-(-1)} = 0.5819767068693265$$

Note que $f(b_1)f(p_1) < 0$, logo deve existir uma raíz para f entre $a_2 \equiv p_1 = 0.5819767068693265$ e $b_2 \equiv b_1 = 1$. Esses serão os valores que usaremos para calcular p_2:

$$p_2 = a_2 - \frac{f(a_2)(b_2 - a_2)}{f(b_2) - f(a_2)} = 0.5819767068693265 - \frac{(-0.21042760315816644)(1 - 0.5819767068693265)}{0.7182818284590451 - (-0.21042760315816644)} = 0.6766927037604051$$

Note que $f(b_2)f(p_2) < 0$, logo deve existir uma raíz para f entre $a_3 \equiv p_2 = 0.6766927037604051$ e $b_3 \equiv b_2 = 1$. Esses serão os valores que usaremos para calcular p_3:

$$p_3 = a_3 - \frac{f(a_3)(b_3 - a_3)}{f(b_3) - f(a_3)} = 0.6766927037604051 - \frac{(-0.032639682719065144)(1 - 0.6766927037604051)}{0.7182818284590451 - (-0.032639682719065144)} = 0.690745633944098$$

e assim por diante...

Veja na tebela as 6 primeiras iterações do método da posição falsa com $p_1 = 0$ e $p_2 = 1$ para a função $f(x) = x^2 - 2$.

n	a_n	b_n	$f(a_n)$	$f(b_n)$	p_n	$f(p_n)$
1	0	1	-1.0	0.7182818284590451	0.5819767068693265	-0.21042760315816644
2	0.5819767068693265	1	-0.21042760315816644	0.7182818284590451	0.6766927037604051	-0.032639682719065144
3	0.6766927037604051	1	-0.032639682719065144	0.7182818284590451	0.690745633944098	-0.004797330419689935
4	0.690745633944098	1	-0.004797330419689935	0.7182818284590451	0.6927974084413778	-0.0006994219108624744
5	0.6927974084413778	1	-0.0006994219108624744	0.7182818284590451	0.6930962538194726	-0.00010185088745662226
6	0.6930962538194726	1	-0.00010185088745662263	0.7182818284590451	0.6931397659701671	-0.0000148291245802845

As 6 primeiras iterações usando o método da posição falsa.

Método do Ponto Fixo

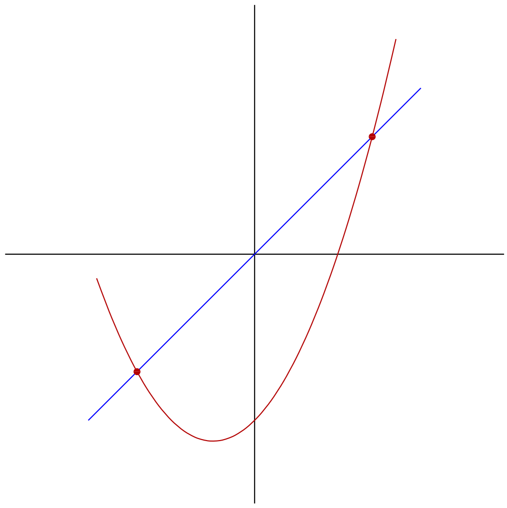
Um número p é um ***ponto fixo*** para a função f se $f(p) = p$, i.e., se p se mantém fixo quando aplicamos a ele a função f. É fácil verificar que p é um ponto fixo para f nos seguintes casos:

- $p = \frac{1}{2}$ e $g(x) = 1 - x$
- $p = \frac{2}{3}$ e $g(x) = 1 - \frac{x}{2}$.
- $p = -1$, $p = 2$ e $g(x) = x^2 - 2$
- $p = 0.7390851332151606416553120876738734040134117589007574649656806357732846548835475$ e $g(x) = \cos x$

Nos 3 primeiros casos, para encontrar o ponto fixo da função dada basta resolver a equação $g(x) = x$ para x. Essa mesma técnica não funciona para encontrar o ponto fixo da função $g(x) = \cos x$, pois não é possível isolar x em $x = \cos x$. Existe, por outro lado, um modo bem simples de encontrar o ponto fixo da função cosseno, escolha um número p qualquer no intervalo $[-1,1]$ e aplique a função cosseno a este número, i.e., calcule $\cos(p)$. Em seguida calcule o cosseno desse novo número, i.e., calcule $\cos(\cos(p))$, repita esse processo umas 30 vezes na sua calculadora e você vai encontrar o número 0.73908513321 (esses são os primeiros 11 dígitos do ponto fixo da função cosseno, que é conhecido como o ***número de Dottie***).

Geometricamente, um ponto fixo para a função g corresponde à coordenada x do ponto de interseção dos gráficos das funções $y = g(x)$ e $y = x$ (veja figura), pois um ponto fixo para g é o mesmo que (a coordenada x de) uma solução para o sistema

$$\begin{cases} y = g(x) \\ y = x \end{cases}$$



O ***método do ponto fixo*** para encontrar soluções para

$$f(x) = 0, \tag{1.5}$$

consiste em reescrever a equação (1.5) na forma

$$g(x) = x \tag{1.6}$$

para alguma função g. Uma vez escollhida a função g, vamos construir uma sequência usando a seguinte expressão recursiva:

$$p_{n+1} = g(p_n),\ n = 1,2,3,\ldots, \tag{1.7}$$

onde p_1 é alguma estimativa inicial para o ponto fixo de g (i.e., para a raíz de f). Nossa intenção é construir uma sequência (p_n) que convirja para um ponto p satisfazendo $g(p) = p$. Esse ponto p, quando existir, será na verdade uma solução para a equação (1.5), já que (1.5) e (1.6) são equivalentes.

Exemplo 8

Existem muitas maneiras de reescrever/transformar a equação $f(x) = 0$ numa da forma $g(x) = x$. Considere por exemplo a função $g(x) = x + cf(x)$, onde c é qualquer constante não nula. E note que se p é tal que $f(p) = 0$, então $g(p) = p + cf(p) = p$, ou seja, se p é uma raiz para f, então p é um ponto fixo para g.

Exemplo 9

Seja $f(x) = x^2 - 2$. Considere as seguintes equivalencias:

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow x^2 - 2 = 0 \Leftrightarrow x^2 - 2 + x = x \Leftrightarrow g(x) = x, \text{ onde } g(x) = x^2 - 2 + x.$$

Disso segue que uma raiz para f é um ponto fixo para g. Agora vamos usar essa função g para construir uma sequência de aproximações para a raiz de f:

$$\begin{aligned}
p_1 &= 1.4142, \text{ este é o chute inicial (você pode escolher outro)} \\
p_2 &= g(p_1) = 1.4141616399999997 \\
p_3 &= g(p_2) = 1.4140147840474884 \\
p_4 &= g(p_3) = 1.4134525935523536 \\
p_5 &= g(p_4) = 1.4113008277722288 \\
p_6 &= g(p_5) = 1.403070854242807 \\
p_7 &= g(p_6) = 1.371678676268447 \\
p_8 &= g(p_7) = 1.253181067198006 \\
p_9 &= g(p_8) = 0.823643854381539 \\
p_{10} &= g(p_9) = -0.49796694675798325
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_{1000000} &= g(p_{999999}) = -0.5549577957353522 \\
p_{1000001} &= g(p_{1000000}) = -2.2469796406879112 \\
p_{1000002} &= g(p_{1000001}) = 0.8019378649780631 \\
p_{1000003} &= g(p_{1000002}) = -0.554957795736363 \\
p_{1000004} &= g(p_{1000003}) = -2.2469796406878 \\
p_{1000005} &= g(p_{1000004}) = 0.8019378649776758 \\
p_{1000006} &= g(p_{1000005}) = -0.554957795737371 \\
p_{1000007} &= g(p_{1000006}) = -2.246979640687689 \\
p_{1000008} &= g(p_{1000007}) = 0.8019378649772877 \\
p_{1000009} &= g(p_{1000008}) = -0.5549577957383818
\end{aligned}$$

Como você pode ver, a sequência acima não está convergindo para $\sqrt{2}$. Mesmo tendo tomado 1.4142 como estimativa inicial.

Exemplo 10

Seja $f(x) = x^2 - 2$. Considere as seguintes equivalencias:

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow x^2 - 2 = 0 \Leftrightarrow x^2 - 2 + x^2 = x^2 \Leftrightarrow 2x^2 - 2 = x^2 \Leftrightarrow 2x^2 = x^2 + 2 \Leftrightarrow x = \frac{x}{2} + \frac{1}{x} \Leftrightarrow x = g(x), \text{ onde } g(x) = \frac{x}{2} + \frac{1}{x}$$

Disso segue que uma raiz para f é um ponto fixo para g. Agora vamos usar essa função g para construir uma sequência de aproximações para a raiz de f:

$p_1 = 1$, este é o chute inicial (você pode escolher outro)
$p_2 = g(p_1) = 1.5$
$p_3 = g(p_2) = 1.4166666666666665$
$p_4 = g(p_3) = 1.4142156862745097$
$p_5 = g(p_4) = 1.4142135623746899$
$p_6 = g(p_5) = 1.414213562373095$

Exemplo 11

Seja $f(x) = x^2 - 2$. Considere as seguintes equivalencias:

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow x^2 - 2 = 0 \Leftrightarrow x^2 - 2 + 1 = 1 \Leftrightarrow x^2 - 1 = 1 \Leftrightarrow (x-1)(x+1) = 1 \Leftrightarrow x = 1 + \frac{1}{x+1} \Leftrightarrow x = g(x), \text{ onde } g(x) = 1 + \frac{1}{x+1}$$

Disso segue que uma raiz para f é um ponto fixo para g. Agora vamos usar essa função g para construir uma sequência de aproximações para a raiz de f:

$p_1 = 1$, este é o chute inicial (você pode escolher outro)
$p_2 = g(p_1) = 1.5$
$p_3 = g(p_2) = 1.4$
$p_4 = g(p_3) = 1.4166666666666667$
$p_5 = g(p_4) = 1.4137931034482758$
$p_6 = g(p_5) = 1.4142857142857144$

Para pensar: Por que as sequências geradas pelas funções g dos exemplos 10 e 11 convergiram, mas a sequência gerada pela função g do exemplo 9 não convergiu? Será que a estimativa inicial foi tomada muito longe da raiz da função f? Será que eu errei nas contas outra vez? Será que o problema é a função $g(x) = x^2 - 2 + x$? O que você acha?

O seguinte teorema lista as condições que a função g deve satisfazer para garantir que a sequência (p_n) convirja[13].

Theorem 1.1.3 Seja $g : [a,b] \to \mathbb{R}$ uma função. Se

1. g é contínua em $[a,b]$ e $g(x) \in [a,b]$ para todo $x \in [a,b]$ e
2. existe L, $0 < L < 1$, tal que $|g'(x)| \leq L$ para todo $x \in [a,b]$

então a função g possui um único ponto fixo no intervalo $[a,b]$.

Demonstração. em breve... □

Exemplo 12

em breve...

Exemplo 13

em breve...

Theorem 1.1.4 Se $g : [a,b] \to \mathbb{R}$ satisfaz as condições 1. e 2. do teorema anterior, então a sequência definida por $p_{n+1} = g(p_n)$, $n = 1,2,3,\ldots$, converge para o único ponto fixo de g em $[a,b]$, seja qual for o chute inicial $p_1 \in [a,b]$.

Demonstração. em breve... □

Número mínimo de iterações.

Da demosntração do teorema 1.1.4, temos que

$$|p_{n+1} - p| \leq L^n |p_1 - p|, \tag{1.8}$$

Em particular, para $n = 1$, temos que

$$|p_2 - p| \leq L|p_1 - p|.$$

Da desigualdade triangular segue que

$$|p_1 - p| = |p_1 - p_2 + p_2 - p| \leq |p_1 - p_2| + |p_2 - p| \leq |p_2 - p_1| + L|p_1 - p| \Rightarrow |p_1 - p| \leq \frac{1}{1-L}|p_2 - p_1|.$$

Substituindo na equação (1.8), ficamos com

$$|p_{n+1} - p| \leq \frac{L^n}{1-L}|p_2 - p_1|.$$

[13] note que a convergência é provada apenas no teorema seguinte

Agora podemos perguntar: Qual o menor valor de n para o qual

$$\frac{L^n}{1-L}|p_2 - p_1| \leq \varepsilon?$$

O número inteiro positivo n que satisfaz essa desilguldade é o número mínimo de iterações que precisamos realizar para obter um erro absoluto $|p_n - p|$ menor que o ε dado.

Isolando n na desigualdade acima (após aplicar ln em ambos os lados) obtemos

$$n \geq \frac{\ln|p_2 - p_1| - \ln((1-L)\varepsilon)}{\ln(1/L)}.$$

Exemplo 14

Qual o número mínimo de iterações que devemos realizar para que o erro absoluto na aproximação do ponto fixo da função $g(x) = \cos x$ seja menor que 10^{-11} com $p_1 = 0$? Queremos encontrar o número n tal que $|p_n - p| < 10^{-11}$, onde p é o número de Dottie (foi assim que chamamos o ponto fixo de $g(x) = \cos x$). Substituindo os valores e observando que $|\cos'(x)| \leq L = \text{sen}(1) \simeq 0.841470985$ para todo $x \in [-1, 1]$, obtemos

$$n \geq \frac{\ln|\cos(0) - 0| - \ln((1 - 0.841470985)10^{-11})}{\ln(1/0.841470985)} \simeq 157.414043951247.$$

Logo, para obter uma precisão de 11 dígitos, é preciso fazer no mínimo 158 iterações usando o método do ponto fixo. Essa fórmula garante que após 158 iterações você terá a precisão desejada, porém na prática (em muitos casos) essa precisão pode ser alcançada após um número menor de iterações (você consegue pensar num exemplo?).

Velocidade do método do ponto fixo

Como uma medida de 'velocidade' da convergência no método do ponto fixo podemos considerar o limite da razão entre erros absolutos subsequentes, i.e.,:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|p_{n+1} - p|}{|p_n - p|} = \lim_{n\to\infty} \left| \frac{g(p_n) - g(p)}{p_n - p} \right| = |g'(p)|,$$

pois $\lim_{n\to\infty} p_n \to p$. Sendo assim, $|g'(p)| \in (0,1)$ pode ser visto como uma medida da velocidade da convergência da sequência associada a g. Quando mais próximo de zero, mais rápida é a convergência: isso significa que o numerador $|p_{n+1} - p|$ vai pra zero muito mais rápido que o denominador $|p_n - p|$, i.e., 'o erro absoluto seguinte está sempre muito mais próximo de zero que o erro absoluto anterior'. Por outro lado, quanto mais próximo de 1 estiver o valor de $|g'(p)|$, mais lenta é a convergência da sequência.

Para pensar: O ideal é sempre combinar o uso dos métodos acima. Por exemplo, que tal usar o método da bisseção para encontrar uma boa estimativa inicial para a raíz da função para então aplicar o método de Newton, que é mais rápido. Como você combinaria outros métodos para tornar mais eficiente a busca por soluções de equações do tipo: $f(x) = 0$?

Critérios de parada

Em cada um dos métodos acima, obtemos uma expressão recursiva que descreve o funcionamento do método. O resultado da aplicação de tais métodos é uma sequência de números $p_1, p_2, p_3, p_4, \ldots$ que se aproxima da raíz real da função.
em breve...

Na Máquina

Representação numérica, ponto flutuante, erro de arredondamento, erros de truncamento, etc em breve...

2 | Aproximando raízes de funções de várias variáveis

Neste capítulo vamos descobrir como aproximar raízes para funções vetoriais de várias variáveis da forma $F:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$. É bastante comum chamar a equação $F(X)=0$, onde $X=(x_1,\ldots,x_n)$, de ***sistema***. Sendo assim, o que faremos nesta seção é aproximar soluções de sistemas.

2.1 Sistemas lineares

Um sistema linear com m equações e n incógnitas, ou simplesmente, ***sistema linear***, é qualquer conjunto de equações da forma

$$\begin{cases} a_{11}x_1+\cdots+a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1+\cdots+a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad\vdots \\ a_{m1}x_1+\cdots+a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \tag{2.1}$$

Note que cada equação no sistema acima nada mais é do que uma combinação linear das incógnitas $x_1,x_2,\ldots,x_n$ igualando uma constante. Uma ***solução*** para o sistema (2.1) é qualquer lista $S=(s_1,s_2,\ldots,s_n)$ de n números que satisfaz simultâneamente todas as equações do sistema.

Associadas ao sistema (2.1) existem as matrizes

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad B=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

chamadas de ***matriz dos coeficientes*** e ***matriz dos termos independentes*** do sistema (2.1), respectivamente. Essas matrizes nos permitem reescrever o sistema (2.1) da seguinte forma alternativa (e mais simples)

$$AX=B, \quad \text{onde} \quad X=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

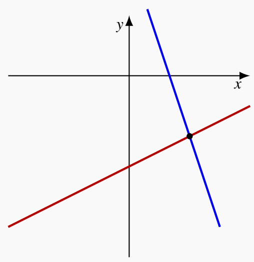
Se definirmos uma função $F:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ por $F(X)=AX-B$, então uma solução para o sistema (2.1), corresponde a uma raiz (ou zero) para essa função F.

