

MÉTODOS NUMÉRICOS

MIEEC, FEUP

<http://www.fe.up.pt/~faf/mnum>

Fernando Fontes 2008/2009

Conteúdo I

1 Erros

- Valores exacto e aproximado
- Sistemas de vírgula flutuante
- Aritmética em representações finitas
- Propagação de erros no cálculo de funções
- Erro no cálculo de séries
- Exercícios

2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- Método da falsa posição
- Método iterativo simples
- Método de Newton
- Método da Secante
- Ordem de convergência: definição
- Raízes de Polinómios

3 Sistemas de equações não lineares

Conteúdo II

- Método iterativo simples
- Método de Newton

4 Aproximação de funções

- Aproximação dos mínimos quadrados
- Aproximação em espaços vectoriais
- Sistemas Sobredeterminados

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação

Conteúdo III

- Splines

6 Integração numérica

- Regra dos trapézios
- Regra de Simpson
- Integração de Romberg

7 Sobre normas de vectores e matrizes

- Norma de um vector
- Norma de uma matriz

8 Sistemas de equações lineares

- Eliminação gaussiana
- Estratégias de pivotação
- Erro e resíduo de uma solução aproximada
- Perturbações no sistema de equações
- Métodos iterativos
- Inversão de matrizes

9 Integração de Equações diferenciais

Conteúdo IV

- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- Método de Taylor
- Consistência e Convergência
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

Docentes

- C. Mendonça e Moura

cmm@fe.up.pt

- Manuel J. Oliveira

moliv@fe.up.pt

- M. Joana Peres

jperes@fe.up.pt

- Fernando A. Fontes

faf@fe.up.pt

Agradecimentos aos anteriores docentes Aníbal Matos e Miguel Gomes pelo material disponibilizado.

Métodos Numéricos (Análise Numérica, Computação Numérica, ...)

Trata do estudo de métodos que permitam obter soluções aproximadas de problemas com um esforço computacional razoável.

Está na fronteira entre a Matemática e Ciências de Computação.

Objectivos da disciplina

Dotar os alunos da capacidade de **aplicar criteriosamente** técnicas numéricas para a resolução de problemas de engenharia, o que exige:

- ① compreender os fundamentos dos métodos
- ② saber aplicar os métodos, recorrendo a
 - programação
 - calculadoras
 - aplicações computacionais

Importância da disciplina

- Um computador é uma útil e poderosa ferramenta de cálculo de um EEC.
- Logo, é importante que ele conheça as potencialidades e fundamentos dos métodos utilizados ...
- Mas também as limitações desses métodos.

Exemplos de desastres devido ao uso incorrecto de métodos numéricos:

- The explosion of the Ariane 5 rocket just after lift-off on its first voyage on June 4, 1996, was ultimately the consequence of a simple overflow.
- The Patriot Missile failure, in Dharan, Saudi Arabia, on February 25, 1991 which resulted in 28 deaths, is ultimately attributable to poor handling of rounding errors.
- The sinking of the Sleipner A offshore platform in Gandsfjorden, Norway, on August 23, 1991, resulted in a loss of nearly one billion dollars. It was found to be the result of inaccurate finite element analysis.

fonte/mais info: <http://www.ima.umn.edu/~arnold/disasters/>

Programa

- **Erros e representações numéricas**
- **Equações não lineares**
- Sistemas de equações não lineares
- Sistemas de equações lineares
- **Aproximação de funções**
- Interpolação polinomial
- Integração numérica
- Integração de Equações diferenciais

É expectável

Conhecimentos prévios de Matemática

- ⇒ derivação e integração, série de Taylor
- ⇒ matrizes, sistemas de equações
- ⇒ maturidade matemática (facilidade na manipulação de expressões, saber ler e escrever matemática)

Conhecimentos prévios de Programação

- ⇒ entrada e saída de dados, passagem de parâmetros
- ⇒ ciclos e “arrays”

Estudo/Trabalho

- ⇒ 8 horas/semana para esta UC (4 de aulas)

Aulas teóricas

⇒ **2×1 horas por semana**

- exposição e discussão da matéria
- apresentação de exemplos ilustrativos
- esclarecimento de dúvidas

Aulas teórico-práticas

- ⇒ bloco de 2 horas por semana
 - ⇒ começam na semana de 9 de Março
 - ⇒ salas de PCs
 - ⇒ plano anunciado antecipadamente
-
- programação de métodos numéricos
 - em linguagem C
 - grupos de 2 alunos
 - resolução de exercícios pelos alunos

Ferramentas

Uso obrigatório

- calculadora científica
- compilador de C

Uso incentivado

- aplicações de cálculo numérico e simbólico
 - Matlab
 - Maple
 - ...
- folha de cálculo

Avaliação: distribuída com exame final

Exame Final (*E*)

Programas e Problemas (*P*)

A resolver nas aulas TP

- Trabalhos de Programação (4)
(grupos 2 alunos, duração 1,5 h)
- Resolução de problemas (5)
(individualmente, duração 30 min)

De entre os 4 programas + 5 problemas só contam para nota os 7 melhores.

Classificação

A classificação final é

$$F = (0.1 + 0.01E) \cdot P + (0.9 - 0.01E) \cdot E$$

Motivação: a nota da avaliação prática vale tanto mais quanto melhor for a nota do exame!

Obtenção de frequência

- não exceder o limite de faltas às aulas TP;
- obter pelo menos 6 valores na componente de trabalhos de programação e resolução de problemas

Bibliografia e material de apoio

- A. Matos, “Apontamentos de Análise Numérica”, FEUP.
- S. Conte & C. de Boor, “An Introduction to Numerical Analysis”, McGraw-Hill.
- E. Fernandes, “Computação Numérica”, U. Minho.
- H. Pina, “Métodos Numéricos”, McGraw-Hill.
- R. Burden & J. Faires, “Numerical Analysis”, Brooks Cole.
- W. Cheney & D. Kincaid, “Numerical Mathematics and Computing”, Brooks Cole.

Páginas disciplina

Página do SIFEUP e <http://www.fe.up.pt/~faf/mnum/>

- “Apontamentos de Análise Numérica”
- Folhas de problemas (alguns resolvidos)
- Testes de anos anteriores
- Exercícios de programação de anos anteriores
- **Informação sobre funcionamento**
 - plano das aulas
 - sumários
 - classificações
 - ...

Um novo capítulo ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

6 Integração numérica

7 Sobre normas de vectores e matrizes

8 Sistemas de equações lineares

1. Erros e representações numéricas

O que significa 1.2 ± 0.1 ou $1.2 \pm 5\%$?

1.3 e 1.30 têm o mesmo significado?

Porque razão a operação $1 + 10^{-20}$ tem resultado 1 nas máquinas calculadoras?

Porque nem sempre $(a + b) + c$ é igual a $a + (b + c)$?

Como minimizar as consequências da precisão finita?

Que precisão terá $\sin \alpha$ se α tiver uma precisão de 2° ?

Quantos termos devemos usar para calcular 5 dígitos de $\sqrt{2}$ através de uma série?

Vamos agora ver ...

1 Erros

- Valores exacto e aproximado
- Sistemas de vírgula flutuante
- Aritmética em representações finitas
- Propagação de erros no cálculo de funções
- Erro no cálculo de séries
- Exercícios

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

Valores exacto e aproximado

Valor exacto:

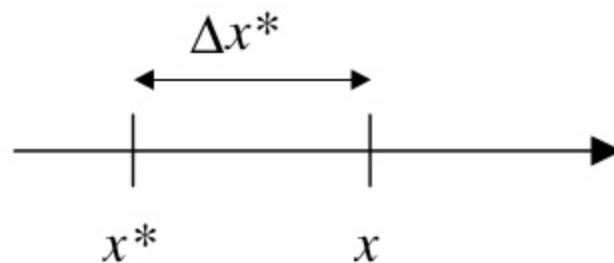
x

Valor aproximado:

x^*

Erro (de aproximação):

$\Delta x^* = x - x^*$



Aproximação

- por defeito: $x^* < x \Leftrightarrow \Delta x^* > 0$
- por excesso: $x^* > x \Leftrightarrow \Delta x^* < 0$

Erro absoluto

Erro absoluto: $|\Delta x^*| = |x - x^*|$

Erro máximo absoluto: um majorante do erro absoluto

$$\varepsilon : \quad |\Delta x^*| \leq \varepsilon$$

Notação:

$$x = x^* \pm \varepsilon \quad \Leftrightarrow \quad x \in [x^* - \varepsilon, x^* + \varepsilon]$$

Exemplo: $\pi = 3.14 \pm 0.002 \quad \Leftrightarrow \quad \pi \in [3.138, 3.142]$

Erro relativo

Erro relativo: $\frac{|\Delta x^*|}{|x|}$ ou aproximadamente $\frac{|\Delta x^*|}{|x^*|}$

→ exprime-se habitualmente em percentagem

Erro máximo relativo: um majorante do erro relativo

$$\varepsilon' = \frac{\varepsilon}{|x|} \simeq \frac{\varepsilon}{|x^*|}$$

Notação: $x = x^* \pm (100\varepsilon')\%$ $\Leftrightarrow x \in [x^*(1 - \varepsilon'), x^*(1 + \varepsilon')]$

Exemplo: $x = 2.0 \pm 5\%$ $\Leftrightarrow x \in [1.9, 2.1]$

Notação científica

Notação científica na base 10 de $x \in \mathbb{R}$

$$x = \pm d_n d_{n-1} \cdots d_1 d_0 . d_{-1} d_{-2} d_{-3} \cdots \times 10^e$$

mantissa: $d_n d_{n-1} \dots d_1 d_0 . d_{-1} d_{-2} d_{-3}$

expoente: $e \in \mathbb{Z}$

Dígitos da mantissa: $d_i \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$

Mantissa com n algarismos

E se a mantissa for $d_1 d_2 \cdots d_n d_{n+1} d_{n+2} \cdots$?

Truncatura

ignoram-se algarismos a partir do índice $n + 1$

Arredondamento

- se $0.d_{n+1}d_{n+2}\dots > 0.5$ soma-se uma unidade à casa n para (**arredondar para cima**)
- se $0.d_{n+1}d_{n+2}\dots < 0.5$ mantém-se a casa n (**arredondar para baixo**)
- se $0.d_{n+1}d_{n+2}\dots = 0.5$ arredonda-se para cima ou para baixo ficando a casa n par (por vezes também se arredonda para cima)

Notação compacta para aproximações

Como simplificar a notação $x = x^* \pm \varepsilon$?

Majorar erros absolutos por 0.5×10^n e representar a aproximação até à casa decimal 10^n .

Os algarismos da mantissa (com excepção dos zeros à esquerda) designam-se **algarismos significativos**.

Procedimento

- ① majoração de ε por um número da forma 0.5×10^n
- ② arredondar x^* para a casa 10^n

Algarismos significativos e erro relativo

x^*	ε	Intervalo	Alg. significativos	ε'
2.24	0.005	[2.235, 2.245]	3	2.2×10^{-3}
2.240	0.0005	[2.2395, 2.2405]	4	2.2×10^{-4}
1.5×10^2	5	[145, 155]	2	3.3×10^{-2}
0.1×10^3	50	[50, 150]	1	5×10^{-1}
1.00×10^k	0.005×10^k	$[0.995 \times 10^k, 1.005 \times 10^k]$	3	5×10^{-3}

Algarismos significativos e erro relativo

Teorema

Seja $x \neq 0$. Uma aproximação de x com n algarismos significativos tem um erro relativo inferior a 5×10^{-n} .

Vamos agora ver ...

1 Erros

- Valores exacto e aproximado
- **Sistemas de vírgula flutuante**
- Aritmética em representações finitas
- Propagação de erros no cálculo de funções
- Erro no cálculo de séries
- Exercícios

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

Sistemas de vírgula flutuante $FP(\beta, n, m, M)$

Números representáveis: $x = \pm(0.d_1d_2 \cdots d_n) \times \beta^e$

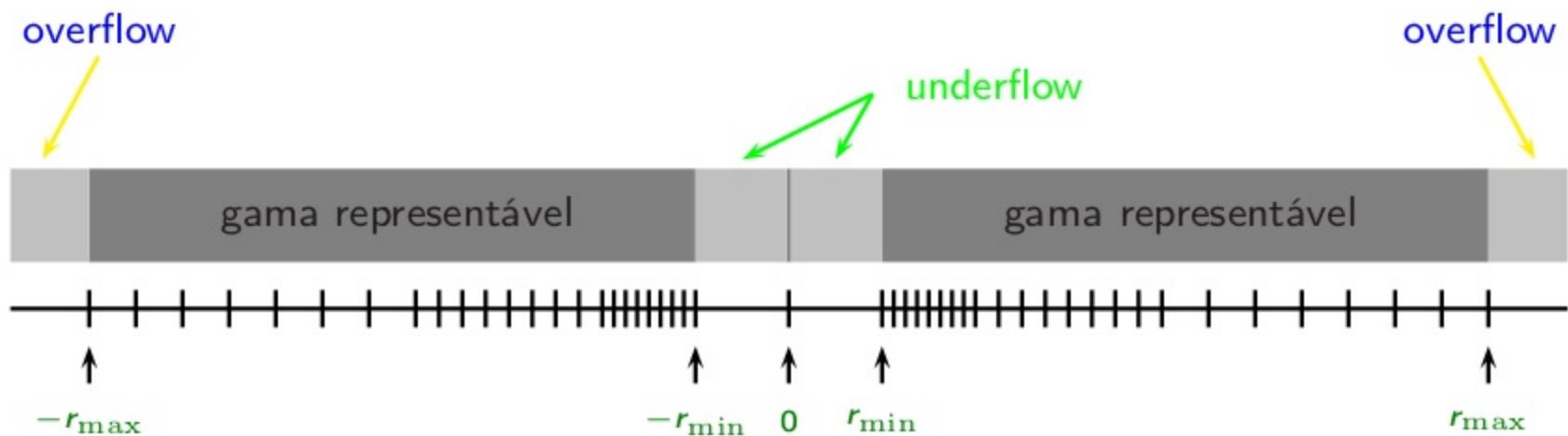
β base de representação

n número de dígitos da mantissa (precisão)

m, M expoentes mínimo e máximo (gama representável)

Sistema normalizado: $x = 0 \vee d_1 \neq 0$

Vírgula flutuante: números representáveis



Vírgula flutuante: algumas limitações

- aproximação de números não representáveis
 - arredondamento
 - truncatura
 - ⇒ erros de representação
- $x, y \in FP \Rightarrow x \circ y \in FP$
 - ⇒ erros de representação
- underflow e overflow
 - ⇒ impossibilidade de representação

Vírgula flutuante

Versões do mesmo sistema $\text{FP}(\beta, n, m, M)$ podem diferir:

- aproximação de números não representáveis
- tratamento de exceções
- algoritmos de cálculo
- ...

Desvantajoso em termos de

- repetibilidade de resultados
- portabilidade de código
- validação de resultados

Norma IEEE 754

Vamos agora ver ...

1 Erros

- Valores exacto e aproximado
- Sistemas de vírgula flutuante
- Aritmética em representações finitas
- Propagação de erros no cálculo de funções
- Erro no cálculo de séries
- Exercícios

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

Aritmética em representações finitas

- ordem de realização de operações associativas pode influenciar resultado: $(a \circ b) \circ c \stackrel{?}{=} a \circ (b \circ c)$
Ex: $1 + 0.24 + 0.14$ com 2 dígitos.
- cancelamento aditivo: $a + b$ com $a \ll b$ ou $a \gg b$
→ problemas com somas de muitas parcelas
- cancelamento subtractivo: $a - b$ com $a \approx b$
→ podem perder-se algarismos significativos
→ podem conduzir a erros elevados
→ possível minorar rearranjando cálculos
Ex: $1.16 - 1.04$ com 2 dígitos.

Vamos agora ver ...

1 Erros

- Valores exacto e aproximado
- Sistemas de vírgula flutuante
- Aritmética em representações finitas
- Propagação de erros no cálculo de funções
- Erro no cálculo de séries
- Exercícios

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

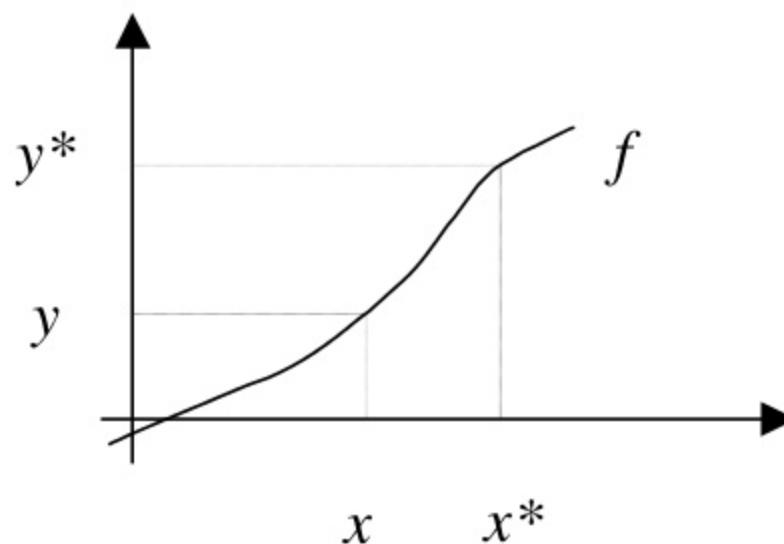
5 Interpolação polinomial

Propagação de erros no cálculo de $y = f(x)$

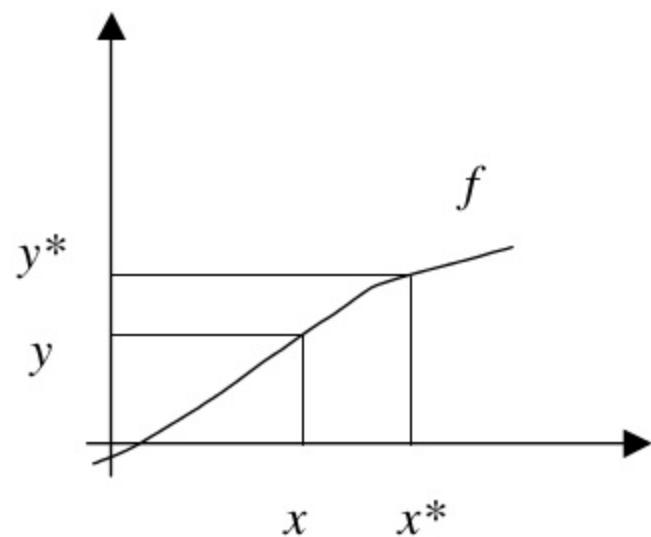
x^* valor aproximado de x . Como aproximar $y = f(x)$?

Será $y^* = f(x^*)$ uma boa aproximação?

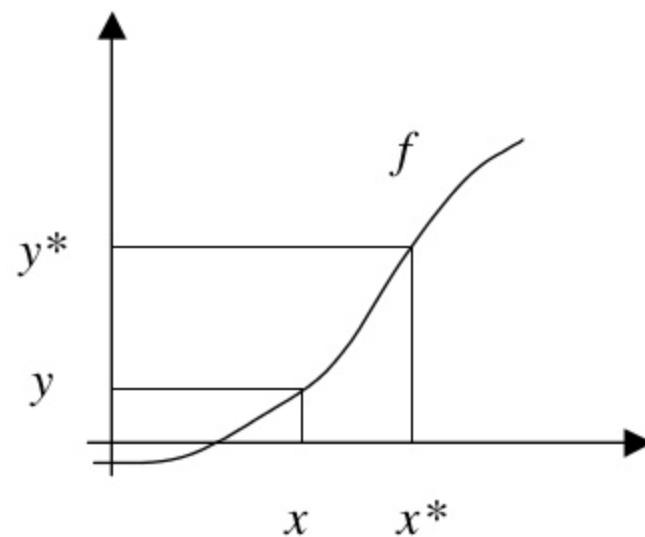
f contínua: x^* próximo de $x \Rightarrow y^*$ próximo de y



Estimação do erro de $y^* = f(x^*)$



f de variação lenta



f de variação rápida

$$\Delta y^* = y - y^* = f(x) - f(x^*) = f(x^* + \Delta x^*) - f(x^*)$$

Majorante para o erro absoluto da aproximação y^* de y

$$\varepsilon_y = |f'|_{\max} \cdot \varepsilon_x$$

Propagação de erros: exemplo

Calcular um valor aproximado de $y = \sin x$ e o correspondente erro máximo absoluto quando $x \approx 0.57$, isto é, $x = 0.57 \pm 0.005$.

Erro relativo no cálculo de $y = f(x)$

Majorante para o erro relativo de $y^* = f(x^*)$

$$\varepsilon'_y = \left| f'(x) \cdot \frac{x}{f(x)} \right|_{\max} \cdot \varepsilon'_x$$

$\left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right|$ designa-se **número de condição** de f em x .

→ $\left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right|$ reduzido: a função diz-se **bem condicionada**

→ $\left| \frac{xf'(x)}{f(x)} \right|$ elevado: a função diz-se **mal condicionada**

Propagação de erros: exemplo

Quantos dígitos significativos se podem perder no cálculo da função
 $y = \tan(x)$ quando x está próximo de 1? E quando x está próximo de 1.5?

Erro no cálculo de $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$

x_i^* valor aproximado de x_i , com erro máximo absoluto ε_{x_i} .

$y^* = f(x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ aproxima $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ com erro máximo absoluto

$$\varepsilon_y = \sum_{i=1}^n \left(\left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{\max} \cdot \varepsilon_{x_i} \right)$$

e erro relativo máximo

$$\varepsilon'_y \leq \sum_{i=1}^n \left(\left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \cdot \frac{x_i}{f} \right|_{\max} \cdot \varepsilon'_{x_i} \right)$$

Nota: os máximos são determinados em $\prod_{i=1}^n [x_i - \varepsilon_{x_i}, x_i + \varepsilon_{x_i}]$

Propagação de erros: exemplos

- 1 Calcular majorante para o erro absoluto de $s = a + b$ em função dos erros máximos absolutos de a e de b .
- 2 Calcular o erro máximo relativo $w = xyz$ a partir dos erros máximos relativos em x , y e z .

Vamos agora ver ...

1 Erros

- Valores exacto e aproximado
- Sistemas de vírgula flutuante
- Aritmética em representações finitas
- Propagação de erros no cálculo de funções
- Erro no cálculo de séries**
- Exercícios

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

Cálculo de séries: erro de truncatura

Quando se aproxima a série

$$S = \sum_{i=0}^{\infty} a_i$$

pela soma finita

$$S_n = \sum_{i=0}^n a_i$$

aparece o **erro de truncatura**

$$R_n = S - S_n$$

Erro de truncatura em séries alternadas

Teorema

Seja a sucessão $\{a_n\}_{n=0}^{\infty}$ decrescente e de termos não negativos, isto é,
 $a_0 \geq a_1 \geq \dots \geq a_n \geq \dots \geq 0$.

Estão a série $\sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i a_i$ é convergente para um número S .

Verifica-se ainda que a soma parcial $S_n = \sum_{i=0}^n (-1)^i a_i$ satisfaz

$$|S - S_n| \leq a_{n+1},$$

ou seja, o erro de truncatura é, em valor absoluto, inferior ou igual ao primeiro termo não considerado.

Erro de truncatura: exemplo de série alternada

A série alternada

$$1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9} - \dots$$

é convergente para o valor $\frac{\pi}{4}$.

Determinar quantos termos são necessários para calcular este valor com um erro inferior a 10^{-4} .

Série de Taylor: erro de truncatura

Desenvolvimento de Taylor da função f em torno de x_0

$$f(x) = \underbrace{f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \cdots + f^{(n)}(x_0) \frac{(x - x_0)^n}{n!}}_{P_{x_0,n}(x)} + R_{x_0,n}(x)$$

onde $R_{x_0,n}(x) = f^{(n+1)}(x_0 + (x - x_0)\theta) \frac{(x - x_0)^{n+1}}{(n+1)!}$, $\theta \in [0, 1]$.

O erro de truncatura de $f(x) \approx P_{x_0,n}(x)$ é $R_{x_0,n}(x)$.

Este desenvolvimento pode ser utilizado para o cálculo de funções como \sin , \cos , \exp , ...

Erro de truncatura: exemplo

Pretende-se aproximar a função e^x no intervalo $[-2, 2]$ por um polinómio de Taylor.

Qual deverá ser o grau do polinómio se se pretender que o erro absoluto devido à truncatura da série seja inferior a 5×10^{-5} ?

Vamos agora ver ...

1 Erros

- Valores exacto e aproximado
- Sistemas de vírgula flutuante
- Aritmética em representações finitas
- Propagação de erros no cálculo de funções
- Erro no cálculo de séries
- Exercícios

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

Exercício: aritmética finita

A precisão de uma máquina pode ser avaliada determinando o valor $\delta > 0$ tal que o resultado da operação $1 + \varepsilon$ seja igual 1, para todo o $|\varepsilon| \leq \delta$. Estime o valor de δ da sua calculadora.

Exercício: propagação de erros

Considere a relação $t = \frac{\cos(x)}{y} + e^{-yz}$.

- (a) Determine um valor aproximado de t e um majorante para o erro absoluto quando

$x = 1.3$, sendo este valor exacto,

$y = 0.25 \pm 4\%$,

$z = 1.7 \pm 3 \times 10^{-1}$.

- (b) Quantos algarismos significativos se podem perder no cálculo de t , quando $x = \frac{\pi}{2}$ e $y = 3$ (valores exactos) e z está próximo de 4?

Nota: exame de 23/Jan/2002.

Exercício: erro de truncatura

Pretende-se calcular a função $\sin(x)$ no intervalo $[-\frac{\pi}{4}, \frac{\pi}{4}]$ recorrendo a um polinómio de Taylor.

Qual deverá ser o polinómio de modo a que o erro relativo, devido à truncatura da série de Taylor, seja inferior a 5×10^{-8} ?

Um novo capítulo ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

6 Integração numérica

7 Sobre normas de vectores e matrizes

8 Sistemas de equações lineares

2. Equações não lineares

Como se calcula a solução da equação $e^{-x} = x$?

Quais são as raízes do polinómio $x^5 + 2x^4 - x^3 + x - 1$?

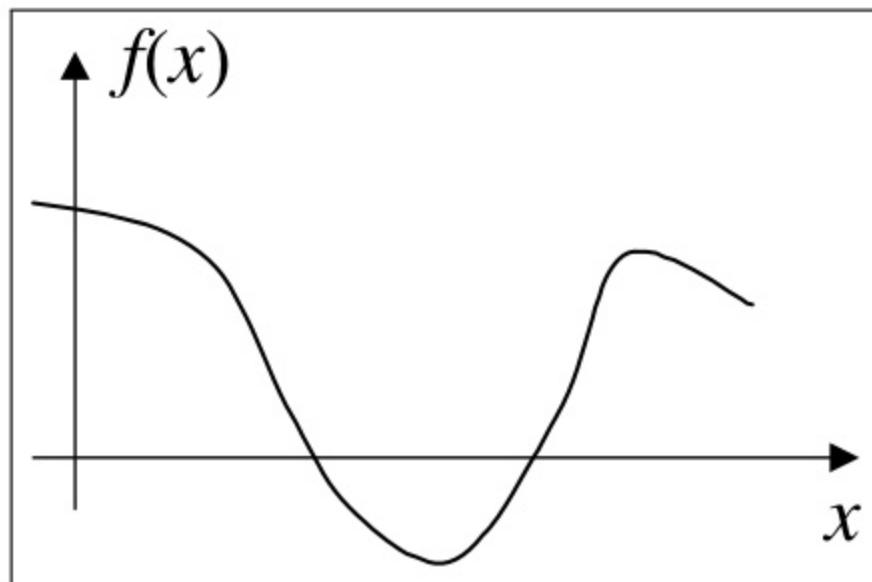
Com que rapidez podemos resolver estes problemas?

:

Equações não lineares ou zeros de funções

Problema

Dada uma função f determinar s tal que $f(s) = 0$.



Métodos de resolução

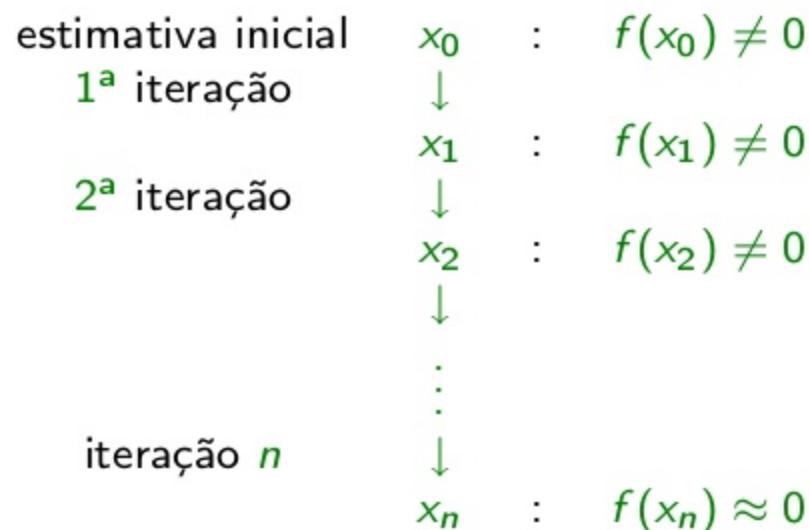
Directos

- soluções determinadas por expressões envolvendo f
 - fornecem soluções exactas (usando precisão infinita)
 - aplicáveis apenas a alguns tipos de problemas
- Exemplo: fórmula resolvente de equações do 2º grau

Iterativos

- geram sucessões de soluções aproximadas
- aplicáveis a uma vasta gama de problemas

Métodos iterativos: funcionamento



$x_0, x_1, \dots, x_n, \dots \rightarrow s$, onde $f(s) = 0$

Métodos iterativos: implementação

```
definir_estimativa_inicial;  
repetir  
    calcular_nova_estimativa;  
até verificar_críterio_paragem;
```

Métodos iterativos: questões a considerar

- ➊ estimativa inicial
 - como escolher x_0 ?
- ➋ convergência de $\{x_n\}$
 - é convergente?
 - converge para uma solução?
- ➌ critério de paragem
 - x_n próximo de s ?
 - $f(x_n)$ próximo de 0 ?
 - número de iterações?
- ➍ rapidez de convergência
 - quantas iterações são necessárias?