Exemplo 15

É imediato verificar que o sistema

$$\begin{cases} x_1-2x_2=3 \\ 3x_1+x_2=2 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

tem $S=(1,-1)$ como solução. Cada equação do sistema define uma reta no plano (ver figurinha ao lado), e essas retas se intersectam exatamente no ponto $(1,-1)$.



Método da eliminação de Gauss

Existem três ***operações elementares*** que podem ser realizadas nas linhas de um sistema linear que não mudam a solução do sistema. São elas:

1. Trocar duas linhas do sistema.
2. Multiplicar uma linha qualquer do sistema por um número não nulo.

3. Trocar a linha L_i ou a linha L_j por $cL_i + L_j$, i.e., por um múltiplo de L_i somado com L_j, i, j quaisquer.

Nota: A notação $cL_i + L_j \to L_j$ significa que a linha L_j está sendo substituída pela linha $cL_i + L_j$.

A ***diagonal***[1] de uma matriz $m \times n$ é a lista de números $\{a_{11}, a_{22}, \ldots, a_{mm}\}$. Dizemos que uma matriz $m \times n$ é ***triangular superior*** se todos os elementos abaixo da diagonal principal são nulos.

Exemplo 16

A diagonal das seguintes matrizes está em destaque:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & -1 & 4 \\ 2 & 4 & 0 & 1 & 3 \\ -1 & 3 & 4 & 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} -1 & 2 & 3 & -1 & 4 \\ 2 & -2 & 0 & 1 & 3 \\ -1 & 3 & 1 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 9 & 2 \end{bmatrix}$$

O ***método da eliminação de Gauss*** para resolver sistemas lineares consiste em transformar a matriz estendida de um sistema linear numa matriz diagonal superior usando apenas operações elementares em linhas.

Exemplo 17

Use o método da eliminação de Gauss para encontrar uma solução para o seguinte sistema

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 6x_3 + 2x_4 = 4 \\ x_1 + 2x_2 - x_3 + 3x_4 = 8 \\ -3x_1 + x_2 - 2x_3 + x_4 = -2 \\ x_1 + 3x_2 - 3x_3 - 2x_4 = 6 \end{cases}$$

Solução. Precisamos zerar todos os elementos abaixo da diagonal apenas usando operações elementares em linhas. O elemento marcado para ser zerado em cada passo está circulado. Esta foi a lista de operações realizadas:

1 - na primeira matriz, trocamos a linha L_2 por $(-1/2)L_1 + L_2$. Com isso obtemos a segunda matriz.
2 - na segunda matriz, trocamos L_3 por $(3/2)L_1 + L_3$. Com isso obtemos a terceira matriz.
3 - na terceira matriz, trocamos L_4 por $(-1/2)L_1 + L_4$. Com isso obtemos a quarta matriz.
4 - na quarta matriz, trocamos L_2 e L_4 de lugar. Com isso obtemos a quinta matriz.
5 - na quinta matriz, trocamos L_3 por $(-7)L_2 + L_3$. Com isso obtemos a sexta matriz.
6 - na sexta matriz, trocamos L_4 por $(4/49)L_3 + L_4$. Com isso obtemos a sétima matriz.

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & -1 & 3 & 8 \\ -3 & 1 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & -3 & -2 & 6 \end{bmatrix} \quad (-1/2)L_1 + L_2 \to L_2 \quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & -4 & 2 & 6 \\ -3 & 1 & -2 & 1 & -2 \\ 1 & 3 & -3 & -2 & 6 \end{bmatrix} \quad (3/2)L_1 + L_3 \to L_3 \quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & -4 & 2 & 6 \\ 0 & 7 & 7 & 4 & 4 \\ 1 & 3 & -3 & -2 & 6 \end{bmatrix}$$

$$(-1/2)L_1 + L_4 \to L_4 \quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & -4 & 2 & 6 \\ 0 & 7 & 7 & 4 & 4 \\ 0 & 1 & -6 & -3 & 4 \end{bmatrix} \quad L_2 \leftrightarrow L_4 \quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 2 & 4 \\ 0 & 1 & -6 & -3 & 4 \\ 0 & 7 & 7 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & -4 & 2 & 6 \end{bmatrix} \quad (-7)L_2 + L_3 \to L_3 \quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 2 & 4 \\ 0 & 1 & -6 & -3 & 4 \\ 0 & 0 & 49 & 25 & -24 \\ 0 & 0 & -4 & 2 & 6 \end{bmatrix}$$

$$(4/49)L_3 + L_4 \to L_4 \quad \begin{bmatrix} 2 & 4 & 6 & 2 & 4 \\ 0 & 1 & -6 & -3 & 4 \\ 0 & 0 & 49 & 25 & -24 \\ 0 & 0 & 0 & 198/49 & 198/49 \end{bmatrix}$$

A última matriz é a matriz estendida do seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 6x_3 + 2x_4 = 4 \\ x_2 - 6x_3 - 3x_4 = 4 \\ 49x_3 + 25x_4 = -24 \\ \dfrac{198}{49}x_4 = \dfrac{198}{49} \end{cases} \tag{2.2}$$

Como esse sistema foi obtido do sistema original apenas usando operações elementares, ambos possuem a mesma solução. Da última equação do sistema (2.2), obtemos $x_4 = 1$. Substituindo esse valor na terceira equação do sistema (2.2), obtemos $x_3 = -1$. Substituindo o valor de $x_4 = 1$ e $x_3 = -1$ na segunda equação do sistema (2.2) obtemos $x_2 = 1$. Substituindo esses valores na primeira equação do sistema (2.2) obtemos $x_1 = 2$.

[1] Estou abusando da notação aqui, e estendendo a noção de diagonal para matrizes que não são quadradas.

O algoritmo e número de operações

O resultado do algoritmo abaixo (é o método de eliminação de Gauss) deve ser uma matriz esclonada, i.e., uma matriz triangular superior.

1 - entre com a matriz estendida do sistema $A = (a_{ij})$, $i = 1, 2, \ldots, n$ e $j = 1, 2, \ldots, n+1$

2 - para cada $i = 1, 2, \ldots, n-1$, faça o seguinte:

 3 - encontre o menor p entre i e n para o qual a_{pi} é não nulo (esse elemento será chamado de ***pivô***). Se tal p não existir, então o sistema não possui solução única.

 4 - se $p \neq i$, então troque as linhas L_i e L_p da matriz estendida, i.e., faça $L_i \leftrightarrow L_p$

 5 - agora para $k = i+1, i+2, \ldots, n$, faça o seguinte:

  6 - defina $m_{ki} \equiv a_{ki}/a_{ii}$

  7 - faça $m_{ki}L_i - L_k \to L_k$

Quanto ao número de operações, temos o seguinte: em breve...

*Eliminação de Gauss com pivotamento parcial**

em breve...

*Decomposição LU (usando a eliminação de Gauss)**

em breve...

Método iterativo de Jacobi

Para construir um método iterativo necessitamos de dois ingredientes básicos: um chute (estimativa) inicial para o objeto que estamos tentando encontrar e uma expressão recursiva (fórmula) que nos ensine a construir uma sequência que convirja para esse objeto, a partir do chute inicial dado.

Considere o sistema linear (2.1). Se isolarmos a variável x_i na linha i, para $i = 1, 2, 3, \ldots, n$, vamos obter o seguinte conjunto de equações:

$$\begin{cases} x_1 = (b_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n)/a_{11} \\ x_2 = (b_1 - a_{21}x_1 - \cdots - a_{2n}x_n)/a_{22} \\ \quad\vdots \\ x_n = (b_1 - a_{n1}x_1 - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1})/a_{nn} \end{cases}$$

Nessa forma, notamos que ao dar valores para $x_1, x_2, \ldots, x_n$ do lado direito de cada equação, vamos obter novos valores para essas variáveis do lado esquerdo. A partir disso, podemos obter uma expressão recursiva para construir uma sequência apenas fazendo:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\right)/a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{21}x_1^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\right)/a_{22} \\ \quad\quad\vdots \\ x_n^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{n1}x_1^{(k)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)}\right)/a_{nn} \end{cases}, \qquad k = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.3}$$

Essa é a expressão recursiva que caracteriza o ***método iterativo de Jacobi*** para aproximação da solução de um sistema linear. Por enquanto, não existe nenhuma razão lógica para o funcionamento desse método. Isso será provado na próxima seção.

Observação: o índice superior ***não*** indica potência, indica apenas o número da iteração.

Exemplo 18

Use o método de Jacobi para aproximar a solução do seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ 2x_1 - 4x_2 - x_3 = -5 \\ x_1 + x_2 + 3x_3 = 0 \end{cases}$$

Solução: Isolando x_i na linha i, para $i = 1, 2, 3$, obtemos o seguinte sistema linear equivalente:

$$\begin{cases} x_1 = (3 - x_2 - x_3)/2 \\ x_2 = (-5 - 2x_1 + x_3)/(-4) \\ x_3 = (-x_1 - x_2)/3 \end{cases} \quad \text{e colocando os índices no lugar certo} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{k+1} = (3 - x_2^k - x_3^k)/2 \\ x_2^{k+1} = (-5 - 2x_1^k + x_3^k)/(-4) \\ x_3^{k+1} = (-x_1^k - x_2^k)/3 \end{cases}$$

Como estimativa (chute) inicial vamos usar o vetor $X^1 = (1, 0, 0)$ (você pode escolher qualquer outra estimativa inicial)

$$k = 1 \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(2)} = (3 - x_2^{(1)} - x_3^{(1)})/2 \\ x_2^{(2)} = (-5 - 2x_1^{(1)} + x_3^{(1)})/(-4) \\ x_3^{(2)} = (-x_1^{(1)} - x_2^{(1)})/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(2)} = (3 - 0 - 0)/2 \\ x_2^{(2)} = (-5 - 2 \cdot 1 + 0)/(-4) \\ x_3^{(2)} = (-1 - 0)/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(2)} = 1.5 \\ x_2^{(2)} = 1.75 \\ x_3^{(2)} = -0.3333333333333333 \end{cases}$$

$$k = 2 \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(3)} = (3 - x_2^{(2)} - x_3^{(2)})/2 \\ x_2^{(3)} = (-5 - 2x_1^{(2)} + x_3^{(2)})/(-4) \\ x_3^{(3)} = (-x_1^{(2)} - x_2^{(2)})/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(3)} = (3 - 1.75 - (-0.3333333333333333))/2 \\ x_2^{(3)} = (-5 - 2 \cdot 1.5 + (-0.3333333333333333))/(-4) \\ x_3^{(3)} = (-1.5 - 1.75)/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(3)} = 0.7916666666666666 \\ x_2^{(3)} = 2.0833333333333335 \\ x_3^{(3)} = -1.0833333333333333 \end{cases}$$

$$k = 3 \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(4)} = (3 - x_2^{(3)} - x_3^{(3)})/2 \\ x_2^{(4)} = (-5 - 2x_1^{(3)} + x_3^{(3)})/(-4) \\ x_3^{(4)} = (-x_1^{(3)} - x_2^{(3)})/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(4)} = (3 - 2.0833333333333335 - (-1.0833333333333333))/2 \\ x_2^{(4)} = (-5 - 2 \cdot 0.7916666666666666 + (-1.0833333333333333))/(-4) \\ x_3^{(4)} = (-0.7916666666666666 - 2.0833333333333335)/3 \end{cases} \Rightarrow$$

$$\begin{cases} x_1^{(4)} = 0.9999999999999999 \\ x_2^{(4)} = 1.9166666666666665 \\ x_3^{(4)} = -0.9583333333333334 \end{cases}$$

e assim por diante ...

k	1	2	3	4	5	6	7
x_1^k	1	1.5	0.7916666666666666	0.9999999999999999	1.0208333333333335	0.9913194444444444	1.0
x_2^k	0	1.75	2.0833333333333335	1.9166666666666665	1.9895833333333333	2.0034722222222223	1.996527777777778
x_3^k	0	-0.3333333333333333	-1.0833333333333333	-0.9583333333333334	-0.9722222222222222	-1.0034722222222223	-0.998263888888889

As 7 primeiras iterações usando o método iterativo de Jacobi.

Note que os valores na tabela estão convergindo para $S = (1, 2, -1)$ que é a solução exata do sistema.

Método iterativo de Gauss-Seidel

O método de Gauss-Seidel é obtido a partir do método de Jacobi com uma pequena modificação. Suponha que estejamos na $(k+1)$-ésima iteração. No método de Jacobi, para encontrar o valor da variável $x_i^{(k+1)}$, $i = 1, 2, \ldots, n$, é necessário usar os valores de $x_1^{(k)}, \ldots, x_{i-1}^{(k)}, x_{i+1}^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}$ calculados na iteração anterior. Mas se já estamos calculando $x_i^{(k+1)}$, significa que já calculamos todas as variáveis anteriores nessa iteração, i.e., já calculamos $x_1^{(k+1)}, \ldots, x_{i-1}^{(k+1)}$. Assim, para o cálculo de $x_i^{(k+1)}$ vamos atualizar o valores de $x_1^{(k)}, \ldots, x_{i-1}^{(k)}$ com os valores já calculados nessa iteração, i.e., para calcular $x_i^{(k+1)}$ vamos usar os valores de $x_1^{(k+1)}, \ldots, x_{i-1}^{(k+1)}, x_{i+1}^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}$ ao invés de $x_1^{(k)}, \ldots, x_{i-1}^{(k)}, x_{i+1}^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}$. Com essas atualizações, a expressão recursiva (2.3) se transforma em

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \cdots - a_{1n}x_n^{(k)}\right)/a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{21}x_1^{(k+1)} - a_{22}x_2^{(k)} - \cdots - a_{2n}x_n^{(k)}\right)/a_{22} \\ \quad\vdots \\ x_n^{(k+1)} = \left(b_1 - a_{n1}x_1^{(k+1)} - a_{n2}x_2^{(k+1)} - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)}\right)/a_{nn} \end{cases}, \qquad k = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.4}$$

Essa é a expressão recursiva que caracteriza o ***método iterativo de Gauss-Seidel*** para aproximação da solução de um sistema linear. Como antes, não existe nenhuma razão lógica para o funcionamento desse método.

Observação: o índice superior ***não*** indica potência, indica apenas o número da iteração.

Exemplo 19

Use o método de Gauss-Seidel para aproximar a solução do seguinte sistema linear:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ 2x_1 - 4x_2 - x_3 = -5 \\ x_1 + x_2 + 3x_3 = 0 \end{cases}$$

Solução: Isolando x_i na linha i, para $i = 1,2,3$, obtemos o seguinte sistema linear equivalente:

$$\begin{cases} x_1 = (3 - x_2 - x_3)/2 \\ x_2 = (-5 - 2x_1 + x_3)/(-4) \\ x_3 = (-x_1 - x_2)/3 \end{cases} \quad \text{e colocando os índices no lugar certo} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = (3 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)})/2 \\ x_2^{(k+1)} = (-5 - 2x_1^{(k+1)} + x_3^{(k)})/(-4) \\ x_3^{(k+1)} = (-x_1^{(k+1)} - x_2^{(k+1)})/3 \end{cases}$$

Note que os índices mudaram um pouco (compare com o método de Jacobi). Agora, para calcular $x_2^{(k+1)}$ estamos usando $x_1^{(k+1)}$ e $x_3^{(k)}$, ao invés de $x_1^{(k)}$ e $x_3^{(k)}$, pois atualizamos o valor da variável $x_1^{(k)}$ com o novo valor que acabamos de calcular, $x_1^{(k+1)}$; e para calcular $x_3^{(k+1)}$ estamos usando $x_1^{(k+1)}$ e $x_2^{(k+1)}$, ao invés de $x_1^{(k)}$ e $x_2^{(k)}$, pois atualizamos o valor das variáveis $x_1^{(k)}$ e $x_2^{(k)}$ com os novos valores que acabamos de calcular, i.e., com $x_1^{(k+1)}$ e $x_2^{(k+1)}$.
Como estimativa (chute) inicial vamos usar o vetor $X^1 = (1,0,0)$ (você pode escolher qualquer outra estimativa inicial)

$$k=1 \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(2)} = (3 - x_2^{(1)} - x_3^{(1)})/2 \\ x_2^{(2)} = (-5 - 2x_1^{(2)} + x_3^{(1)})/(-4) \\ x_3^{(2)} = (-x_1^{(2)} - x_2^{(2)})/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(2)} = (3 - 0 - 0)/2 \\ x_2^{(2)} = (-5 - 2 \cdot 1.5 + 0)/(-4) \\ x_3^{(2)} = (-1.5 - 2)/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(2)} = 1.5 \\ x_2^{(2)} = 2 \\ x_3^{(2)} = -1.1666666666666667 \end{cases}$$

$$k=2 \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(3)} = (3 - x_2^{(2)} - x_3^{(2)})/2 \\ x_2^{(3)} = (-5 - 2x_1^{(3)} + x_3^{(2)})/(-4) \\ x_3^{(3)} = (-x_1^{(3)} - x_2^{(3)})/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(3)} = (3 - 2 - (-1.1666666666666667))/2 \\ x_2^{(3)} = (-5 - 2 \cdot 1.0833333333333335 + (-1.1666666666666667))/(-4) \\ x_3^{(3)} = (-1.0833333333333335 - 2.0833333333333335)/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(3)} = 1.0833333333333335 \\ x_2^{(3)} = 2.0833333333333335 \\ x_3^{(3)} = -1.0555555555555556 \end{cases}$$

$$k=3 \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(4)} = (3 - x_2^{(3)} - x_3^{(3)})/2 \\ x_2^{(4)} = (-5 - 2x_1^{(4)} + x_3^{(3)})/(-4) \\ x_3^{(4)} = (-x_1^{(4)} - x_2^{(4)})/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(4)} = (3 - 2.0833333333333335 - (-1.0555555555555556))/2 \\ x_2^{(4)} = (-5 - 2 \cdot 0.9861111111111111 + (-1.0555555555555556))/(-4) \\ x_3^{(4)} = (-0.9861111111111111 - 2.0069444444444446)/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(4)} = 0.9861111111111111 \\ x_2^{(4)} = 2.0069444444444446 \\ x_3^{(4)} = -0.9976851851851852 \end{cases}$$

e assim por diante ...

Confira a tabela com as 7 primeiras iterações:

k	1	2	3	4	5	6	7
x_1^k	1	1.5	1.0833333333333335	0.9861111111111111	0.9953703703703702	1.0001929012345678	1.0002089763374487
x_2^k	0	2.0	2.0833333333333335	2.0069444444444446	1.9971064814814814	1.9994695216049383	2.0000763567386834
x_3^k	0	-1.1666666666666667	-1.0555555555555556	-0.9976851851851852	-0.9974922839506172	-0.9998874742798355	-1.0000951110253773

As 8 primeiras iterações usando o método iterativo de Gauss-Seidel.

Convergência (de métodos do ponto fixo - parte 1)

Os métodos iterativos para aproximar soluções de sistemas lineares que vimos até aqui, são apenas casos particulares da aplicação do método do ponto fixo, i.e., o tempo todo estávamos tentando encontrar pontos fixos para funções $G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ definidas por $G(X) = TX + \vec{c}$, onde T é alguma matriz $m \times n$ e $\vec{c}$ é algum vetor $m \times 1$.

Se isso é mesmo verdade, então quem são as matrizes T e $\vec{c}$ que dão origem aos métodos iterativos de Jacobi e Gauss-Seidel?

No caso do método de Jacobi, é fácil encontrar a resposta para essa pergunta, pois o sistema ??? pode ser escrito na sua 'forma matricial' da seguinte forma:

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = \left(b_1 - a_{12}x_2^k - \cdots - a_{1n}x_n^k\right)/a_{11} \\ x_2^{k+1} = \left(b_2 - a_{11}x_2^k - \cdots - a_{2n}x_n^k\right)/a_{22} \\ \quad \vdots \\ x_n^{k+1} = \left(b_n - a_{n1}x_2^k - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1}^k\right)/a_{nn} \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1^{k+1} \\ x_2^{k+1} \\ \vdots \\ x_n^{k+1} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{22}} & \cdots & \frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \cdots & \frac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^k \\ x_2^k \\ \vdots \\ x_n^k \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{bmatrix}$$

Logo, no método de Jacobi, a matriz T e o vetor $\vec{c}$ são dados por

$$T = -\begin{bmatrix} 0 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \cdots & \frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \cdots & \frac{a_{n,n-1}}{a_{nn}} & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{e} \quad \vec{c} = \begin{bmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{bmatrix}$$

Agora, podemos escrever o método de Jacobi de maneira mais simples usando notação matricial:

$$X^{n+1} = TX^n + \vec{c}$$

Exemplo 20

Escreva a forma matricial do método de Jacobi para o sistema $\begin{cases} 2x_1 + x_2 + x_3 = 3 \\ 2x_1 - 4x_2 - x_3 = -5 \\ x_1 + x_2 + 3x_3 = 0 \end{cases}$

Solução: A notação matricial do método de Jacobi para o sistema acima é dado por

$$\begin{cases} x_1^{k+1} = (3 - x_2^k - x_3^k)/2 \\ x_2^{k+1} = (-5 - 2x_1^k + x_3^k)/(-4) \\ x_3^{k+1} = (-x_1^k - x_2^k)/3 \end{cases} \Rightarrow \begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ x_3^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 \\ -2 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3/2 \\ 5/4 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Seja $AX = B$ um sistema linear de orden $n \times n$ (por simplicidade, vou considerar $n = 3$). Considere agora a seguinte decomposição da matriz $A = (a_{ij})$ dos coeficientes do sistema (2.1):

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}}_{A} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & 0 \end{bmatrix}}_{L} + \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{bmatrix}}_{D} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} \\ 0 & 0 & a_{23} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_{U}$$

em breve...

Theorem 2.1.1 (***Critério 1***) A sequência $X^{(1)}, X^{(2)}, X^{(3)}, \ldots$ definida pela expressão

$$X^{(k+1)} = TX^{(k)} + \vec{c}, \quad k = 1, 2, 3, \ldots$$

converge para a única solução do sistema $X = TX + \vec{c}$, seja qual for o chute inicial $X^{(1)} \in \mathbb{R}^n$, se, e somente se, $\rho(T) < 1$.

Demonstração. em breve... □

O que o teorema acima está dizendo é: para garantir a convergência dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel, basta verificar se o raio espectral da matriz T_j (no caso do método de Jacobi) ou da matrix T_g (no caso do método de Gauss-Seidel) é < 1. Se for $\rho(T_j) \geq 1$ ou $\rho(T_g) \geq 1$, então a sequência produzida pelo respectivo método iterativo ***não converge***.

Exemplo 21

em breve...

Dizemos que uma matriz $A = (a_{ij})$ é ***diagonalmente dominante*** se

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^{n} |a_{ij}|, \qquad i = 1, 2, 3, \ldots, n.$$

Theorem 2.1.2 (***Critério 2***) Se a matriz dos coeficientes de um sistema linear é diagonalmente dominante, então os métodos de Jacobi e Gauss-Seidel produzem sequências que convergem para a solução do sistema.

Demonstração. em breve... □

Exemplo 22

em breve...

2.2 Sistemas não lineares

Um ***sistema não linear*** com m equações e n incógnitas é um conjunto de equações da forma

$$\begin{cases} f_1(x_1,x_2,\dots,x_n)=0 \\ f_2(x_1,x_2,\dots,x_n)=0 \\ \qquad\qquad\vdots \\ f_m(x_1,x_2,\dots,x_n)=0 \end{cases} \tag{2.5}$$

em que pelo menos uma das equações $f_i(x_1,\dots,x_n)=0$, $i=1,2,\dots,m$, é não linear[2]. Uma ***solução*** para o sistema (2.5) é qualquer lista de n números $S=(s_1,\dots,s_n)$ que satisfaz todas as equações do sistema. Por exemplo

$$\begin{cases} x_1^2+x_2^2-2=0 \\ x_1-x_2=0 \end{cases}, \tag{2.6}$$

é um sistema não linear. A equação $x_1^2+x_2^2-2=0$ corresponde à equação de um círculo de raio 2, e a equação $x_1-x_2=0$ corresponde à equação de uma reta. A solução do sistema, por sua vez, corresponde ao conjunto dos pontos onde esse círculo e essa reta se intersectam. É fácil ver que $(1,1)$ e $(-1,-1)$ são as únicas soluções desse sistema. Essa interpretação geométrica para a solução de um sistema não linear pode ser generalizada para sistemas de ordem maior.

Se denotarmos $f_1(x_1,x_2)=x_1^2+x_2^2-4$ e $f_2(x_1,x_2)=x_1-x_2$, podemos reescrever o sistema (2.6) na forma $F(X)=0$, com $F:\mathbb{R}^2\to\mathbb{R}^2$ definida por $F(X)=(f_1(X),f_2(X))$ e $X=(x_1,x_2)$. Em geral, se definirmos $F:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}^m$ por $F=(f_1,f_2,\dots,f_m)$, então o sistema (2.5) assume a forma

$$F(X)=0, \qquad X=(x_1,\dots,x_n) \tag{2.7}$$

A partir daqui, vamos usar a notação (2.7) para denotar um sistema da forma (2.5).

O método do ponto fixo

O ***método do ponto fixo*** para aproximar uma solução de um sistema não linear $F(X)=0$ consiste em reescrever essa equação na forma $G(X)=X$, para alguma função G, e então usar essa função G para construir uma sequência de vetores, $X^{(1)},X^{(2)},X^{(3)},\dots$, definida por

$$X^{(k+1)}=G\big(X^{(k)}\big), \quad k=1,2,3,\dots,$$

onde $X^{(1)}$ é qualquer estimativa inicial para a solução do sistema $F(X)=0$. Mais adiante vamos impôr restrições sobre G para garantir que essa sequência convirja para a solução desejada.

Exemplo 23

Use o método do ponto fixo para aproximar uma solução para o sistema

$$\begin{cases} x_1^2+x_1x_2-6=0 \\ 3x_1x_2^2+x_2-7=0 \end{cases} \tag{2.8}$$

Isolando um x_1 na primeira equação e um x_2 na segunda equação, obtemos:

$$\begin{cases} x_1=\sqrt{6-x_1x_2} \\ x_2=\sqrt{\dfrac{7-x_2}{3x_1}} \end{cases} \tag{2.9}$$

Agora vamos definir uma função $G:\mathbb{R}^2\to\mathbb{R}^2$ por

$$G(x_1,x_2)=\left(\sqrt{6-x_1x_2},\sqrt{\frac{7-x_2}{3x_1}}\right)$$

Note que as funções coordenadas da função G são exatamente as funções que aparecem do lado direito das equações do sistema (2.9).

[2]Dizemos que uma equação $f_1(x_1,\dots,x_n)=0$ é linear se $f_i(x_1,\dots,x_n)$ é uma combinação linear dos elementos do conjunto $\{1\}\cup\{x_1,x_2,\dots,x_n\}$

Agora vamos usar a iteração do ponto fixo

$$X^{(k+1)} = G\big(X^{(k)}\big), \quad k = 1, 2, 3, \ldots,$$

com $X^{(1)} = (1,1)$ como chute inicial, para construir uma sequência de aproximações para a solução do sistema (2.9) que é também uma solução para o sistema (2.8)

$k = 1 \to X^{(2)} = G\big(X^{(1)}\big) = G(1,1) = (2.23606797749979, 1.4142135623730951)$
$k = 2 \to X^{(3)} = G\big(X^{(2)}\big) = G(2.23606797749979, 1.4142135623730951) = (1.6845540477620837, 0.9125129472078792)$
$k = 3 \to X^{(4)} = G\big(X^{(3)}\big) = G(1.6845540477620837, 0.9125129472078792) = (2.1125393774189534, 1.0975287945297134)$
$k = 4 \to X^{(5)} = G\big(X^{(4)}\big) = G(2.1125393774189534, 1.0975287945297134) = (1.9187045639453784, 0.9650590877690142)$
$k = 5 \to X^{(6)} = G\big(X^{(5)}\big) = G(1.9187045639453784, 0.9650590877690142) = (2.0367466027517094, 1.0239336826370602)$
$k = 6 \to X^{(7)} = G\big(X^{(6)}\big) = G(2.0367466027517094, 1.0239336826370602) = (1.9785111954310293, 0.9889596589542432)$
$k = 7 \to X^{(8)} = G\big(X^{(7)}\big) = G(1.9785111954310293, 0.9889596589542432) = (2.010803879777781, 1.0063404693109488)$
$k = 8 \to X^{(9)} = G\big(X^{(8)}\big) = G(2.010803879777781, 1.0063404693109488) = (1.9941029762607927, 0.9967828335173673)$
$k = 9 \to X^{(10)} = G\big(X^{(9)}\big) = G(1.9941029762607927, 0.9967828335173673) = (2.0030757312187055, 1.0017459814573115)$
e assim por diante..

Note que essa sequência está se aproximando da solução $(2,1)$ so sistema (2.8).

Exemplo 24

Use o método do ponto fixo para aproximar uma solução para o sistema

$$\begin{cases} x_1^2 + x_1x_2 - 6 = 0 \\ 3x_1x_2^2 + x_2 - 7 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1(x_1 + x_2) - 6 = 0 \\ x_2(3x_1x_2 + 1) - 7 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = \dfrac{6}{x_1 + x_2} \\ x_2 = \dfrac{7}{3x_1x_2 + 1} \end{cases} \tag{2.10}$$

Defina $G : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ por

$$G(x_1, x_2) = \left(\frac{6}{x_1 + x_2}, \frac{7}{3x_1x_2 + 1}\right)$$

A seguência gerada por essa função G não converge (verifique isso!).

Exemplo 25

Use o método do ponto fixo para aproximar uma solução para o sistema

$$\begin{cases} x_1^2 + x_1x_2 - 6 = 0 \\ 3x_1x_2^2 + x_2 - 7 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1(x_1 + x_2) - 6 = 0 \\ x_2(3x_1x_2 + 1) - 7 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = \dfrac{6}{x_1 + x_2} \\ x_2 = \dfrac{7}{3x_1x_2 + 1} \end{cases} \tag{2.11}$$

Defina $G : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ por

$$G(x_1, x_2) = \left(\frac{6}{x_1 + x_2}, \frac{7}{3x_1x_2 + 1}\right)$$

A seguência gerada por essa função G não converge (verifique isso!).

Como você pôde notar, para um mesmo sistema existem várias opções de funções G. Algumas vão produzir sequências convergêntes e outras não. Na próxima seção, serão dadas condições necessárias para que em breve...

Convergência (de métodos do ponto fixo - parte 2)

em breve...

Exemplo 26

em breve...

O método de Newton

Seja $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ uma função vetorial de várias variáveis. Denote por $f_1, f_2, \ldots, f_m$ as funções coordenadas de F, i.e., F é dada por

$$F(X) = (f_1(X), \ldots, f_m(X)).$$

A derivada F' da função F é chamada de ***matriz jacobiana de F*** e é definida por

$$F'(X) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(X) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(X) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(X) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(X) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(X) & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(X) \end{bmatrix}, \quad \forall\, X = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n \tag{2.12}$$

Obs: Note que na linha i da matriz jacobiana aparecem todas as derivadas parciais da função f_i, i.e., $\frac{\partial f_i}{\partial x_1}, \ldots, \frac{\partial f_i}{\partial x_n}$.

Sejam $F(X) = 0$ um sistema não-linear e $X^{(1)} \in \mathbb{R}^n$ uma estimativa inicial para a solução desse sistema. A expressão recursiva definida por

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} - [F'(X^{(k)})]^{-1} F(X^{(k)}), \quad k = 1, 2, 3, \ldots \tag{2.13}$$

é chamada de ***método de Newton*** para o sistema $F(X) = 0$ (compare com o método de Newton para funções de uma variável).

Exemplo 27

Use o método de Newton com $X^{(1)} = (1,1)$ para aproximar uma solução do sistema $\begin{cases} 2x_1^3 + x_2^2 - 4 = 0 \\ x_1^2 + x_2^4 - 5 = 0 \end{cases}$.

Solução: Começamos definindo uma função $F : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$ por $F(x_1, x_2) = \big(2x_1^3 + x_2^2 - 4, x_1^2 + x_2^4 - 5\big)$. Isso nos permite reescrever o sistema na forma $F(X) = 0$, onde $X = (x_1, x_2)$ e 0 é o vetor nulo em $\mathbb{R}^2$. A derivada F' da função F que acabamos de definir é dada por

$$F'(X) = \begin{bmatrix} 6x_1^2 & 2x_2 \\ 2x_1 & 4x_2^3 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \text{ cuja inversa é } \Rightarrow \quad \big[F'(X)\big]^{-1} = \frac{1}{24x_1^2x_2^3 - 4x_1x_2} \begin{bmatrix} 4x_2^3 & -2x_2 \\ -2x_1 & 6x_1^2 \end{bmatrix} \tag{2.14}$$

Note que o método de Newton (2.13) é dado por

$$X^{k+1} = G(X^{(k)}). \tag{2.15}$$

onde G é a função definida por $G(X) = X - [F'(X)]^{-1}F(X)$ (convença-se disso!). Substituindo, nessa função G, os valores de $F(X)$ e $[F'(X)]^{-1}$ obtidos em (2.14), obtemos

$$G(x_1, x_2) = (x_1, x_2) - [F'(x_1, x_2)]^{-1} F(x_1, x_2) = (x_1, x_2) - \frac{1}{24x_1^2x_2^3 - 4x_1x_2} \begin{bmatrix} 4x_2^3 & -2x_2 \\ -2x_1 & 6x_1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2x_1^3 + x_2^2 - 4 \\ x_1^2 + x_2^4 - 5 \end{bmatrix}$$

Agora vamos começar a construir os elementos da sequência de aproximações para a solução do sistema, usando essa função G e a expressão de recorrência (2.15):

$k = 1 \to X^{(2)} = G(X^{(1)}) = G(1,1) = (1,1) - \frac{1}{24 \cdot 1^2 \cdot 1^3 - 4 \cdot 1 \cdot 1} \begin{bmatrix} 4 \cdot 1^3 & -2 \cdot 1 \\ -2 \cdot 1 & 6 \cdot 1^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \cdot 1^3 + 1^2 - 4 \\ 1^2 + \cdot 1^4 - 5 \end{bmatrix} = (0.9, 1.8)$
$k = 2 \to X^{(3)} = G(X^{(2)}) = G(0.9, 1.8) = (0.9601007651686604, 1.5249750781334197)$
$k = 3 \to X^{(4)} = G(X^{(3)}) = G(0.9601007651686604, 1.5249750781334197) = (0.9972975054255997, 1.4261850983733284)$
$k = 4 \to X^{(5)} = G(X^{(4)}) = G(0.9972975054255997, 1.4261850983733284) = (0.9999557651171214, 1.414371689213416)$
$k = 5 \to X^{(6)} = G(X^{(5)}) = G(0.9999557651171214, 1.414371689213416) = (0.9999999929537328, 1.4142135903070407)$
e assim por diante...