Determinação de estimativa inicial

- Aplicando um método iterativo calcula-se um zero
- Múltiplos zeros
 - ⇒ múltiplas aplicações de métodos iterativos
 - ⇒ estimativas iniciais próximas dos zeros (ou intervalos contendo cada zero)
- Localização (ou separação) de zeros
 - cálculo de valores
 - estudo do gráfico
 - análise de propriedades

Localização de zeros: cálculo de valores

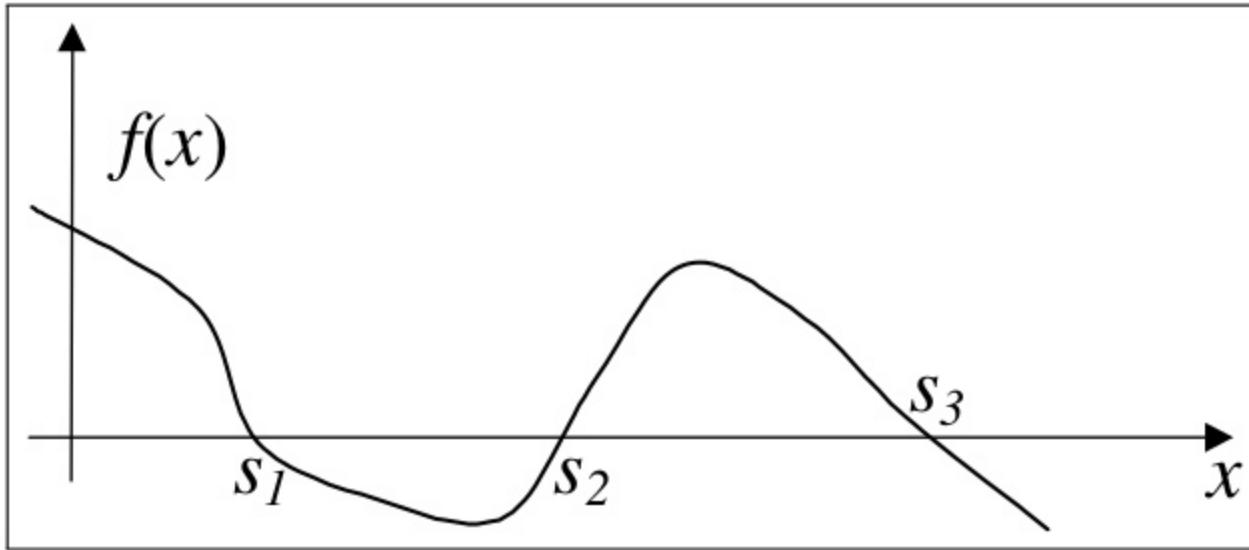
Varrimento de um intervalo $[a, b]$ em n subintervalos

- ① definir passo $h = \frac{b-a}{n}$
- ② calcular f nos pontos $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$
- ③ se $f(x_i)f(x_{i+1}) < 0$ então \exists zero de f em $[x_i, x_{i+1}]$

Características

- aplicação geral
- simples de automatizar
- possibilidade de falhar zeros \Rightarrow ajustar passo h ...

Localização de zeros: métodos gráficos



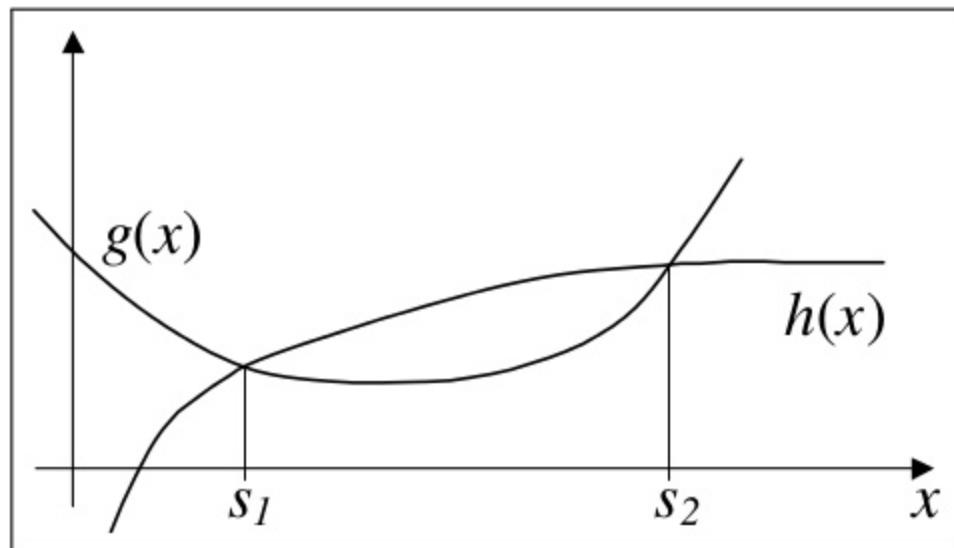
O gráfico de f pode ser obtido

- estudando as propriedades de f
- utilizando meios computacionais

Localização de zeros: métodos gráficos

Transformação de $f(x) = 0$ em $g(x) = h(x)$

Estudos das intersecções dos gráficos de g e h



Localização de zeros: métodos analíticos

⇒ Monotonia de f

⇒ Números de Rolle de $f : D \rightarrow \mathbb{R}$

- pontos fronteira de D
- zeros da função f'

Teorema

Se f é estritamente monótona em $[a, b]$, então f tem no máximo um zero em $[a, b]$.

Teorema

Se f é diferenciável, então entre dois números de Rolle consecutivos f tem no máximo um zero.

Localização de zeros: exemplos

1 Utilizando métodos gráficos localize os zeros de

1 $f(x) = x^2 + \sin(x) - 1$

2 $f(x) = e^x \ln(x) - 1$

2 Utilizando os números de Rolle localize os zeros de

1 $f(x) = e^x - 3x$

2 $f(x) = x^3 - 3x + 1$

Estimação do erro

Teorema

f continuamente diferenciável em $[a, b]$ tal que $m_1 = \min_{\xi \in [a, b]} |f'(\xi)| > 0$.

Seja $s \in [a, b]$ tal que $f(s) = 0$. Então

$$|s - x| \leq \frac{|f(x)|}{m_1} \quad \forall x \in [a, b].$$

Critério de paragem

Parando o método quando $|f(x_k)| \leq \delta$ garante-se que

$$|x_k - s| \leq \frac{\delta}{m_1}$$

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- Método da falsa posição
- Método iterativo simples
- Método de Newton
- Método da Secante
- Ordem de convergência: definição
- Raízes de Polinómios

3 Sistemas de equações não lineares

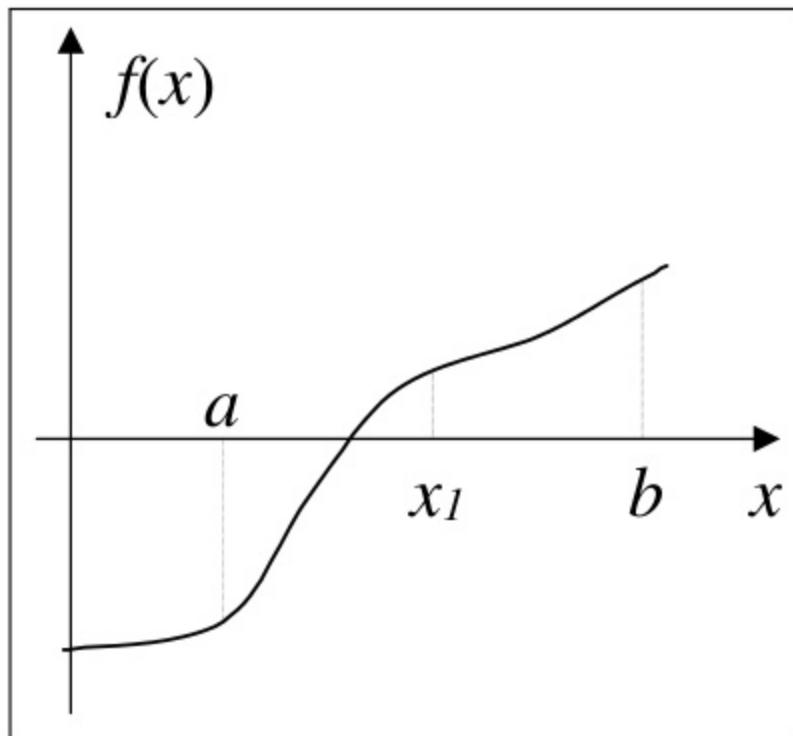
4 Aproximação de funções

Método das bissecções sucessivas

Descrição

Parte-se de um intervalo tal que a função tenha sinais contrários nos seus extremos.

Divide-se o intervalo a meio, escolhe-se o subintervalo onde a função tem sinais contrários nos extremos e assim sucessivamente.



Bissecções sucessivas: algoritmo

Inicialização	$[a_0, b_0] = [a, b]$
Repetir	<ol style="list-style-type: none">1. $x_{n+1} = \frac{a_n+b_n}{2};$2. Se $f(x_{n+1})f(a_n) < 0$ Então $a_{n+1} = a_n;$ $b_{n+1} = x_{n+1};$ Senão $a_{n+1} = x_{n+1};$ $b_{n+1} = b_n;$
Até	<i>verificar critério de paragem</i>

Bissecções sucessivas: convergência

Teorema

Seja f contínua em $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) \leq 0$ e seja s o único zero de f nesse intervalo. Então o método das bissecções sucessivas gera uma sucessão que converge para s .

Bissecções sucessivas: estimativa do erro

$$x_1 = \frac{a + b}{2}$$

$$\Rightarrow |s - x_1| \leq \frac{b - a}{2}$$

$$x_2 = \frac{a_1 + b_1}{2}$$

$$\Rightarrow |s - x_2| \leq \frac{b_1 - a_1}{2} = \frac{b - a}{2^2}$$

⋮

$$x_n = \frac{a_{n-1} + b_{n-1}}{2}$$

$$\Rightarrow |s - x_n| \leq \frac{b_{n-1} - a_{n-1}}{2} = \frac{b - a}{2^n}$$

$$n \geq \log_2 \frac{b - a}{\delta} \quad \Rightarrow \quad |s - x_n| \leq \delta$$

Bissecções sucessivas: exemplo

Determinar, com um erro absoluto inferior a 5×10^{-3} , a (única) solução da equação $1 + x + e^x = 0$ que se sabe estar no intervalo $[-2, -1]$.

Bissecções sucessivas: exemplo

n	a_n	$f(a_n)$	b_n	$f(b_n)$	x_{n+1}	$f(x_{n+1})$
0	-2.000	-0.865	-1.000	+0.368	-1.500	-0.277
1	-1.500	-0.277	-1.000	+0.368	-1.250	+0.037
2	-1.500	-0.277	-1.250	+0.037	-1.375	-0.122
3	-1.375	-0.122	-1.250	+0.037	-1.313	-0.043
4	-1.313	-0.043	-1.250	+0.037	-1.281	-0.004
5	-1.281	-0.004	-1.250	+0.037	-1.266	+0.016
6	-1.281	-0.004	-1.266	+0.016	-1.273	+0.006
7	-1.281	-0.004	-1.273	+0.006	-1.277	+0.001

Solução:

$$s = -1.277 \pm 4 \times 10^{-3}$$

ou

$$s \in [-1.281, -1.273]$$

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- **Método da falsa posição**
- Método iterativo simples
- Método de Newton
- Método da Secante
- Ordem de convergência: definição
- Raízes de Polinómios

3 Sistemas de equações não lineares

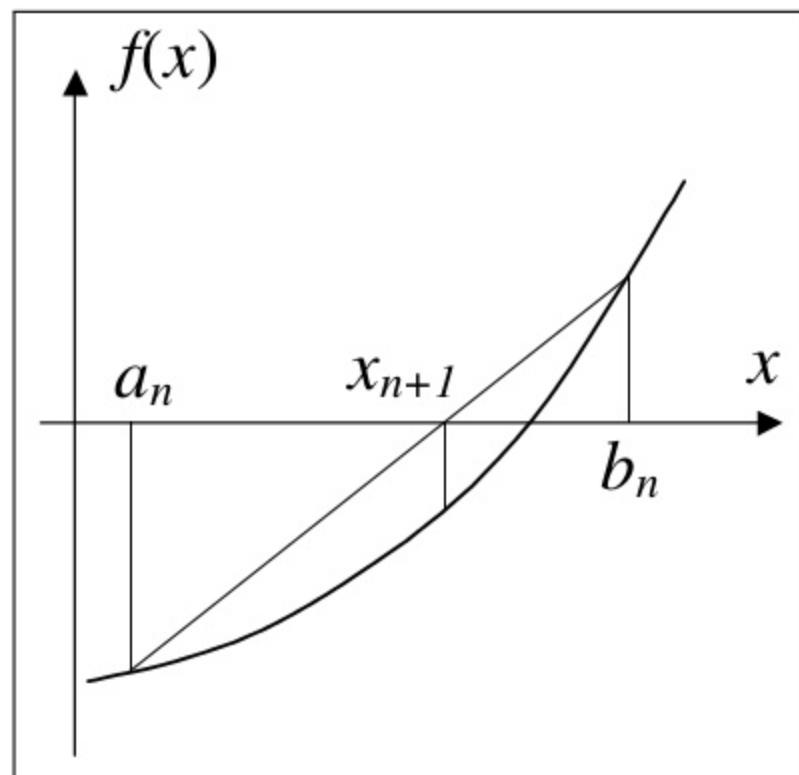
4 Aproximação de funções

Método da falsa posição (*regula falsi*)

Semelhante ao método das bissecções sucesivas, mas com o cálculo de x_{n+1} dado por

$$x_{n+1} = \frac{a_n f(b_n) - b_n f(a_n)}{f(b_n) - f(a_n)}$$

Este ponto corresponde à intersecção com o eixo dos x da recta que une os pontos $(a_n, f(a_n))$ e $(b_n, f(b_n))$.



Falsa posição: algoritmo

Inicialização	$[a_0, b_0] = [a, b]$
Repetir	<ol style="list-style-type: none">$x_{n+1} = \frac{a_n f(b_n) - b_n f(a_n)}{f(b_n) - f(a_n)}$;Se $f(x_{n+1})f(a_n) < 0$ Então $a_{n+1} = a_n$; $b_{n+1} = x_{n+1}$; Senão $a_{n+1} = x_{n+1}$; $b_{n+1} = b_n$;
Até	<i>verificar critério de paragem</i>

Falsa posição: estimativa do erro

Teorema

Seja f continuamente diferenciável em $[a, b]$ e tal que $f(a)f(b) \leq 0$. Sejam $m_1 = \min_{\xi \in [a, b]} |f'(\xi)| > 0$ e $M_1 = \max_{\xi \in [a, b]} |f'(\xi)|$.

Então, o erro de aproximação de s , único zero de f em $[a, b]$, pela estimativa x_{n+1} satisfaz a relação

$$|s - x_{n+1}| \leq \frac{M_1 - m_1}{m_1} |x_{n+1} - x_n|.$$

Critério de paragem

$$\varepsilon_{n+1} = \frac{M_1 - m_1}{m_1} |x_{n+1} - x_n| \leq \delta \quad \Rightarrow \quad |s - x_{n+1}| \leq \delta$$

Falsa posição: exemplo 1

Utilizar o método da falsa posição para determinar, com um erro absoluto inferior a 5×10^{-3} , o (único) zero da função $f(x) = 1 + x + e^x$.

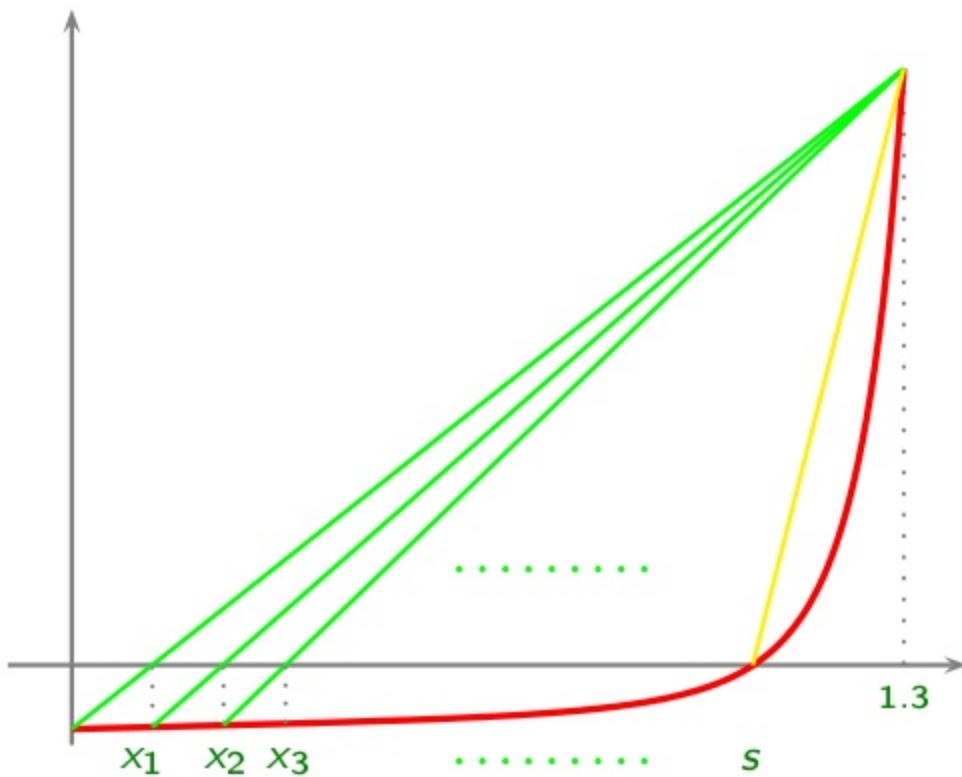
Falsa posição: exemplo 1

n	a_n	$f(a_n)$	b_n	$f(b_n)$	x_{n+1}	$f(x_{n+1})$	ε_{n+1}
0	-2.000	-0.865	-1.000	+0.368	-1.298	-2.55×10^{-2}	1.4×10^{-1}
1	-1.298	-0.026	-1.000	+0.368	-1.279	-8.22×10^{-4}	4.0×10^{-3}

Solução: $s \simeq -1.279$, com erro absoluto máximo de 4.0×10^{-3}

Falsa posição: exemplo 2

Determinar o zero de $f(x) = x + e^{x^5} - 5$ em $[0, 1.3]$



Falsa posição: exemplo 2

n	a_n	$f(a_n)$	b_n	$f(b_n)$	x_{n+1}	$f(x_{n+1})$	ε_{n+1}
0	+0.000	-4.000	+1.300	+37.274	+0.126	-3.87	+3.87
1	+0.126	-3.874	+1.300	+37.274	+0.237	-3.76	+3.76
2	+0.237	-3.763	+1.300	+37.274	+0.334	-3.66	+3.66
3	+0.334	-3.662	+1.300	+37.274	+0.420	-3.57	+3.57
4	+0.420	-3.566	+1.300	+37.274	+0.497	-3.47	+3.47
5	+0.497	-3.472	+1.300	+37.274	+0.566	-3.37	+3.37
...
50	+1.065	-0.008	+1.300	+37.274	+1.065	-6.64×10^{-3}	$+6.64 \times 10^{-3}$
51	+1.065	-0.007	+1.300	+37.274	+1.065	-5.54×10^{-3}	$+5.54 \times 10^{-3}$
52	+1.065	-0.006	+1.300	+37.274	+1.065	-4.63×10^{-3}	$+4.63 \times 10^{-3}$

Falsa posição: exemplo 2

O método das bissecções sucessivas aplicado a este problema garante o mesmo erro máximo em **9** iterações!

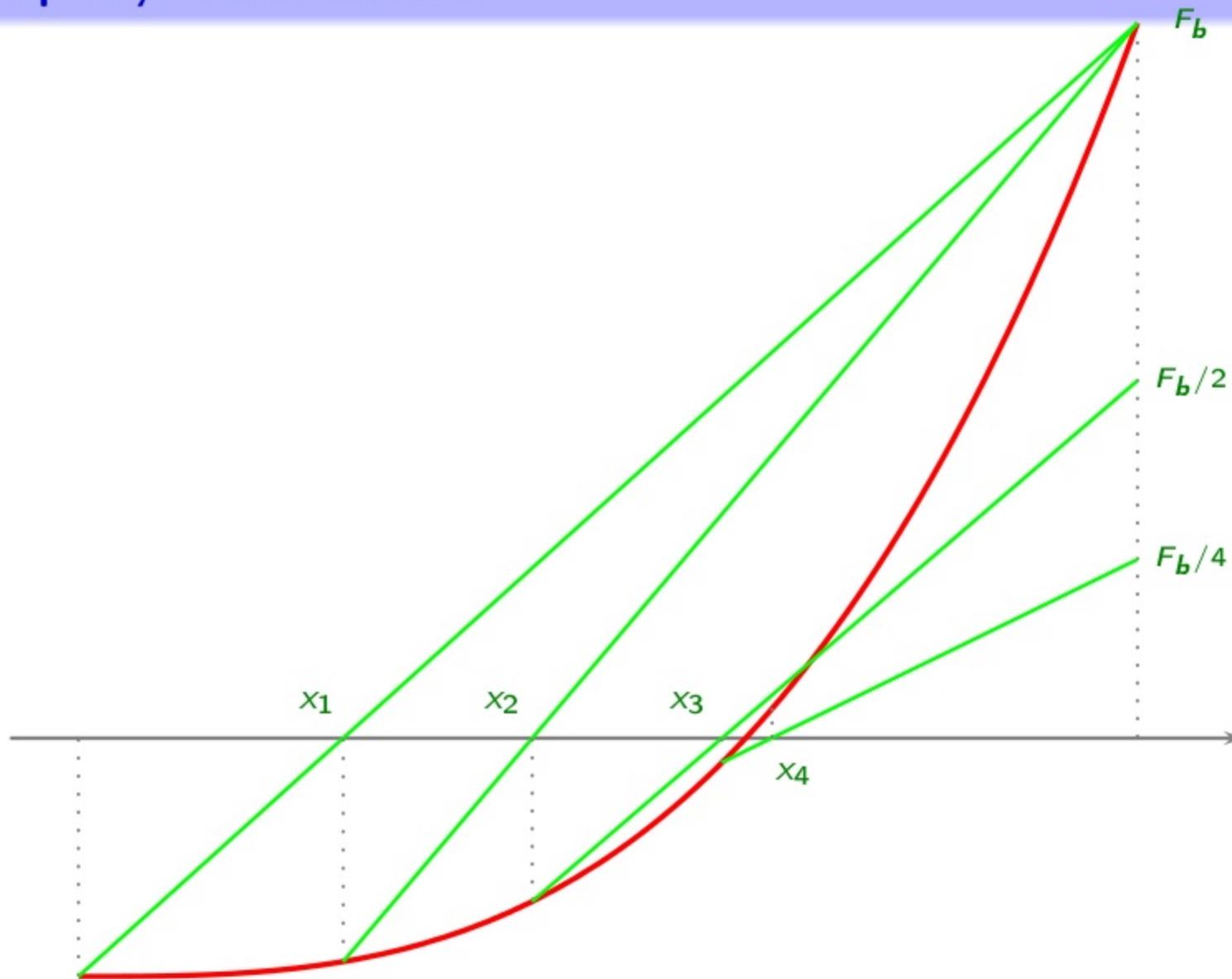
n	a_n	$f(a_n)$	b_n	$f(b_n)$	x_{n+1}	$f(x_{n+1})$
0	+0.000	-4.000	+1.300	+37.274	+0.650	-3.227
1	+0.650	-3.227	+1.300	+37.274	+0.975	-1.611
2	+0.975	-1.611	+1.300	+37.274	+1.138	+2.853
3	+0.975	-1.611	+1.138	+2.853	+1.056	-0.220
4	+1.056	-0.220	+1.138	+2.853	+1.097	+0.990
5	+1.056	-0.220	+1.097	+0.990	+1.077	+0.323
6	+1.056	-0.220	+1.077	+0.323	+1.066	+0.038
7	+1.056	-0.220	+1.066	+0.038	+1.061	-0.094
8	+1.061	-0.094	+1.066	+0.038	+1.064	-0.029

Falsa posição: convergência

Teorema

Se f for estritamente monótona e duplamente diferenciável em $[a, b]$, se $f(a)f(b) \leq 0$ e se o sinal de f'' não variar em $[a, b]$, então a sucessão produzida pelo método da falsa posição converge monotonamente para o zero de f nesse intervalo. Também se verifica que um dos extremos do intervalo permanece inalterado.

Falsa posição modificado



Falsa posição modificado: convergência

Teorema

Se f é contínua, estritamente monótona e tiver sinais contrários nos extremos de um intervalo $[a, b]$, a sucessão produzida pelo método da falsa posição modificado converge para o zero de f em $[a, b]$.

Falsa posição modificado: algoritmo

Inicialização	$[a_0, b_0] = [a, b]; F_a = f(a_0); F_b = f(b_0)$
Repetir	<ol style="list-style-type: none"> 1. $x_{n+1} = \frac{a_n F_b - b_n F_a}{F_b - F_a};$ 2. Se $f(x_{n+1})f(a_n) < 0$ Então $a_{n+1} = a_n; b_{n+1} = x_{n+1}; F_b = f(x_{n+1});$ Se $f(x_{n+1})f(x_n) > 0$ Então $F_a = \frac{F_a}{2};$ Senão $a_{n+1} = x_{n+1}; b_{n+1} = b_n; F_a = f(x_{n+1});$ Se $f(x_{n+1})f(x_n) > 0$ Então $F_b = \frac{F_b}{2};$
Até	<i>verificar critério de paragem</i>

Falsa posição modificado: exemplo

Determinar, com um erro absoluto inferior a 5×10^{-3} o zero de
 $f(x) = x + e^{x^5} - 5$ no intervalo $[0, 1.3]$.

Falsa posição modificado: exemplo

n	a_n	F_a	b_n	F_b	x_{n+1}	$f(x_{n+1})$	ε_{n+1}
0	+0.000	-4.000	+1.300	+37.274	+0.126	-3.87	+3.87
1	+0.126	-3.874	+1.300	+37.274	+0.237	-3.76	+3.76
2	+0.237	-3.763	+1.300	+18.637	+0.415	-3.57	+3.57
3	+0.415	-3.572	+1.300	+9.318	+0.660	-3.21	+3.21
4	+0.660	-3.206	+1.300	+4.659	+0.921	-2.14	+2.14
5	+0.921	-2.138	+1.300	+2.330	+1.102	+1.20	+1.20
6	+0.921	-2.138	+1.102	+1.198	+1.037	-6.39×10^{-1}	$+6.39 \times 10^{-1}$
7	+1.037	-0.639	+1.102	+1.198	+1.060	-1.29×10^{-1}	$+1.29 \times 10^{-1}$
8	+1.060	-0.129	+1.102	+0.599	+1.067	$+6.65 \times 10^{-2}$	$+6.65 \times 10^{-2}$
9	+1.060	-0.129	+1.067	+0.066	+1.065	-1.61×10^{-3}	$+1.61 \times 10^{-3}$

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- Método da falsa posição
- **Método iterativo simples**
- Método de Newton
- Método da Secante
- Ordem de convergência: definição
- Raízes de Polinómios

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

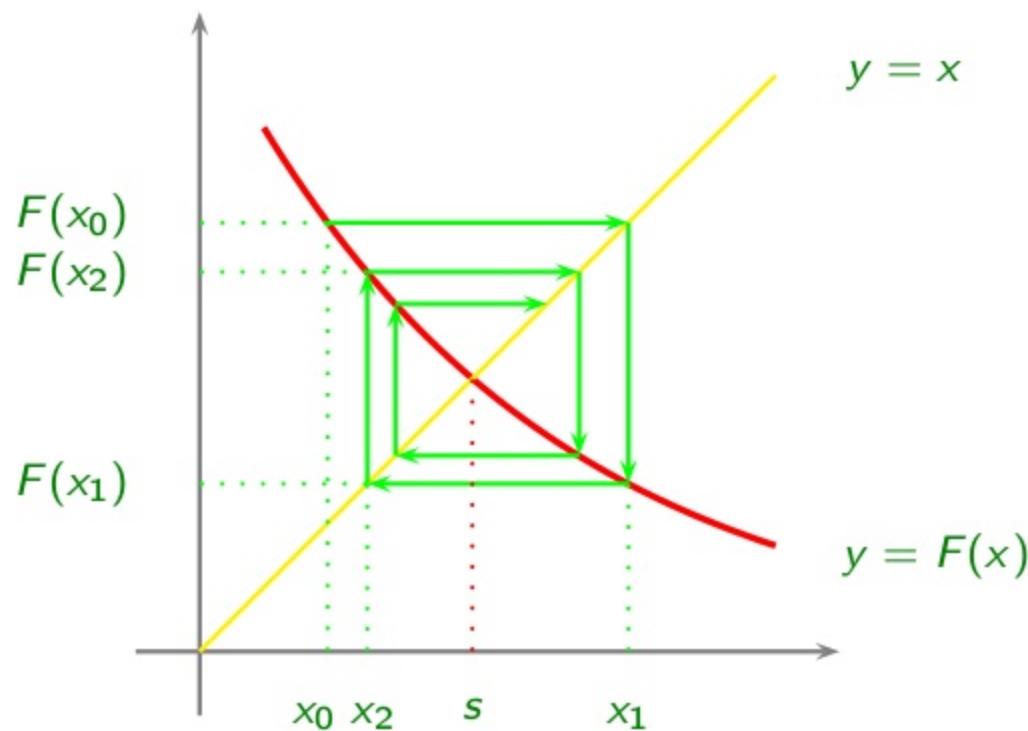
Método iterativo simples

- ① Reescrever $f(x) = 0$ da forma equivalente $x = F(x)$
- ② Escolher estimativa inicial x_0
- ③ Gerar a sucessão $x_{n+1} = F(x_n)$, $n = 0, 1, \dots$