Esta sequência está convergindo para o vetor $(1, \sqrt{2})$, que é uma solução exata do sistema dado.

(des)Motivação 1: Agora você vai descobrir de onde surgiu a expressão (2.13). Seja $P \in \mathbb{R}^n$ é uma solução para o sistema $F(X) = 0$, onde F é uma função de $\mathbb{R}^n$ para $\mathbb{R}^n$. Defina $G : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ por

$$G(X) = id(X) + A(X)F(X) \tag{2.16}$$

onde $id : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ é a função identidade e A é uma matriz-função[3], i.e., cada entrada a_{ij} de A é uma função de $\mathbb{R}^n$ para $\mathbb{R}$. Se supormos que $A(P) \neq 0$ não é a matriz nula, então P é um ponto fixo para G. De fato,

$$G(P) = id(P) + A(P)F(P) = P + A(P)0 = P.$$

[3]Na verdade, A é uma função de $\mathbb{R}^n$ para o conjunto $\mathrm{Lin}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ de todas as transformações lineares de $\mathbb{R}^n$ para $\mathbb{R}^n$; o que significa que quando aplicada num vetor $X \in \mathbb{R}^n$, $A(X)$ é uma 'matriz'.

Suponha agora essa G seja contínua numa vizinhança de P e que $G'(P) = 0$ (ver teorema 10.7 Burden). Derivando equação (2.16), obtemos

$$G'(X) = id'(X) + A'(X)F(X) + A(X)F'(X) \Leftrightarrow G'(X) = I_n + A'(X)F(X) + A(X)F'(X),$$

onde $I_n : \mathbb{R}^n \to \mathrm{Lin}(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$ é a função[4] constante que manda todo ponto de $\mathbb{R}^n$ para a matriz identidade I_n, i.e., $I_n(X) = I_n$, para todo $X \in \mathbb{R}^n$ (veja como calcular a derivada da função identidade no Apendice I, em breve...). Calculando esta última igualdade no ponto P obtemos

$$0 = G'(P) = I_n(P) + A'(P)F(P) + A(P)F'(P),$$

e como $F(P) = 0$, concluímos que

$$A(P)F'(P) = -I_n \Leftrightarrow A(P) = -[F'(P)]^{-1},$$

sempre que $F'(P)$ for invertível, i.e., o valor da função A no ponto P deve ser a matriz $-[F'(P)]^{-1}$. Sendo assim, vamos definir a matriz-função $A(X)$ por

$$A(X) = -[F'(X)]^{-1}.$$

Substituindo essa função na equação (2.16), ficamos com

$$G(X) = X - [F'(X)]^{-1}F(X),$$

pois que $id(X) = X$. A sequência $X^{(1)}, X^{(2)}, X^{(3)}, \ldots$ definida por

$$X^{(k+1)} = G\big(X^{(k)}\big), \quad k = 1, 2, 3 \ldots$$

converge pelo menos quadráticamente para a solução P do sistema $F(X) = 0$, desde que $X^{(1)}$ seja tomado suficientemente próximo de P.

(des)Motivação 2: Uma outra forma de descobrir de onde surgiu a expressão (2.13) é dada a seguir. em breve...

*O método do gradiente conjugado**

em breve...

[4]derivada da função identidade $id : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$

3 | Derivação numérica

Theorem 3.0.1 (de Taylor) Seja que $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ uma função $k+1$ vezes diferenciável no intervalo (a,b) e $x_0 \in [a,b]$. Então para cada $x \in [a,b]$ existe um número c (que depende de x) entre x e p tal que

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x)$$

onde

$$P_n(x) = f(p) + f'(p)(x-p) + \frac{f''(p)}{2!}(x-p)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(p)}{n!}(x-p)^n \tag{3.1}$$

é o polinômio de Taylor de grau n em torno do ponto $x = x_0$ e

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x-p)^{n+1} \tag{3.2}$$

é o erro associado a $P_n(x)$.

Demonstração. em breve... □

Nota: Intuitivamente pode-se pensar em $P_n(x_0)$ como uma aproximação para o valor de $f(x)$ no ponto $x = x_0$ com erro dado por $R_n(x_0)$.

Com isso em mente, podemos considerar alguns casos particulares.

Faça $k = 1$ no teorema de Taylor. Quando $h \neq 0$ é um número real suficientemente pequeno, então $p+h$ estão próximos de p. Calculando a fórmula (3.1) em $p+h$ ficamos com

$$f(p+h) = f(p) + f'(p)h + \frac{f''(c)}{2!}h^2 \;\Rightarrow\; f'(p) = \frac{f(p+h)-f(p)}{h} + \frac{h}{2}f''(c), \quad \text{para algum } c \in (p, p+h) \tag{3.3}$$

Exemplo 28

Use a fórmula acima para aproximar a primeira derivada de $f(x) = xe^x$ no ponto $p = 1$.

Solução. Denotando por $N(h) = \frac{f(1+h)-f(1)}{h}$, temos que

$$f'(1) \simeq N(h).$$

Escolhi alguns valores para h e coloquei os resultados na tabela abaixo:

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'(1) - N(h) \rvert$
10^{-1}	5.86300797882032	0.42644432190223025
10^{-2}	5.477519670804032	0.04095601388594172
10^{-3}	5.440642892414527	0.004079235496436517
10^{-5}	5.436604431396929	$4.077447883865659e-05$
10^{-6}	5.436567733774211	$4.076856121137951e-06$
10^{-7}	5.43656407003823	$4.13120139874934e-07$
10^{-8}	5.436563643712589	$1.32055015811261e-08$
10^{-9}	5.4365640878017985	$4.308837082689365e-07$
10^{-10}	5.4365667523370576	$3.0954189673693122e-06$
10^{-13}	5.435651928564766	0.0009117283533237597
10^{-14}	5.417888360170764	0.018675296747326264
10^{-15}	6.217248937900876	0.7806852809827856
10^{-16}	0.0	5.43656365691809

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'(1) - N(h) \rvert$
2^{-1}	8.008503554096105	2.571939897178015
2^{-2}	6.578587473473027	1.1420238165549366
2^{-3}	5.975697012589919	0.5391333556718285
2^{-18}	5.436579211149365	$1.5554231274528263e-05$
2^{-19}	5.436571434140205	$7.77722211520171e-06$
2^{-29}	5.436563730239868	$7.33217779824713e-08$
2^{-30}	5.436563968658447	$3.117403570840338e-07$
2^{-35}	5.4365692138671875	$5.556949097318409e-06$
2^{-36}	5.43658447265625	$2.081573815981841e-05$
2^{-50}	5.5	0.06343634308190982
2^{-51}	6.0	0.5634363430819098
2^{-52}	6.0	0.5634363430819098
2^{-53}	0.0	5.43656365691809

Na tabela à esquerda, por exemplo, quando $h = 10^{-8}$ temos um erro $E(h) < 1.321 \cdot 10^{-8}$, porém quando diminuímos demais h, as aproximações começam a piorar.

Faça $k = 2$ no teorema de Taylor. Quando $h \neq 0$ é um número real suficientemente pequeno, então $p-h$ e $p+h$ estão próximos de p. Calculando a fórmula (3.1) em $p-h$ e $p+h$ ficamos com

$$f(p-h) = f(p) - f'(p)h + \frac{f''(p)}{2!}h^2 - \frac{f'''(c_1)}{3!}h^3, \quad c_1 \in (p-h, p)$$

e

$$f(p+h) = f(p) + f'(p)h + \frac{f''(p)}{2!}h^2 + \frac{f'''(c_2)}{3!}h^3, \quad c_2 \in (p, p+h)$$

Subtraindo a primeira equação da segunda, obtemos

$$f(p+h) - f(p-h) = 2f'(p)h + \frac{2f'''(c)}{3!}h^3 \Rightarrow f'(p) = \frac{f(p+h) - f(p-h)}{2h} + \frac{h^2}{6}f'''(c) \tag{3.4}$$

onde $2f'''(c) = f'''(c_1) + f'''(c_2)$, para algum[1] $c \in (p-h, p+h)$.

Exemplo 29

Use a fórmula acima para aproximar a primeira derivada de $f(x) = xe^x$ no ponto $p = 1$.

Solução. Denotando por $N(h) = \frac{f(1+h)-f(1-h)}{2h}$, temos que

$$f'(1) \simeq N(h).$$

Escolhi alguns valores para h e coloquei os resultados na tabela abaixo:

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'(1) - N(h)\rvert$
10^{-1}	5.45469913149911	0.018135474581019828
10^{-2}	5.436744877065802	0.00018122014771204675
10^{-3}	5.4365654691057586	$1.8121876683707683e-06$
10^{-4}	5.436563675040862	$1.8122771727746567e-08$
10^{-7}	5.436563657035265	$1.1717471437577842e-10$
10^{-9}	5.436563643712589	$1.32055015811261e-08$
10^{-10}	5.436564531891008	$8.749729181189991e-07$
10^{-11}	5.436562311444959	$1.345473131131314e-06$
10^{-12}	5.436984196194317	0.00042053927622642817
10^{-13}	5.435651928564766	0.0009117283533237597
10^{-14}	5.417888360170764	0.018675296747326264
10^{-15}	5.773159728050813	0.33659607113272294
10^{-16}	2.220446049250313	3.216117607667777
10^{-17}	0.0	5.43656365691809

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'(1) - N(h)\rvert$
2^{-1}	5.898172970157033	0.4616093132389425
2^{-2}	5.550357368735591	0.1137937118175012
2^{-3}	5.464912291246296	0.028348634328206224
2^{-14}	5.436563663672132	$6.75404177030714e-09$
2^{-15}	5.4365636586007895	$1.682699313221292e-09$
2^{-16}	5.436563657349325	$4.312346035817427e-10$
2^{-17}	5.436563657014631	$9.654055332930511e-11$
2^{-18}	5.436563656956423	$3.8332892415837705e-11$
2^{-19}	5.436563656898215	$1.9874768497629702e-11$
2^{-20}	5.436563656665385	$2.5270541215149933e-10$
2^{-49}	5.5	0.06343634308190982
2^{-50}	5.25	0.18656365691809018
2^{-53}	2.0	3.43656365691809
2^{-54}	0.0	5.43656365691809

Na tabela à esquerda, por exemplo, quando $h = 10^{-7}$ temos um erro $E(h) < 1.172 \cdot 10^{-10}$, porém quando diminuímos demais h, as aproximações começam a piorar.

Faça $k = 3$ no teorema de Taylor. Quando $h \neq 0$ é um número real suficientemente pequeno, então $p-h$ e $p+h$ estão próximos de p. Calculando a fórmula (3.1) em $p-h$ e $p+h$ ficamos com

$$f(p-h) = f(p) - f'(p)h + \frac{f''(p)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \frac{f^{(iv)}(c_1)}{4!}h^4, \quad c_1 \in (p-h, p)$$

e

$$f(p+h) = f(p) + f'(p)h + \frac{f''(p)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \frac{f^{(iv)}(c_2)}{4!}h^4, \quad c_2 \in (p-h, p)$$

Somando essas duas equações, obtemos

$$f(p-h) + f(p+h) = 2f(p) + \frac{f''(p)}{3!}h^2 + \frac{2f^{(iv)}(c)}{4!}h^4 \Rightarrow f''(p) = \frac{f(p-h) - 2f(p) + f(p+h)}{h^2} + \frac{h^2}{12}f^{(iv)}(c) \tag{3.5}$$

onde $2f^{(iv)}(c) = f^{(iv)}(c_1) + f^{(iv)}(c_2)$, para algum[2] $c \in (p-h, p+h)$.

Exemplo 30

Use a fórmula acima para aproximar a primeira derivada de $f(x) = xe^x$ no ponto $p = 1$.

Solução. Denotando por $N(h) = \frac{f(1-h)-2f(1)+f(1+h)}{h^2}$, temos que

$$f''(1) \simeq N(h).$$

Escolhi alguns valores para h e coloquei os resultados na tabela abaixo:

[1] A existência desse c segue do Teorema do Valor Intermediário.
[2] A existência desse c segue do Teorema do Valor Intermediário.

h	$N(h)$	$E(h) = \|f''(1) - N(h)\|$
10^{-1}	8.166176946424207	0.011331461047070945
10^{-2}	8.154958747645935	0.00011326226879937451
10^{-3}	8.154846617536293	$1.132159157535284e-06$
10^{-4}	8.154845554386725	$6.900958915423416e-08$
10^{-5}	8.154854569397683	$9.084020547334148e-06$
10^{-6}	8.15436607126685	0.00047941411028595837
10^{-7}	8.260059303211166	0.10521381783403072
10^{-8}	0.0	8.154845485377136
10^{-9}	888.1784197001251	880.023574214748
10^{-10}	44408.920985006254	44400.76613952088

h	$N(h)$	$E(h) = \|f''(1) - N(h)\|$
2^{-1}	8.441322335756283	0.28647685037914705
2^{-2}	8.225840837899483	0.07099535252234723
2^{-3}	8.172555541497957	0.017710056120820994
2^{-4}	8.15927057879037	0.004425093413233938
2^{-13}	8.154845505952835	$2.0575699366531808e-08$
2^{-14}	8.154845476150513	$9.226623021163505e-09$
2^{-15}	8.15484619140625	$7.06029114283524e-07$
2^{-16}	8.154848098754883	$2.613377747096024e-06$
2^{-27}	16.0	7.845154514622864
2^{-28}	32.0	23.845154514622863

Na tabela à esquerda, por exemplo, quando $h = 10^{-4}$ temos um erro $E(h) < 6.901 \cdot 10^{-8}$, porém quando diminuímos demais h, as aproximações começam a piorar.

Na seção a seguir, vamos descobrir um novo método para encontrar fórmulas de aproximação para derivadas.

3.1 Método das diferenças finitas

Na primeira fórmula de aproximação que encontramos acima o erro é dado por $E(h) = \frac{f''(c)}{2}$. Neste caso, se f é qualquer polinômio de graus menor ou igual que 1, então $E(h) = 0$ e a fórmula dá o valor exato.

Analogamente, na segunda fórmula de aproximação que encontramos, o erro é dado por $E(h) = \frac{f'''(c)}{6}$. Note-se agora que, se f é qualquer polinômio de grau menor ou igual a dois, então $E(h) = 0$, e a fórmula dá também o valor exato.

Assim, se queremos generalizar o método de construção de tais fórmulas de aproximação de derivadas, faz sentido raciocinar da seguinte forma: dados $x_1, x_2, \ldots, x_n$, n pontos no domínio de f e p um ponto entre dois x_i's quaisquer, suponha que existam constantes $c_1, c_2, \ldots, c_n$ tais que a fórmula

$$f^{(k)}(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + \cdots c_n f(x_n), \quad k \leq n-1 \tag{3.6}$$

seja exata em polinômios de grau menor ou igual a $n-1$. Se a fórmula acima satisfaz essa condição, então ela será uma fórmula de aproximação para a k-ésima derivada de f em p.

Não é preciso verificar a exatidão da fórmula (3.6) em todos os polinômios de graus $\leq n-1$. É suficiente verificar que (3.6) é exata apenas para os polinômios na lista $\{1, x, x^2, \ldots, x^{n-1}\}$ (já que todo polinômio é uma combinação linear destes). Substituindo $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x) = x^2$, ..., $f(x) = x^{n-1}$ na fórmula (3.6), obtemos a seguinte lista de equações:

$$\left.\begin{aligned}
0 &= (1)^{(k)}|_{x=p} = c_1 + c_2 + c_3 + \cdots + c_n \\
0 &= (x)^{(k)}|_{x=p} = c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 + \cdots + c_n x_n \\
&\vdots \\
k! &= (x^k)^{(k)}|_{x=p} = c_1 x_1^k + c_2 x_2^k + c_3 x_3^k + \cdots + c_n x_n^k \\
(k+1)!p &= (x^{k+1})^{(k)}|_{x=p} = c_1 x_1^k + c_2 x_2^k + c_3 x_3^k + \cdots + c_n x_n^k \\
&\vdots \\
\frac{(n-1)!}{(n-1-k)!} p^{n-1-k} &= (x^{n-1})^{(k)}|_{x=p} = c_1 x_1^{n-1} + c_2 x_2^{n-1} + c_3 x_3^{n-1} + \cdots + c_n x_n^{n-1}
\end{aligned}\right. \quad \Rightarrow \tag{3.7}$$

cuja forma matricial é dada por

$$\begin{bmatrix}
1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\
x_1 & x_2 & x_3 & \cdots & x_n \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
x_1^k & x_2^k & x_3^k & \cdots & x_n^k \\
x_1^{k+1} & x_2^{k+1} & x_3^{k+1} & \cdots & x_n^{k+1} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & x_3^{n-1} & \cdots & x_n^{n-1}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_k \\ c_{k+1} \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ k! \\ (k+1)!p \\ \vdots \\ \frac{(n-1)!}{(n-1-k)!} p^{n-1-k} \end{bmatrix} \tag{3.8}$$

Exemplo 31

Encontre uma expressão do tipo

$$f'(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) + c_5 f(x_5) \tag{3.9}$$

com

$$x_1 = p - 2h,\ x_2 = p - h,\ x_3 = p,\ x_4 = p + h,\ x_5 = p + 2h.$$

para aproximar a primeira derivada de um função.

Solução. Para simplificar a resolução do sistema (3.8), vamos fazer uma *translação* no gráfico da função f, ou seja, vamos definir uma nova função $\tilde{f}$ por $\tilde{f}(x) = f(x+p)$ e novos pontos

$$\tilde{x}_1 = -2h,\ \tilde{x}_2 = -h,\ \tilde{x}_3 = 0,\ \tilde{x}_4 = h,\ \tilde{x}_5 = 2h \tag{3.10}$$

Note que $\tilde{f}(\tilde{x}_1) = f(x_1), \tilde{f}(\tilde{x}_2) = f(x_2), \tilde{f}(\tilde{x}_3) = f(x_3), \tilde{f}(\tilde{x}_3) = f(x_4), \tilde{f}(\tilde{x}_5) = f(x_5)$. Além disso $\tilde{f}'(x) = f'(x+p) \Rightarrow \tilde{f}'(0) = f'(p)$. Substituindo esses valores na equação (3.9) obtemos a seguinte expressão

$$\tilde{f}'(0) \simeq c_1 \tilde{f}(\tilde{x}_1) + c_2 \tilde{f}(x_2) + c_3 \tilde{f}(\tilde{x}_3) + c_4 \tilde{f}(\tilde{x}_4) + c_5 \tilde{f}(\tilde{x}_5) \tag{3.11}$$

Portanto, para encontrar $c_1, c_2, \ldots, c_5$ é suficiente resolver o sistema (3.19) para a função $\tilde{f}$ com os pontos (3.18), isto é, basta substituir os valores de $\tilde{x}_1 = -2h$, $\tilde{x}_2 = -h$, $\tilde{x}_3 = 0$, $\tilde{x}_4 = h$, $\tilde{x}_5 = 2h$, $k = 1$ e $p = 0$ no sistema (3.8), para obter o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2h & -h & 0 & h & 2h \\ 4h^2 & h^2 & 0 & h^2 & 4h^2 \\ -8h^3 & -h^3 & 0 & h^3 & 8h^2 \\ 16h^4 & h^4 & 0 & h^4 & 16h^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \\ c_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

cuja solução é

$$c_1 = \frac{1}{12h}, \quad c_2 = -\frac{8}{12h}, \quad c_3 = 0, \quad c_4 = \frac{8}{12h}, \quad c_5 = -\frac{1}{12h}$$

Substituindo esses valores na expressão (3.9), obtemos a seguinte fórmula

$$f'(p) \simeq \frac{f(p-2h) - 8f(p-h) + 8f(p+h) - f(p+2h)}{12h} \tag{3.12}$$

que aproxima a derivada de f no ponto p com erro[a] $O(h^4)$.

[a] A ordem do erro é calculada de outra maneira!

Exemplo 32

Use a fórmula (3.12) para aproximar a primeira derivada de $f(x) = xe^x$ no ponto $p = 1$.

Solução. Denotando por $N(h) = \frac{f(1-2h) - 8f(1-h) + 8f(1+h) - f(1+2h)}{12h}$, temos que

$$f'(1) \simeq N(h)$$

Escolhi alguns valores para h e coloquei os resultados na tabela abaixo:

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'(1) - N(h) \rvert$
10^{-1}	5.436509204923911	$5.4451994179416374e-05$
10^{-2}	5.436563651481452	$5.4366378066106336e-09$
10^{-3}	5.436563656917026	$1.06403774680075e-12$
10^{-4}	5.436563656918691	$6.004086117172847e-13$
10^{-5}	5.436563656961249	$4.3159253948488185e-11$
10^{-6}	5.436563656628183	$2.899067652606391e-10$
10^{-7}	5.436563656665191	$2.5289903504699396e-10$
10^{-8}	5.436563636311101	$2.0606989004079423e-08$
10^{-9}	5.436563680720022	$2.3801931980926838e-08$
10^{-10}	5.436565272039691	$1.6151216009063774e-06$
10^{-30}	-37007434154171.88	37007434154177.32
10^{-31}	-370074341541718.8	370074341541724.25
10^{-32}	-3700743415417188.5	3700743415417194.0
10^{-60}	$-3.700743415417189e+43$	$3.700743415417189e+43$
10^{-61}	$-3.700743415417188e+44$	$3.700743415417188e+44$

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'(1) - N(h) \rvert$
2^{-1}	5.4012119272324925	0.03535172968559763
2^{-2}	5.434418834928444	0.002144821989646495
2^{-3}	5.4364305987498645	0.00013305816822573036
2^{-12}	5.436563656917618	$4.725109192804666e-13$
2^{-13}	5.436563656920346	$2.255973186038318e-12$
2^{-22}	5.436563656665385	$2.5270541215149933e-10$
2^{-23}	5.436563654492299	$2.4257911235281426e-09$
2^{-35}	5.436565399169922	$1.7422518316934088e-06$
2^{-36}	5.436574300130208	$1.0643212117855683e-05$
2^{-50}	5.041666666666667	0.3948969902514232
2^{-51}	5.666666666666667	0.23010300974857678
2^{-60}	-42.666666666666664	48.103230323584754
2^{-61}	-85.33333333333333	90.76989699025142
2^{-67}	-5461.333333333333	5466.769896990251
2^{-68}	-10922.666666666666	10928.103230323584

Na tabela à esquerda, por exemplo, quando $h = 10^{-4}$ temos um erro $E(h) < 6.005 \cdot 10^{-13}$, porém quando diminuímos demais h, as aproximações começam a piorar.

Exemplo 33

Encontre uma expressão do tipo

$$f''(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) + c_5 f(x_5) \tag{3.13}$$

com

$$x_1 = p - 2h,\ x_2 = p - h,\ x_3 = p,\ x_4 = p + h,\ x_5 = p + 2h.$$

para aproximar a segunda derivada de um função num ponto.

Solução. Para simplificar a resolução do sistema (3.8), vamos fazer uma *translação* no gráfico da função f, ou seja, vamos definir uma nova função $\tilde{f}$ por $\tilde{f}(x) = f(x + p)$ e novos pontos

$$\tilde{x}_1 = -2h,\ \tilde{x}_2 = -h,\ \tilde{x}_3 = 0,\ \tilde{x}_4 = h,\ \tilde{x}_5 = 2h \tag{3.14}$$

Note que $\tilde{f}(\tilde{x}_1) = f(x_1), \tilde{f}(\tilde{x}_2) = f(x_2), \tilde{f}(\tilde{x}_3) = f(x_3), \tilde{f}(\tilde{x}_3) = f(x_4), \tilde{f}(\tilde{x}_5) = f(x_5)$. Além disso $\tilde{f}''(x) = f''(x + p) \Rightarrow \tilde{f}''(0) = f''(p)$. Substituindo esses valores na equação (3.9) obtemos a seguinte expressão

$$\tilde{f}''(0) \simeq c_1 \tilde{f}(\tilde{x}_1) + c_2 \tilde{f}(\tilde{x}_2) + c_3 \tilde{f}(\tilde{x}_3) + c_4 \tilde{f}(\tilde{x}_4) + c_5 \tilde{f}(\tilde{x}_5) \tag{3.15}$$

Portanto, para encontrar $c_1, c_2, \ldots, c_5$ é suficiente resolver o sistema (3.19) para a função $\tilde{f}$ com os pontos (3.18), isto é, basta substituir os valores de $\tilde{x}_1 = -2h$, $\tilde{x}_2 = -h$, $\tilde{x}_3 = 0$, $\tilde{x}_4 = h$, $\tilde{x}_5 = 2h$, $k = 2$ e $p = 0$ no sistema (3.8), para obter o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ -2h & -h & 0 & h & 2h & 0 \\ 4h^2 & h^2 & 0 & h^2 & 4h^2 & 2 \\ -8h^3 & -h^3 & 0 & h^3 & 8h^3 & 0 \\ 16h^4 & h^4 & 0 & h^4 & 16h^4 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 3h & 4h & 0 \\ 0 & -h^2 & 0 & 3h^2 & 8h^2 & 2 \\ 0 & h^3 & 0 & 3h^3 & 16h^3 & 4h \\ 0 & -h^4 & 0 & 3h^4 & 32h^4 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 3h & 4h & 0 \\ 0 & 0 & 2h^2 & 6h^2 & 12h^2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 6h^3 & 24h^3 & 6h \\ 0 & 0 & 0 & 6h^4 & 48h^4 & 4h^2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 3h & 4h & 0 \\ 0 & 0 & 2h^2 & 6h^2 & 12h^2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 6h^3 & 24h^3 & 6h \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 24h^4 & -2h^2 \end{bmatrix}$$

cuja solução é dada por

$$c_1 = -\frac{1}{12h^2}, \quad c_2 = \frac{16}{12h^2}, \quad c_3 = -\frac{30}{12h^2}, \quad c_4 = \frac{16}{12h^2}, \quad c_5 = -\frac{1}{12h^2}$$

Substituindo esses valores na expressão (3.13), obtemos a seguinte fórmula

$$f''(p) \simeq \frac{-f(p-2h) + 16f(p-h) - 30f(p) + 16f(p+h) - f(p+2h)}{12h^2} \tag{3.16}$$

que aproxima a segunda derivada de f no ponto p com erro $O(h^4)$.

Exemplo 34

Use a fórmula (3.16) para aproximar a primeira derivada de $f(x) = xe^x$ no ponto $p = 1$.

Solução. Denotando por $N(h) = \frac{-f(1-2h)+16f(1-h)-30f(1)+16f(1+h)-f(1+2h)}{12h^2}$, temos que

$$f''(1) \simeq N(h)$$

Escolhi alguns valores para h e coloquei os resultados na tabela abaixo:

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f''(1) - N(h)\rvert$
10^{-1}	8.154824318901134	$2.116647600125532e-05$
10^{-2}	8.154845483263987	$2.1131487670800198e-09$
10^{-3}	8.154845485293846	$8.328981948579894e-11$
10^{-4}	8.154845617299362	$1.3192222603208847e-07$
10^{-5}	8.154861970884514	$1.6485507378760644e-05$
10^{-6}	8.154847167910853	$1.6825337176840094e-06$
10^{-7}	8.330373428104092	0.1755279427269567
10^{-8}	−0.7401486830834376	8.894994168460574
10^{-9}	1665.3345369377346	1657.1796914523575
10^{-60}	$2.5905203907920322e+104$	$2.5905203907920322e+104$
10^{-61}	$2.5905203907920318e+106$	$2.5905203907920318e+106$
10^{-62}	$2.5905203907920317e+108$	$2.5905203907920317e+108$
10^{-63}	$2.5905203907920318e+110$	$2.5905203907920318e+110$
10^{-64}	$2.590520390792032e+112$	$2.590520390792032e+112$

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f''(1) - N(h)\rvert$
2^{-1}	8.141246934027313	0.013598551349822685
2^{-2}	8.154013671947228	0.0008318134299081237
2^{-3}	8.154793776030838	$5.17093462981677e-05$
2^{-4}	8.154842257888001	$3.227489134616235e-06$
2^{-5}	8.154845283728	$2.016491364997819e-07$
2^{-6}	8.1548454727775	$1.2599635113019758e-08$
2^{-7}	8.1548454845979	$7.792362310965473e-10$
2^{-8}	8.154845485393404	$1.6267875935227494e-11$
2^{-9}	8.15484548555105	$1.7391421636148152e-10$
2^{-60}	$3.44339222709245e+20$	$3.44339222709245e+20$
2^{-61}	$1.37735689083698e+21$	$1.37735689083698e+21$
2^{-62}	$5.50942756334792e+21$	$5.50942756334792e+21$
2^{-63}	$2.203771025339168e+22$	$2.203771025339168e+22$
2^{-64}	$8.815084101356672e+22$	$8.815084101356672e+22$

Na tabela à esquerda, por exemplo, quando $h = 10^{-3}$ temos um erro $E(h) < 8.329 \cdot 10^{-11}$, porém quando diminuímos demais h, as aproximações começam a piorar.

Exemplo 35

Encontre uma expressão do tipo

$$f'''(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) + c_5 f(x_5) \tag{3.17}$$

com

$$x_1 = p - 2h,\ x_2 = p - h,\ x_3 = p,\ x_4 = p + h,\ x_5 = p + 2h.$$

para aproximar a terceira derivada de um função num ponto.

Solução. Para simplificar a resolução do sistema (3.8), vamos fazer uma *translação* no gráfico da função f, ou seja, vamos definir uma nova função $\tilde{f}$ por $\tilde{f}(x) = f(x+p)$ e novos pontos

$$\tilde{x}_1 = -2h,\ \tilde{x}_2 = -h,\ \tilde{x}_3 = 0,\ \tilde{x}_4 = h,\ \tilde{x}_5 = 2h \tag{3.18}$$

Note que $\tilde{f}(\tilde{x}_1) = f(x_1), \tilde{f}(\tilde{x}_2) = f(x_2), \tilde{f}(\tilde{x}_3) = f(x_3), \tilde{f}(\tilde{x}_3) = f(x_4), \tilde{f}(\tilde{x}_5) = f(x_5)$. Além disso $\tilde{f}'''(x) = f'''(x+p) \Rightarrow \tilde{f}'''(0) = f'''(p)$. Substituindo esses valores na equação (3.9) obtemos a seguinte expressão

$$\tilde{f}'''(0) \simeq c_1 \tilde{f}(\tilde{x}_1) + c_2 \tilde{f}(x_2) + c_3 \tilde{f}(\tilde{x}_3) + c_4 \tilde{f}(\tilde{x}_4) + c_5 \tilde{f}(\tilde{x}_5) \tag{3.19}$$

Portanto, para encontrar $c_1, c_2, \ldots, c_5$ é suficiente resolver o sistema (3.19) para a função $\tilde{f}$ com os pontos (3.18), isto é, basta substituir os valores de $\tilde{x}_1 = -2h,\ \tilde{x}_2 = -h,\ \tilde{x}_3 = 0,\ \tilde{x}_4 = h,\ \tilde{x}_5 = 2h, k = 3$ e $p = 0$ no sistema (3.8), para obter o seguinte sistema

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ -2h & -h & 0 & h & 2h & 0 \\ 4h^2 & h^2 & 0 & h^2 & 4h^2 & 0 \\ -8h^3 & -h^3 & 0 & h^3 & 8h^3 & 6 \\ 16h^4 & h^4 & 0 & h^4 & 16h^4 & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 3h & 4h & 0 \\ 0 & -h^2 & 0 & 3h^2 & 8h^2 & 0 \\ 0 & h^3 & 0 & 3h^3 & 16h^3 & 6 \\ 0 & -h^4 & 0 & 3h^4 & 32h^4 & 12h \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 3h & 4h & 0 \\ 0 & 0 & 2h^2 & 6h^2 & 12h^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6h^3 & 24h^3 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 6h^4 & 48h^4 & 18h \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & h & 2h & 3h & 4h & 0 \\ 0 & 0 & 2h^2 & 6h^2 & 12h^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6h^3 & 24h^3 & 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 24h^4 & 12h \end{bmatrix}$$

cuja solução é dada por

$$c_1 = -\frac{1}{2h^3}, \quad c_2 = \frac{2}{2h^2}, \quad c_3 = 0, \quad c_4 = -\frac{2}{2h^3}, \quad c_5 = \frac{1}{2h^3}$$

Substituindo esses valores na expressão (3.17), obtemos a seguinte fórmula

$$f'''(p) \simeq \frac{-f(p-2h) + 2f(p-h) - 2f(p+h) + f(p+2h)}{2h^3} \tag{3.20}$$

que aproxima a segunda derivada de f no ponto p com erro $O(h^2)$.

Exemplo 36

Use a fórmula (3.20) para aproximar a primeira derivada de $f(x) = xe^x$ no ponto $p = 1$.