→ F designa-se **função de recorrência**

→ $s : F(s) = s$ designa-se **ponto fixo** de F

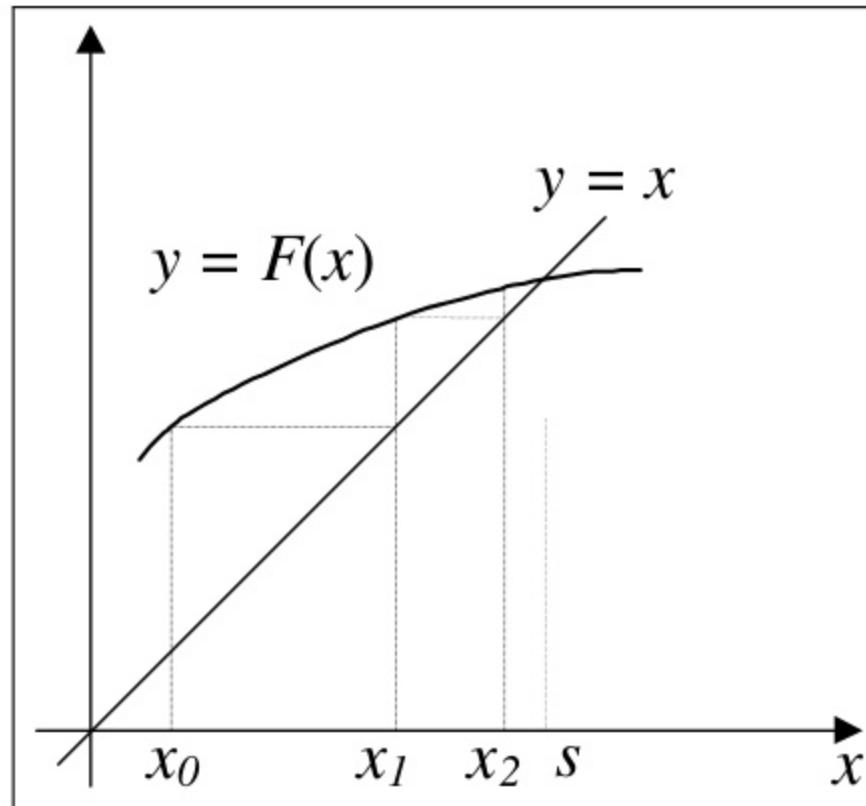
Método iterativo simples



Método iterativo simples: algoritmo

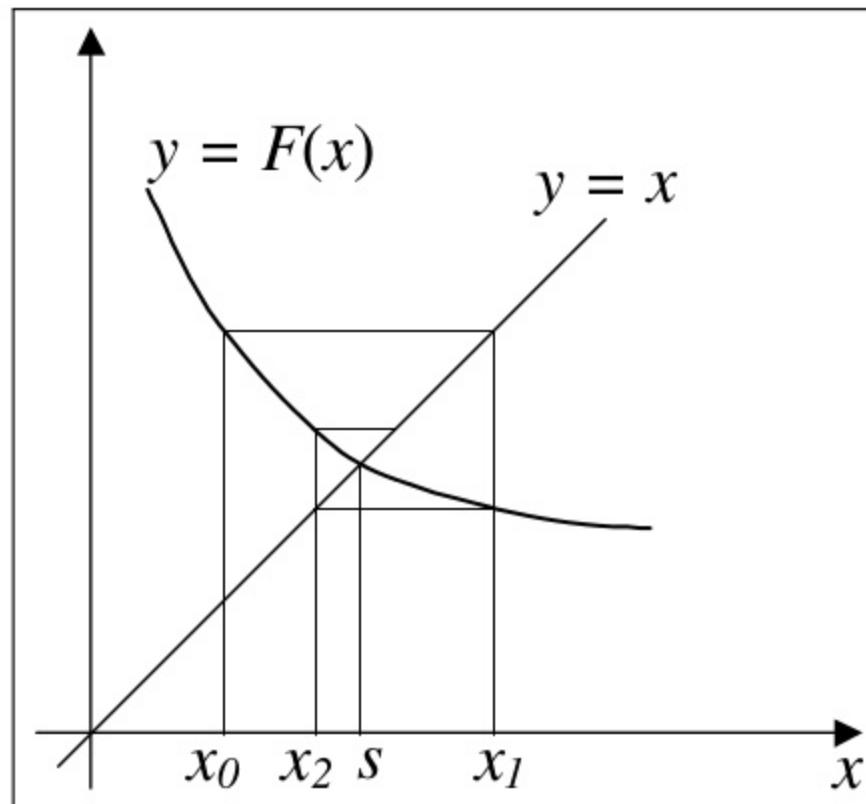
Inicialização	Escolher x_0
Repetir	$x_{n+1} = F(x_n)$
Até	<i>verificar critério de paragem</i>

Método iterativo simples: comportamento



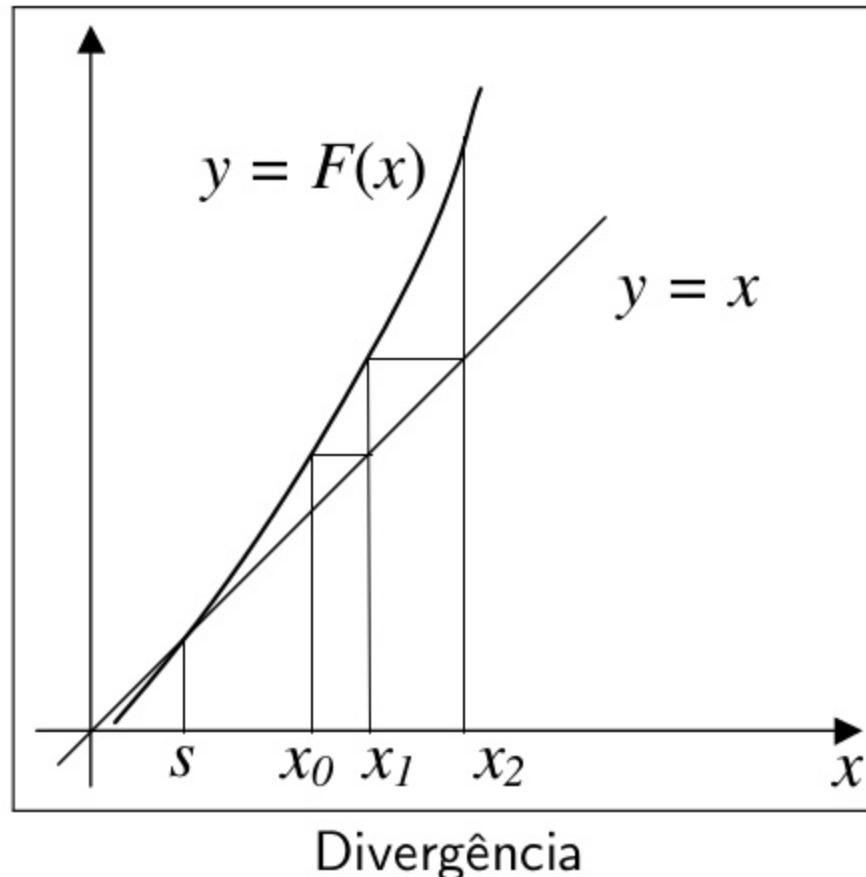
Convergência monótona

Método iterativo simples: comportamento



Convergência “alternada”

Método iterativo simples: comportamento



Método iterativo simples: convergência

Teorema

Se F é continuamente diferenciável em $[a, b]$, $\max_{x \in [a, b]} |F'(x)| < 1$ e existe $s \in [a, b]$ tal que $s = F(s)$, então, para qualquer valor inicial $x_0 \in [a, b]$, a sucessão gerada pelo método iterativo simples converge para s (s será único! porquê?).

Método iterativo simples: erro

Majoração do erro

$$|x_{n+1} - s| \leq \frac{1-L}{L} |x_{n+1} - x_n|$$

Critério de paragem

$$\varepsilon_{n+1} = \frac{1-L}{L} |x_{n+1} - x_n| \leq \delta \quad \Rightarrow \quad |x_{n+1} - s| \leq \delta$$

Método iterativo simples: exemplo

Determinar, com um erro absoluto inferior a 5×10^{-5} , o zero da função
 $f(x) = 1 + x + e^x$ no intervalo $[-2, -1]$.

Método iterativo simples: exemplo

n	x_n	$x_{n+1} = F(x_n)$	ε_{n+1}
0	-2.00000	-1.13534	$+5.0 \times 10^{-1}$
1	-1.13534	-1.32131	$+1.1 \times 10^{-1}$
2	-1.32131	-1.26678	$+3.2 \times 10^{-2}$
3	-1.26678	-1.28174	$+8.7 \times 10^{-3}$
4	-1.28174	-1.27756	$+2.4 \times 10^{-3}$
5	-1.27756	-1.27872	$+6.8 \times 10^{-4}$
6	-1.27872	-1.27839	$+1.9 \times 10^{-4}$
7	-1.27839	-1.27848	$+5.2 \times 10^{-5}$
8	-1.27848	-1.27846	$+1.5 \times 10^{-5}$

Vamos agora ver ...

1 Erros

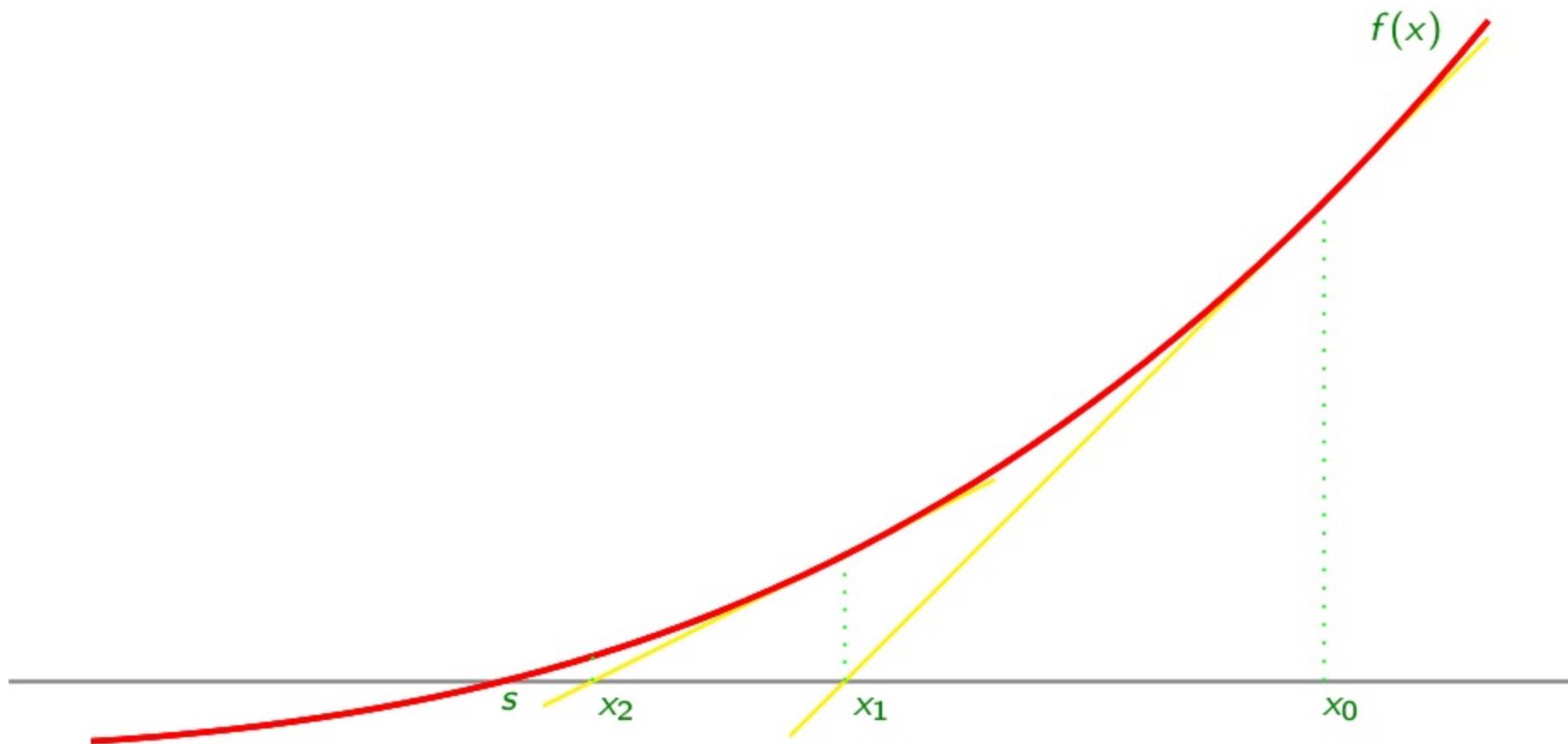
2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- Método da falsa posição
- Método iterativo simples
- **Método de Newton**
- Método da Secante
- Ordem de convergência: definição
- Raízes de Polinómios

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

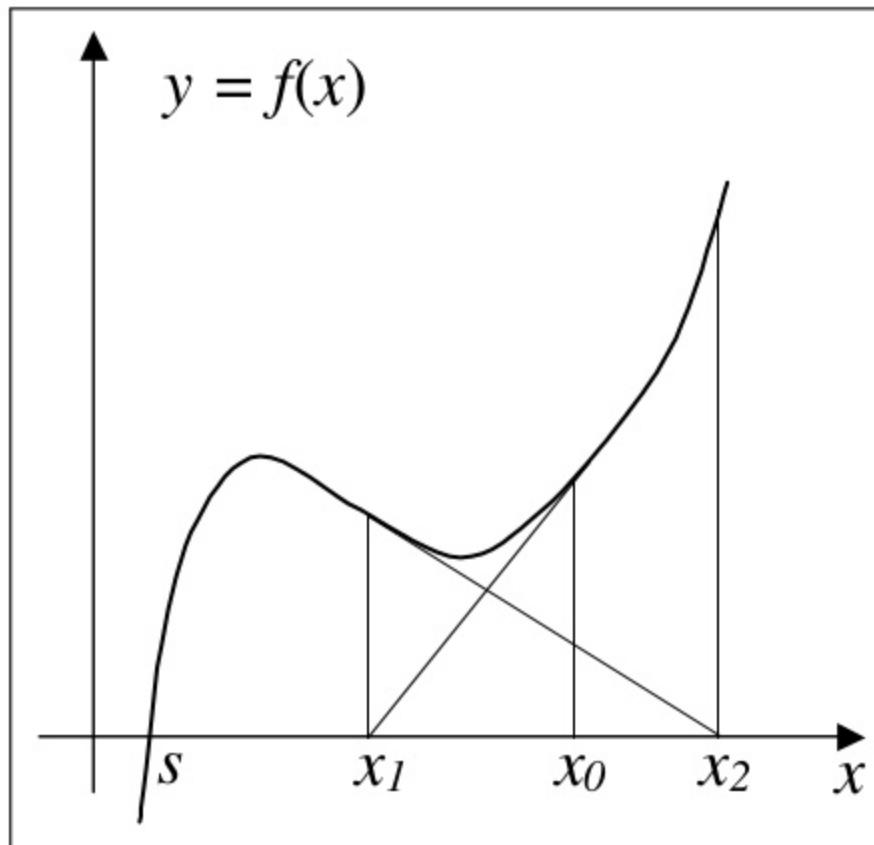
Método de Newton



Método de Newton: algoritmo

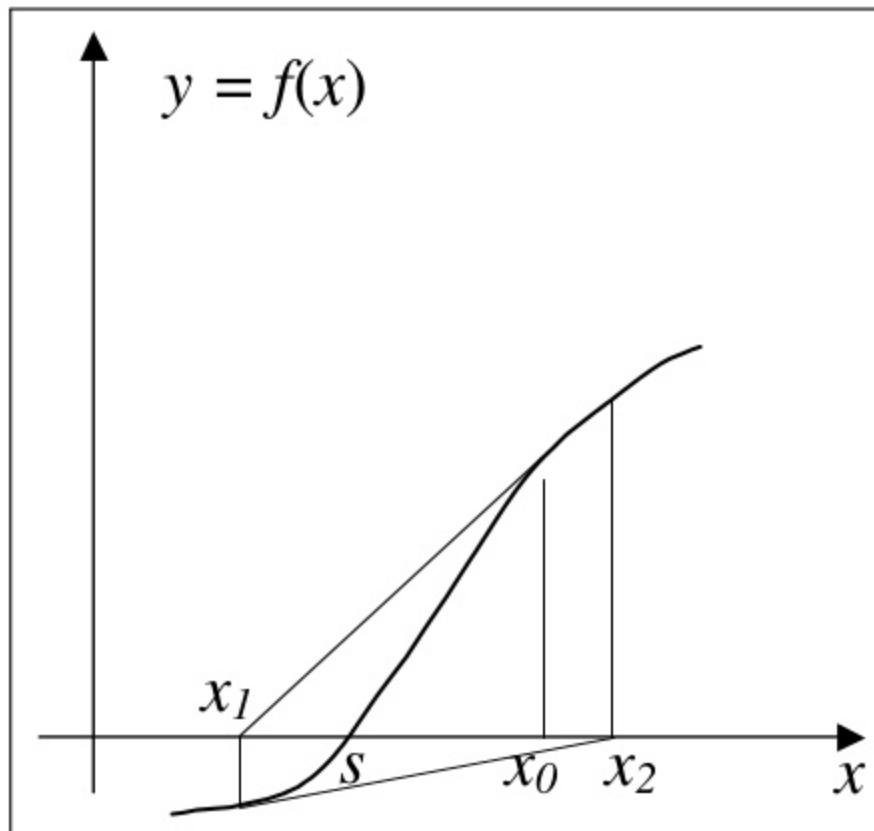
Inicialização	Escolher x_0
Repetir	$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
Até	<i>verificar critério de paragem</i>

Método de Newton: divergência



Anulamento da derivada

Método de Newton: divergência



Mudança de concavidade

Método de Newton: convergência

Teorema

Seja $f \in C^2([a, b]; \mathbb{R})$ tal que $f'(x) \neq 0$, e $f''(x) \leq 0$ ou $f''(x) \geq 0$ em $[a, b]$. Seja ainda s o (único) zero de f em $[a, b]$. Então a sucessão gerada pelo método de Newton converge para s sempre que o ponto inicial $x_0 \in [a, b]$ satisfizer $f(x_0)f''(x_0) \geq 0$. Mais ainda, a sucessão gerada é monótona.

Método de Newton: erro

Majoração do erro

$$|x_{n+1} - s| \leq \frac{M_2}{2m_1} |x_{n+1} - x_n|^2$$

Critério de paragem

$$\varepsilon_{n+1} = \frac{M_2}{2m_1} |x_{n+1} - x_n|^2 \leq \delta \quad \Rightarrow \quad |x_{n+1} - s| \leq \delta$$

Método de Newton: exemplo

Determinar, com um erro absoluto inferior a 5×10^{-6} , o zero da função
 $f(x) = 1 + x + e^x$, que se sabe estar no intervalo $[-2, -1]$.

Método de Newton: exemplo

n	x_n	$f(x_n)$	$f'(x_n)$	x_{n+1}	ε_{n+1}
0	-1.00000	$+3.68 \times 10^{-1}$	+1.368	-1.26894	$+1.2 \times 10^{-1}$
1	-1.26894	$+1.22 \times 10^{-2}$	+1.281	-1.27845	$+1.5 \times 10^{-5}$
2	-1.27845	$+1.27 \times 10^{-5}$	+1.278	-1.27846	$+1.6 \times 10^{-11}$

Solução: $s \simeq -1.27846$ (todos os algarismos exactos)

Método de Newton: convergência (2)

Teorema

Sejam $f \in C^2([a, b]; \mathbb{R})$ e s um zero de f em $[a, b]$ tal que $f'(s) \neq 0$.
Então existe $\delta > 0$ tal que a sucessão $\{x_n\}$ gerada pelo método de Newton converge para s sempre que $x_0 \in [s - \delta, s + \delta]$.

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- Método da falsa posição
- Método iterativo simples
- Método de Newton
- **Método da Secante**
- Ordem de convergência: definição
- Raízes de Polinómios

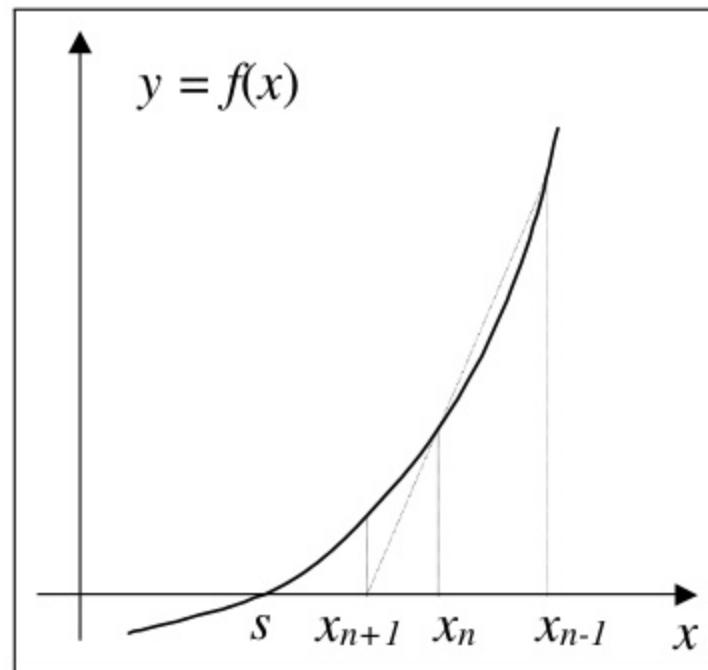
3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

Método da secante

Semelhante ao método de Newton

Tangente ao gráfico substituída pela secante nos dois últimos pontos



$$x_{n+1} = \frac{x_{n-1}f(x_n) - x_nf(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$

Método da secante: algoritmo

Inicialização	Escolher x_{-1} e x_0
Repetir	$x_{n+1} = \frac{x_{n-1}f(x_n) - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$
Até	<i>verificar critério de paragem</i>

Método da secante: convergência

Teorema

Seja $f \in C^2([a, b]; \mathbb{R})$ tal que $f'(x) \neq 0$, e $f''(x) \leq 0$ ou $f''(x) \geq 0$ em $[a, b]$. Seja ainda s o (único) zero de f em $[a, b]$.

Então a sucessão gerada pelo método da secante converge para s sempre que os pontos iniciais $x_{-1}, x_0 \in [a, b]$ satisfizerem $f(x_{-1})f''(x_{-1}) \geq 0$ e $f(x_0)f''(x_0) \geq 0$. Mais ainda, a sucessão gerada é monótona.

Método da secante: erro

Majoração do erro

$$|x_{n+1} - s| \leq \frac{M_2}{2m_1} |x_{n+1} - x_n| \cdot |x_{n+1} - x_{n-1}|$$

Critério de paragem

$$\varepsilon_{n+1} = \frac{M_2}{2m_1} |x_{n+1} - x_n| \cdot |x_{n+1} - x_{n-1}| \leq \delta \quad \Rightarrow \quad |x_{n+1} - s| \leq \delta$$

Método da secante: exemplo

Determinar, com um erro absoluto inferior a 5×10^{-6} , o (único) zero da função $f(x) = 1 + x + e^x$, que se sabe estar no intervalo $[-2, -1]$.

Método da secante: exemplo

n	x_{n-1}	x_n	x_{n+1}	$f(x_{n+1})$	ε_{n+1}
0	-1.00000	-1.10000	-1.27249	$+7.65 \times 10^{-3}$	7.6×10^{-3}
1	-1.10000	-1.27249	-1.27834	$+1.55 \times 10^{-4}$	1.7×10^{-4}
2	-1.27249	-1.27834	-1.27846	$+1.01 \times 10^{-7}$	1.2×10^{-7}

Solução: $s \simeq -1.27846$ (com todos os algarismos exactos)

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- Método da falsa posição
- Método iterativo simples
- Método de Newton
- Método da Secante
- **Ordem de convergência: definição**
- Raízes de Polinómios

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

Ordem de convergência dum método iterativo

Considere um método iterativo tal que:

- função de recorrência: F
- ponto fixo: s ($s = F(s)$)
- $F'(s) = F''(s) = \dots = F^{(p-1)}(s) = 0$
- $F^{(p)}(s) \neq 0$
- $x_{n+1} = F(x_n)$
- $x_n \rightarrow s$

o método têm **convergência de ordem p**

Ordem de convergência

$$\Delta_{n+1} \propto \Delta_n^p$$

$p = 1 \rightarrow$ convergência linear ou de 1^a ordem

$p = 2 \rightarrow$ convergência quadrática ou de 2^a ordem

Ordem de convergência: justificação

O desenvolvimento em série de F em torno de s

$$\begin{aligned} F(x_n) &= F(s) + F'(s)(x_n - s) + \dots + F^{(p-1)}(s)(x_n - s)^{p-1}/(p-1)! + \\ &\quad + F^{(p)}(\xi)(x_n - s)^p/p! \\ &= s + F^{(p)}(\xi)(x_n - s)^p/p! \end{aligned}$$

Seja $\Delta_n = s - x_n$, obtemos

$$|\Delta_{n+1}| = |x_{n+1} - s| = |F(x_n) - s| = \left| \frac{F^{(p)}(\xi)}{p!} \Delta_n^p \right|$$

ou seja

$$\Delta_{n+1} \propto \Delta_n^p$$

Ordem de convergência: exemplo

Considere dois métodos iterativos A e B , para os quais se tem $\Delta_{n+1} = 10^{-2}\Delta_n$ e $\Delta_{n+1} = \Delta_n^2$, respectivamente.

Se em ambos os casos se tiver $\Delta_0 = 10^{-1}$, determine a evolução do erro para as primeiras 6 iterações de cada método.

Ordem de convergência: exemplo

n	$\Delta_n(\text{mét. } A)$	$\Delta_n(\text{mét. } B)$
0	10^{-1}	10^{-1}
1	10^{-3}	10^{-2}
2	10^{-5}	10^{-4}
3	10^{-7}	10^{-8}
4	10^{-9}	10^{-16}
5	10^{-11}	10^{-32}
6	10^{-13}	10^{-64}

Método iterativo simples: convergência linear

$$1 + x + e^x = 0, \quad x \in [-2, -1] \quad \Rightarrow \quad x = F(x) = -1 - e^x$$

n	x_n	$x_{n+1} = F(x_n)$	Δ_{n+1}	Δ_{n+1}/Δ_n
0	-2.00000	-1.13534	-1.4×10^{-1}	-
1	-1.13534	-1.32131	$+4.3 \times 10^{-2}$	-0.299
2	-1.32131	-1.26678	-1.2×10^{-2}	-0.273
3	-1.26678	-1.28174	$+3.3 \times 10^{-3}$	-0.280
4	-1.28174	-1.27756	-9.1×10^{-4}	-0.278
5	-1.27756	-1.27872	$+2.5 \times 10^{-4}$	-0.279
6	-1.27872	-1.27839	-7.1×10^{-5}	-0.278
7	-1.27839	-1.27848	$+2.0 \times 10^{-5}$	-0.278
8	-1.27848	-1.27846	-5.5×10^{-6}	-0.278

$$F'(x) = -e^x \quad F'(-1.27846) = -0.27846$$

Método de Newton: convergência quadrática

$$1 + x + e^x = 0, \quad x \in [-2, -1]$$

n	x_n	$f(x_n)$	$f'(x_n)$	x_{n+1}	Δ_{n+1}	Δ_{n+1}/Δ_n^2
0	-1.00000	$+3.68 \times 10^{-1}$	+1.368	-1.26894	-9.5×10^{-3}	-
1	-1.26894	$+1.22 \times 10^{-2}$	+1.281	-1.27845	-9.9×10^{-6}	-0.1094
2	-1.27845	$+1.27 \times 10^{-5}$	+1.278	-1.27846	-1.1×10^{-11}	-0.1089

Método de Newton: convergência quadrática

A função de recorrência neste método é

$$F(x) = x - f(x)/f'(x)$$

A primeira derivada

$$F'(x) = 1 - \frac{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

Como $f(s) = 0$, temos que $F'(s) = 0$.

A 2a derivada

$$F''(s) = \dots = \frac{f''(s)}{f'(s)}$$

é em geral não nula. Logo o método é de 2a ordem.

Ordem de convergência duma sucessão

$\{e_n\}$ convergente para 0. Se existirem $p, K > 0$ tais que

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^p} = K$$

diz-se que $\{e_n\}$ tem **ordem de convergência p** .

n elevado $\Rightarrow |e_{n+1}| \simeq K|e_n|^p$

$p = 1 \rightarrow$ convergência **linear**

$p > 1 \rightarrow$ convergência **supralinear**

$p = 2 \rightarrow$ convergência **quadrática**

Ordem de convergência: método da secante

Teorema

Nas condições suficientes apresentadas para a convergência do método da secante, pode ainda afirmar-se que sucessão dos erros de aproximação gerada por este método tem convergência de ordem

$$\frac{1 + \sqrt{5}}{2} \quad (\approx 1.618).$$

Método da secante: ordem de convergência

$$1 + x + e^x = 0, \quad x \in [-2, -1]$$

n	x_{n-1}	x_n	x_{n+1}	$f(x_{n+1})$	ε_{n+1}	$\varepsilon_{n+1}/\varepsilon_n^p$
0	-1.00000	-1.10000	-1.27249	$+7.65 \times 10^{-3}$	$+1.5 \times 10^{-1}$	-
1	-1.10000	-1.27249	-1.27834	$+1.55 \times 10^{-4}$	$+2.1 \times 10^{-2}$	0.479
2	-1.27249	-1.27834	-1.27846	$+1.01 \times 10^{-7}$	$+5.0 \times 10^{-4}$	0.255
3	-1.27834	-1.27846	-1.27846	$+1.33 \times 10^{-12}$	$+1.7 \times 10^{-6}$	0.377
4	-1.27846	-1.27846	-1.27846	$+1.33 \times 10^{-12}$	$+1.4 \times 10^{-10}$	0.296
5	-1.27846	-1.27846	-1.27846	$+1.33 \times 10^{-12}$	$+4.0 \times 10^{-17}$	0.344

$$p = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$$

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

- Método das bissecções sucessivas
- Método da falsa posição
- Método iterativo simples
- Método de Newton
- Método da Secante
- Ordem de convergência: definição
- Raízes de Polinómios

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

Raízes de polinómios

$p(x) \rightarrow$ polinómio de coeficientes reais de grau n

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0, \quad a_i \in \mathbb{R} \wedge a_n \neq 0$$

Teorema

O polinómio $p(x)$ tem n raízes (contando com a multiplicidade). Estas raízes podem ser reais ou complexas, caso em quem surgem em pares conjugados.

Teorema

Sejam r_1, r_2, \dots, r_n as n raízes do polinómio de grau n $p(x)$. Então, $p(x)$ pode ser escrito como

$$p(x) = a_n(x - r_1)(x - r_2) \cdots (x - r_n)$$

Polinómios: Regra de Ruffini

$p(x) = (x - s)q(x) + r$ onde

$q(x) = b_{n-1}x^{n-1} + \dots + b_1x + b_0$ é o quociente

$r \in \mathbb{C}$ é o resto

s	a_n	a_{n-1}	\dots	a_1	a_0
	sb_{n-1}	\dots	sb_1	sb_0	
	b_{n-1}	b_{n-2}	\dots	b_0	r

Polinómios: “Regra de Ruffini” generalizada

Generalizando, $p(x) = (x^2 - \alpha x - \beta)q(x) + (rx + s)$, onde

$q(x) = b_{n-2}x^{n-2} + \dots + b_1x + b_0$ é o quociente

$rx + s$ é o resto

	a_n	a_{n-1}	a_{n-2}	\dots	a_2	a_1	a_0
β			βb_{n-2}	\dots	βb_2	βb_1	βb_0
α		αb_{n-2}	αb_{n-3}	\dots	αb_1	αb_0	
	b_{n-2}	b_{n-3}	b_{n-4}	\dots	b_0		r

Localização de raízes de polinómios

Regra dos sinais de Descartes I

O número de raízes reais positivas do polinómio $p(x)$ é igual, ou menor pela diferença de um número par, ao número de mudanças de sinal dos seus coeficientes não nulos.