Solução. Denotando por $N(h) = \frac{-f(1-2h)+2f(1-h)-2f(1+h)+f(1+2h)}{2h^3}$, temos que

$$f'''(1) \simeq N(h)$$

Escolhi alguns valores para h e coloquei os resultados na tabela abaixo:

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'''(1) - N(h) \rvert$
10^{-1}	10.913955945119234	0.040828631283053696
10^{-2}	10.873535061461935	0.00040774762575424006
10^{-3}	10.873132172406486	$4.858570305188437e-06$
10^{-4}	10.872858169364006	0.00026914447217407655
10^{-5}	10.214051826551437	0.6590754872847437
10^{-6}	444.0892098500627	433.2160825362265
10^{-7}	−444089.2098500627	444100.0829773765
10^{-8}	444089209.85006255	444089198.9769352

h	$N(h)$	$E(h) = \lvert f'''(1) - N(h) \rvert$
2^{-1}	11.927065030188942	1.0539377163527615
2^{-3}	10.936969918629757	0.06384260479357629
2^{-5}	10.877109690503858	0.003982376667677201
2^{-7}	10.87337618181482	0.0002488679786392112
2^{-9}	10.873142898082733	$1.5584246552791114e-05$
2^{-11}	10.873130798339844	$3.4845036633868176e-06$
2^{-19}	32.0	21.12687268616382
2^{-20}	512.0	501.12687268616384

Na tabela à esquerda, por exemplo, quando $h = 10^{-3}$ temos um erro $E(h) < 4.859 \cdot 10^{-6}$, porém quando diminuímos demais h, as aproximações começam a piorar.

Exemplo 37

Encontre uma expressão do tipo

$$f^{(iv)}(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) + c_5 f(x_5) \tag{3.21}$$

com

$$x_1 = p - 2h,\ x_2 = p - h,\ x_3 = p,\ x_4 = p + h,\ x_5 = p + 2h.$$

para aproximar a quarta derivada de um função num ponto.

Solução. em breve...

Exemplo 38

Encontre uma expressão do tipo

$$f'(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) + c_5 f(x_5) + c_6 f(x_6) + c_7 f(x_7) \tag{3.22}$$

com

$$x_1 = p - 3h,\ x_2 = p - 2h,\ x_3 = p - h,\ x_4 = p,\ x_5 = p + h,\ x_6 = p + 2h,\ x_7 = p + 3h.$$

para aproximar a primeira derivada de um função num ponto.

Solução. em breve...

Exemplo 39

Encontre uma expressão do tipo

$$f^{(v)}(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) + c_5 f(x_5) + c_6 f(x_6) + c_7 f(x_7) \tag{3.23}$$

com

$$x_1 = p - 3h,\ x_2 = p - 2h,\ x_3 = p - h,\ x_4 = p,\ x_5 = p + h,\ x_6 = p + 2h,\ x_7 = p + 3h.$$

para aproximar a quinta derivada de um função num ponto.

Solução. em breve...

Exemplo 40

Encontre uma expressão do tipo

$$f^{(vi)}(p) \simeq c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2) + c_3 f(x_3) + c_4 f(x_4) + c_5 f(x_5) + c_6 f(x_6) + c_7 f(x_7) \tag{3.24}$$

com

$$x_1 = p - 3h,\ x_2 = p - 2h,\ x_3 = p - h,\ x_4 = p,\ x_5 = p + h,\ x_6 = p + 2h,\ x_7 = p + 3h.$$

para aproximar a sexta derivada de um função num ponto.

Solução. em breve...

3.2 Extrapolação de Richardson

Se definirmos uma função $N_1(h)$ por $N_1(h) = \frac{f(p+h)-f(p)}{h}$, podemos reescrever a expressão (3.3) na forma

$$f'(p) = N_1(h) + K_1 h, \quad \text{onde } K_1 = \frac{f''(c)}{2}.$$

Um raciocínio análogo mostra que a equação (3.4) pode ser reescrita na forma

$$f'(p) = N_1(h) + K_1 h + K_2 h^2,$$

com $N_1(h) = \frac{f(p+h)-f(p-h)}{2h}$, $K_1 = 0$ e $K_2 = \frac{f'''(c)}{6}$. E assim por diante...

De modo geral, suponha que $N_1(h)$ é uma fórmula usada para aproximar um dado valor M, e que o ***erro*** nessa aproximação pode ser escrito na forma indicada abaixo

$$M = N_1(h) + K_1 h + K_2 h^2 + K_3 h^3 + K_4 h^4 + \cdots \tag{3.25}$$

onde $K_1, K_2, K_3, \ldots$, são constantes desconhecidas[3]. Neste caso, o erro da aproximação[4] é $O(h)$, pois $K_1 h$ é o termo que tende a zero mais devagar quando $h \to 0$, se comparado aos demais termos que compõem o erro.

[3] Essas constantes usualmente dependem do parâmetro h, mas vamos supor que essa dependência pode ser desprezada.

[4] O erro é proporcional a h; é um múltiplo de h; etc

Supondo que a expressão (3.25) é válida para todo $h > 0$, podemos trocar h por $h/2$ na expressão (3.25), para obter

$$M = N_1\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{K_1}{2}h + \frac{K_2}{2^2}h^2 + \frac{K_3}{2^3}h^3 + \frac{K_4}{2^4}h^4 + \cdots \tag{3.26}$$

Para eliminar o termo em h (na esperança de obtermos uma nova fórmula de aproximação que dê erros menores), multiplique a equação (3.26) por 2 e subtraia a equação (3.25):

$$2M - M = 2N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h) + K_1h - K_1h + \frac{K_2}{2}h^2 - K_2h^2 + \frac{K_3}{2^2}h^3 - K_3h^3 + \frac{K_4}{2^3}h^4 - K_4h^4 + \cdots$$

Que simplificada, dá

$$M = \left[2N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)\right] - \frac{K_2}{2}h^2 - \frac{3K_3}{2^2}h^3 - \frac{7K_4}{2^3}h^4 - \cdots \tag{3.27}$$

A expressão acima nos diz que a função de aproximação $N_2(h)$, definida por

$$N_2(h) = 2N_1\left(\frac{h}{2}\right) - N_1(h)$$

tem erro[5] $O(h^2)$.

Consideremos agora a expressão

$$M = N_2(h) - \frac{K_2}{2}h^2 - \frac{3K_3}{2^2}h^3 - \frac{7K_4}{2^3}h^4 - \cdots \tag{3.28}$$

Para eliminar[6] o termo em h^2, troque h por $h/2$ na equação (3.28), para obter

$$M = N_2\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{K_2}{2^3}h^2 - \frac{3K_3}{2^5}h^3 - \frac{7K_4}{2^7}h^4 - \cdots \tag{3.29}$$

em seguida multiplique a equação (3.29) por 2^2 e subtraia a equação (3.28), o que dá

$$2^2M - M = 2^2N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h) - \frac{K_2}{2}h^2 + \frac{K_2}{2}h^2 - \frac{3K_3}{2^3}h^3 + \frac{3K_3}{2^2}h^3 - \frac{7K_4}{2^5}h^4 + \frac{7K_4}{2^3}h^4 - \cdots \tag{3.30}$$

Simplificando,

$$M = \frac{2^2N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h)}{2^2 - 1} + \frac{K_3}{2^3}h^3 + \frac{7K_4}{2^5}h^4 + \cdots \tag{3.31}$$

A expressão acima nos diz que a função de aproximação $N_3(h)$, definida por

$$N_3(h) = \frac{2^2N_2\left(\frac{h}{2}\right) - N_2(h)}{2^2 - 1}$$

tem erro[7] pelo menos $O(h^3)$.

Realizando esse procedimento k vezes vamos obter a seguinte fórmula de aproximação

$$N_{k+1}(h) = \frac{2^kN_k(h/2) - N_k(h)}{2^k - 1} \tag{3.32}$$

que aproxima o número M com erro[8] pelo menos $O(h^k)$.

O método que acabamos de descrever se chama ***método de extrapolação de Richardson***. Intuitivamente, esse método combina aproximações não tão boas de uma certa constante M para obter aproximações melhores.

Exemplo 41

Seja $f(x) = x^x$. Use o método de extrapolação de Richardson sobre a fórmula de aproximação $N_1(h) = \frac{f(1+h)-f(1)}{h}$ para encontrar uma aproximação para $f'(1)$ com um erro pelo menos $O(h^5)$. Use $h = 0.1$.

Solução: Para isso, basta calcular $N_5(0.1)$, pois do que fizemos acima, o erro dado pela fórmula de aproximação $N_5(h)$ tem erro[a]

[5] proporcional a h^2; da mesma ordem de grandeza que h^2; etc

[6] na esperança de obtermos uma nova fórmula de aproximação que dê erros menores

[7] proporcional a h^3; da mesma ordem de grandeza que h^3; etc

[8] O erro é um múltiplo de h^k; decresce tão rápido quando h^k; tem a mesma ordem de grandeza que h^k; etc

$O(h^5)$ quando $N_1(h)$ tem erro $O(h)$. Da expressão (3.32), obtemos

$$f'(1) \simeq N_5(0.1) = \frac{2^4 N_4(0.05) - N_4(0.1)}{2^4 - 1},$$

onde

$$N_4(0.05) = \frac{2^3 N_3(0.025) - N_3(0.05)}{2^3 - 1} \quad \text{e} \quad N_4(0.1) = \frac{2^3 N_3(0.05) - N_3(0.1)}{2^3 - 1},$$

onde

$$N_3(0.025) = \frac{2^2 N_2(0.0125) - N_2(0.025)}{2^2 - 1}, \quad N_3(0.05) = \frac{2^2 N_2(0.025) - N_2(0.05)}{2^2 - 1} \quad \text{e} \quad N_3(0.1) = \frac{2^2 N_2(0.05) - N_2(0.1)}{2^2 - 1}$$

$$N_2(0.0125) = \frac{2^1 N_1(0.00625) - N_1(0.0125)}{2^1 - 1}, \quad N_2(0.025) = \frac{2^1 N_1(0.0125) - N_1(0.025)}{2^1 - 1}, \quad N_2(0.05) = \frac{2^1 N_1(0.125) - N_1(0.25)}{2^1 - 1} \quad \text{e} \quad N_2(0.1) = \frac{2^1 N_1(0.05) - N_1(0.1)}{2^1 - 1}$$

Agora calcule os valores nessa última linha substituindo os valores de $h = 0.1$, $h = 0.05$, $h = 0.025$, $h = 0.0125$ e $h = 0.00625$ na fórmula $N_1(h)$.
Eu fiz isso e coloquei todos os valores que encontrei na tabela abaixo:

h	$N_1(h)$	$N_2(h)$	$N_3(h)$	$N_4(h)$	$N_5(h)$
0.1	1.1053424105457577	0.9972420111043601	1.0000436928409833	0.9999998480404954	1.0000000007221934
0.05	1.0512922108250589	0.9993432724068274	1.0000053286405564	0.9999999911795874	
0.025	1.0253177416159431	0.9998398145821241	1.0000006583622085		
0.0125	1.0125787780990336	0.9999604474171875			
0.00625	1.0062696127581106				

Note que a extrapolação $N_5(0.1)$ é uma aproximação para $f'(1)$ bem melhor do que $N_1(0.00625)$. O valor exato é $f'(1) = 1$. É sempre[b] melhor extrapolar, do que diminuir o h na fórmula original (-: Agora se você extrapolar demais, coisas estranhas começam a acontecer. Por exemplo, $N_{70}(0.1) = 9.10860208841032 \cdot 10^{-63}$, $N_{90}(0.1) = 2.143655519271295 \cdot 10^{-246}$ e $N_{100}(0.1) = 0$.

[a]No mínimo!

[b]cuidado para não extrapolar nas extrapolações ;-) Lembre-se que para calcular $N_k(h)$ você eventualmente vai ter que calcular $N_1(h/2^k)$, e se k for muito grande, inconsistências vão começar a aparecer, e os valores obtidos não servirão mais para aproximar o número desejado.

Caso geral

Suponha agora que $N(h)$ é uma fórmula usada para aproximar um número M e que o erro da aproximação seja da ordem $O(h^\alpha)$ como indicado abaixo

$$M = N_1(h) + K_1 h^\alpha + K_2 h^{2\alpha} + K_3 h^{3\alpha} + K_4 h^{4\alpha} + \cdots, \tag{3.33}$$

onde $K_1, K_2, \ldots$ são constantes desconhecidas. Note que dentre os elementos contidos da expressão do erro, aquele que vai pra zero mais devagar[9] quando h vai pra zero é o termo em h^α, por isso o erro tem a mesma ordem que esse termo.

Trocado h por h/r, $r \in \mathbb{R}$, $r \neq 0$, em (3.33)

$$M = N_1(h/r) + \frac{K_1}{r^\alpha} h^\alpha + \frac{K_2}{r^{2\alpha}} h^{2\alpha} + \frac{K_3}{r^{3\alpha}} h^{3\alpha} + \frac{K_4}{r^{4\alpha}} h^{4\alpha} + \cdots \tag{3.34}$$

Após multiplicar (3.34) por r^α e subtrair (3.33), obtemos

$$r^\alpha M - M = r^\alpha N_1(h/r) - N_1(h) + K_1 h^\alpha - K_1 h^\alpha + \frac{K_2}{r^\alpha} h^2 - K_2 h^{2\alpha} + \frac{K_3}{r^{2\alpha}} h^3 - K_3 h^{3\alpha} + \frac{K_4}{r^{3\alpha}} h^4 - K_4 h^{3\alpha} + \cdots$$

Isolando M do lado esquerdo, obtemos

$$M = N_2(h) - \frac{K_2}{r^\alpha} h^{2\alpha} - \frac{(r^\alpha + 1) K_3}{r^{2\alpha}} h^{3\alpha} - \frac{(r^{2\alpha} + r^\alpha + 1) K_4}{r^{3\alpha}} h^{4\alpha} - \cdots,$$

onde $N_2(h) = \frac{r^\alpha N_1(h/r) - N_1(h)}{r^\alpha - 1}$.

Realizando esse procedimento k vezes, vamos obter a seguinte expressão

$$N_{k+1}(h) = \frac{r^{\alpha k} N_k(h/r) - N_k(h)}{r^{\alpha k} - 1} \tag{3.35}$$

[9]Isso é verdade sempre que h for suficientemente pequeno, i.e., quando $h \to 0$. Além do mais, é possível que essas constantes dependam de h, mas vamos ignorar esse fato sempre que possível. Afinal estamos interessados apenas em aproximações...

Exemplo 42

Seja $f(x) = x^x$. Use o método de extrapolação de Richardson sobre a fórmula de aproximação $N_1(h) = \frac{f(1+h)-f(1-h)}{2h}$ para encontrar uma aproximação para $f'(1)$ com um erro pelo menos $O(h^{10})$. Use $h = 0.1$.

Solução: Da expressão (3.4) temos que o erro dessa fórmula $N_1(h)$ tem a forma

$$f'(1) = N_1(h) + K_1 h^2 + K_2 h^4 + K_3 h^6 + \cdots$$

Sendo assim, precisamos calcular $N_5(0.1)$ usando a fórmula (3.35) com $\alpha = 2$. Como nos foi dada a fórmula $N_1(h)$, vamos escolher $r = 2$ e $h = 0.1 \cdot 2^{-n}$, com $n = 1,2,3,4,5$.

$$N_5(h) = \frac{2^{2\cdot 4} N_4(h/r) - N_4(h)}{2^{2\cdot 4} - 1}$$

h	$N_1(h)$	$N_2(h)$	$N_3(h)$	$N_4(h)$	$N_5(h)$
0.1	1.0050083248580677	0.9999979193174102	0.99999999986688	1.000000000000035	1.0000000000000198
0.05	1.0012505207025746	0.9999998698325382	0.9999999999979546	1.0000000000000198	
0.025	1.0003125325500473	0.999999991862616	0.9999999999999876		
0.0125	1.0000781270344739	0.9999999994914018			
0.00625	1.0000195313771698				

Se compararmos com o $N_5(0.1)$ do exercícios anterior, vemos que essa extrapolação é uma aproximação muito melhor. Essa é uma aproximação equivalente àquela obtida extrapolando-se 10 vezes usando a expressão 'normal' dada pela equação (3.32).

4 | Interpolação polinomial

4.1 Polinômios de Lagrange

Dada uma lista $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ de n pontos no plano, o que posso fazer para encontrar um polinômio de grau $n-1$ cujo gráfico passa por todos esses pontos?

Comecemos com 2 pontos só para exemplificar o método. Dados dois pontos (x_1, y_1) e (x_2, y_2), será que é possível escrever o polinômio de grau 1 passando por esses dois pontos na forma

$$p(x) = L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2? \tag{4.1}$$

Para que o polinômio (4.1) passe pelos pontos dados é preciso que $p(x_1) = y_1$ e $p(x_2) = y_2$. Para que

$$p(x_1) = L_1(x_1)y_1 + L_2(x_1)y_2 = y_1$$

basta que $L(x_1) = 1$ e $L_2(x_1) = 0$. E para que

$$p(x_2) = L_1(x_2)y_1 + L_2(x_2)y_2 = y_2$$

basta que $L(x_2) = 0$ e $L_2(x_2) = 1$.

Note que as funções $L_1(x) = \frac{x-x_2}{x_1-x_2}$ e $L_2(x) = \frac{x-x_1}{x_2-x_1}$ satisfazem essas condições. Agora, é fácil verificar que o polinômio

$$p(x_2) = \frac{x-x_2}{x_1-x_2}y_1 + \frac{x-x_1}{x_2-x_1}y_2$$

é tal que $p(x_1) = y_1$ e $p(x_2) = y_2$.