Regra dos sinais de Descartes II

O número de raízes reais negativas do polinómio $p(x)$ é igual, ou menor pela diferença de um número par, ao número de mudanças de sinal dos coeficientes não nulos de $p(-x)$.

Localização de raízes de polinómios

Exemplo:

$$p(x) = x^5 - 5x^4 + 10x^3 - 6x^2 - 12x + 16$$

tem 4 mudanças de sinal

$$p(-x) = -x^5 - 5x^4 - 10x^3 - 6x^2 + 12x + 16$$

tem uma mudança de sinal.

Logo as raízes do polinómio serão:

- 1 real negativa e 4 reais positiva, ou
- 1 real negativa, 2 reais positivas e 2 complexas, ou
- 1 real negativa, 0 reais positivas, 4 complexas.

Localização de raízes de polinómios

Teorema

Todos os zeros do polinómio $p(x)$ situam-se no interior do círculo (no plano complexo) centrado na origem e de raio

$$1 + \max_{0 \leq k \leq n-1} \left| \frac{a_k}{a_n} \right|$$

Polinómios: determinação de todas as raízes

Conhecendo k raízes r_1, \dots, r_k de $p(x)$, as restantes $n - k$ raízes podem ser obtidas como sendo as raízes de $q(x)$ que é o polinómio quociente da divisão de $p(x)$ pelo polinómio $(x - r_1) \cdots (x - r_k)$.

Estratégia

Ir obtendo raízes, uma de cada vez, e dividir o polinómio até se obter um polinómio de grau 1 ou 2, casos em que a determinação de raízes é trivial.

Método de Newton para polinómios

A expressão de recorrência é

$$x_{k+1} = x_k - \frac{p(x_k)}{p'(x_k)}$$

$x_0 \in \mathbb{C}$ é escolhido como uma das soluções de

$$a_n x^2 + a_{n-1} x + a_{n-2} = 0$$

Método de Newton para polinómios: exemplo

Determinar todas as raízes do polinómio

$$p(x) = x^4 + 2x^3 + 10x^2 + 24x + 80$$

aplicando o método de Newton.

Método de Newton para polinómios: exemplo

Determinação x_0

$$x_0^2 + 2x_0 + 10 = 0 \Leftrightarrow x_0 = -1 \pm 3j$$

k	x_k	$p(x_k)$	$p'(x_k)$
0	$-1.00 + j3.00$	$56.00 + j72.00$	$60.00 - j48.00$
1	$-0.98 + j1.81$	$43.35 + j23.00$	$25.40 + j12.07$
2	$-2.73 + j1.74$	$-2.57 - j69.73$	$13.53 + j111.88$
3	$-2.11 + j1.79$	$8.26 - j15.13$	$32.70 + j63.12$
4	$-1.97 + j1.99$	$1.84 + j0.91$	$47.11 + j54.20$
5	$-2.00 + j2.00$	$-0.02 - j0.02$	$48.01 + j56.03$
6	$-2.00 + j2.00$	≈ 0	

$$r_1 = -2 + 2j \quad r_2 = -2 - 2j$$

Depois, determinar as raízes do polinómio:

$$\frac{p(x)}{(x - r_1)(x - r_2)} = \frac{p(x)}{x^2 + 4x + 8} = x^2 - 2x + 10$$

Método de Lin

Construir sucessões $\{p_i\}$ e $\{q_i\}$ convergentes para \bar{p} e \bar{q} de forma a que $x^2 + \bar{p}x + \bar{q}$ seja divisor de $p(x)$.

Em cada iteração é realizada a divisão polinomial

$$\frac{p(x)}{x^2 + p_i x + q_i} = q(x) + \frac{rx + s}{x^2 + p_i x + q_i}$$

que é parada após se obter de $q(x)$, substituindo-se $p_i \rightarrow p_{i+1}$ e $q_i \rightarrow q_{i+1}$ de modo a anular o resto $rx + s$.

Método de Lin

$$\begin{array}{c|ccccccccc}
 & a_n & a_{n-1} & \dots & a_2 & & a_1 & & a_0 \\
 -q_i & & & & & -q_i b_2 & & -q_i b_1 & \\
 -p_i & & -p_i b_{n-2} & \dots & -p_i b_1 & & -p_{i+1} b_0 & & \\
 \hline
 & b_{n-2} & b_{n-3} & \dots & b_0 & || & 0 & & 0
 \end{array}$$

$$\begin{cases} a_1 - q_i b_1 - p_{i+1} b_0 = 0 \\ a_0 - q_{i+1} b_0 = 0 \end{cases}$$

Método de Lin: exemplo

Determinar os zeros de

$$p(x) = x^4 - 6x^3 + 18x^2 - 24x + 16$$

pelo método de Lin.

Método de Lin: exemplo

k	p_k	q_k	quociente da divisão $\frac{p(x)}{x^2 + p_k x + q_k}$
0	1	1	$x^2 - 7x + 24$
1	-0.708333	0.666667	$x^2 - 5.2917x + 13.5851$
2	-1.506965	1.177764	$x^2 - 4.4930x + 10.0514$
3	-1.861262	1.591820	$x^2 - 4.1387x + 8.7049$
4	-2.000237	1.838044	$x^2 - 3.9998x + 8.1615$
5	-2.039857	1.960428	$x^2 - 3.9601x + 7.9614$
6	-2.039382	2.009685	$x^2 - 3.9606x + 7.9131$

$x^4 - 6x^3 + 18x^2 - 24x + 16$ é divisível por $x^2 - 2x + 2$

Um novo capítulo ...

- 1 Erros
- 2 Equações não Lineares
- 3 Sistemas de equações não lineares
- 4 Aproximação de funções
- 5 Interpolação polinomial
- 6 Integração numérica
- 7 Sobre normas de vectores e matrizes
- 8 Sistemas de equações lineares

Sistemas de equações não lineares

n equações nas n variáveis x_1, x_2, \dots, x_n :

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

onde $f_1, f_2, \dots, f_n : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

Sistemas de equações não lineares

Definindo $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ e $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ como

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix}$$

o sistema pode ser escrito como

$$\boxed{F(x) = 0}$$

Sistemas de equações não lineares

Métodos iterativos

- método iterativo simples (iteração de ponto fixo)
- método de Newton
- ...

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

- Método iterativo simples
- Método de Newton

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

6 Integração numérica

7 Sobre normas de vectores e matrizes

Método iterativo simples

Reescrever o sistema de equações $F(x) = 0$ na forma

$$x = G(x), \quad G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$$

ou seja

$$\begin{cases} x_1 = g_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ x_2 = g_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ x_n = g_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases}$$

Método iterativo simples

- 1 Escolher um ponto inicial $x_{(0)}$
- 2 Determinar os termos da sucessão $\{x_{(k)}\}$ pela expressão de recorrência

$$x_{(k+1)} = G(x_{(k)})$$

$x_{(k)} \rightarrow s$ tal que $s = G(s)$ (ponto fixo de G) $\Leftrightarrow F(s) = 0$

Método iterativo simples: exemplo

Considere o sistema de equações

$$\begin{cases} 4x_1 - \ln(x_1 x_2) - 8 = 0 \\ 2x_1 - 4x_2 + \sqrt{x_1 x_2} - 3 = 0 \end{cases}$$

- (a) Reescreva-o numa forma adequada para aplicação do método iterativo simples.
- (b) Efetue 11 iterações deste método partindo do ponto $(1.5, 1)$.

Método iterativo simples: exemplo

$$\begin{cases} x_1 = [\ln(x_1 x_2) + 8]/4 = 0 \\ x_2 = [2x_1 + \sqrt{x_1 x_2} - 3]/4 \end{cases}$$

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$g_1(x_{1,(k)}, x_{2,(k)})$	$g_2(x_{1,(k)}, x_{2,(k)})$
0	1.50000	1.00000	2.10137	0.30619
1	2.10137	0.30619	1.88976	0.50122
2	1.88976	0.50122	1.98643	0.43819
3	1.98643	0.43819	1.96531	0.47646
4	1.96531	0.47646	1.98357	0.47457
5	1.98357	0.47457	1.98489	0.48434
6	1.98489	0.48434	1.99015	0.48757
7	1.99015	0.48757	1.99247	0.49134
8	1.99247	0.49134	1.99469	0.49359
9	1.99469	0.49359	1.99611	0.49541
10	1.99611	0.49541	1.99721	0.49666

Método iterativo simples: convergência

Teorema

Seja $D \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto fechado e convexo. Seja $G : D \rightarrow \mathbb{R}^n$ de classe C^1 . Se

- i) existe um número $L < 1$ tal que

$$\max_j \left| \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right| \leq L \quad \forall i = 1 \dots n \quad \forall x \in D$$

- ii) $G(D) \subset D$

então

- i) existe um e só um $z \in D$ tal que $z = G(z)$
- ii) o método iterativo simples converge para z , $\forall x_{(0)} \in D$
- iii) verifica-se que

$$\|z - x_{(k)}\| \leq \frac{L}{1-L} \|x_{(k)} - x_{(k-1)}\|$$

Método iterativo simples: exemplo 2

Considere o sistema de equações definido em \mathbb{R}^2 .

$$\begin{cases} 4x_1 - \cos(x_1 + x_2) = 4, \\ 3x_2 - \sin(x_1 + x_2) = 6. \end{cases}$$

- Verifique que o sistema tem uma e uma só solução.
- Aplicando o método iterativo simples, determine tal solução com um erro máximo de 10^{-5} na soma dos módulos de cada uma das componentes do erro (norma 1).

Método iterativo simples: exemplo 2

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$g_1(x_{1,(k)}, x_{2,(k)})$	$g_2(x_{1,(k)}, x_{2,(k)})$	ε_{k+1}
0	1.000000	1.000000	0.895963	2.303099	2.0
1	0.895963	2.303099	0.750413	1.980854	6.5×10^{-1}
2	0.750413	1.980854	0.770752	2.132969	2.4×10^{-1}
3	0.770752	2.132969	0.757040	2.078545	9.5×10^{-2}
4	0.757040	2.078545	0.761614	2.100418	3.7×10^{-2}
5	0.761614	2.100418	0.759706	2.091978	1.4×10^{-2}
6	0.759706	2.091978	0.760433	2.095288	5.7×10^{-3}
7	0.760433	2.095288	0.760146	2.093998	2.2×10^{-3}
8	0.760146	2.093998	0.760257	2.094502	8.6×10^{-4}
9	0.760257	2.094502	0.760214	2.094305	3.4×10^{-4}
10	0.760214	2.094305	0.760231	2.094382	1.3×10^{-4}
11	0.760231	2.094382	0.760224	2.094352	5.1×10^{-5}
12	0.760224	2.094352	0.760227	2.094364	2.0×10^{-5}
13	0.760227	2.094364	0.760226	2.094359	7.8×10^{-6}

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

- Método iterativo simples
- Método de Newton

4 Aproximação de funções

5 Interpolação polinomial

6 Integração numérica

7 Sobre normas de vectores e matrizes

Método de Newton

Sendo $J_F(x)$ não singular tem-se

$$F(x) = 0 \Leftrightarrow [J_F(x)]^{-1}F(x) = 0$$

ou ainda

$$x = x - [J_F(x)]^{-1}F(x)$$

Método de Newton

Expressão de recorrência

$$x_{(k+1)} = x_{(k)} - [J_F(x_{(k)})]^{-1} F(x_{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots$$

Determinação de $x_{(k+1)}$

- ① calcular $F(x_{(k)})$
- ② calcular $J_F(x_{(k)})$
- ③ calcular $v_{(k)}$ resolvendo o SEL $J_F(x_{(k)}) v_{(k)} = F(x_{(k)})$
- ④ calcular $x_{(k+1)} = x_{(k)} - v_{(k)}$

Método de Newton: caso \mathbb{R}^2

Para o sistema de equações $\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = 0 \\ f_2(x_1, x_2) = 0 \end{cases}$,

$$\text{a matriz jacobiana } J_F(x_1, x_2) = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} \end{bmatrix}$$

$$\text{tem como inversa } J_F^{-1}(x_1, x_2) = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}.$$

Logo

$$\begin{bmatrix} x_{1,(k+1)} \\ x_{2,(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1,(k)} \\ x_{2,(k)} \end{bmatrix} - J_F^{-1} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}(x_{1,(k)}, x_{2,(k)})$$

$$\boxed{\begin{bmatrix} x_{1,(k+1)} \\ x_{2,(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_{1,(k)} \\ x_{2,(k)} \end{bmatrix} - \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} df_1 - bf_2 \\ -cf_1 + af_2 \end{bmatrix}(x_{1,(k)}, x_{2,(k)})}$$

Método de Newton: convergência

Teorema

Sejam F de classe C^2 e z tal que $F(z) = 0$.

Se $\det(J_F(z)) \neq 0$ a sucessão gerada pelo método de Newton converge para z qualquer que seja o ponto inicial $x_{(0)}$ suficientemente próximo de z . Verifica-se ainda que existe uma constante positiva c tal que

$$\|z - x_{(k)}\| \leq c \|z - x_{(k-1)}\|^2,$$

ou seja, a convergência é quadrática.

Método de Newton: exemplo

Aplique o método de Newton para resolver o sistema de equações

$$\begin{cases} 4x_1x_2^2 - 2x_1^2x_2 + 2 = 0 \\ 2x_1 - 4x_2 + \sqrt{x_1x_2} - 3 = 0. \end{cases}$$

Parta do ponto $(1.5, 1)$ e termine a aplicação do método assim que da diferença entre duas estimativas consecutivas seja inferior 5×10^{-6} em qualquer das componentes do erro (norma ∞)

Método de Newton: exemplo

k	$x_{\mathbf{1},(k)}$	$x_{\mathbf{2},(k)}$	$v_{\mathbf{1},(k)}$	$v_{\mathbf{2},(k)}$	$x_{\mathbf{1},(k+1)}$	$x_{\mathbf{2},(k+1)}$	$\ x_{(k+1)} - x_{(k)}\ _\infty$
0	1.500000	1.000000	-0.793659	0.255024	2.293659	0.744976	7.9×10^{-1}
1	2.293659	0.744976	0.360263	0.290966	1.933395	0.454010	3.6×10^{-1}
2	1.933395	0.454010	-0.066606	-0.046156	2.000001	0.500166	6.7×10^{-2}
3	2.000001	0.500166	0.000001	0.000166	2.000000	0.500000	1.7×10^{-4}
4	2.000000	0.500000	0.000000	0.000000	2.000000	0.500000	7.3×10^{-8}

Método de Newton: algumas dificuldades

- Cálculo de J_F e resolução do sistema $J_F \cdot v = F$

→ aproximar numericamente as derivadas
→ não recalcular J_F em todas as iterações

- Dificuldades de convergência

$$\rightarrow x_{(k+1)} = x_{(k)} - \alpha_k \cdot [J_F(x_{(k)})]^{-1} F(x_{(k)})$$

α_k tal que $\|F(x_{(k+1)})\| \leq \|F(x_{(k)})\|$

→ ...

Um novo capítulo ...

- 1 Erros
- 2 Equações não Lineares
- 3 Sistemas de equações não lineares
- 4 Aproximação de funções
- 5 Interpolação polinomial
- 6 Integração numérica
- 7 Sobre normas de vectores e matrizes
- 8 Sistemas de equações lineares

Aproximação de funções

Qual a recta $y = ax + b$ que melhor aproxima um dado conjunto de pontos (x_i, y_i) ?

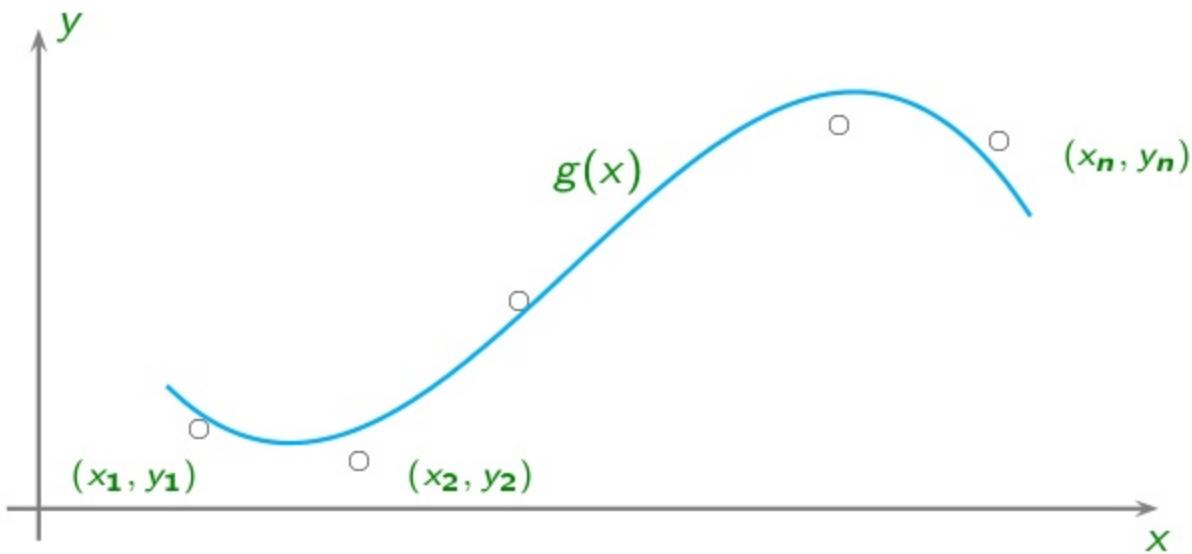
E se for uma parábola $y = ax^2 + bx + c$?

E se for uma função $y = a \sin x + b \cos x$?

Como é que estes problemas se relacionam com projectar pontos em planos?

:

Aproximação



Dados os pontos $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$

Determinar uma função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$g(x_i)$ seja próximo de y_i

Funções aproximantes

A função aproximante depende de constantes c_1, c_2, \dots, c_k

$$g(x) = F(x; c_1, c_2, \dots, c_k)$$

O problema de aproximação consiste em determinar o vector de parâmetros (c_1, \dots, c_k) tal que a função g **melhor aproxime** os pontos dados.

Critérios de aproximação

Para determinar a função que **melhor aproxima** os pontos dados é necessário definir um **critério** que permita comparar funções aproximantes.

Este critério deverá depender dos **desvios** d_i definidos por

$$d_i = y_i - F(x_i; c_1, \dots, c_k) \quad i = 1, \dots, n$$

e deverá garantir que a função aproximante torne os desvios “**pequenos**”.

Critérios de aproximação

Alguns dos critérios utilizados são

① minimizar $\sum_{i=1}^n |d_i|$

② minimizar $\max_{1 \leq i \leq n} |d_i|$

③ minimizar $\sum_{i=1}^n d_i^2$

Funções aproximantes

Em muitas situações, $F(x; c_1, \dots, c_k)$ é escolhida como uma **combinação linear** de funções ϕ_1, \dots, ϕ_k

$$F(x; c_1, \dots, c_k) = c_1\phi_1(x) + \cdots + c_k\phi_k(x)$$

Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

- Aproximação dos mínimos quadrados
- Aproximação em espaços vectoriais
- Sistemas Sobredeterminados

5 Interpolação polinomial

6 Integração numérica

Aproximação dos mínimos quadrados

Dados os pares $(x_i, y_i)_{i=1}^n$ e as funções ϕ_1, \dots, ϕ_k , calcular os parâmetros c_1, \dots, c_k que minimizam

$$e(c_1, \dots, c_k) = \sum_{i=1}^n d_i^2 = \sum_{i=1}^n [y_i - (c_1\phi_1(x_i) + \dots + c_k\phi_k(x_i))]^2$$

isto é, que **minimizam a soma dos quadrados dos desvios**.

Mínimos quadrados: equações normais

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 \sum_{i=1}^n \phi_1^2(x_i) + c_2 \sum_{i=1}^n \phi_1(x_i)\phi_2(x_i) + \cdots + c_k \sum_{i=1}^n \phi_1(x_i)\phi_k(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i \phi_1(x_i) \\ c_1 \sum_{i=1}^n \phi_2(x_i)\phi_1(x_i) + c_2 \sum_{i=1}^n \phi_2^2(x_i) + \cdots + c_k \sum_{i=1}^n \phi_2(x_i)\phi_k(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i \phi_2(x_i) \\ \dots \dots \dots \\ c_1 \sum_{i=1}^n \phi_k(x_i)\phi_1(x_i) + c_2 \sum_{i=1}^n \phi_k(x_i)\phi_2(x_i) + \cdots + c_k \sum_{i=1}^n \phi_k^2(x_i) = \sum_{i=1}^n y_i \phi_k(x_i) \end{array} \right.$$

MQ: aproximação por uma recta

As funções aproximantes serão da forma $g(x) = c_1 + c_2x$, ou seja, $k = 2$, $\phi_1(x) = 1$ e $\phi_2(x) = x$.

O sistema de equações a resolver é

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n 1 & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \end{bmatrix}$$

MQ: aproximação por uma recta

Os somatórios envolvidos são facilmente determinados com base na tabela

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$
x_1	y_1	x_1^2	$x_1 y_1$
x_2	y_2	x_2^2	$x_2 y_2$
...
x_n	y_n	x_n^2	$x_n y_n$
$\sum x_i$	$\sum y_i$	$\sum x_i^2$	$\sum x_i y_i$

MQ: aproximação por uma parábola

As funções aproximantes são do tipo $g(x) = c_1 + c_2x + c_3x^2$, ou seja, $k = 3$, $\phi_1(x) = 1$, $\phi_2(x) = x$ e $\phi_3(x) = x^2$.

O sistema de equações a resolver é

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n 1 & \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i^3 \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 & \sum_{i=1}^n x_i^3 & \sum_{i=1}^n x_i^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i y_i \\ \sum_{i=1}^n x_i^2 y_i \end{bmatrix}$$

Mínimos quadrados: exemplo

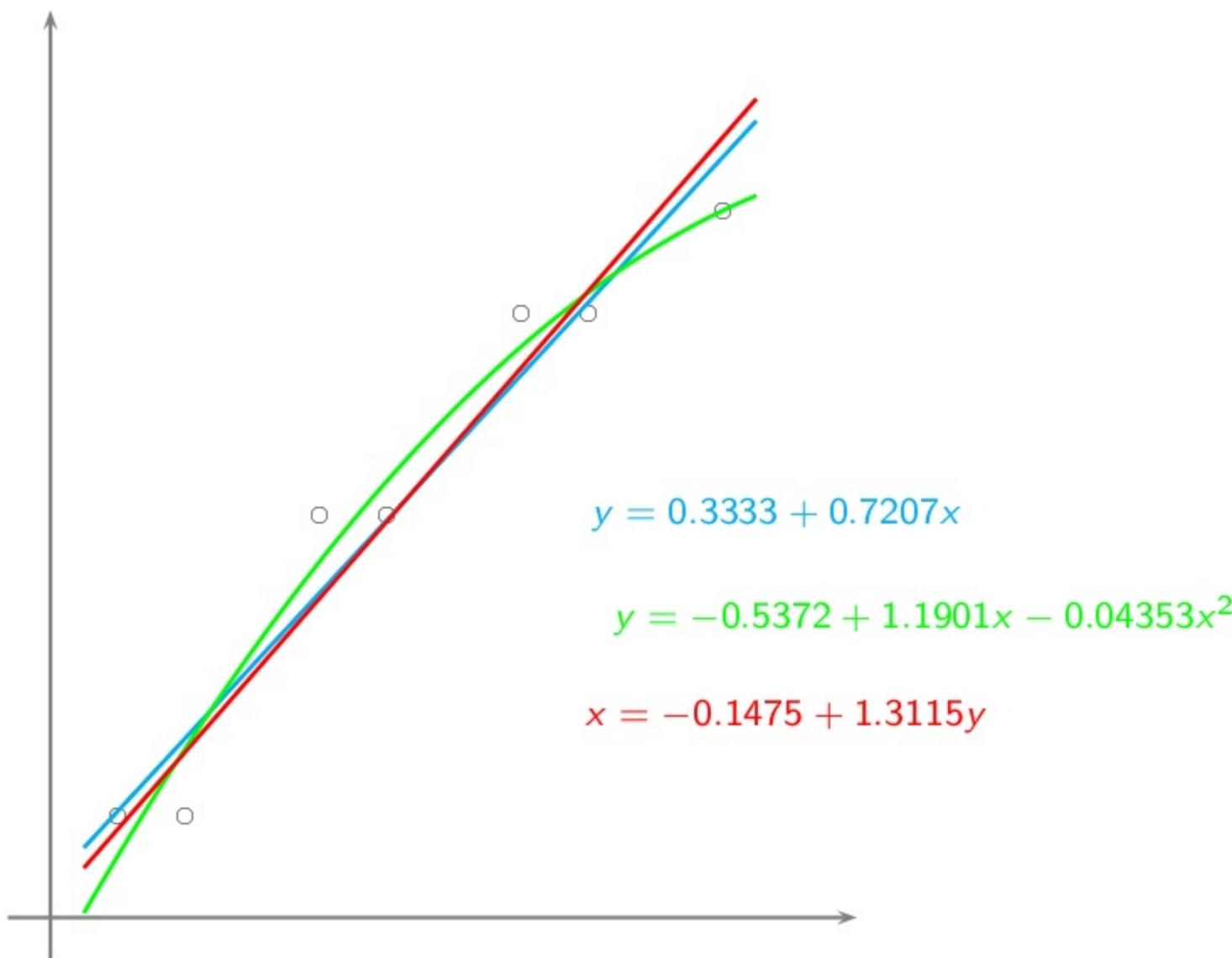
Determine a aproximação dos mínimos quadrados aos pontos da tabela

x	1	2	4	5	7	8	10
y	1	1	4	4	6	6	7

por

- a) uma recta
- b) uma parábola
- c) uma recta que minimize o erro em x

Exemplo



Redução a problemas de mínimos quadrados

Se a função aproximante não puder ser escrita como

$$F(x; c_1, \dots, c_k) = c_1 \phi_1(x) + \dots + c_k \phi_k(x)$$

a aproximação dos mínimos quadrados origina um **sistema de equações não lineares** (resolução "difícil").

Contudo, se existir uma função g tal que

$$g(F(x; c_1, \dots, c_k)) = b_1 \phi_1(x) + \dots + b_k \phi_k(x)$$

$$\text{e } b_1 = \psi_1(c_1), \quad b_2 = \psi_2(c_2), \quad \dots, \quad b_k = \psi_k(c_k)$$

obtém-se uma função aproximante resolvendo um SEL.

Redução a problemas de mínimos quadrados

Para tal, deverá ser determinada a função

$$b_1\phi_1(x) + \cdots + b_k\phi_k(x)$$

que melhor aproxima os pontos $(x_i, g(y_i))$ no sentido dos mínimos quadrados, isto é, que minimiza a soma dos quadrados dos **desvios modificados**

$$\tilde{d}_i = g(y_i) - g(F(x_i; c_1, \dots, c_k))$$

Após a resolução deste problema, os c_j calculam-se por

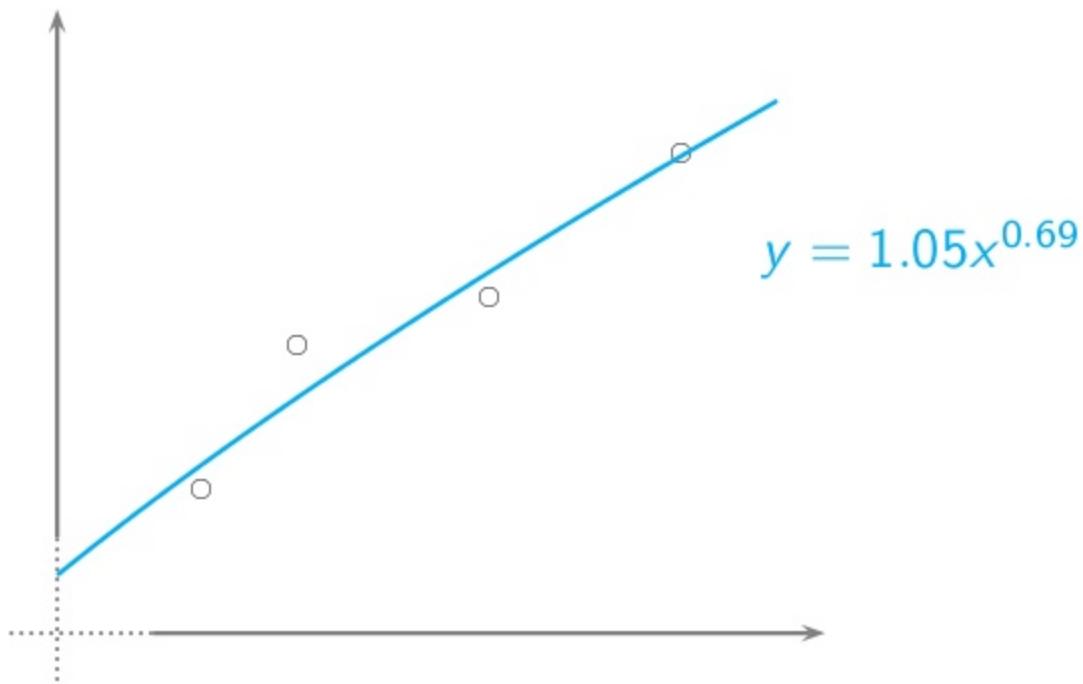
$$c_j = \psi_j^{-1}(b_j), \quad j = 1, \dots, k.$$

Redução a problemas de MQ: exemplo

Aproximar por uma função da forma $y = c_1x^{c_2}$ os pontos

x	1	1.2	1.6	2
y	1	1.3	1.4	1.7

Redução a problemas de MQ: exemplo



Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

- Aproximação dos mínimos quadrados
- Aproximação em espaços vectoriais
- Sistemas Sobredeterminados

5 Interpolação polinomial

6 Integração numérica

Aproximação em espaços vectoriais

V espaço vectorial com o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$

$\|\cdot\|$ norma em V induzida pelo produto interno, isto é,

$$\|v\| = \sqrt{\langle v, v \rangle}, \quad v \in V$$

$\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ vectores de V linearmente independentes

Dado $u \in V$ pretende-se determinar a combinação linear $c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_k v_k$ que melhor aproxima u , no sentido de tornar mínimo,

$$\|u - (c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_k v_k)\|^2$$

Aproximação em espaços vectoriais

Teorema

Sejam os vectores $\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ de V linearmente independentes e um vector $u \in V$. A combinação linear $c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_k v_k$ que torna mínimo o valor

$$\|u - (c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_k v_k)\|^2$$

satisfaz as relações

$$\langle v_j, u - (c_1 v_1 + c_2 v_2 + \dots + c_k v_k) \rangle = 0, \quad j = 1, 2, \dots, k.$$

Aproximação em espaços vectoriais

O sistema de equações que determina c_1, c_2, \dots, c_k é

$$\begin{bmatrix} \langle v_1, v_1 \rangle & \langle v_1, v_2 \rangle & \dots & \langle v_1, v_k \rangle \\ \langle v_2, v_1 \rangle & \langle v_2, v_2 \rangle & \dots & \langle v_2, v_k \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle v_k, v_1 \rangle & \langle v_k, v_2 \rangle & \dots & \langle v_k, v_k \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle v_1, u \rangle \\ \langle v_2, u \rangle \\ \vdots \\ \langle v_k, u \rangle \end{bmatrix}$$

e designa-se por **sistema de equações normais**.