Considere agora uma lista de 3 pontos: (x_1, y_1), (x_2, y_2) e (x_3, y_3). Agora precisamos construir três funções $L_1(x)$, $L_2(x)$ e $L_3(x)$. E elas devem satisfazer

$$L_i(x_j) = \begin{cases} 0, & \text{se } i \neq j \\ 1, & \text{se } i = j \end{cases}, \quad i = 1,2,3 \text{ e } j = 1,2,3 \tag{4.2}$$

Veja que

$$L_1(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}, \quad L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}, \quad L_3(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

satisfazem as condições listadas em (4.2), sendo assim, o polinômio definido por

$$p(x) = L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2 + L_3(x)y_3$$

satisfaz $p(x_1) = y_1$, $p(x_2) = y_2$ e $p(x_3) = y_2$.

Para resolver o problema com n pontos, basta definir

$$p(x) = L_1(x)y_1 + L_2(x)y_2 + \cdots + L_n(x)y_n \tag{4.3}$$

onde

$$L_i(x) = \prod_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

O polinômio (4.3) é chamado de ***polinômio de Lagrange*** passando pelos pontos dados. Quando os pontos dados estão no gráfico de uma função f, ou seja, quando $y_i = f(x_i)$, chamados o polinômio (4.3) de ***polinômio interpolador de Lagrange*** da função f nos pontos dados.

Exemplo 43

Sejam $(x_1, f(x_1))$ e $(x_2, f(x_2))$ dois pontos no gráfico de uma função f. Se $x_1 = a$ e $x_2 = a+h$, então polinômio de grau 1 passando por esses pontos é dado por

$$p(x) = \frac{x-(a+h)}{a-(a+h)}f(a) + \frac{x-a}{(a+h)-a}f(a+h) = \frac{x-(a+h)}{-h}f(a) + \frac{x-a}{h}f(a+h)$$

Calculando a derivada de $p(x)$ no ponto $x = a$, obtemos

$$p'(a) = \frac{1}{-h}f(a) + \frac{1}{h}f(a+h) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}.$$

Note que o quociente à direita é exatamente a fórmula que usamos para aproximar a primeira derivada da função $f(x)$ no ponto $x = a$.

Exemplo 44

Sejam $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, f(x_2))$ e $(x_3, f(x_3))$ três pontos no gráfico de uma função f. Se $x_1 = a - h$, $x_2 = a$ e $x_3 = a + h$, então o polinômio passando por esses pontos é dado por

$$p(x) = \frac{(x-a)(x-(a+h))}{((a-h)-a)((a-h)-(a+h))}f(a-h) + \frac{(x-(a-h))(x-(a+h))}{(a-(a-h))(a-(a+h))}f(a) + \frac{(x-(a-h))(x-a)}{((a+h)-(a-h))((a+h)-a)}f(a+h)$$

Derivando, obtemos

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

E assim,

$$p'(a) = \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}.$$

Note que essa é exatamente a expressão que usamos para aproximar a a primeira derivada de uma função no ponto $x = a$ com erro $O(h^2)$.

Derivando mais uma vez, obtemos

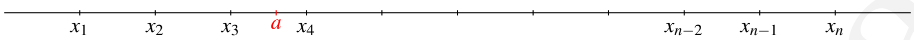
$$p'(x) = \frac{2}{2h^2}f(a-h) + \frac{2}{-h^2}f(a) + \frac{2}{2h^2}f(a+h)$$

E assim,

$$p'(a) = \frac{f(a-h) - 2f(a) + f(a+h)}{h^2}.$$

Note que essa é exatamente a expressão que usamos para aproximar a a segunda derivada de uma função no ponto $x = a$ com erro $O(h^2)$.

Nota: Suponha que a é qualquer ponto no intervalo $[x_i, x_j]$ onde x_1, x_j são quaisquer dois pontos numa lista de n pontos, dois a dois, distintos $x_1, x_2, \ldots, x_n$, e que $p(x)$ é o polinômio de Lagrange que passa pelos pontos $(x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n))$, onde f é alguma função $n-1$ vezes derivável. Então, podemos usar a derivada $p^{(k)}(a)$, $k \leq n-1$, do polinômio de Lagrange como uma estimativa para a derivada $f^{(k)}(a)$ da função f. Quanto mais próximos estiverem os pontos $x_1, x_2, \ldots, x_n$, melhores serão suas aproximações.



Theorem 4.1.1 Se $p(x)$ é o polinômio de Lagrange passando pelos pontos

$$(x_1, f(x_1)), \ldots, (x_n, f(x_n)),$$

então $c_i = L_i^{(k)}(a)$, $i = 1, 2, \ldots, n$, onde os c_i's são as constantes obtidas pelo método das diferenças finitas para aproximar $f^{(k)}(a)$ usando os n pontos acima.

Demonstração. em breve... □

Seja $N_1(h)$ uma fórmula de aproximação qualquer com erro $O(h)$. O polinômio de Lagrange passando pelos pontos $(h, N_1(h))$ e $(h/2, N_1(h/2))$ é dado por

$$p(x) = \frac{x - \frac{h}{2}}{h - \frac{h}{2}}N_1(h) + \frac{x-h}{\frac{h}{2} - h}N_1(h/2).$$

Note que

$$p(0) = \frac{-\frac{h}{2}}{h - \frac{h}{2}}N_1(h) + \frac{-h}{\frac{h}{2} - h}N_1(h/2) = -N_1(h) + 2N_1(h/2) = N_2(h).$$

Note agora que o polinômio de Lagrange passando pelos pontos $(h^2, N_2(h))$ e $(h^2/4, N_2(h/2))$ é dado por

$$p(x) = \frac{x - \frac{h^2}{4}}{h^2 - \frac{h^2}{4}}N_2(h) + \frac{x - h^2}{\frac{h^2}{4} - h^2}N_2(h/2)$$

e satisfaz

$$p(0) = \frac{-\frac{h^2}{4}}{h^2 - \frac{h^2}{4}} N_2(h) + \frac{-h^2}{\frac{h^2}{4} - h^2} N_2(h/2) = \frac{-1}{3} N_2(h) + \frac{4}{3} N_2(h/2) = N_3(h)$$

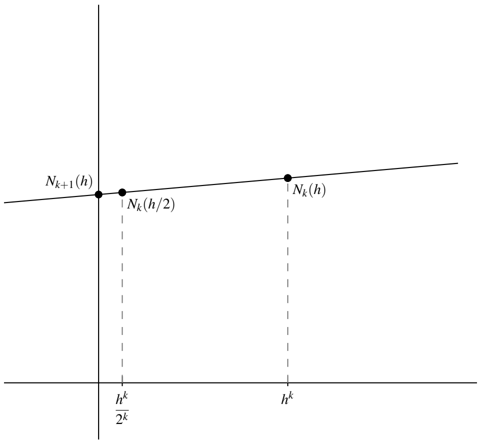
De modo geral, o polinômio de Lagrange passando pelos pontos $(h^k, N_k(h))$ e $(h^k/2^k, N_k(h/2))$ é dado por

$$p(x) = \frac{x - \frac{h^k}{2^k}}{h^k - \frac{h^k}{2^k}} N_2(h) + \frac{x - h^k}{\frac{h^k}{2^k} - h^k} N_2(h/2)$$

e satisfaz

$$p(0) = \frac{-\frac{h^k}{2^k}}{h^k - \frac{h^k}{2^k}} N_2(h) + \frac{-h^k}{\frac{h^k}{2^k} - h^k} N_2(h/2) = \frac{-1}{2^k - 1} N_2(h) + \frac{2^k}{2^k - 1} N_2(h/2) = N_{k+1}(h)$$

Intuitivamente, isso significa que o resultado da extrapolação sobre um par de pontos corresponde ao ponto onde a reta passando por esses pontos intersecta o eixo y.



Erro do polinômio interpolador de Lagrange

Vejamos agora como dar uma estimativa para o erro dado pela aproximação do polinômio de Lagrange, mais precisamente

Theorem 4.1.2 Seja f uma função n vezes derivável em breve...

Demonstração. em breve... □

Exemplo 45

Encontre o polinômio de Lagrange para o polinômio

4.2 Diferenças divididas*

4.3 Splines

em breve...

5 | Integração numérica

5.1 Somas de Riemann

em breve...

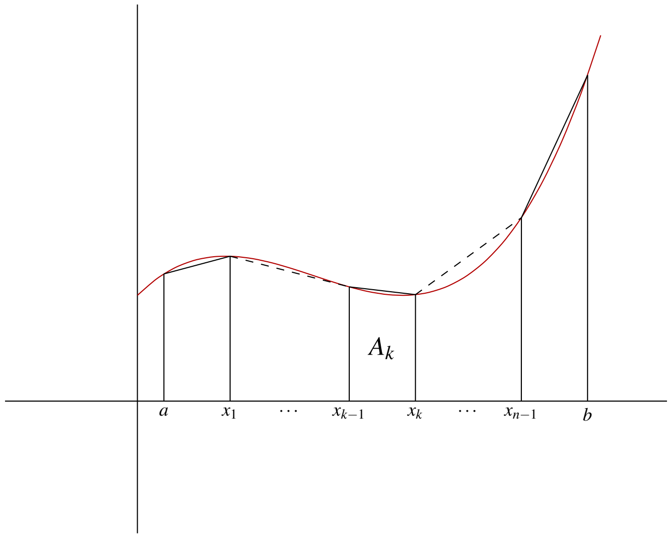
5.2 Regra dos Trapézios

Ideia: A cada dois pontos numa partição de um intervalo vamos usar a área embaixo de um segmento de reta ligando esses dois pontos como uma estimativa para a área embaixo do gráfico de uma função entre esses dois pontos.

Seja $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ uma função integrável no intervalo $[a,b]$. Dado um número $n > 0$, podemos definir uma partição $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ do intervalo $[a,b]$ da seguinte forma

$$x_k = a + k \cdot h,$$

onde $h = \frac{b-a}{n}$. Note que temos no total $n+1$ pontos e n subintervalos nessa partição.



A área do trapézio que vive acima do subintervalo $[x_{k-1}, x_k]$ é dada por $A_k = \frac{h}{2}[f(x_{k-1}) + f(x_k)]$. E para cada $k = 1, 2, \ldots, n$ existe um trapézio com área A_k. Somando todas essas áreas obtemos a aproximação

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)dx \simeq \sum_{k=1}^{n} A_k = \sum_{k=1}^{n} \frac{h}{2}[f(x_{k-1}) + f(x_k)]$$

Note que para aproximar integral acima pela regra dos trapézios basta calcular o valor da função f nos extremos de cada subintervalo $[x_{k-1}, x_k]$, somar todos esses valores e multiplicar o resultado por $\frac{h}{2}$. Neste caso, o valor de f deverá ser calculado duas vezes nos pontos em que dois subintervalos se intersectam[1], podemos simplificar um pouco a soma acima para obter:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}\left[f(a) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(b)\right]$$

Exemplo 46

Use a regra dos trapézios para aproximar o valor de $\int_0^1 f(x)dx$, onde $f(x) = e^{-x^2}$. Use $h = 0.25$, $h = 0.125$ e $h = 0.0625$.

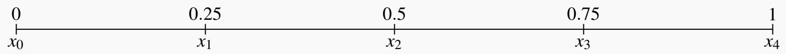
Solução. Precisamos primeiro encontrar o número de subintervalos (o valor de n) associado a cada valor de h.

$$0.25 = h = \frac{1-0}{n} \Rightarrow n = 4, \qquad 0.125 = h = \frac{1-0}{n} \Rightarrow n = 8, \qquad 0.0625 = h = \frac{1-0}{n} \Rightarrow n = 16,$$

Lembre-se que os elementos da partição são definidos por $x_k = a + k \cdot h$, $k = 0, 1, 2, \ldots, n$. Logo

para $h = 0.25$ temos:

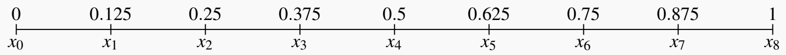
[1] por exemplo $[x_0, x_1]$ e $[x_1, x_2]$ se intersectam em x_1



e

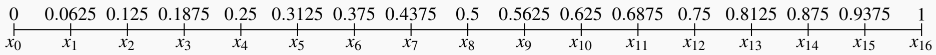
$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.25}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{k=1}^{4-1} f(x_k)+f(x_4)\right] = \frac{0.25}{2}\Big[f(0)+2\Big(f(0.25)+f(0.5)+f(0.75)\Big)+f(1)\Big]$$
$$= 0.7429840978003812$$

para $h = 0.125$ temos:



$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.125}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{k=1}^{8-1} f(x_k)+f(x_8)\right] = \frac{0.125}{2}\Big[f(0)+2\Big(f(0.125)+f(0.25)+\cdots+f(0.75)+f(0.875)\Big)+f(1)\Big]$$
$$= 0.7458656148456952$$

para $h = 0.0625$ temos:



$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.0625}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{k=1}^{16-1} f(x_k)+f(x_{16})\right] = \frac{0.0625}{2}\Big[f(0)+2\Big(f(0.0625)+f(0.125)+\cdots+f(0.875)+f(0.9375)\Big)+f(1)\Big]$$
$$= 0.7465845967882215$$

Só por curiosidade, vamos ver o que acontece se tomarmos $h = 0.001$ (esse h corresponde a $n = 1000$)

para $h = 0.001$ temos:

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.001}{2}\left[f(x_0)+2\sum_{k=1}^{10^3-1} f(x_k)+f(x_{10^3})\right] = \frac{0.001}{2}\Big[f(0)+2\Big(f(0.001)+f(0.002)+\cdots+f(0.998)+f(0.999)\Big)+f(1)\Big]$$
$$= 0.7468240714991842$$

Esse valor, obtido com $h = 10^{-3}$, tem 6 casas decimais exatas (bem ruim, já que foi necessário calcular o valor de $f(x)$ em 1001 pontos diferentes).

*O erro na regra dos trapézios**

em breve...

5.3 Regra de Simpson

Na regra dos trapézios, a cada dois pontos consecutivos, usamos a área embaixo de um segmento de reta como uma estimativa para a área embaixo do gráfico da função. Agora, vamos considerar 3 pontos consecutivos, e usaremos a área embaixo de um segmento de parábola como uma estimativa para a área embaixo do gráfico da função. Para que isso seja possível, precisamos de subdividir o intervalo dado num número *par* de subintervalos (porque?).

Seja $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ uma função integrável. Dado $n > 0$ inteiro, podemos definir uma partição $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{2n} = b$ do intervalo $[a,b]$ por

$$x_k = a + k\cdot h, \quad k = 0,1,2,\ldots,2n$$

onde $h = \frac{b-a}{2n}$. Note que temos no total $2n+1$ pontos e $2n$ subintervalos nessa partição.

A área embaixo do segmento de parábola que vive acima do subintervalo $[x_{2k-2}, x_{2k}]$ é dada por $A_k = \frac{h}{3}[f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})]$. Provemos isso.

Toda parábola tem a forma $p(x) = ax^2 + bx + c$, e como o segmento de parábola que vive acima do intervalo $[x_{2k-2}, x_{2k}]$ deve passar pelos pontos $(x_{2k-2}, f(x_{2k-2}))$, $(x_{2k-1}, f(x_{2k-1}))$ e $(x_{2k}, f(x_{2k}))$ devemos ter

$$p(x_{2k-2}) = f(x_{2k-2}), \quad p(x_{2k-1}) = f(x_{2k-1}), \quad p(x_{2k}) = f(x_{2k}).$$

Essas tês equações vão dar origem a um sistema com 3 equações e 3 incógnitas. Porém, estamos mais interessados em calcular a área embaixo do segmento do gráfico dessa parábola do que em encontrar a equação da parábola. Para simplificar essa tarefa, defina

$\tilde{p}(x) = p(x + x_{2k-1})$. A parábola $\tilde{p}(x)$ tem equação dada por $\tilde{p}(x) = Ax^2 + Bx + C$ e satisfaz

$$\tilde{p}(-h) = f(x_{2k-2}), \quad \tilde{p}(0) = f(x_{2k-1}), \quad \tilde{p}(h) = f(x_{2k}). \tag{5.1}$$

Além do mais, a área embaixo do gráfico de $\tilde{p}(x)$ de $-h$ a h é igual à área embaixo do gráfico de $p(x)$ de x_{2k-2} a x_{2k}.