Sendo v_1, v_2, \dots, v_k linearmente independentes, este sistema tem solução única, qualquer que seja $u \in V$.

MQ e aproximação em espaços vectoriais

Dados os pares $(x_i, y_i)_{i=1}^n$ e as funções $\phi_1(x), \dots, \phi_k(x)$ pretende-se determinar a combinação linear

$$c_1\phi_1(x) + \cdots + c_k\phi_k(x)$$

que minimiza a soma dos quadrados dos desvios.

Definam-se $\bar{\phi}_1, \dots, \bar{\phi}_k, \bar{y} \in \mathbb{R}^n$ de acordo com

$$\bar{\phi}_1 = \begin{bmatrix} \phi_1(x_1) \\ \phi_1(x_2) \\ \vdots \\ \phi_1(x_n) \end{bmatrix}, \dots, \bar{\phi}_k = \begin{bmatrix} \phi_k(x_1) \\ \phi_k(x_2) \\ \vdots \\ \phi_k(x_n) \end{bmatrix}, \text{ e } \bar{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

MQ e aproximação em espaços vectoriais

Determinar a combinação linear $c_1\phi_1(x) + \cdots + c_k\phi_k(x)$ que minimiza a soma dos quadrados dos desvios

é equivalente a

Determinar a combinação linear $c_1\bar{\phi}_1 + \cdots + c_k\bar{\phi}_k$ que minimiza o valor

$$\|\bar{y} - (c_1\bar{\phi}_1 + \cdots + c_k\bar{\phi}_k)\|^2$$

MQ e aproximação em espaços vectoriais

Os valores c_1, c_2, \dots, c_k são determinados resolvendo

$$\begin{bmatrix} \langle \bar{\phi}_1, \bar{\phi}_1 \rangle & \langle \bar{\phi}_1, \bar{\phi}_2 \rangle & \dots & \langle \bar{\phi}_1, \bar{\phi}_k \rangle \\ \langle \bar{\phi}_2, \bar{\phi}_1 \rangle & \langle \bar{\phi}_2, \bar{\phi}_2 \rangle & \dots & \langle \bar{\phi}_2, \bar{\phi}_k \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \bar{\phi}_k, \bar{\phi}_1 \rangle & \langle \bar{\phi}_k, \bar{\phi}_2 \rangle & \dots & \langle \bar{\phi}_k, \bar{\phi}_k \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \bar{\phi}_1, \bar{y} \rangle \\ \langle \bar{\phi}_2, \bar{y} \rangle \\ \vdots \\ \langle \bar{\phi}_k, \bar{y} \rangle \end{bmatrix}$$

MQ e aproximação em espaços vectoriais

Este sistema de equações pode ser escrito na forma

$$\left[\begin{array}{cccc} \sum_{i=1}^n \phi_1(x_i) \phi_1(x_i) & \sum_{i=1}^n \phi_1(x_i) \phi_2(x_i) & \dots & \sum_{i=1}^n \phi_1(x_i) \phi_k(x_i) \\ \sum_{i=1}^n \phi_2(x_i) \phi_1(x_i) & \sum_{i=1}^n \phi_2(x_i) \phi_2(x_i) & \dots & \sum_{i=1}^n \phi_2(x_i) \phi_k(x_i) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{i=1}^n \phi_k(x_i) \phi_1(x_i) & \sum_{i=1}^n \phi_k(x_i) \phi_2(x_i) & \dots & \sum_{i=1}^n \phi_k(x_i) \phi_k(x_i) \end{array} \right] \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n \phi_1(x_i) y_i \\ \sum_{i=1}^n \phi_2(x_i) y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n \phi_k(x_i) y_i \end{bmatrix}$$

MQ e aproximação em espaços vectoriais

Este sistema tem solução única se os vectores $\bar{\phi}_1, \bar{\phi}_2, \dots, \bar{\phi}_k$, forem **linearmente independentes**.

Neste caso, diz-se que as funções ϕ_1, \dots, ϕ_k são **linearmente independentes nos pontos** x_1, x_2, \dots, x_n .

Então, o número de pontos (n) deverá ser sempre superior ou igual ao número de funções consideradas (k).

Exercício

Determine a melhor aproximação $y = a \sin(x) + b \cos(x)$, no sentido dos mínimos quadrados, dos pontos da tabela.

x	0	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{3\pi}{2}$
y	-1.3	1.55	1.2	-1.45

Resolva o exercício usando o formalismo da aproximação em espaços vectoriais.

Vectores ortogonais

Se $\langle v_i, v_j \rangle = 0$ para $i \neq j$ (vectores **ortogonais**), então

$$\begin{bmatrix} \langle v_1, v_1 \rangle & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \langle v_2, v_2 \rangle & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \langle v_k, v_k \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle v_1, u \rangle \\ \langle v_2, u \rangle \\ \vdots \\ \langle v_k, u \rangle \end{bmatrix}$$

Conclui-se que

$$c_j = \frac{\langle v_j, u \rangle}{\langle v_j, v_j \rangle}$$

Exercício: aprox. por exponenciais complexas

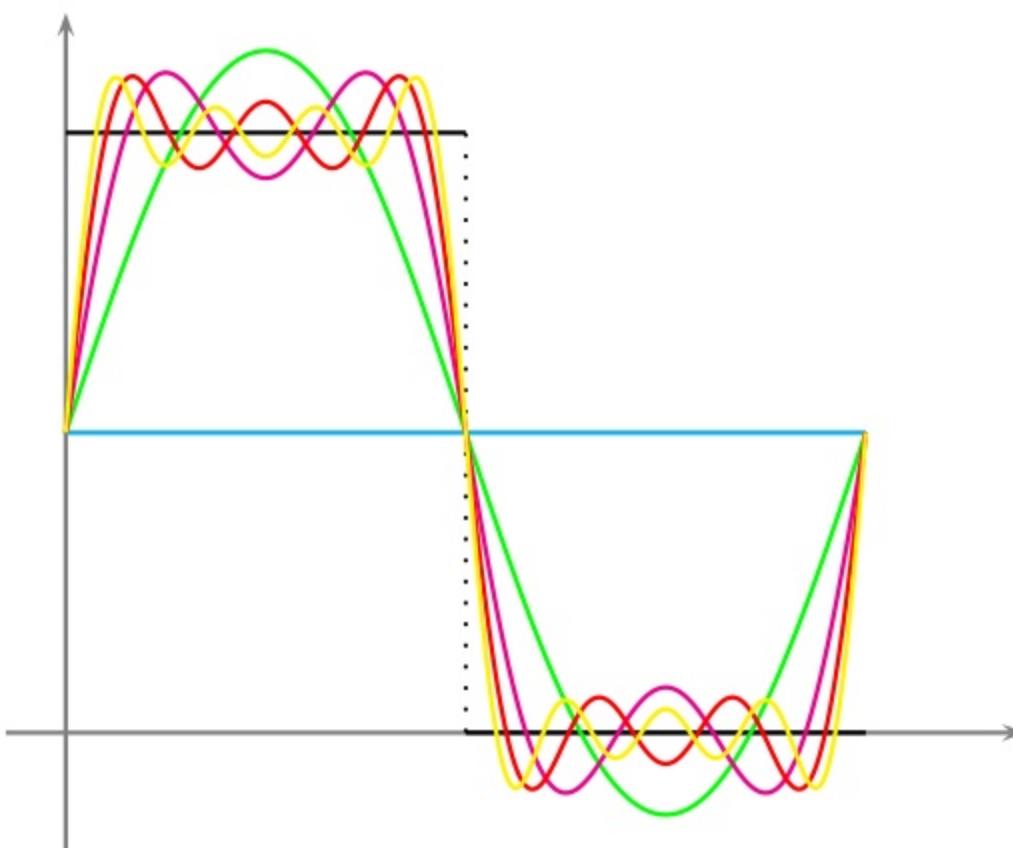
Sejam $f, g : [0, T] \rightarrow \mathbb{C}$ e defina-se $\langle f, g \rangle = \int_0^T f^*(t)g(t)dt$.

- ➊ Verifique que as funções $v_k(t) = e^{j\frac{2k\pi}{T}t}$ com $k \in \mathbb{Z}$ são ortogonais.
Nota: $j = \sqrt{-1}$.

- ➋ Considere a função $h(t) = \begin{cases} 1 & \text{se } 0 \leq t \leq \frac{T}{2} \\ 0 & \text{se } \frac{T}{2} < t \leq T \end{cases}$

Qual a combinação linear de $v_{-N}, \dots, v_0, \dots, v_N$ que melhor aproxima h no sentido dos mínimos quadrados?

Exemplo



Vamos agora ver ...

1 Erros

2 Equações não Lineares

3 Sistemas de equações não lineares

4 Aproximação de funções

- Aproximação dos mínimos quadrados
- Aproximação em espaços vectoriais
- Sistemas Sobredeterminados

5 Interpolação polinomial

6 Integração numérica

Sistemas Sobredeterminados

O sistema de equações (na variável $c = c_1, \dots, c_k$)

$$\left\{ \begin{array}{l} F(x_1, c) = y_1 \\ \vdots \\ F(x_m, c) = y_m \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^k \phi_j(x_1)c_j = y_1 \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^k \phi_j(x_m)c_j = y_m \end{array} \right. \Leftrightarrow Ac = y$$

é, para um problema de MQ, em geral *sobredeterminado* (n.o de equações $m >$ n.o incógnitas k). Não tem solução se n.o linhas lin. indep. $> k$.

Defina-se “solução mínimos quadrados” deste sistema o vector $c \in \mathbb{R}$ que minimiza a soma dos quadrados dos desvios

$$\|d\|^2 = \|y - Ac\|^2$$

Desenvolvendo a expressão

$$\begin{aligned}\|d\|^2 &= \|y - Ac\|^2 = (y - Ac)^T(y - Ac) = \\ &= y^T y - 2y^T A c + c^T A^T A c\end{aligned}$$

Derivando em ordem a c e igualando a zero

$$-2y^T A + 2c^T A^T A = 0$$

$$\Leftrightarrow \boxed{A^T A c = A^T y} \quad (1)$$

Se a matriz $A^T A$ possuir inversa (se as colunas de A forem lin. indep.) então

$$\boxed{c = (A^T A)^{-1} A^T y}$$

Pseudo-inversa

A matriz $(A^T A)^{-1} A^T$ designa-se por **pseudo-inversa** e representa-se por A^+ . No caso em que A admite inversa $A^+ = A^{-1}$.

Teorema

Seja $Ac = y$ um sistema (sobredeterminado ou não) em que as colunas de A são linearmente independentes. Então a solução de mínimos quadrados do sistema é dada por

$$c = A^+y$$

onde $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$.

Em alguns sistemas de computação numérica (ex: Matlab) a solução de sistemas sobredeterminados é dada desta forma.

Exemplo: Em Matlab

```
» c=inv(A)*y
```

dá-nos a solução de MQ do sistema $Ac = y$.

Normalidade

A expressão (1)

$$A^T A c = A^T y$$

é uma outra forma de escrever as equações normais, pois reescrevendo como

$$A^T (A c - y) = 0 \Leftrightarrow A^T d = 0$$

verificamos que os desvios são ortogonais às colunas de A .

(Comparar com o 1º teorema deste capítulo.)

Um novo capítulo ...

- 1 Erros
- 2 Equações não Lineares
- 3 Sistemas de equações não lineares
- 4 Aproximação de funções
- 5 Interpolação polinomial
- 6 Integração numérica
- 7 Sobre normas de vectores e matrizes
- 8 Sistemas de equações lineares

Interpolação

Por 2 pontos passa uma recta.

Por 3 será uma parábola?

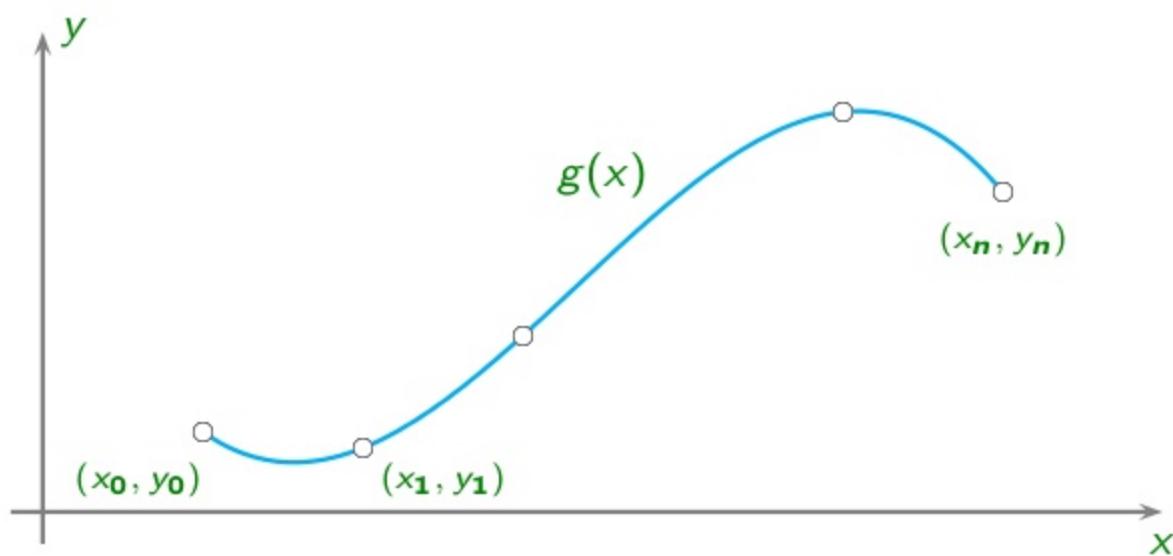
E por 4? uma cúbica!?

Como podem os polinómios ajudar a resolver equações não lineares?

O que são cubic splines?

:

Interpolação



Dados os pontos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$

Determinar uma função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ tal que

$$g(x_0) = y_0, \quad g(x_1) = y_1, \quad \dots, \quad g(x_n) = y_n$$

x_0, x_1, \dots, x_n são os nós de interpolação $(i \neq j \Rightarrow x_i \neq x_j)$

Aplicações da interpolação

- Cálculo de funções fornecidas por tabelas
- Quando se conhecem apenas alguns dos valores de uma função, por exemplo obtidos experimentalmente
- Aproximação de funções cujo cálculo seja complexo ou exija grande esforço
- Base de muitos métodos numéricos

Interpolação polinomial

Uma função p diz-se **polinomial de grau n** se puder ser escrita na forma

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

onde $n \in \mathbb{N}_0$ e $a_n \neq 0$.

Se $p(x) = 0$, o polinómio diz-se **nulo**, e o seu grau é, por convenção, $-\infty$.

Interpolação polinomial

Utilização de funções interpoladoras polinomiais

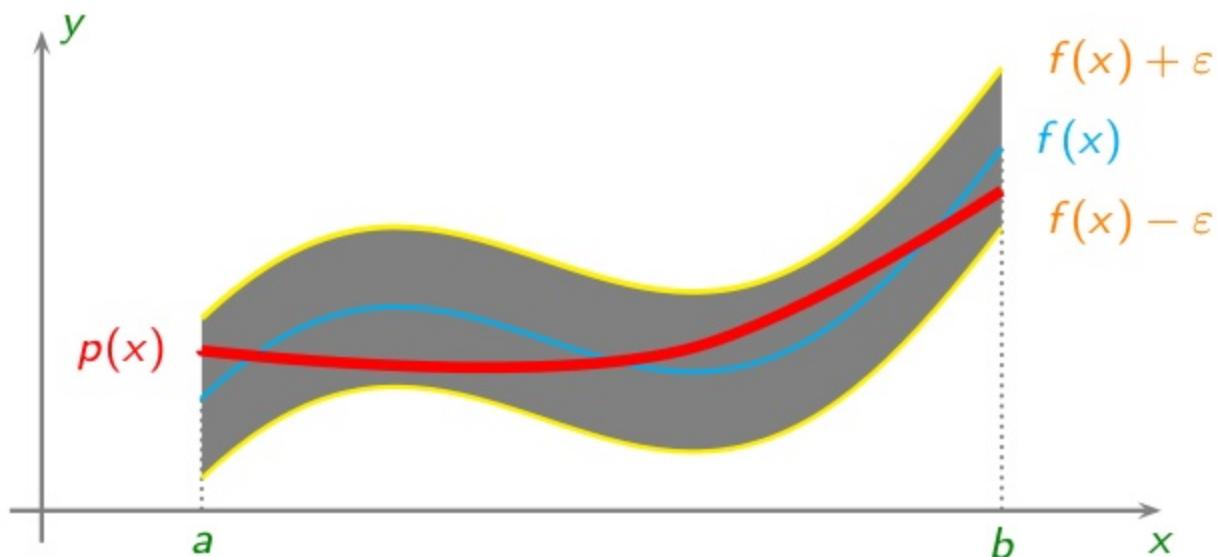
- o seu cálculo é feito com um número finito de multiplicações e somas
- as operações de derivação e primitivação são simples
- são funções de classe C^∞
- aproximam tanto quanto se queira qualquer função contínua num intervalo finito

Aproximação por polinómios

Teorema (Weierstrass)

Seja $[a, b]$ um intervalo real e f uma função contínua em $[a, b]$. Então, qualquer que seja $\varepsilon > 0$, existe uma função polinomial p tal que

$$\max_{x \in [a,b]} |f(x) - p(x)| < \varepsilon.$$



Formas polinomiais

Forma de potências simples

$$p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n$$

Forma de potências centradas

$$p(x) = \bar{a}_0 + \bar{a}_1(x - c) + \bar{a}_2(x - c)^2 + \cdots + \bar{a}_n(x - c)^n$$

Forma de Newton

$$p(x) = \tilde{a}_0 + \tilde{a}_1(x - c_1) + \tilde{a}_2(x - c_1)(x - c_2) + \cdots + \tilde{a}_n(x - c_1) \cdots (x - c_n)$$

Cálculo de polinómios: algoritmo de Horner

Forma de potências simples:

$$p(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$$

$$y \leftarrow a_n$$

Para $i = n - 1$ até 0 fazer

$$y \leftarrow a_i + y \cdot x$$

Cálculo de polinómios: algoritmo de Horner

Forma de Newton:

$$p(x) = a_0 + a_1(x - c_1) + \cdots + a_n(x - c_1) \cdots (x - c_n)$$

$$y \leftarrow a_n$$

Para $i = n - 1$ até 0 fazer

$$y \leftarrow a_i + y \cdot (x - c_{i+1})$$

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- Splines

Polinómio interpolador: unicidade e existência

Teorema

Dados os nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n e os valores nodais y_0, y_1, \dots, y_n , existe um e um só polinómio p de grau menor ou igual a n que interpola os valores y_i nos nós x_i , ou seja, tal que

$$p(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Existência e unicidade de polinómio interpolador

Os coeficientes do polinómio interpolador verificam

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 + a_1 x_0 + \dots + a_n x_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_n x_1^n = y_1 \\ \dots \\ a_0 + a_1 x_n + \dots + a_n x_n^n = y_n \end{array} \right.$$

que não é mais do que um sistema de $n + 1$ equações lineares nas $n + 1$ incógnitas a_0, a_1, \dots, a_n .

Determinante de Vandermonde

$$v(x_0, x_1, \dots, x_n) = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^{n-1} & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-1} & x_n^n \end{vmatrix}$$

Determinante de Vandermonde

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^{n-1} & 0 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-1} & x_1^{n-1}(x_1 - x_0) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-1} & x_n^{n-1}(x_n - x_0) \end{vmatrix}$$

Determinante de Vandermonde

$$\begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^{n-2} & 0 & 0 \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^{n-2} & x_1^{n-2}(x_1 - x_0) & x_1^{n-1}(x_1 - x_0) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^{n-2} & x_n^{n-2}(x_n - x_0) & x_n^{n-1}(x_n - x_0) \end{vmatrix}$$

Determinante de Vandermonde

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & x_1 - x_0 & x_1(x_1 - x_0) & \dots & x_1^{n-2}(x_1 - x_0) & x_1^{n-1}(x_1 - x_0) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n - x_0 & x_n(x_n - x_0) & \dots & x_n^{n-2}(x_n - x_0) & x_n^{n-1}(x_n - x_0) \end{vmatrix}$$

Determinante de Vandermonde

$$\begin{vmatrix} x_1 - x_0 & x_1(x_1 - x_0) & \dots & x_1^{n-2}(x_1 - x_0) & x_1^{n-1}(x_1 - x_0) \\ x_2 - x_0 & x_2(x_2 - x_0) & \dots & x_2^{n-2}(x_2 - x_0) & x_2^{n-1}(x_2 - x_0) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_n - x_0 & x_n(x_n - x_0) & \dots & x_n^{n-2}(x_n - x_0) & x_n^{n-1}(x_n - x_0) \end{vmatrix}$$

Determinante de Vandermonde

$$(x_1 - x_0) \cdot (x_2 - x_0) \cdots (x_n - x_0) \cdot \begin{vmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{vmatrix}$$

Determinante de Vandermonde

$$v(x_0, x_1, \dots, x_n) = \left[\prod_{j=1}^n (x_j - x_0) \right] \cdot v(x_1, \dots, x_n)$$

Determinante de Vandermonde

$$v(x_0, x_1, \dots, x_n) = \left[\prod_{j=1}^n (x_j - x_0) \right] \cdot \left[\prod_{j=2}^n (x_j - x_1) \right] \cdot \dots \cdot \left[\prod_{j=n}^n (x_j - x_{n-1}) \right]$$

é **não nulo** se os nós forem distintos!

Construção do polinómio interpolador

Dados os valores $(y_i)_{i=0}^n$ nos nós distintos $(x_i)_{i=0}^n$, como se determina o polinómio interpolador p , de grau $\leq n$?

Uma possibilidade é resolver o sistema de equações

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 + a_1 x_0 + \dots + a_n x_0^n = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_n x_1^n = y_1 \\ \dots \\ a_0 + a_1 x_n + \dots + a_n x_n^n = y_n \end{array} \right.$$

Abordagem não aconselhável ... **vamos estudar outras!**

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- Splines

Forma de Lagrange

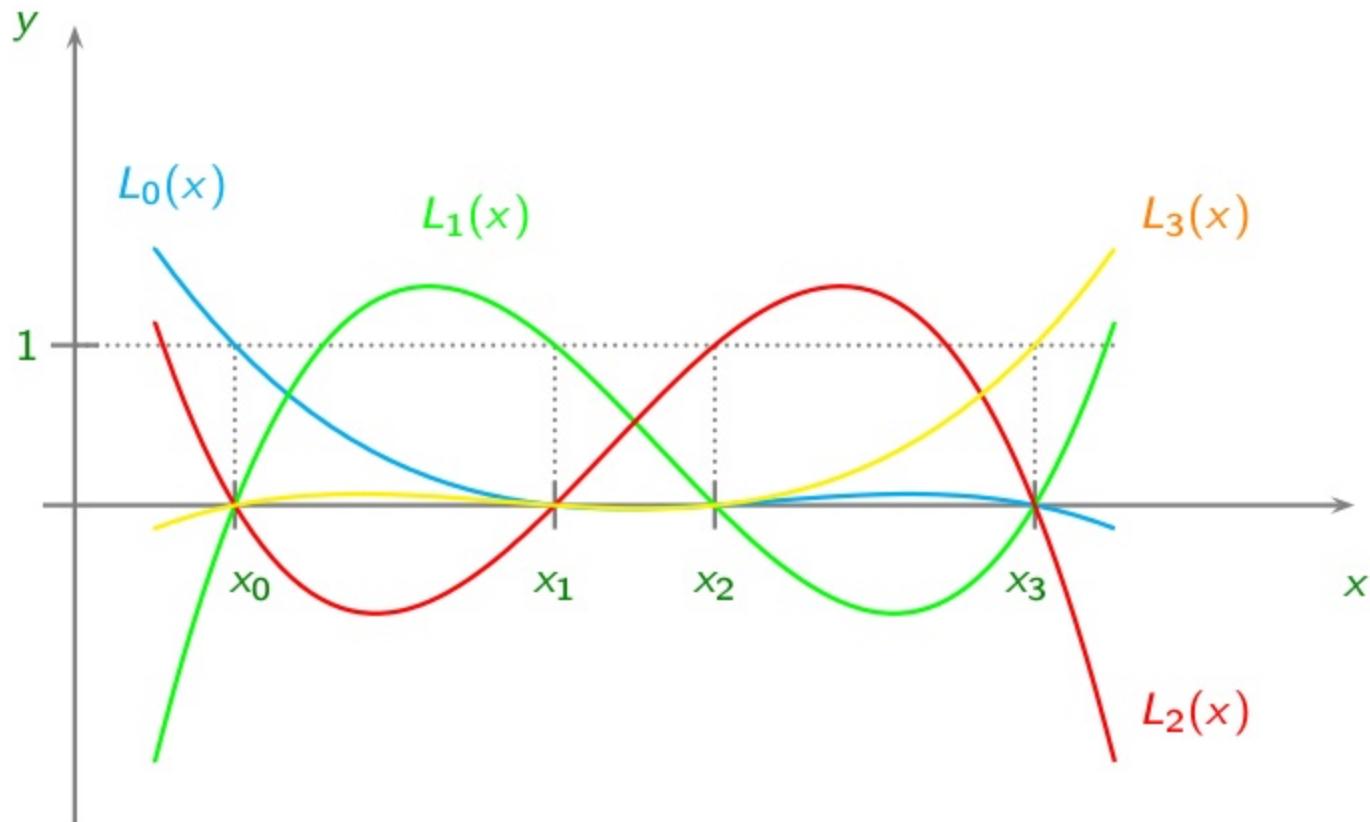
Os **polinómios de Lagrange** definem-se por

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

e verificam as relações

$$L_k(x_j) = \delta_{kj} = \begin{cases} 1 & \text{se } k = j \\ 0 & \text{se } k \neq j \end{cases}$$

onde δ_{kj} é o designado **delta de Kronecker**

Forma de Lagrange: polinómios $L_k(x)$ 

Existência e unicidade: outra vez

Mostramos assim de uma outra forma, construtiva, a existência do polinómio interpolador.

Teorema

O polinómio

$$p(x) = \sum_{k=0}^n y_k L_k(x),$$

tem grau menor ou igual a n e interpola os valores y_0, y_1, \dots, y_n nos nós distintos x_0, x_1, \dots, x_n .

A unicidade mostra-se facilmente. Suponha-se que $p_1(x)$ e $p_2(x)$ são dois polinómios interpoladores de grau menor ou igual que $\leq n$. O polinómio $d(x) = p_1(x) - p_2(x)$ tem grau $\leq n$ e tem pelo menos $n + 1$ zeros nos nós. Logo $d(x) = 0$.

Forma de Lagrange: exemplo

Determinar o polinómio de grau menor ou igual a 3 que interpola os valores

x	-1	0	2	3
y	6	-12	18	24

Forma de Lagrange

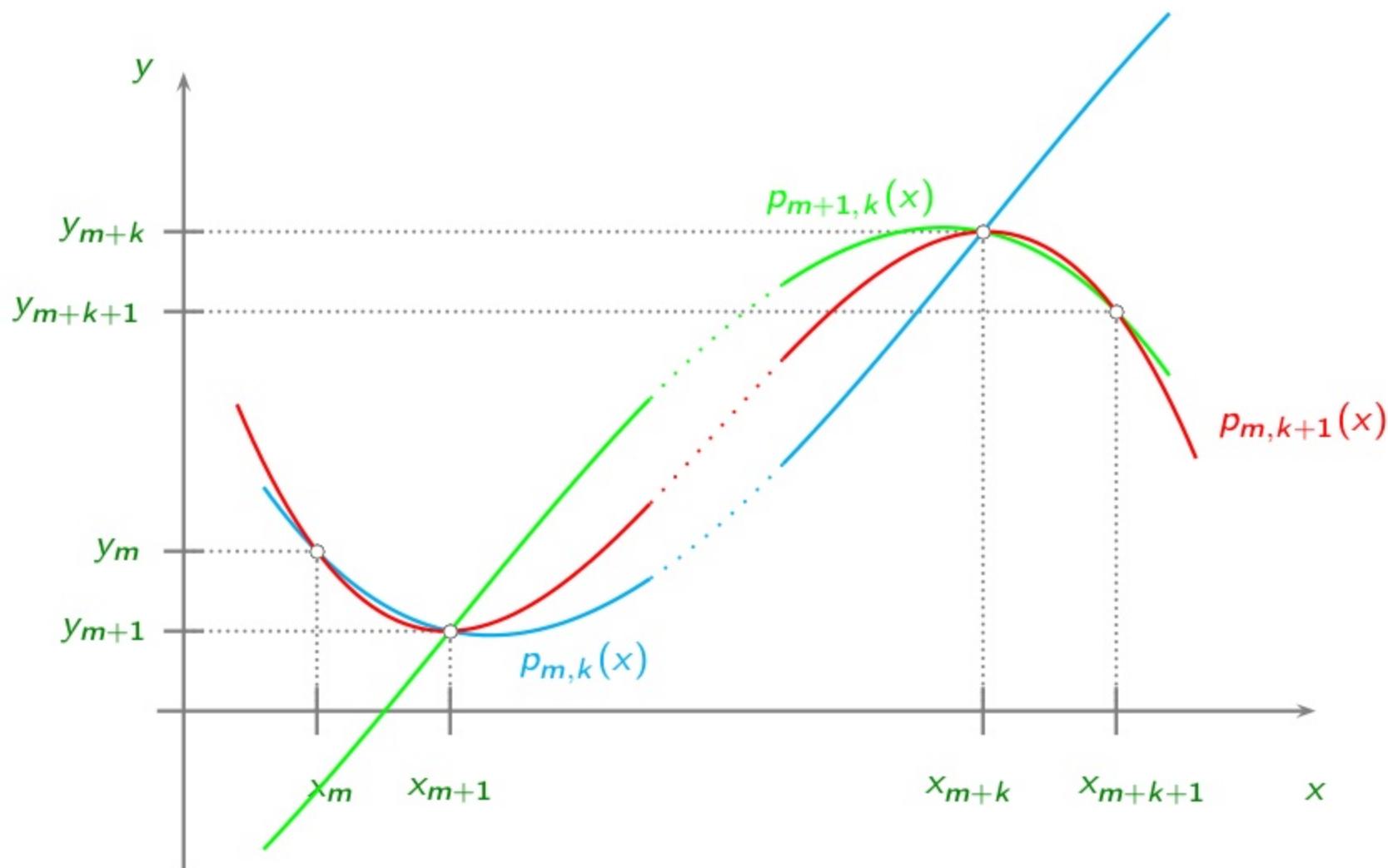
- Quando se altera ou adiciona um nó é necessário recalcular todos os polinómios L_k
- Se um ou mais valores nodais forem alterados, os polinómios L_k mantêm-se, sendo apenas necessário recalcular a combinação destes para obter $p(x)$

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- **Forma de Aitken-Neville**
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- Splines

Forma de Aitken-Neville



Forma de Aitken-Neville

Se $p_{m,k}(x)$ interpola $(y_i)_{i=m}^{m+k}$ nos nós $(x_i)_{i=m}^{m+k}$

e se $p_{m+1,k}(x)$ interpola $(y_i)_{i=m+1}^{m+k+1}$ nos nós $(x_i)_{i=m+1}^{m+k+1}$

então

$$p_{m,k+1}(x) = \frac{(x - x_{m+k+1}) \cdot p_{m,k}(x) + (x_m - x) \cdot p_{m+1,k}(x)}{x_m - x_{m+k+1}}$$

interpola $(y_i)_{i=m}^{m+k+1}$ nos nós $(x_i)_{i=m}^{m+k+1}$.

Forma de Aitken-Neville

A expressão de recorrência

$$\frac{(x - x_{m+k+1}) \cdot p_{m,k}(x) + (x_m - x) \cdot p_{m+1,k}(x)}{x_m - x_{m+k+1}}$$

é uma generalização da expressão

$$\frac{(x - x_1) \cdot y_0 + (x_0 - x) \cdot y_1}{x_0 - x_1}$$

designando-se também por **interpolação linear iterada**

Forma de Aitken-Neville

A expressão de recorrência pode ainda ser escrita como

$$p_{m,k+1}(x) = \frac{\begin{vmatrix} p_{m,k}(x) & x - x_m \\ p_{m+1,k}(x) & x - x_{m+k+1} \end{vmatrix}}{x_m - x_{m+k+1}}$$

Forma de Aitken-Neville

Para determinar $p(x)$ que interpola $(y_i)_{i=0}^n$ em $(x_i)_{i=0}^n$ é necessário obter os polinómios

$$p_{i,0}(x), \quad i = 0, \dots, n$$

$$p_{i,1}(x), \quad i = 0, \dots, n - 1$$

... e, finalmente

$$p_{0,n}(x) = p(x).$$

Forma de Aitken-Neville

$$y_{01}(x) = \frac{\begin{vmatrix} y_0 & x - x_0 \\ y_1 & x - x_1 \end{vmatrix}}{x_0 - x_1}, \quad y_{12}(x) = \frac{\begin{vmatrix} y_1 & x - x_1 \\ y_2 & x - x_2 \end{vmatrix}}{x_1 - x_2}, \dots$$

$$y_{012}(x) = \frac{\begin{vmatrix} y_{01}(x) & x - x_0 \\ y_{12}(x) & x - x_2 \end{vmatrix}}{x_0 - x_2}, \quad y_{123}(x) = \dots$$

:

Forma de Aitken-Neville: exemplo

Determinar, em $x = 1$, o valor do polinómio de grau menor ou igual a 3 que interpola

x	-1	0	2	3
y	6	-12	18	24

Forma de Aitken-Neville

- Permite calcular o valor do polinómio interpolador num ponto, sem determinar os seus coeficientes.
- É possível adicionar e retirar nós nos “extremos” reutilizando os cálculos já efectuados.
- Se os valores nodais forem alterados é necessário repetir os cálculos.

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- **Forma de Newton**
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- Splines

Forma de Newton

O polinómio interpolador p é obtido na forma de Newton tomando como centros os nós distintos x_0, x_1, \dots, x_{n-1}

$$p(x) = a_0 + a_1 W_0(x) + \cdots + a_n W_{n-1}(x)$$

onde

$$W_0(x) = x - x_0$$

$$W_1(x) = (x - x_0)(x - x_1)$$

...

$$W_{n-1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})$$

Forma de Newton

Teorema

Sendo os polinómios p_0, p_1, \dots, p_n definidos por

$$p_0(x) = a_0,$$

$$p_k(x) = p_{k-1}(x) + a_k W_{k-1}(x), \quad k = 1, \dots, n,$$

e definindo os valores

$$a_0 = y_0,$$

$$a_k = \frac{y_k - p_{k-1}(x_k)}{W_{k-1}(x_k)}, \quad k = 1, \dots, n,$$

então, para $k = 0, 1, \dots, n$, p_k interpola $(y_j)_{j=0}^k$ nos nós $(x_j)_{j=0}^k$.

Forma de Newton: exemplo

Determinar o polinómio de grau menor ou igual a 2 que interpola

x	-1	2	3
y	1	3	5

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- Splines

Diferenças divididas

$p_{m,k}(x)$ interpola $(x_i, y_i)_{i=m}^{m+k}$

$$p_{m,k}(x) = a_{m,0} + a_{m,1}(x - x_m) + \cdots + a_{m,k}(x - x_m) \cdots (x - x_{m+k-1})$$

$p_{m,k+1}(x)$ interpola $(x_i, y_i)_{i=m}^{m+k+1}$

$$p_{m,k+1}(x) = a_{m,0} + a_{m,1}(x - x_m) + \cdots + a_{m,k+1}(x - x_m) \cdots (x - x_{m+k})$$

$a_{m,j}$ depende de $(x_i, y_i)_{i=m}^{m+j}$ \rightarrow $a_{m,j} = y[x_m, \dots, x_{m+j}]$

e designa-se **diferença dividida** (nos nós x_m, \dots, x_{m+j}).

Diferenças divididas

Teorema

As diferenças divididas satisfazem $y[x_j] = y_j$, e

$$y[x_m, \dots, x_{m+k+1}] = \frac{y[x_{m+1}, \dots, x_{m+k+1}] - y[x_m, \dots, x_{m+k}]}{x_{m+k+1} - x_m}.$$

Diferenças divididas: forma de Newton

O polinómio interpolador na forma de Newton fica agora

$$p(x) = y[x_0] + y[x_0, x_1](x - x_0) + \cdots + y[x_0, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})$$

onde

$$y[x_0] = y_0$$

$$y[x_0, x_1] = \frac{y[x_1] - y[x_0]}{x_1 - x_0}$$

$$y[x_0, x_1, x_2] = \frac{y[x_1, x_2] - y[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$$

...

Diferenças divididas: forma tabular

Exemplo com 4 nós

x	$y[\cdot]$	$y[\cdot, \cdot]$	$y[\cdot, \cdot, \cdot]$	$y[\cdot, \cdot, \cdot, \cdot]$
x_0	y_0			
		$y[x_0, x_1]$		
x_1	y_1		$y[x_0, x_1, x_2]$	
		$y[x_1, x_2]$		$y[x_0, x_1, x_2, x_3]$
x_2	y_2		$y[x_1, x_2, x_3]$	
		$y[x_2, x_3]$		
x_3	y_3			

Diferenças divididas: exemplo

Determinar, na forma de Newton, o polinómio de grau menor ou igual a 3 que interpola

x	-1	0	2	3
y	6	-12	18	24

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- **Diferenças fiinitas**
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- Splines

Diferenças finitas

Definição

A diferença finita de ordem $k \in \mathbb{N}_0$ e passo $h > 0$ da função f representa-se por $\Delta_h^k f$ e o seu valor no ponto x é

$$\Delta_h^0 f(x) = f(x),$$

$$\Delta_h^{k+1} f(x) = \Delta_h^k f(x + h) - \Delta_h^k f(x), \quad k = 0, 1, \dots$$

Diferenças finitas: forma tabular

x	y	Δy	$\Delta^2 y$...	$\Delta^{n-1} y$	$\Delta^n y$
x_0	y_0	Δy_0				
x_1	y_1		$\Delta^2 y_0$			
...	...	Δy_1		...		
...	$\Delta^{n-1} y_0$	$\Delta^n y_0$
x_{n-1}	y_{n-1}	Δy_{n-2}	$\Delta^2 y_{n-2}$...		
x_n	y_n	Δy_{n-1}			$\Delta^{n-1} y_1$	

Diferenças finitas e diferenças divididas

Teorema

A diferença dividida de ordem k dos valores nodais y nos nós h -equidistantes $x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}$ satisfaz

$$y[x_i, \dots, x_{i+k}] = \frac{1}{k!h^k} \Delta^k y_i$$

Nós equidistantes: exemplo

Determinar o polinómio p , de grau menor ou igual a 3, que interpola os valores da seguinte tabela.

x	-1	1	3	5
y	2	5	3	1

Forma de Newton

- É possível adicionar nós e retirar nós nos “extremos” reutilizando os cálculos já efectuados.
- A alteração dos valores nodais obriga a refazer os cálculos.
- Os cálculos tornam-se mais simples se os nós estiverem igualmente espaçados.

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- **Interpolação directa e inversa**
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- Splines

Interpolação directa e inversa

Sejam $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, $(x_i)_{i=0}^n$ nós distintos em $[a, b]$ e $y_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$.

A **interpolação directa** de f consiste em obter o polinómio p de menor grau tal que $p(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \dots, n$.

Se f admitir inversa então a **interpolação inversa** de f consiste em obter o polinómio q de menor grau tal que

$$q(y_i) = x_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

Agora $(y_i)_{i=0}^n$ são os nós de interpolação e $(x_i)_{i=0}^n$ são os valores nodais, da função f^{-1} a interpolar.

Interpolação inversa: exemplo de aplicação

Determinar, por interpolação inversa, um valor aproximado do zero de $f(x) = \frac{3}{2} \sin(x) - e^{-x}$ no intervalo $[0, 1]$.

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- **Dupla interpolação**
- Erro de interpolação
- Splines

Dupla interpolação

Sejam $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, $(x_i)_{i=0}^n$ distintos, e $(y_j)_{j=0}^m$ distintos

Dados os valores $z_{ij} = f(x_i, y_j)$ pretende-se obter $f(\bar{x}, \bar{y})$

Pode utilizar-se **dupla interpolação**, que consiste em efectuar interpolações polinomiais independentes nas duas variáveis

Dupla interpolação: primeira alternativa

- ➊ Interpolando em x , obtém-se para cada j o polinómio p_j que interpola os valores $(z_{ij})_{i=0}^n$ nos nós $(x_i)_{i=0}^n$.
- ➋ Posteriormente, determina-se o polinómio q que interpola os valores $p_j(\bar{x})$ nos nós $(y_j)_{j=0}^m$.
- ➌ O valor procurado será $q(\bar{y})$.

Dupla interpolação

$f(x, y)$	y_0	\dots	y_l	\bar{y}	y_{l+1}	\dots	y_m
x_0	z_{00}	\dots	z_{0l}		$z_{0,l+1}$	\dots	z_{0m}
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots		\vdots	\ddots	\vdots
x_k	z_{k0}	\dots	z_{kl}		$z_{k,l+1}$	\dots	z_{km}
\bar{x}	$p_0(\bar{x})$	\dots	$p_l(\bar{x})$	$q(\bar{y})$	$p_{l+1}(\bar{x})$	\dots	$p_m(\bar{x})$
x_{k+1}	$z_{k+1,0}$	\dots	$z_{k+1,l}$		$z_{k+1,l+1}$	\dots	$z_{k+1,m}$
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots		\vdots	\ddots	\vdots
x_n	z_{n0}	\dots	z_{nl}		$z_{n,l+1}$	\dots	z_{nm}

Dupla interpolação: segunda alternativa

- ➊ Interpolando em y , obtém-se para cada i o polinómio q_i que interpola os valores $(z_{ij})_{j=0}^m$ nos nós $(y_j)_{j=0}^m$.
- ➋ Posteriormente, determina-se o polinómio p que interpola os valores $q_i(\bar{y})$ nos nós $(x_i)_{i=0}^n$.
- ➌ O valor procurado será $p(\bar{x})$.

Dupla interpolação

$f(x, y)$	y_0	\dots	y_l	\bar{y}	y_{l+1}	\dots	y_m
x_0	z_{00}	\dots	z_{0l}	$q_0(\bar{y})$	$z_{0,l+1}$	\dots	z_{0m}
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
x_k	z_{k0}	\dots	z_{kl}	$q_k(\bar{y})$	$z_{k,l+1}$	\dots	z_{km}
\bar{x}				$p(\bar{x})$			
x_{k+1}	$z_{k+1,0}$	\dots	$z_{k+1,l}$	$q_{k+1}(\bar{y})$	$z_{k+1,l+1}$	\dots	$z_{k+1,m}$
\vdots	\vdots	\ddots	\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
x_n	z_{n0}	\dots	z_{nl}	$q_n(\bar{y})$	$z_{n,l+1}$	\dots	z_{nm}

Dupla interpolação: exemplo

- 1 Considere a tabela com valores de $z(x, y)$ conhecidos.

		z	y			
			1	2	4	6
x	1	10	15	18	22	
	2	7	12	15	20	
	5	5	8	10	14	

- 1 Com interpolação linear em x e em y , estime $z(4, 5)$
 - 1 interpolando primeiro em x .
 - 2 interpolando primeiro em y .
- 2 Estime agora $z(4, 5)$ utilizando primeiro interpolação linear em x e depois quadrática em y .

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- **Erro de interpolação**
- Splines

Erro na interpolação de funções

Sejam $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ e os nós $(x_i)_{i=0}^n$ em $[a, b]$

Seja p o polinómio de menor grau que interpola f em $(x_i)_{i=0}^n$

Qual o erro que se comete ao aproximar $f(x)$ por $p(x)$?

Erro de interpolação

Teorema

Sejam $f \in C^{n+1}([a, b]; \mathbb{R})$ e p o polinómio de grau menor ou igual a n que interpola f nos nós distintos $(x_i)_{i=0}^n$, pertencentes a $[a, b]$. Então, para qualquer $x \in [a, b]$ existe $\xi \in [a, b]$ tal que

$$e(x) \equiv f(x) - p(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) W_n(x),$$

onde $W_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$.

Diferenças divididas e derivadas

Lema

Sejam $f \in C^k([a, b]; \mathbb{R})$ e $(x_i)_{i=0}^k$ um conjunto de nós distintos em $[a, b]$. Então existe $\xi \in [a, b]$ tal que

$$f[x_0, x_1, \dots, x_k] = \frac{1}{k!} f^{(k)}(\xi).$$

Erro de interpolação

Estando os nós ordenados de forma crescente e sendo h o espaçamento máximo entre nós consecutivos, a majoração de $|W_n|$ conduz a

$$|e(x)| \leq \frac{h^{n+1}}{4(n+1)} \cdot \max_{z \in [a,b]} |f^{(n+1)}(z)|$$

válida para todo o $x \in [x_0, x_n]$.

Erro de interpolação: exercício 1

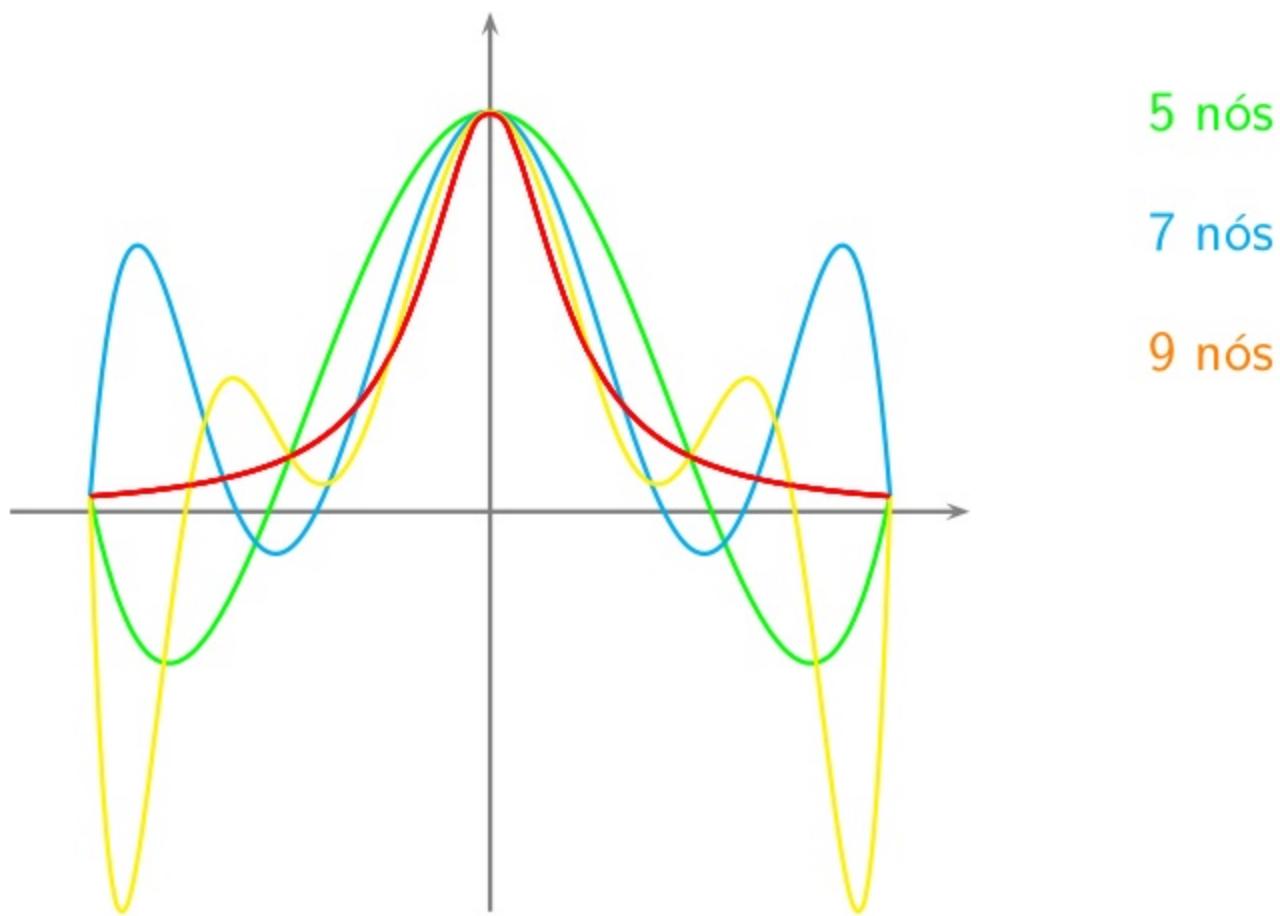
Pretende-se construir uma tabela da função $f(x) = \tan(x)$ no intervalo $[0, \frac{\pi}{4}]$ com nós equidistantes, por forma a que o erro absoluto cometido quando se interpola linearmente nesta tabela não exceda 5×10^{-5} . Qual o espaçamento mínimo entre os nós?

Erro de interpolação: exercício 2

Pretende-se aproximar a função e^x no intervalo $[-1, 1]$ por um polinómio interpolador em nós igualmente espaçados, de forma a que o erro absoluto cometido seja inferior a 5×10^{-8} . Determine a ordem mínima para o polinómio interpolador.

Aproximação por polinómios interpoladores

Interpolação de $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$ em $[-1, 1]$ (nós equidistantes)



Rigidez dos polinómios

Oscilações crescentes ao aumentar o grau do polinómio.

Como evitar este fenómeno?

- escolhendo criteriosamente a localização dos nós
- utilizar outras funções interpoladoras

Vamos agora ver ...

5 Interpolação polinomial

- Polinómio interpolador: unicidade e existência
- Forma de Lagrange
- Forma de Aitken-Neville
- Forma de Newton
- Diferenças divididas
- Diferenças finitas
- Interpolação directa e inversa
- Dupla interpolação
- Erro de interpolação
- **Splines**

Splines polinomiais

Definição

Uma função S diz-se um **spline polinomial de grau m** (onde $m \in \mathbb{N}$), relativo aos nós $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, quando

- ① S coincide com um polinómio S_i de grau menor ou igual a m em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \dots, n$.
- ② $S \in C^{m-1}([a, b]; \mathbb{R})$.

Interpolação por splines polinomiais

Dados os nós $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ e os valores nodais y_0, y_1, \dots, y_n , a **interpolação por splines de grau m** consiste em encontrar um spline S de grau m relativo aos nós $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ tal que

$$S(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

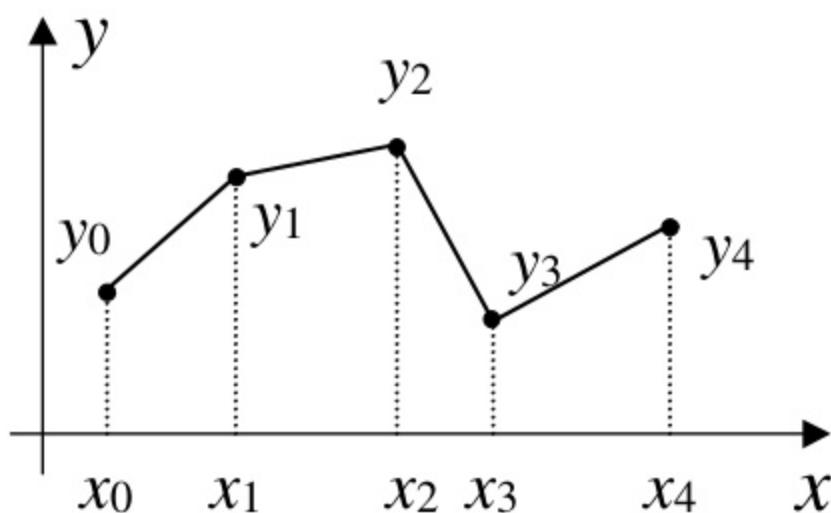
Interpolação por splines polinomiais

Algumas questões importantes:

- será que existe spline interpolador?
- será que o spline interpolador é único?
- como determinar os polinómios S_i que o definem?
- qual o erro na interpolação de uma função por splines?

Splines lineares (ou de grau 1)

O spline S coincide em $[x_{i-1}, x_i]$ com o segmento de recta que passa pelos pontos (x_{i-1}, y_{i-1}) e (x_i, y_i) .



Splines lineares

Os polinómios S_i , definidores do spline, satisfazem

$$\begin{aligned} S_i(x_{i-1}) &= y_{i-1} & i = 1, \dots, n, \\ S_i(x_i) &= y_i & i = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

de onde resultam $2n$ equações.

Spline é definido por $2n$ coeficientes.

Spline existe e é único.

Splines lineares

Os polinómios S_i , definidores do spline, serão dados por

$$S_i(x) = y_{i-1} \frac{x_i - x}{h_i} + y_i \frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$

para $i = 1, 2, \dots, n$. Nota: $h_i = x_i - x_{i-1}$.

Aproximação por splines lineares

Sendo $y_i = f(x_i)$, onde f é de classe C^2 , o erro de aproximação por um spline de grau 1 é majorado por

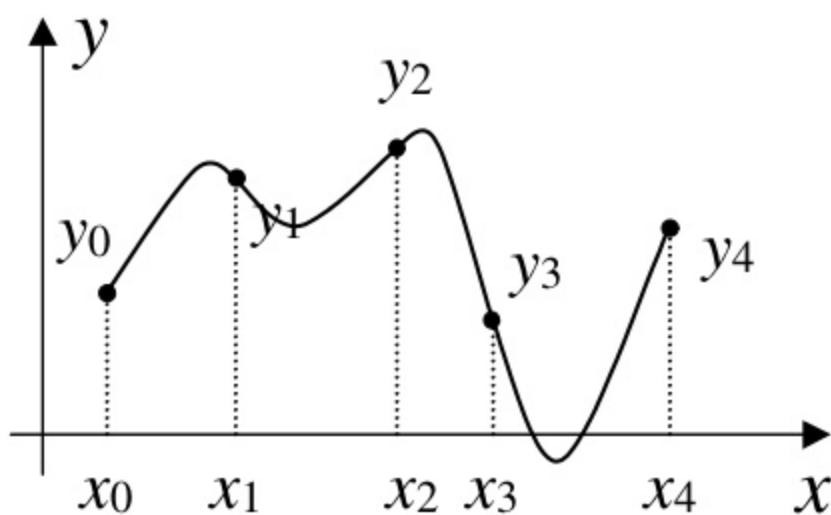
$$|e| \leq \frac{1}{8} \cdot |f''|_{\max} \cdot h^2$$

com $h = \max\{h_i : 1 \leq i \leq n\}$.

Splines quadráticos (ou de grau 2)

O spline coincide em cada intervalo $[x_{i-1}, x_i]$ com um arco de parábola.

Estes arcos ligam-se de forma contínua, devendo passar pelos valores a interpolar e assegurar a continuidade da primeira derivada nos nós x_1, x_2, \dots, x_{n-1} .



Splines quadráticos

As condições a impor aos polinómios S_i , definidores do spline S , serão

$$S_i(x_{i-1}) = y_{i-1} \quad i = 1, \dots, n,$$

$$S_i(x_i) = y_i \quad i = 1, \dots, n,$$

$$S'_i(x_i) = S'_{i+1}(x_i) \quad i = 1, \dots, n - 1.$$

que resultam em $3n - 1$ equações.

Spline é definido por $3n$ coeficientes.

Spline não único: necessário impor condição adicional.

Splines quadráticos

Definindo S_i , $i = 1, \dots, n$, como

$$S_i(x) = y_{i-1} + m_{i-1}(x - x_{i-1}) + \frac{M_i}{2}(x - x_{i-1})^2$$

os valores m_i e M_i determinam-se por recorrência

$$m_i = 2 \cdot \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - m_{i-1} \quad i = 1, \dots, n,$$

$$M_i = \frac{m_i - m_{i-1}}{h_i} \quad i = 1, \dots, n.$$

sendo necessário definir o valor adicional m_0 .

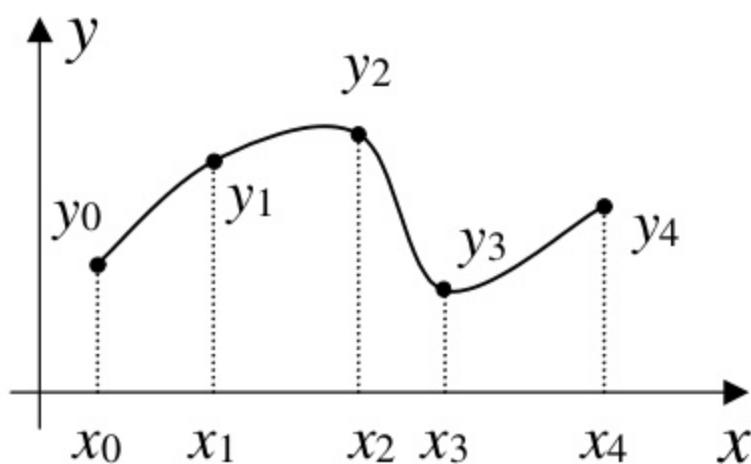
Splines quadráticos

São pouco utilizados, pois habitualmente apresentam um comportamento com grandes oscilações.

Splines cúbicos (ou de grau 3)

Em $[x_{i-1}, x_i]$ o spline S coincide com um polinómio de grau menor ou igual a 3.

Estas funções polinomiais ligam-se de forma contínua, deverão passar pelos valores a interpolar e assegurar a continuidade da primeira e segunda derivadas nos nós x_1, x_2, \dots, x_{n-1} .



Splines cúbicos

As condições a impor aos polinómios S_i , definidores do spline S , serão

$$S_i(x_{i-1}) = y_{i-1} \quad i = 1, \dots, n,$$

$$S_i(x_i) = y_i \quad i = 1, \dots, n,$$

$$S'_i(x_i) = S'_{i+1}(x_i) \quad i = 1, \dots, n - 1,$$

$$S''_i(x_i) = S''_{i+1}(x_i) \quad i = 1, \dots, n - 1.$$

que resultam em $4n - 2$ equações.

Spline é definido por $4n$ coeficientes.

Spline não único: necessárias duas condições adicionais.

Splines cúbicos

Definindo $M_i = S''(x_i)$, para $i = 0, 1, \dots, n$, a continuidade da segunda derivada fica assegurada se

$$S_i''(x) = M_{i-1} \frac{x_i - x}{h_i} + M_i \frac{x - x_{i-1}}{h_i}$$

Os parâmetros M_i são habitualmente designados por **momentos**.

Splines cúbicos

$$\begin{aligned} S_i(x) = & M_{i-1} \frac{(x_i - x)^3}{6h_i} + M_i \frac{(x - x_{i-1})^3}{6h_i} + \\ & \left(y_{i-1} - \frac{M_{i-1} h_i^2}{6} \right) \frac{x_i - x}{h_i} + \left(y_i - \frac{M_i h_i^2}{6} \right) \frac{x - x_{i-1}}{h_i} \end{aligned}$$

Splines cúbicos

Os momentos M_0, \dots, M_n deverão satisfazer as equações

$$\frac{h_i}{6}M_{i-1} + \frac{h_i + h_{i+1}}{3}M_i + \frac{h_{i+1}}{6}M_{i+1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i}$$

para $i = 1, 2, \dots, n - 1$.

Sistema de $n - 1$ equações lineares com $n + 1$ incógnitas.

Impondo-se $M_0 = 0$ e $M_n = 0$ obtém-se o **spline natural**.

Splines cúbicos: propriedades

Teorema

Sejam os nós $a = x_0 < \dots < x_n = b$ e os valores nodais y_0, \dots, y_n . Então, de todas as funções $g \in C^2([a, b]; \mathbb{R})$ que interpolam estes pontos, o spline cúbico natural é a única que torna mínimo o valor de

$$\int_a^b [g''(x)]^2 dx.$$

Splines cúbicos interpoladores

Caso os valores nodais obedecam a $y_i = f(x_i)$, onde f é uma função de classe C^4 , o erro de interpolação por um spline cúbico é majorado por

$$|e| \leq \frac{5}{384} \cdot |f^{(4)}|_{\max} \cdot h^4$$

onde $h = \max\{h_i : 1 \leq i \leq n\}$.

Interpolação por splines: exemplo

Interpolar, por splines polinomiais, a função

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2} \quad x \in [-1, 1]$$

utilizando 7 pontos equidistantes do intervalo $[-1, 1]$.