Das equações (5.1) obtemos o seguinte sistema

$$\begin{aligned} f(x_{2k-2}) &= p(-h) = A(-h)^2 + B(-h) + C \\ f(x_{2k-1}) &= p(-h) = A0^2 - B0 + C \\ f(x_{2k}) &= p(h) = Ah^2 + Bh + C \end{aligned}$$

Da segunda equação, concluímos que $C = f(x_{2k})$. Somando a primeira e a terceira, obtemos $a = \frac{h}{3}[f(x_{2k-2}) - 2f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})]$. E finalmente, para encontrar a área embaixo do gráfico de $\tilde{p}(x)$ de $-h$ a h (que é igual à área embaixo do gráfico de $p(x)$ de x_{2k-2} a x_{2k}), basta notar que

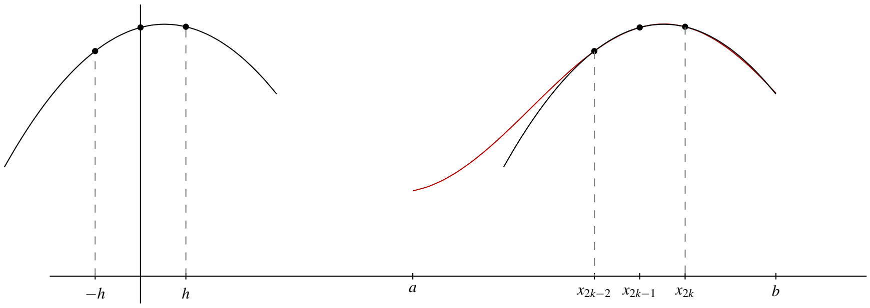
$$A_k = \int_{-h}^{h} \tilde{p}(x)dx = \frac{A}{3}x^3 + \frac{B}{2}x^2 + Cx\Big|_{-h}^{h} = \frac{A}{3}h^3 + \frac{B}{2}h^2 + Ch - \left(\frac{A}{3}(-h)^3 + \frac{B}{2}(-h)^2 + C(-h)\right) = \frac{2A}{3}h^3 + 2Ch$$

E substituindo os valores de A e C obtemos

$$A_k = \int_{-h}^{h} \tilde{p}(x)dx = \frac{h}{3}[f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})].$$

Assim,

$$\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx \simeq A_k = \frac{h}{3}[f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})]$$



Nota: a fórmula acima diz que para calcular a área embaixo do gráfico da parábola de x_{2k-2} até x_{2k} basta calcular o valor de f nos extremos do subintervalo $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, calcular o valor de f no ponto médio desse mesmo intervalo multiplicando o resultado por 4, somam-se os três valores obtidos e multiplica por $\frac{h}{3}$.

Para cada $k = 1, 2, \ldots, n$ existe um segmento de parábola com área A_k. Somando todas essas áreas obtemos a aproximação

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k = \sum_{k=1}^{n} \frac{h}{3}[f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})].$$

Expandindo a soma acima, vemos que ocorrem algums repetições

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}\Big[\big(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\big) + \big(f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\big) + \big(f(x_4) + 4f(x_5) + f(x_6)\big) + \cdots + \big(f(x_{2n-2}) + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})\big)\Big]$$

Note que os valores de $f(x_i)$, com i ímpar de 1 a $2n-1$, aparecem multiplicados por 4 e que os valores de $f(x_i)$ aparecem duas vezes para cada i par, onde $i \neq 0$ e $i \neq 2n$, assim, o somatório acima pode ser escrito na forma

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4\sum_{k=1}^{n} f(x_{2k-1}) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_{2k}) + f(x_{2n})\right].$$

Exemplo 47

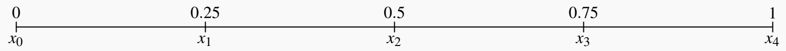
Use a regra de Simpson para aproximar o valor de $\int_0^1 f(x)dx$, onde $f(x) = e^{-x^2}$. Use $h = 1/4$, $h = 1/8$ e $h = 1/16$; compare com os valores obtidos pela regra dos trapézios.

Solução. Precisamos primeiro encontrar o número de subintervalos (o valor de n) associado a cada valor de h.

$$0.25 = h = \frac{1-0}{2n} \Rightarrow n = 2, \qquad 0.125 = h = \frac{1-0}{2n} \Rightarrow n = 4, \qquad 0.0625 = h = \frac{1-0}{2n} \Rightarrow n = 8,$$

Lembre-se que os elementos da partição (na regra de Simpson) são definidos por $x_k = a + k \cdot h$, $k = 0, 1, 2, \ldots, 2n$. Logo

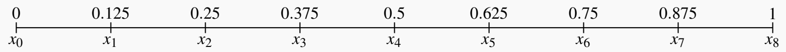
para $h = 0.25$ temos:



e

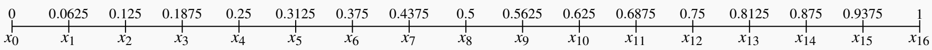
$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.25}{3}\left[f(x_0)+4\sum_{k=1}^{2} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{2-1} f(x_{2k})+f(x_4)\right]$$
$$= 0.7468553797909874$$

para $h = 0.125$ temos:



$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.125}{3}\left[f(x_0)+4\sum_{k=1}^{4} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{4-1} f(x_{2k})+f(x_8)\right]$$
$$= 0.7468261205274667$$

para $h = 0.0625$ temos:



$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.0625}{3}\left[f(x_0)+4\sum_{k=1}^{8} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{8-1} f(x_{2k})+f(x_{16})\right]$$
$$= 0.7468242574357303$$

E, para tentar prever o que acontece quando diminuímos demais o valor de h:

para $h = 0.001$: (temos $n = 500$ parábolas)

$$\int_0^1 e^{-x^2}dx \simeq \frac{0.001}{3}\left[f(x_0)+4\sum_{k=1}^{500} f(x_{2k-1})+2\sum_{k=1}^{500-1} f(x_{2k})+f(x_{1000})\right]$$
$$= 0.7468241328124351$$

Esse valor, obtido com $h = 10^{-3}$, tem 13 casas decimais exatas (aqui foi necessário calcular o valor de $f(x)$ em mil e um pontos diferentes, porém a aproximação foi bem melhor do que aquela obtida pela regra dos trapézios com o mesmo valor de h. Vale observar que, para se obter uma precisão tão boa quanto essa pela regra dos trapézios seria necessário usar pelo menos 1 milhão de subintervalos, o que corresponde a tomar $h = 10^{-6}$.).

*O erro na regra de Simpson**

em breve...

5.4 Regra de Newton-Cotes com $m+1$ pontos

Seja $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ uma função integrável. Dado $n > 0$ inteiro, podemos definir uma partição $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{mn} = b$ do intervalo $[a,b]$ por

$$x_k = a + k\cdot h, \quad k = 0,1,2,\ldots,mn$$

onde $h = \frac{b-a}{mn}$. Note que teremos no total $mn+1$ pontos e mn subintervalos nessa partição.

Ideia: A cada $m+1$ pontos consecutivos nessa partição vamos usar a área embaixo do segmento do gráfico de um polinômio de grau m como uma estimativa para a área embaixo do gráfico da função acima do intervalo contendo tais $m+1$ pontos.

Seja $p_k(x)$ o polinômio de Lagrange que passa por todos os pontos no gráfico da função f cuja coordenada x é um ponto da partição que vive no subintervalo $[x_{(k-1)m}, x_{km}]$, $k = 1,2,3,\ldots,n$, ou seja,

$$p_k(x) = \sum_{i=1}^{m} L_i(x) f\big(x_{(k-1)m+i}\big), \quad \text{onde} \quad L_i(x) = \prod_{j=1, j\neq i}^{m} \frac{x - x_{(k-1)m+j}}{x_{(k-1)m+i} - x_{(k-1)m+j}}, \quad i = 1,2,\ldots,m.$$

Então

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{n}\int_{x_{(k-1)m}}^{x_{km}} f(x)dx \simeq \sum_{k=1}^{n} p_k(x)dx.$$

Exemplo 48

Determine a regra de Newton-Cotes com 4 pontos.

Solução. em breve...

5.5 Integração de Romberg

Agora vamos aplicar o método da extrapolação de Richardson ao cálculo de integrais. Como o erro na regra dos trapézios tem a forma

$$\int_a^b f(x)dx = K_1 h^2 + k_2 h^4 + K_3 h^6 + K_4 h^8 + O(h^{10})$$

podemos aplicar o método de extrapolação de Richardson (mais precisamente, a fórmula (3.35)) sobre a fórmula da regra dos trapézios com $\alpha = 2$.

Nota: Usamos extrapolação sobre as fórmulas para aproximar derivadas, porque aquelas fórmulas não dão resultados consistentes quando diminuímos demais o valor de h. Já para as fórmulas para aproximar integrais, usamos interpolação puramente para economizar nosso tempo de vida, já que diminuir demais o valor de h, resulta em ter que calcular o valor da função em um número muito grande de pontos (quanto menor o valor de h, maior a quantidade de pontos na partição), o que pode ser tedioso.

Exemplo 49

Use extrapolação de Richardson sobre a fórmula da regra dos trapézios para obter aproximações com erro $O(h^6)$ para a seguinte integral $\int_0^1 e^{-x^2} dx$.

Solução: Basta calcular $N_3(h)$ para algum valor de h. Vamos escolher $h = 0.25$. Considere a fórmula da regra dos trapézios

$$N_1(h) = \frac{h}{2}\left[f(0) + 2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k) + f(1) \right].$$

Então, escolhendo[a] $r = 2$ na fórmula de extrapolação (3.35):

$$N_3(0.25) = \frac{2^{2\cdot 2} N_2(0.125) - N_2(0.25)}{2^{2\cdot 2} - 1}$$

Para calcular o valor acima precisamos de

$$N_2(0.25) = \frac{2^{2\cdot 1} N_1(0.125) - N_1(0.25)}{2^{2\cdot 1} - 1} \quad \text{e} \quad N_2(0.125) = \frac{2^{2\cdot 1} N_1(0.0625) - N_1(0.125)}{2^{2\cdot 1} - 1}$$

Aproveitando os cálculos que fizemos no exercício 46:

$$N_1(0.25) = 0.7429840978003812, \quad N_1(0.125) = 0.7458656148456952 \quad \text{e} \quad N_1(0.0625) = 0.7465845967882215$$

Substituindo esses valores nas fórmulas acima e colocando os resultados numa tabela:

h	$N_1(h)$	$N_2(h)$	$N_3(h)$
0.25	0.7429840978003812	0.7487471318910093	0.7468223943439941
0.125	0.7458656148456952	0.7473035787307478	
0.0625	0.7465845967882215		

[a] Você pode escolher outros valores para r, se quiser.

5.6 Integrais Múltiplas

Seja $R = \{(x,y) | x \in [a,b], y \in [c,d]\}$ um retângulo no plano. O teorema de Fubini diz que

$$\iint_R f(x,y)dA = \int_c^d \left[\int_a^b f(x,y)dx \right] dy = \int_a^b \left[\int_c^d f(x,y)dy \right] dx$$

Então podemos usar métodos numéricos para aproximar a integral dupla acima. Por exemplo, consideremos a primeira igualdade (se considerarmos a segunda vamos obter a mesma resposta; tente por conta própria!)

$$\iint_R f(x,y)dA = \int_c^d \left[\int_a^b f(x,y)dx \right] dy \tag{5.2}$$

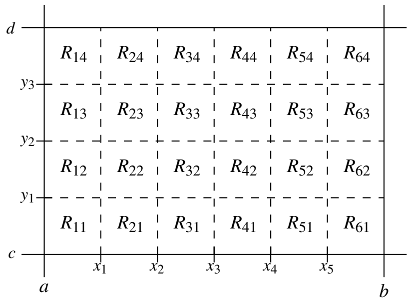
Consideremos inicialmente duas partições, uma do intervalo $[a,b]$ e uma do intervalo $[c,d]$:

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n_1} = b \;\text{ onde } x_i = a + i \cdot h_1 \text{ e } h_1 = (b-a)/n_1$$

e

$$c = y_0 < y_1 < \ldots < y_{n_2} = d \;\text{ onde } y_j = c + j \cdot h_2 \text{ e } h_2 = (d-c)/n_2$$

onde n_1 e n_2 são inteiros positivos. Essas partições induzem uma partição do retângulo R (veja figura abaixo)



E dessa partição de R, concluímos que

$$\iint_R f(x,y)dA = \sum_{j=1}^{n_2}\sum_{i=1}^{n_1}\iint_{R_{ij}} f(x,y)dA$$

Agora (em particular) a integral sobre o subretângulo $R_{ij} = [x_{i-1}, x_i] \times [y_{j-1}, y_j]$ é igual a

$$\iint_{R_{ij}} f(x,y)dA = \int_{y_{j-1}}^{y_j}\left[\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x,y)dx\right]dy \tag{5.3}$$

Usando a regra dos trapézios para aproximar a integral com relação a x do lado direto da igualdade acima, obtemos

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x,y)dx \simeq \frac{h_1}{2}\left[f(x_{i-1},y) + f(x_i,y)\right]$$

Substituindo no lado direito da igualdade (5.3), obtemos

$$\iint_{R_{ij}} f(x,y)dA \simeq \int_{y_{j-1}}^{y_j}\left[\frac{h_1}{2}\left[f(x_{i-1},y)+f(x_i,y)\right]\right]dy = \frac{h_1}{2}\left[\int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x_{i-1},y)dy + \int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x_i,y)dy\right] \tag{5.4}$$

Usando a regra dos trapézios para aproximar as duas integrais com relação a y acima, obtemos

$$\int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x_{i-1},y)dy = \frac{h_2}{2}\left[f(x_{i-1},y_{j-1}) + f(x_{i-1},y_j)\right]$$

e

$$\int_{y_{j-1}}^{y_j} f(x_i,y)dy = \frac{h_2}{2}\left[f(x_i,y_{j-1}) + f(x_i,y_j)\right]$$

Substituindo essas duas aproximações em (5.4), obtemos

$$\begin{aligned}\iint_{R_{ij}} f(x,y)dA &\simeq \frac{h_1}{2}\left[\frac{h_2}{2}\left[f(x_{i-1},y_{j-1})+f(x_{i-1},y_j)\right] + \frac{h_2}{2}\left[f(x_i,y_{j-1})+f(x_i,y_j)\right]\right]\\ &= \frac{h_1h_2}{4}\left[f(x_{i-1},y_{j-1})+f(x_{i-1},y_j)+f(x_i,y_{j-1})+f(x_i,y_j)\right]\end{aligned}$$

Obs: Note que para calcular a integral dupla sobre o subretângulo R_{ij} basta calcular o valor da função $f(x,y)$ nos 4 cantos (vértices) do subretângulo R_{ij}, somar esses valores e multiplicar o resultado por $h_1h_2/4$ (isso é $1/4$ da área do subretângulo R_{ij}).

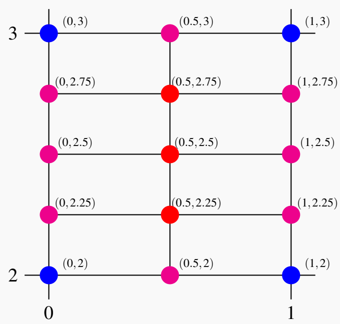
E, finalmente,

$$\iint_R f(x,y)dA = \sum_{j=1}^{n_2}\sum_{i=1}^{n_1}\iint_{R_{ij}} f(x,y)dA \simeq \sum_{j=1}^{n_2}\sum_{i=1}^{n_1}\frac{h_1h_2}{4}\left[f(x_{i-1},y_{j-1})+f(x_{i-1},y_j)+f(x_i,y_{j-1})+f(x_i,y_j)\right] \tag{5.5}$$

Exemplo 50

Use a regra dos trapézio para aproximar a integral $\iint_R e^{-x^2y^2}dA$ onde $R = \{(x,y) | x \in [0,1], y \in [2,3]\}$. Use $h_1 = 0.5$ e $h_2 = 0.25$

Solução. Considere a partição de R induzida por h_1 e h_2



Da fórmula para a aproximação da integral dupla, temos que o valor de $f(x,y)$ nos pontos vermelhos deve ser calculado 4 vezes, pois cada um destes pontos é vértice para 4 subretângulos; cada ponto laranja é vértice para 2 subretângulos e portanto o valor de $f(x,y)$ deve ser calculado nesses pontos 2 vezes; nos pontos azuis o valor de $f(x,y)$ deve ser calculado apenas 1 vez, pois cada um desses pontos é vertice para apenas um subretângulo. Logo a fórmula da integral dupla (5.5) se simplifica para

$$
\begin{aligned}
\iint_R e^{-x^2y^2}\, dA &\simeq \frac{h_1 h_2}{4}\left[\sum f(\textcolor{blue}{\bullet}) + 2\sum f(\textcolor{magenta}{\bullet}) + 4\sum f(\textcolor{red}{\bullet})\right] \\
&= \frac{(0.5)(0.25)}{4}\Big[f\textcolor{blue}{(0,2)} + f\textcolor{blue}{(1,2)} + f\textcolor{blue}{(1,3)} + f\textcolor{blue}{(0,3)} \\
&\qquad + 2\Big(f\textcolor{magenta}{(0.5,2)} + f\textcolor{magenta}{(1,2.25)} + f\textcolor{magenta}{(1,2.5)} + f\textcolor{magenta}{(1,2.75)} + f\textcolor{magenta}{(0.5,3)} + f\textcolor{magenta}{(0,2.75)} + f\textcolor{magenta}{(0,2.5)} + f\textcolor{magenta}{(0,2.25)}\Big) \\
&\qquad + 4\Big(f\textcolor{red}{(0.5,2.25)} + f\textcolor{red}{(0.5,2.5)} + f\textcolor{red}{(0.5,2.75)}\Big)\Big] \\
&= ?????
\end{aligned}
$$