Interpolação por splines: exemplo

Os polinómios definidores do spline linear serão

$$S_1(x) = 0.17078 + 0.13232x, \quad x \in [-1, -\frac{2}{3}]$$

$$S_2(x) = 0.44684 + 0.54641x, \quad x \in [-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}]$$

$$S_3(x) = 1 + 2.20588x, \quad x \in [-\frac{1}{3}, 0]$$

$$S_4(x) = 1 - 2.20588x, \quad x \in [0, \frac{1}{3}]$$

$$S_5(x) = 0.44684 - 0.54641x, \quad x \in [\frac{1}{3}, \frac{2}{3}]$$

$$S_6(x) = 0.17078 - 0.13232x, \quad x \in [\frac{2}{3}, 1]$$

Interpolação por splines: exemplo

Os polinómios definidores do spline quadrático serão

$$S_1(x) = 0.43543 + 0.79393x + 0.39697x^2, \quad x \in [-1, -\frac{2}{3}]$$

$$S_2(x) = 0.63469 + 1.39171x + 0.84530x^2, \quad x \in [-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}]$$

$$S_3(x) = 1 + 3.58359x + 4.13311x^2, \quad x \in [-\frac{1}{3}, 0]$$

$$S_4(x) = 1 + 3.58359x - 17.36841x^2, \quad x \in [0, \frac{1}{3}]$$

$$S_5(x) = 5.41280 - 22.89323x + 22.34682x^2, \quad x \in [\frac{1}{3}, \frac{2}{3}]$$

$$S_6(x) = -13.89892 + 35.04193x - 21.10455x^2, \quad x \in [\frac{2}{3}, 1]$$

Interpolação por splines: exemplo

Os polinómios definidores do spline cúbico serão

$$S_1(x) = -0.63728 - 2.49388x - 2.72721x^2 - 0.90907x^3, \quad x \in [-1, -\frac{2}{3}]$$

$$S_2(x) = 2.08308 + 9.74775x + 15.63523x^2 + 8.27215x^3, \quad x \in [-\frac{2}{3}, -\frac{1}{3}]$$

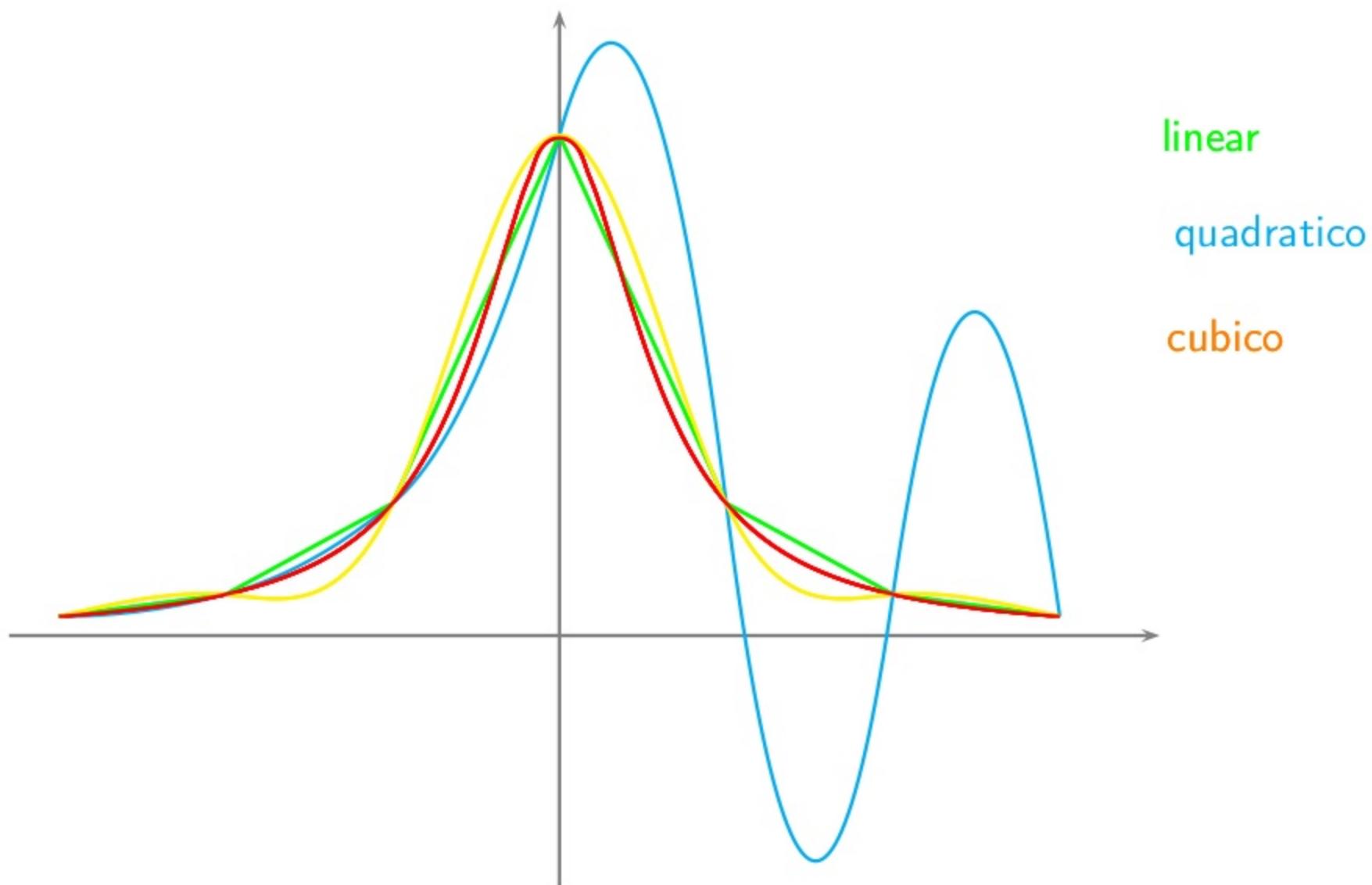
$$S_3(x) = 1 - 13.60801x^2 - 20.97109x^3, \quad x \in [-\frac{1}{3}, 0]$$

$$S_4(x) = 1 - 13.60801x^2 + 20.97109x^3, \quad x \in [0, \frac{1}{3}]$$

$$S_5(x) = 2.08308 - 9.74775x + 15.63523x^2 - 8.27215x^3, \quad x \in [\frac{1}{3}, \frac{2}{3}]$$

$$S_6(x) = -0.63728 + 2.49388x - 2.72721x^2 + 0.90907x^3, \quad x \in [\frac{2}{3}, 1]$$

Interpolação por splines: exemplo



Um novo capítulo ...

- 1 Erros
- 2 Equações não Lineares
- 3 Sistemas de equações não lineares
- 4 Aproximação de funções
- 5 Interpolação polinomial
- 6 Integração numérica
- 7 Sobre normas de vectores e matrizes
- 8 Sistemas de equações lineares

Integração numérica

Para calcular $\int_0^1 \sin x^2 dx$, encontra-se $h(x)$ tal que $h'(x) = \sin x^2$ e calcula-se $h(1) - h(0)$.

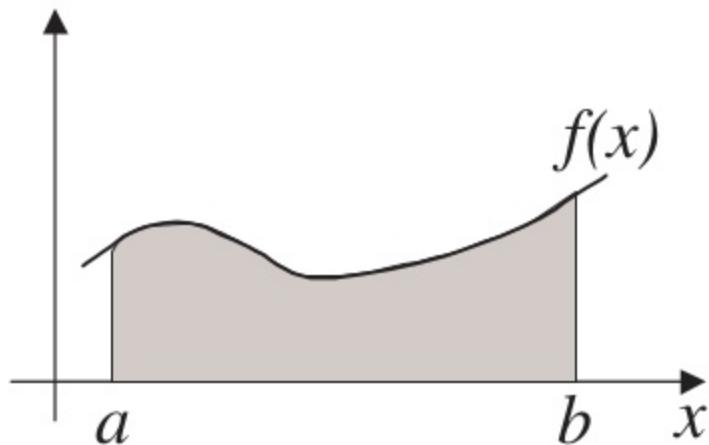
Mas $h(x)$ não pode ser escrita à custa de um número finito de funções conhecidas!

Integração numérica

Dada uma função f definida num intervalo $[a, b]$, consiste em obter valores aproximados de

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

sem obter uma primitiva de f .



Integração numérica: interesse

- ① quando não se conhece expressão analítica de f
- ② quando não se conhecem expressões analíticas de primitivas de f
- ③ quando o cálculo de primitivas de f é dispendioso

Integração numérica: metodologia

- ① Aproximar f por uma função g de primitivação simples
(vamos usar polinómios!)
- ② Aproximar o integral de f por

$$I(f) \simeq I(g) = \int_a^b g(x)dx$$

- ③ O erro cometido é

$$E(f) = I(f) - I(g) = I(f - g)$$

Regras de integração básicas

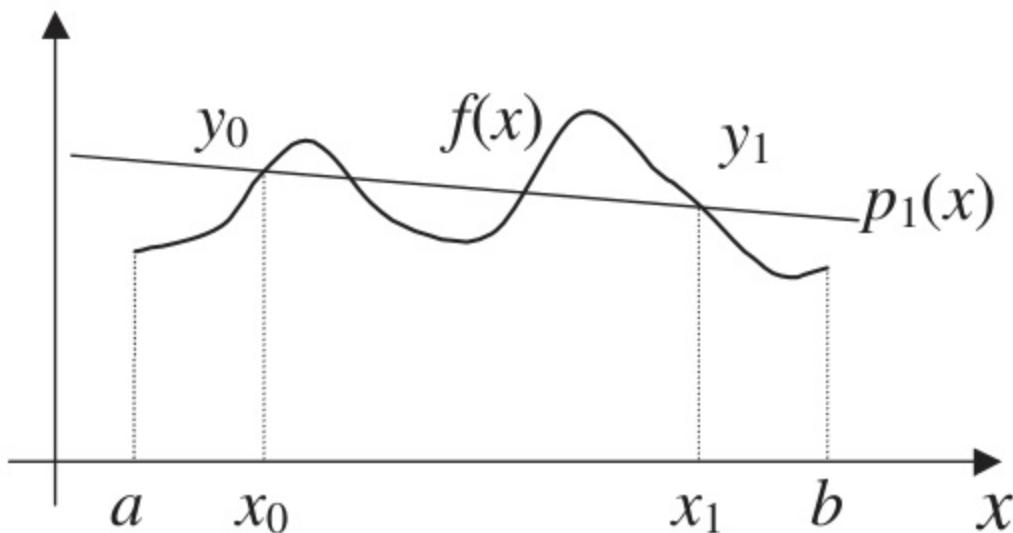
Aproximar $\int_a^b f(x)dx$ por $\int_a^b p_n(x)dx$, onde p_n é o polinómio de menor grau que interpola f nos nós $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ de $[a, b]$.

Como $p_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)L_i(x)$, onde os L_i são os polinómios de Lagrange nos nós $(x_i)_{i=0}^n$, temos

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b p_n(x)dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n f(x_i)L_i(x) \right) dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$$

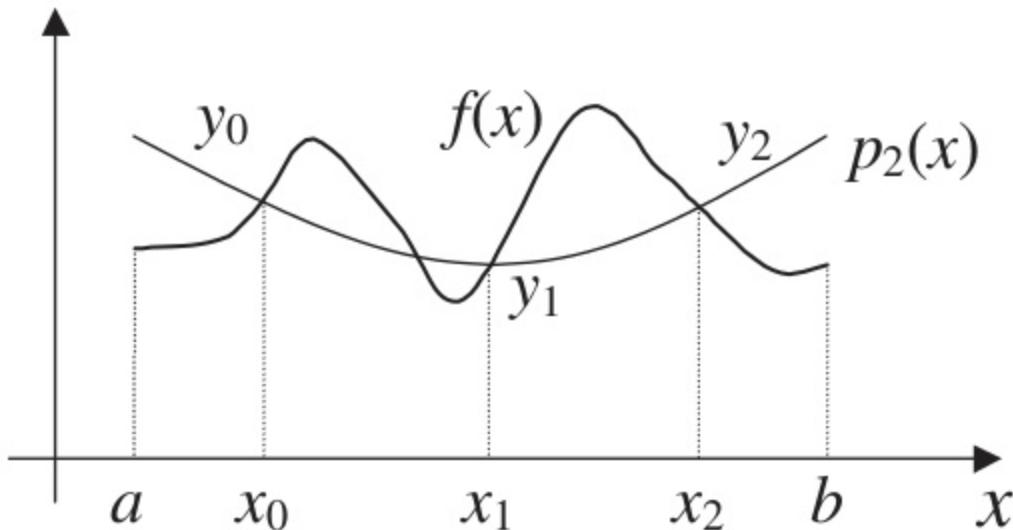
onde $A_i = \int_a^b L_i(x)dx$.

Regras de integração básicas: exemplos



Polinómio interpolador em 2 nós

Regras de integração básicas: exemplos



Polinómio interpolador em 3 nós

Regras de integração básicas: exactidão

Definição

*Uma regra de integração diz-se de **grau** ou **exactidão n** se integrar exactamente todos os polinómios de grau menor ou igual a n e existir pelo menos um polinómio de grau $n + 1$ que não é integrado exactamente.*

Regras de integração básicas: erro

O erro de integração será

$$E(f) = \int_a^b e(x) dx = \int_a^b f[x_0, \dots, x_n, x] W_n(x) dx$$

Nota: Se f é C^{n+1} então $x \mapsto f[x_0, x_1, \dots, x_n, x]$ é contínua e existe $\xi \in [a, b]$ tal que $f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$.

Regras de integração compostas

Sejam $a = a_0 < a_1 < \dots < a_n = b$. Em cada subintervalo $[a_{i-1}, a_i]$, a função f é interpolada por um polinómio p_i , de grau menor ou igual a k_i .

A aproximação de $\int_a^b f(x)dx$ será

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n \int_{a_{i-1}}^{a_i} f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^n \int_{a_{i-1}}^{a_i} p_i(x)dx$$

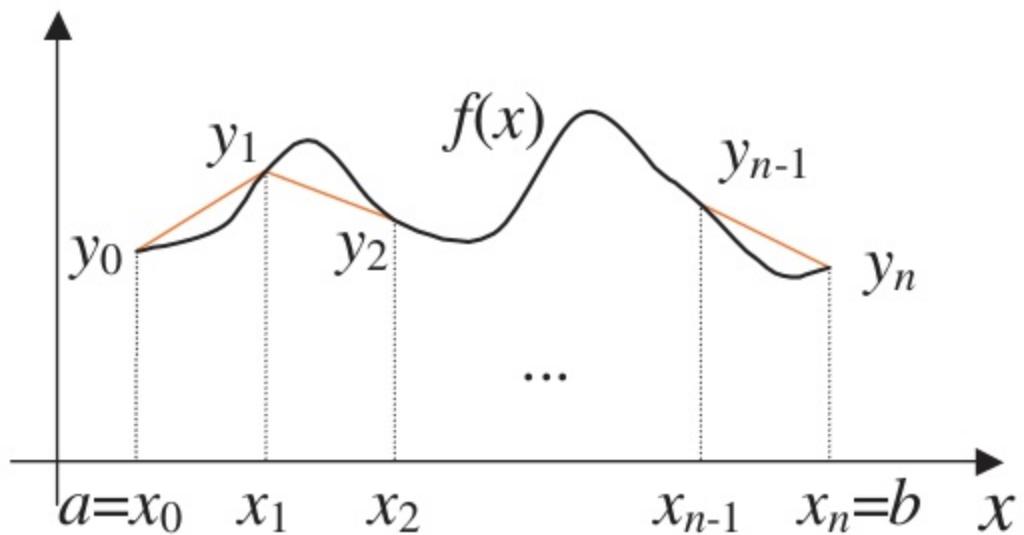
Vamos agora ver ...

6 Integração numérica

- Regra dos trapézios
- Regra de Simpson
- Integração de Romberg

Regra dos trapézios

Em cada subintervalo é utilizado o polinómio de grau menor ou igual a 1 que interpola f nos seus extremos.



Regra dos trapézios

A expressão da regra de integração dos trapézios é

$$I(f) \simeq \frac{h}{2}(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{n-1} + y_n)$$

Regra dos trapézios: erro de truncatura

O erro de truncatura da regra dos trapézios é dado por

$$E(f) = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\xi)$$

podendo usar-se o majorante

$$|E(f)| = \frac{h^2}{12}(b-a) \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$

Regra dos trapézios: erro de arredondamento

Tendo cada y_i um erro absoluto máximo ε , o erro de arredondamento ε_a na regra dos trapézios satisfará

$$\varepsilon_a \leq (b - a)\varepsilon$$

Um majorante para o **erro absoluto total**, na aplicação da regra dos trapézios será

$$|E(f)| + \varepsilon_a$$

Regra dos trapézios: exemplo

Calcular um valor aproximado de $\int_0^1 e^{-x^2} dx$, utilizando a regra dos trapézios com 20 subintervalos e obter um majorante para o erro cometido, considerando que os valores de f são exactos.

Qual o erro máximo absoluto admissível para os valores de f se se pretender que o erro de arredondamento não seja superior ao erro de truncatura?

Vamos agora ver ...

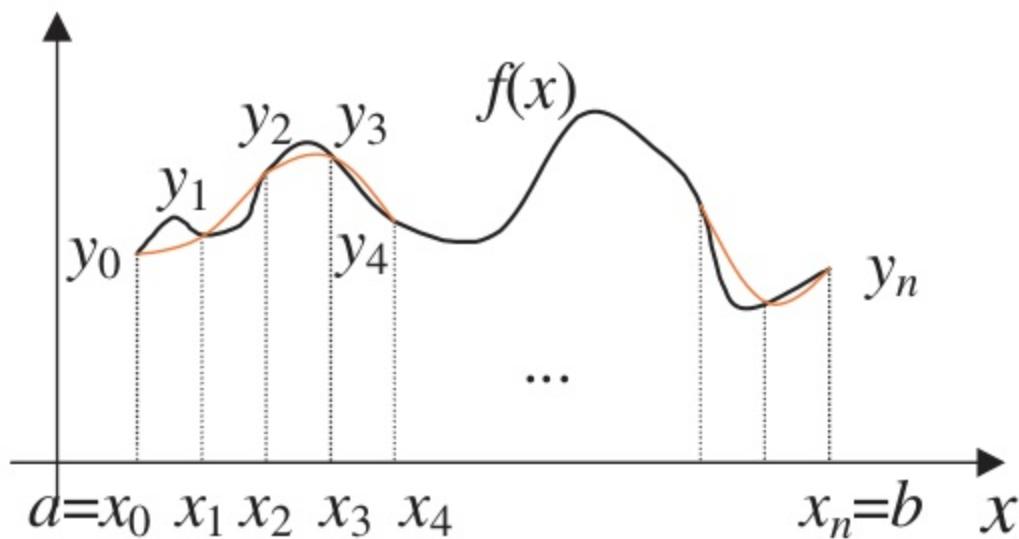
6 Integração numérica

- Regra dos trapézios
- **Regra de Simpson**
- Integração de Romberg

Regra de Simpson

Consideram-se agora polinómios de grau menor ou igual a 2, cada um interpolando f em três pontos igualmente espaçados.

O número n de subintervalos deverá ser **par**, pois cada parábola interpoladora é definida em dois subintervalos consecutivos (3 pontos).



Regra de Simpson

A expressão da regra de integração de Simpson é

$$I(f) \simeq \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \cdots + 4y_{n-1} + y_n)$$

Regra de Simpson: erro de truncatura

O erro de truncatura da regra de Simpson é dado por

$$E(f) = -\frac{h^4}{180}(b-a)f^{(4)}(\xi)$$

podendo usar-se o majorante

$$|E(f)| = \frac{h^4}{180}(b-a) \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

Regra de Simpson: erro de arredondamento

Tendo cada y_i um erro absoluto máximo ε , o erro de arredondamento ε_a na regra de Simpson satisfará

$$\varepsilon_a \leq (b - a)\varepsilon$$

Um majorante para o **erro absoluto total** na aplicação da regra de Simpson será

$$|E(f)| + \varepsilon_a$$

Regra de Simpson: exemplo

Calcular um valor aproximado de $\int_0^1 e^{-x^2} dx$, utilizando a regra de Simpson com 12 subintervalos e obter um majorante para o erro cometido, considerando que os valores de f são exactos.

Vamos agora ver ...

6 Integração numérica

- Regra dos trapézios
- Regra de Simpson
- Integração de Romberg

Integração de Romberg

Consiste em obter estimativas de $I = \int_a^b f(x)dx$ partindo de várias aplicações da regra dos trapézios, com subintervalos de larguras diferentes.

Sendo $T(h)$ o valor aproximado de I dado pela regra dos trapézios com subintervalos de largura h , tem-se que

$$I = T(h) + K_1 h^2 + K_2 h^4 + K_3 h^6 + \dots$$

onde K_1, K_2, K_3, \dots são constantes independentes de h .

Integração de Romberg

Se $T_1(h) = \frac{4T(h/2) - T(h)}{3}$ então $I = T_1(h) + K'_1 h^4 + K'_2 h^6 + \dots$

Se $T_2(h) = \frac{16T_1(h/2) - T_1(h)}{15}$ então $I = T_2(h) + K''_1 h^6 + K''_2 h^8 + \dots$

Se $T_3(h) = \frac{64T_2(h/2) - T_2(h)}{63}$ então $I = T_3(h) + K'''_1 h^8 + K'''_2 h^{10} + \dots$

...

Integração de Romberg

Definindo

$$T_0(h) = T(h)$$

$$T_n(h) = \frac{4^n T_{n-1}(h/2) - T_{n-1}(h)}{4^n - 1}, \quad n = 1, 2, \dots$$

verifica-se que

$$I = T_n(h) + K_{n,1} h^{2n+2} + K_{n,2} h^{2n+4} + \dots$$

Integração de Romberg: exemplo

Obter uma estimativa de $\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ com erro de ordem 8, utilizando um valor de inicial de $h = 0.25$.

Integração de Romberg: exemplo

Valores obtidos com a regra dos trapézios

h	$T(h)$
0.25	0.7827941176471
0.125	0.7847471236228
0.0625	0.7852354030103
0.03125	0.7853574732937

Integração de Romberg: exemplo

Os valores extrapolados encontram-se na tabela seguinte

h	$T(h)$	$T_1(h)$	$T_2(h)$	$T_3(h)$
0.25	0.7827941176471	0.7853981256147	0.7853981652856	0.7853981633975
0.125	0.7847471236228	0.7853981628062	0.7853981634270	
0.0625	0.7852354030103	0.7853981633882		
0.03125	0.7853574732937			

O valor do integral a calcular é $\frac{\pi}{4} = 0.78539816339744830963\dots$

O erro de $T_3(0.25)$ é cerca de 10^{-13} ,
enquanto o erro de $T(0.03125)$ é cerca de 4×10^{-5} !!!!

Um novo capítulo ...

- 4 Aproximação de funções
- 5 Interpolação polinomial
- 6 Integração numérica
- 7 Sobre normas de vectores e matrizes
- 8 Sistemas de equações lineares
- 9 Integração de Equações diferenciais

Vamos agora ver ...

7 Sobre normas de vectores e matrizes

- Norma de um vector
- Norma de uma matriz

Norma de um vector

V : espaço vectorial

norma: $\|\cdot\| : V \rightarrow \mathbb{R}$

- ① $\|x\| \geq 0 \quad \forall x \in V \quad \text{e} \quad \|x\| = 0 \Rightarrow x = 0$
- ② $\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\| \quad \forall \alpha \in \mathbb{R}, \forall x \in V$
- ③ $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \quad \forall x, y \in V$

Norma euclidiana em \mathbb{R}^n

$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2} = \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

Outras normas em \mathbb{R}^n

→ norma 1

$$\sum_{i=1}^n |x_i|$$

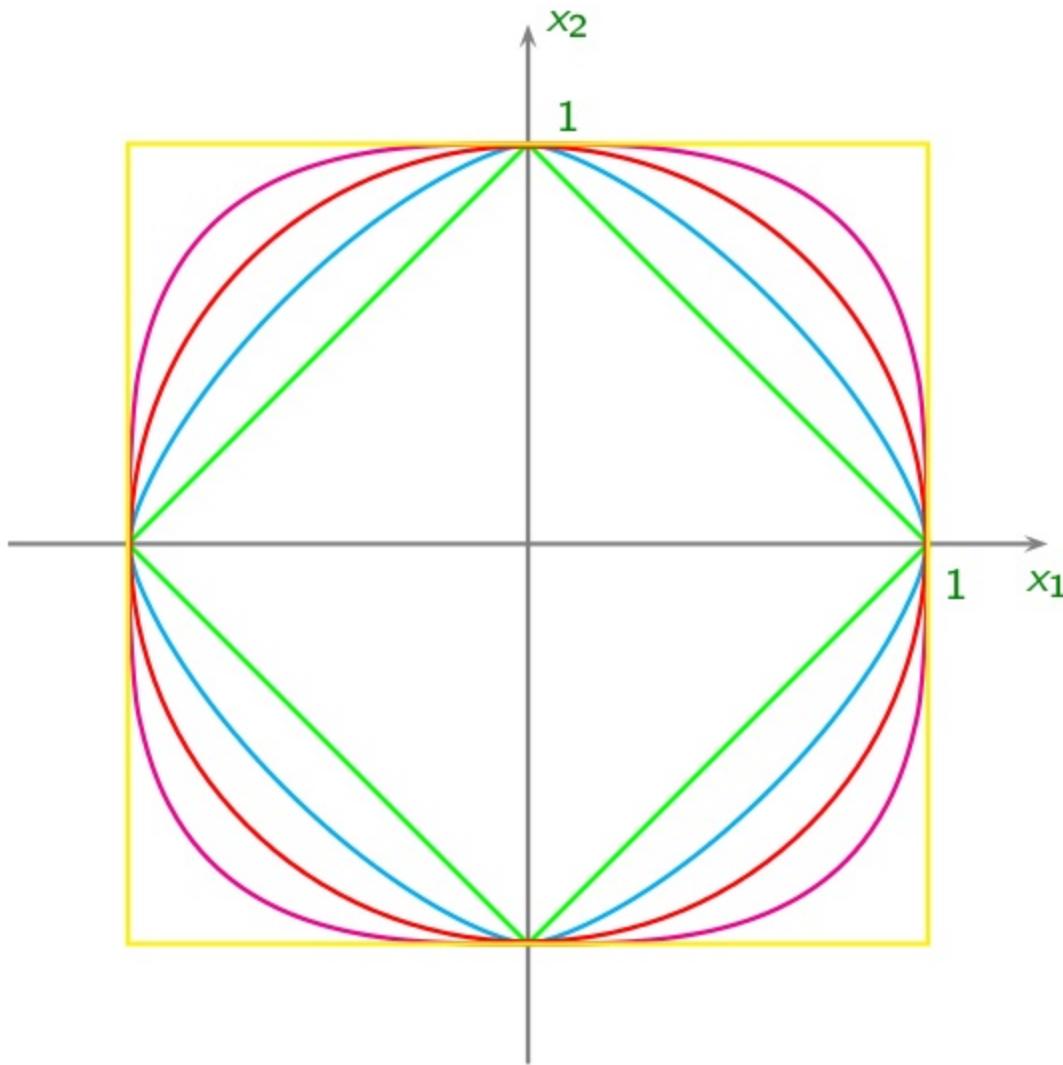
→ norma ∞

$$\max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$$

→ norma p

$$\left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad (\text{com } p \geq 1)$$

→ ...

Normas em \mathbb{R}^n : exemplos para $n = 2$ 

$$\|x\|_1 = 1$$

$$\|x\|_{1.4} = 1$$

$$\|x\|_2 = 1$$

$$\|x\|_3 = 1$$

$$\|x\|_\infty = 1$$

Equivalência de normas

Teorema

Sejam $\|\cdot\|_\alpha$ e $\|\cdot\|_\beta$ duas normas definidas em \mathbb{R}^n .

Então existem constantes $k_1, k_2 > 0$ tais que

$$k_1 \|x\|_\alpha \leq \|x\|_\beta \leq k_2 \|x\|_\alpha, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Exemplo: $\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \sqrt{n} \|x\|_\infty, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$

Convergência em \mathbb{R}^n

Sejam

$$\begin{aligned}\rightarrow \quad & x_{(k)} = (x_{1,(k)}, \dots, x_{n,(k)}) \in \mathbb{R}^n, \quad k \in \mathbb{N} \\ \rightarrow \quad & s = (s_1, \dots, s_n) \in \mathbb{R}^n\end{aligned}$$

Definição

Diz-se que $\{x_{(k)}\}$ converge para s ($x_{(k)} \rightarrow s$) se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \|x_{(k)} - s\| = 0.$$

Teorema

$x_{(k)} \rightarrow s$ se e só se $x_{i,(k)} \rightarrow s_i$, $i = 1, \dots, n$.

Vamos agora ver ...

7 Sobre normas de vectores e matrizes

- Norma de um vector
- Norma de uma matriz

Norma de uma matriz

Dada uma norma $\|\cdot\|$ em \mathbb{R}^n , define-se **norma induzida** da matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ como

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

Esta definição é equivalente a

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

Norma induzida: propriedades

1 Para $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tem-se

- 1 $\forall x \in \mathbb{R}^n \quad \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$
- 2 $\exists x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\} \quad \|Ax\| \geq \|A\| \cdot \|x\|$

2 $\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\| \quad \forall A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$

3 $\|I\| = 1$, onde I é a matriz identidade

Normas de matrizes

Diferentes normas em \mathbb{R}^n originam diferentes normas induzidas:

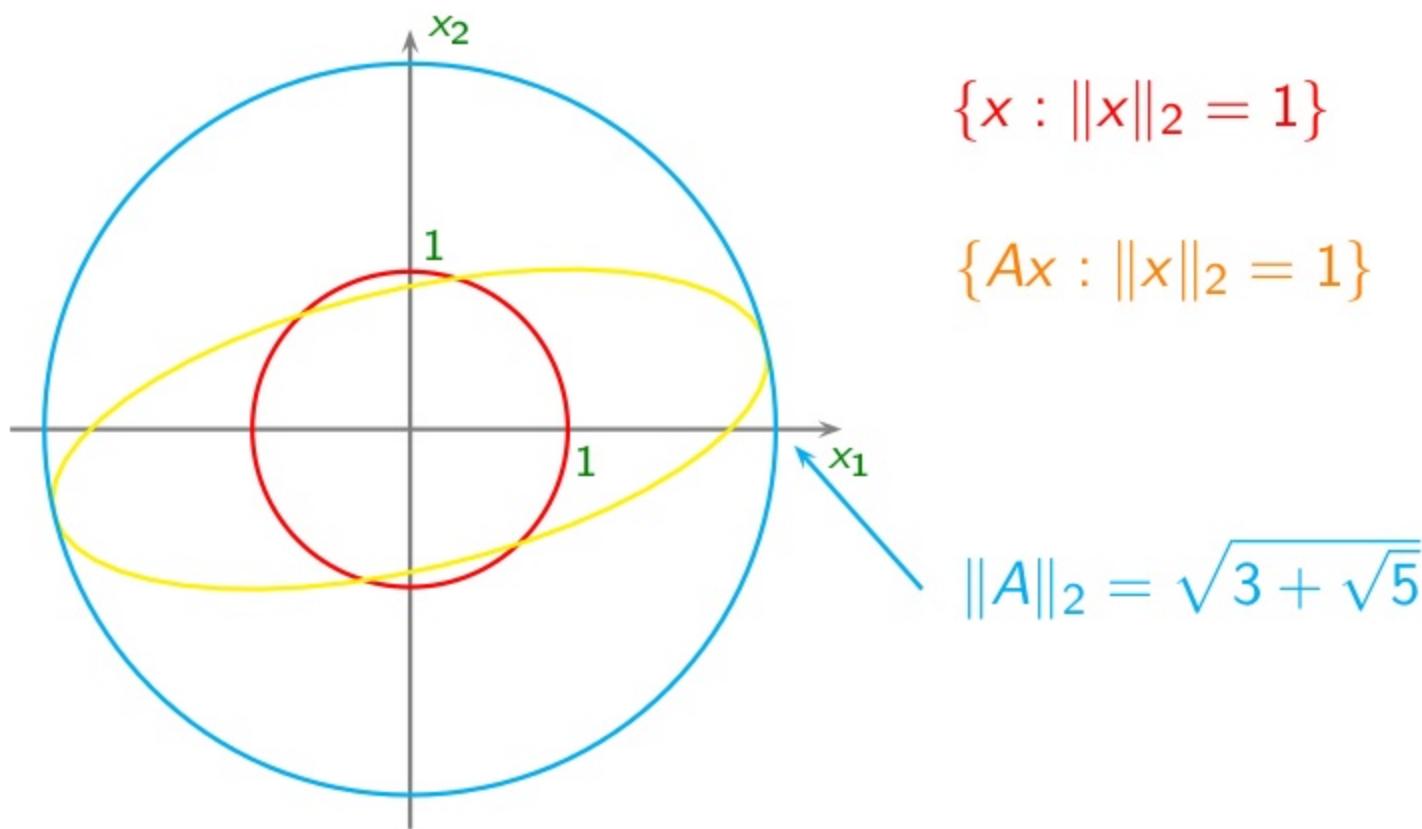
$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2$$

$$\|A\|_1 = \max_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1$$

$$\|A\|_\infty = \max_{\|x\|_\infty=1} \|Ax\|_\infty$$

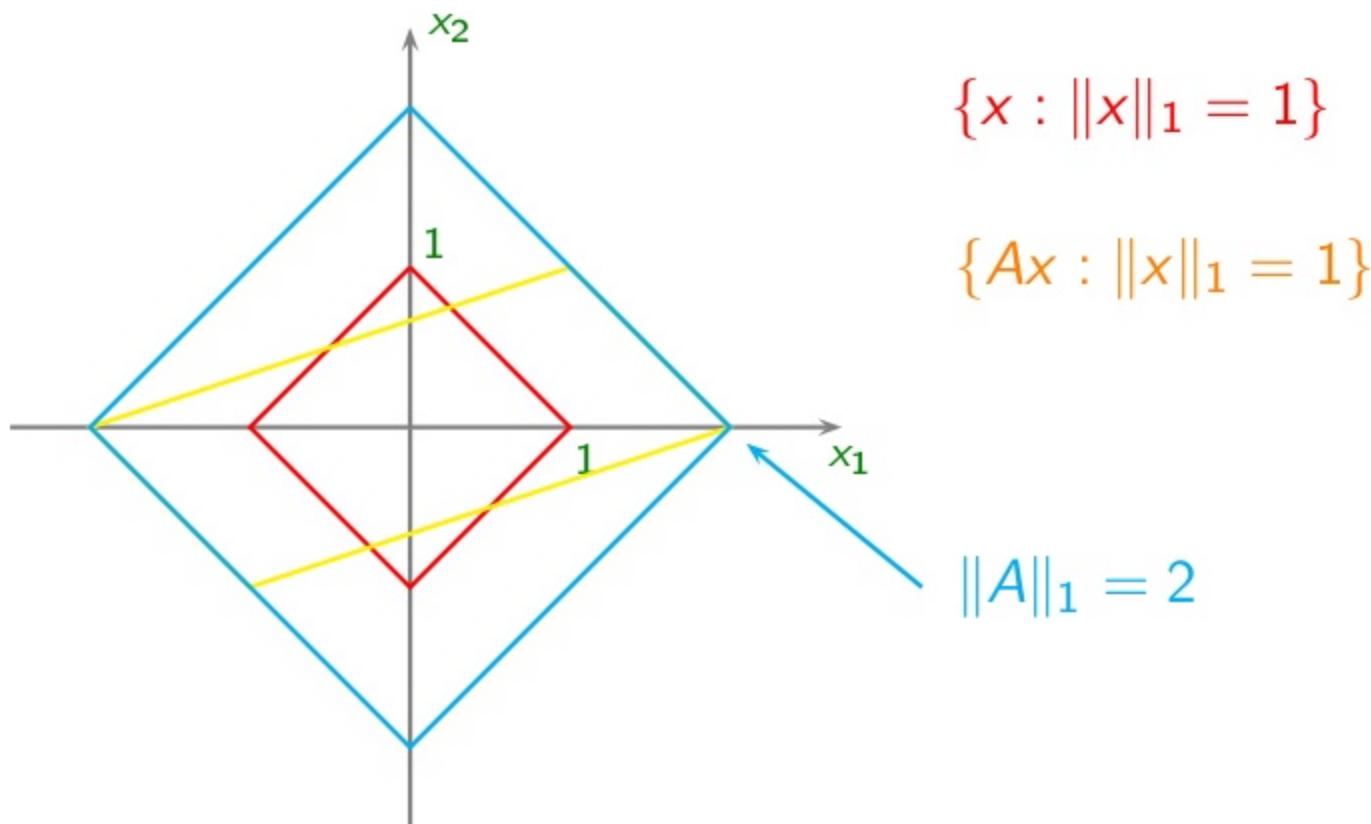
Norma 2 de uma matriz: exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \|A\|_2 = ?$$



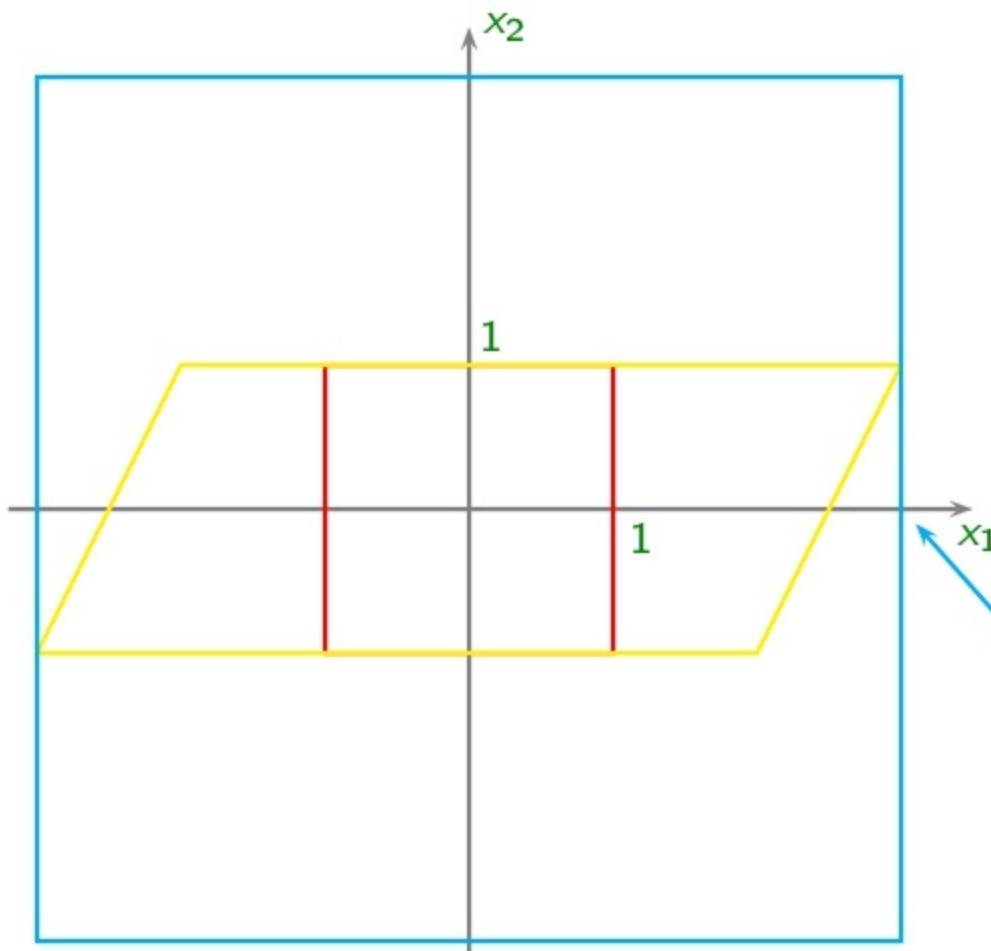
Norma 1 de uma matriz: exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \|A\|_1 = ?$$



Norma ∞ de uma matriz: exemplo

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \|A\|_\infty = ?$$



$$\{x : \|x\|_\infty = 1\}$$

$$\{Ax : \|x\|_\infty = 1\}$$

$$\|A\|_\infty = 3$$

Norma 1 de uma matriz

Teorema

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ de elemento genérico a_{ij} . Então verifica-se

$$\|A\|_1 = \max_{j=1, \dots, n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|,$$

ou seja, $\|A\|_1$ é o máximo das somas por colunas dos valores absolutos dos elementos de A .

Norma ∞ de uma matriz

Teorema

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ de elemento genérico a_{ij} . Então verifica-se

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1, \dots, n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|,$$

ou seja, $\|A\|_\infty$ é o máximo das somas por linhas dos valores absolutos dos elementos de A .

Normas de matrizes: exemplo

Sendo

$$A = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 1 & 6 \\ -3 & -1 & 2 & 4 \\ 2 & 1 & -1 & 1 \\ 3 & -2 & 2 & 5 \end{bmatrix}$$

calcular $\|A\|_1$ e $\|A\|_\infty$.

Norma 2 de uma matriz. Raio Espectral

Teorema

Seja $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Então verifica-se $\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^T A)}$.

$\rho(C)$ é o **raio espectral** de $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definido por

$$\rho(C) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i|$$

onde $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ são os valores próprios de C .

Raio espectral e norma 2 são de cálculo trabalhoso!

Raio espectral e normas

Teorema

Para qualquer norma induzida $\|\cdot\|$ e para qualquer $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tem-se

$$\rho(A) \leq \|A\|.$$

Dados $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $\varepsilon > 0$, existe uma norma induzida $\|\cdot\|$ tal que

$$\|A\| \leq \rho(A) + \varepsilon.$$

Um novo capítulo ...

- 4 Aproximação de funções
- 5 Interpolação polinomial
- 6 Integração numérica
- 7 Sobre normas de vectores e matrizes
- 8 Sistemas de equações lineares
- 9 Integração de Equações diferenciais

4. Sistemas de equações lineares

Porque nem sempre é a regra de Cramer um bom método para resolver sistemas de equações lineares?

Como se propagam os erros (de arredondamento) ao resolver um sistema de equações? Como se evita que estes sejam grandes?

O que é um sistema de equações mal condicionado?

:

Sistemas de equações lineares

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{array} \right.$$

em forma compacta:

$$Ax = b$$

$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ matriz dos coeficientes, de elementos a_{ij}

$b \in \mathbb{R}^m$ vector dos termos independentes, de elementos b_i

$x \in \mathbb{R}^n$ vector de incógnitas, de elementos x_j

Sistemas de n equações a n incógnitas

Teorema

O sistema de n equações a n incógnitas tem solução única se e só se $\det A \neq 0$.

Podem ser resolvidos pela **regra de Cramer**:

$$x_i = \frac{\det A_i}{\det A}$$

Métodos de resolução

Objectivo: estudar métodos de resolução numérica

- eficientes: **baixo** número de operações
- eficazes: **boas** aproximações

Serão estudados dois tipos de métodos

- directos: eliminação gaussiana (ou método de Gauss)
- iterativos: métodos de Jacobi e de Gauss-Seidel

Sistemas na forma triangular

$$\left\{ \begin{array}{rcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1,n-1}x_{n-1} + a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{22}x_2 + \cdots + a_{2,n-1}x_{n-1} + a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n-1,n-1}x_{n-1} + a_{n-1,n}x_n & = & b_{n-1} \\ a_{nn}x_n & = & b_n \end{array} \right.$$

Substituição inversa

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j}{a_{ii}} \quad i = n-1, \dots, 1$$

Vamos agora ver ...

8 Sistemas de equações lineares

- Eliminação gaussiana
- Estratégias de pivotação
- Erro e resíduo de uma solução aproximada
- Perturbações no sistema de equações
- Métodos iterativos
- Inversão de matrizes

Eliminação gaussiana

Redução à forma triangular superior

Na etapa j anulam-se os coeficientes a_{ij} com $i > j$

- equação j designa-se **equação pivot**
- elemento a_{jj} designa-se **elemento pivot**
- à equação $i (> j)$ soma-se o múltiplo m_{ij} da equação j

$$m_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{jj}}$$

- se $a_{jj} = 0$ troca-se a equação j com a i tal que $a_{ij} \neq 0$

Eliminação gaussiana: aritmética finita

Resolver o sistema com aritmética de 4 dígitos.

$$\begin{cases} 0.0002x_1 + 1.672x_2 = 1.673 \\ 1.336x_1 - 2.471x_2 = 4.209 \end{cases}$$

Eliminação gaussiana: aritmética finita

Na substituição inversa

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$

a propagação de erros é

$$\varepsilon_{x_i} \leq \sum_{j=i+1}^n \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} \varepsilon_{x_j}$$

Então interessa que os quocientes $\frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|}$ sejam pequenos!

Para tal usam-se **estratégias de escolha de pivot**

Vamos agora ver ...

8 Sistemas de equações lineares

- Eliminação gaussiana
- Estratégias de pivotação
- Erro e resíduo de uma solução aproximada
- Perturbações no sistema de equações
- Métodos iterativos
- Inversão de matrizes

Estratégia parcial de pivot

① Na etapa j é escolhida a equação pivot k ($j \leq k \leq n$)

① calculam-se os valores $d_i = \max_{j \leq l \leq n} |a_{il}| \quad i = j, \dots, n$

② calculam-se os quocientes $\frac{|a_{ij}|}{d_i} \quad i = j, \dots, n$

③ selecciona-se para equação pivot aquela em que

$$\frac{|a_{kj}|}{d_k} \quad \text{é máximo}$$

② Troca-se a equação k com a j

③ Realiza-se a eliminação

Pivotação parcial: exemplo

Resolver por eliminação gaussiana, utilizando pivotação parcial e arredondando os resultados para 2 algarismos significativos.

$$\begin{bmatrix} 0.1 & 0.9 & 2.3 \\ 0.25 & 0.71 & 3.2 \\ 1.2 & 2.6 & 1.3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Estratégia total de pivot

- ① Na etapa j escolhe-se o elemento pivot a_{kl} ($k, l \in \{j, \dots, n\}$)
→ $|a_{kl}|$ é máximo
- ② Troca-se a equação j com a equação k
- ③ Troca-se a variável x_j com a variável x_l
- ④ Realiza-se a eliminação

Pivotação total: exemplo

Resolver por eliminação gaussiana, utilizando pivotação total e arredondando os resultados para 2 algarismos significativos.

$$\begin{bmatrix} 0.1 & 0.9 & 2.3 \\ 0.25 & 0.71 & 3.2 \\ 1.2 & 2.6 & 1.3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Pivotação parcial vs. pivotação total

- A pivotação parcial apenas exige trocas de linhas.
- A pivotação total exige ainda a troca de colunas, e logo é mais “cara” em esforço computacional.
- A pivotação total conduz geralmente a resultados melhores.
- No entanto, a pivotação parcial produz resultados suficientemente bons na maioria das situações.

Vamos agora ver ...

8 Sistemas de equações lineares

- Eliminação gaussiana
- Estratégias de pivotação
- Erro e resíduo de uma solução aproximada
- Perturbações no sistema de equações
- Métodos iterativos
- Inversão de matrizes

Erro e resíduo de uma solução aproximada

Sistema de equações: $Ax = b$ (A não singular)

\bar{x} : solução exacta

\tilde{x} : solução aproximada

Erro da solução aproximada: $e = \bar{x} - \tilde{x}$

Resíduo da solução aproximada: $r = b - A\tilde{x}$

Relação entre erro e resíduo: $r = Ae$

Erro e resíduo de uma solução aproximada

$$\tilde{x} = \bar{x} \Rightarrow e = 0 \wedge r = 0$$

$$\tilde{x} \neq \bar{x} \Rightarrow ?$$

erro pequeno $\stackrel{?}{\Rightarrow}$ resíduo pequeno

resíduo pequeno $\stackrel{?}{\Rightarrow}$ erro pequeno

Erro e resíduo: exemplo 1

$\begin{bmatrix} 1.01 & 0.99 \\ 0.99 & 1.01 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$ tem solução exacta $\bar{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

→ se $\tilde{x} = \begin{bmatrix} 1.01 \\ 1.01 \end{bmatrix}$ tem-se $e = \begin{bmatrix} -0.01 \\ -0.01 \end{bmatrix}$ e $r = \begin{bmatrix} -0.02 \\ -0.02 \end{bmatrix}$

erro relativo: 1% em cada componente

resíduo relativo: 1% em cada componente

→ se $\hat{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \end{bmatrix}$ tem-se $e = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \end{bmatrix}$ e $r = \begin{bmatrix} -0.02 \\ 0.02 \end{bmatrix}$

erro relativo: 100% em cada componente

resíduo relativo: 1% em cada componente

Erro e resíduo: exemplo 2

$\begin{bmatrix} 1.01 & 0.99 \\ 0.99 & 1.01 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix}$ tem solução exacta $\bar{x} = \begin{bmatrix} 100 \\ -100 \end{bmatrix}$

→ se $\tilde{x} = \begin{bmatrix} 101 \\ -99 \end{bmatrix}$ tem-se $e = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}$ e $r = \begin{bmatrix} -2 \\ -2 \end{bmatrix}$

erro relativo: 1% em cada componente

resíduo relativo: 100% em cada componente

Número de condição

O **número de condição** da matriz A é definido por

$$\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

A relação entre erro e resíduo fica agora

$$\frac{1}{\text{cond}(A)} \frac{\|r\|}{\|b\|} \leq \frac{\|e\|}{\|\bar{x}\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}$$

Número de condição

Se A é invertível então $I = AA^{-1}$ e logo

$$1 = \|I\| = \|AA^{-1}\| \leq \|A\| \|A^{-1}\| = \text{cond}(A)$$

Se $\text{cond}(A) \approx 1$ a matriz diz-se **bem condicionada**

Se $\text{cond}(A) \gg 1$ a matriz diz-se **mal condicionada**

Cálculo do número de condição

Teorema

Se A é não singular tem-se que

$$\text{cond}(A) = \max_{B \text{ singular}} \left(\frac{\|A\|}{\|A - B\|} \right).$$

Sendo B singular conclui-se que

$$\text{cond}(A) \geq \frac{\|A\|}{\|A - B\|}$$

Cálculo do número de condição: exemplo

Estimar o número de condição (na norma ∞) da matriz

$$A = \begin{bmatrix} 1.01 & 0.99 \\ 0.99 & 1.01 \end{bmatrix}$$

Vamos agora ver ...

8 Sistemas de equações lineares

- Eliminação gaussiana
- Estratégias de pivotação
- Erro e resíduo de uma solução aproximada
- Perturbações no sistema de equações
- Métodos iterativos
- Inversão de matrizes

Perturbações no sistema de equações

Sistema de equações $Ax = b$ com solução \bar{x}

Influência de perturbações nos elementos de A ou b em \bar{x}

Estas perturbações podem resultar de

- erros de medida
- erros de arredondamento

Perturbação nos termos independentes

Teorema

Seja \bar{x} a solução do sistema de equações $Ax = b$, onde A é não singular e b é não nulo.

Seja \tilde{x} a solução do sistema de equações (perturbado) $Ax = \tilde{b}$.

Então verifica-se que

$$\frac{\|\bar{x} - \tilde{x}\|}{\|\bar{x}\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\tilde{b} - b\|}{\|b\|}.$$

Perturbação nos termos independentes

O sistema de equações $Ax = b$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 4 & 3 & 1 \\ 2 & 2 & 3 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

tem solução $\bar{x} = [-0.2 \quad 1 \quad -0.2]^T$.

Se $\tilde{b} = [1.1 \quad 2.2 \quad 0.9]^T$, a solução é $\tilde{x} = [-0.62 \quad 1.7 \quad -0.42]^T$

Compare a variação relativa dos termos independentes com a variação relativa das soluções.

Perturbação na matriz dos coeficientes

Teorema

Seja \bar{x} a solução do sistema de equações $Ax = b$, onde A é não singular.

Seja \tilde{x} a solução do sistema de equações (perturbado) $\tilde{A}x = b$, onde \tilde{A} é não singular.

Então verifica-se que

$$\frac{\|\bar{x} - \tilde{x}\|}{\|\tilde{x}\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\tilde{A} - A\|}{\|A\|}.$$

Perturbação na matriz dos coeficientes: exemplo

O sistema de equações $Ax = b$, onde

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 10 \\ 0 & 1 & -6 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{bmatrix} 16 \\ -5 \\ 1 \end{bmatrix},$$

tem solução $\bar{x} = [1 \ 1 \ 1]^T$.

Se a matriz dos coeficientes for $\tilde{A} = \begin{bmatrix} 1 & 5 & 10 \\ 0 & 1 & -6 \\ 0 & 0 & 1.1 \end{bmatrix}$ a solução é
 $\tilde{x} = [\frac{51}{11} \ \frac{5}{11} \ \frac{10}{11}]^T$.

Compare a variação relativa da matriz de coeficientes com a variação relativa das soluções.

Vamos agora ver ...

8 Sistemas de equações lineares

- Eliminação gaussiana
- Estratégias de pivotação
- Erro e resíduo de uma solução aproximada
- Perturbações no sistema de equações
- **Métodos iterativos**
- Inversão de matrizes

Métodos iterativos

- Substituir a equação $Ax = b$ pela equação equivalente

$$x = Gx + d$$

- Escolher um valor inicial $x_{(0)} \in \mathbb{R}^n$
- Gerar a sucessão $\{x_{(k)}\}$, pela relação de recorrência

$$x_{(k+1)} = Gx_{(k)} + d \quad k = 0, 1, \dots$$

A sucessão $\{x_{(k)}\}$ deverá ser convergente para $A^{-1}b$!

Métodos iterativos

Algumas questões importantes

- Como determinar G e d a partir de A e b ?
- Em que condições converge o método iterativo?
- Que critério de paragem utilizar?
- Será possível estimar o erro?

Métodos iterativos

Dado o sistema de equações, onde $a_{ii} \neq 0 \forall i$,

$$\left\{ \begin{array}{lcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n & = & b_n \end{array} \right.$$

e resolvendo cada equação i em ordem a x_i , obtém-se

Métodos iterativos

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1 = -\frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 - \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 - \dots - \frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n + \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_2 = -\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1 - \frac{a_{23}}{a_{22}}x_3 - \dots - \frac{a_{2n}}{a_{22}}x_n + \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ x_n = -\frac{a_{n1}}{a_{nn}}x_1 - \frac{a_{n2}}{a_{nn}}x_2 - \frac{a_{n3}}{a_{nn}}x_3 - \dots + \frac{b_n}{a_{nn}} \end{array} \right.$$

Métodos iterativos

Definindo $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $c \in \mathbb{R}^n$ respectivamente por

$$b_{ij} = \begin{cases} -\frac{a_{ij}}{a_{ii}} & \text{se } i \neq j \\ 0 & \text{se } i = j \end{cases} \quad i, j = 1, \dots, n, \quad \text{e}$$
$$c_i = \frac{b_i}{a_{ii}} \quad i = 1, \dots, n,$$

este último sistema pode ser escrito como

$$x = Bx + c$$

Método de Jacobi

Utiliza a relação de recorrência

$$\mathbf{x}_{(k+1)} = B\mathbf{x}_{(k)} + \mathbf{c}$$

ou, equivalentemente

$$x_{i,(k+1)} = \sum_{j=1}^n [b_{ij}x_{j,(k)}] + c_i \quad i = 1, \dots, n$$

Método de Jacobi: exemplo

Aplicar o método de Jacobi para resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Método de Jacobi: exemplo

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$x_{3,(k)}$
0	0	0	0
1	1.0000	1.5000	0.7500
2	1.2500	1.1250	1.2500
3	0.9583	0.8750	1.0000
4	0.9583	1.0000	0.9479
5	1.0174	1.0260	1.0104
6	1.0052	0.9948	1.0087
7	0.9954	0.9957	0.9961
8	0.9999	1.0020	0.9990
9	1.0010	1.0005	1.0010
10	0.9998	0.9995	1.0000
11	0.9998	0.9999	0.9998
...

Método de Gauss-Seidel

Semelhante ao método de Jacobi, mas utiliza sempre a última estimativa disponível de cada variável.

Ao calcular $x_{i,(k+1)}$ já estão disponíveis os valores $x_{j,(k+1)}$ para $j = 1, \dots, i - 1$.

A expressão de recorrência é

$$x_{i,(k+1)} = \sum_{j=1}^{i-1} [b_{ij}x_{j,(k+1)}] + \sum_{j=i+1}^n [b_{ij}x_{j,(k)}] + c_i$$

Método de Gauss-Seidel: exemplo

Aplicar o método de Gauss-Seidel para resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 3 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Método de Gauss-Seidel: exemplo

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$x_{3,(k)}$
0	0	0	0
1	1.0000	1.5000	1.2500
2	1.0833	0.8750	0.9167
3	0.9861	1.0417	1.0243
4	1.0058	0.9878	0.9925
5	0.9985	1.0038	1.0023
6	1.0005	0.9989	0.9993
7	0.9999	1.0003	1.0002
8	1.0000	0.9999	0.9999
...

Exemplo2: métodos de Jacobi e Gauss-Seidel

Resolver o sistema

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 0 & 2 & -1 \\ 1 & -2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

- (a) aplicando o método de Jacobi;
- (b) aplicando o método de Gauss-Seidel.

Exemplo2: método de Jacobi

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$x_{3,(k)}$
0	0	0	0
1	1.0000	0.5000	0.5000
2	1.0000	0.7500	0.5000
3	1.2500	0.7500	0.7500
4	1.0000	0.8750	0.6250
5	1.2500	0.8125	0.8750
6	0.9375	0.9375	0.6875
7	1.2500	0.8438	0.9688
8	0.8750	0.9844	0.7188
9	1.2656	0.8594	1.0469
...

Exemplo2: método de Gauss-Seidel

k	$x_1,(k)$	$x_2,(k)$	$x_3,(k)$
0	0	0	0
1	1.0000	0.5000	0.5000
2	1.0000	0.7500	0.7500
3	1.0000	0.8750	0.8750
4	1.0000	0.9375	0.9375
5	1.0000	0.9688	0.9688
6	1.0000	0.9844	0.9844
7	1.0000	0.9922	0.9922
8	1.0000	0.9961	0.9961
9	1.0000	0.9980	0.9980
...

Convergência de métodos iterativos

Teorema

Sejam $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $d \in \mathbb{R}^n$. Se $\|G\| < 1$, então

- 1 existe uma e uma só solução $\bar{x} \in \mathbb{R}^n$ da equação

$$x = Gx + d,$$

- 2 a sucessão $\{x_{(k)}\}$, gerada por

$$x_{(k+1)} = Gx_{(k)} + d, \quad k = 0, 2, \dots,$$

converge para \bar{x} , qualquer que seja o ponto inicial $x_{(0)}$,

- 3 o erro de aproximação de \bar{x} por $x_{(k+1)}$, $\bar{x} - x_{(k+1)}$, satisfaz

$$\|\bar{x} - x_{(k+1)}\| \leq \frac{\|G\|}{1 - \|G\|} \|x_{(k+1)} - x_{(k)}\|, \quad k = 1, 2, \dots$$

Matriz diagonalmente dominante por linhas

Uma matriz $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ diz-se **estritamente diagonalmente dominante por linhas** quando

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n.$$

Método de Jacobi: convergência

Teorema

Sejam $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $b \in \mathbb{R}^n$. Se a matriz A for estritamente diagonalmente dominante por linhas então a sucessão gerada pelo método de Jacobi converge para a única solução do sistema de equações $Ax = b$, qualquer que seja o ponto inicial $x_{(0)}$.

Convergência do método de Jacobi: exemplo

Aplicando o método de Jacobi, obter uma solução aproximada do sistema de equações, com um erro máximo absoluto em cada variável de 5×10^{-3} .

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

Convergência do método de Jacobi: exemplo

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$x_{3,(k)}$	ε_k
0	0	0	0	—
1	0.75000	0.66667	1.00000	3
2	0.83333	0.91667	0.97222	7.5×10^{-1}
3	0.96528	0.94444	1.02778	4.0×10^{-1}
4	0.96528	0.98843	0.99306	1.3×10^{-1}
5	0.99595	0.98843	1.00772	9.2×10^{-2}
6	0.99228	0.99865	0.99749	3.1×10^{-2}
7	0.99995	0.99743	1.00212	2.3×10^{-2}
8	0.99818	0.99998	0.99916	8.9×10^{-3}
9	1.00020	0.99939	1.00060	6.0×10^{-3}
10	0.99955	1.00007	0.99973	2.6×10^{-3}

Método de Gauss-Seidel: convergência

Teorema

Sejam $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ e $b \in \mathbb{R}^n$. Se a matriz A for estritamente diagonalmente dominante por linhas então a sucessão gerada pelo método de Gauss-Seidel converge para a única solução do sistema de equações $Ax = b$, qualquer que seja o ponto inicial $x_{(0)}$.

Método de Gauss-Seidel: exemplo

Aplicando o método de Gauss-Seidel, obter uma solução aproximada do sistema de equações. Terminar o método assim que a diferença entre duas estimativas consecutivas seja inferior ou igual a 10^{-3} , em todas as variáveis.

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

Método de Gauss-Seidel: exemplo

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$x_{3,(k)}$	$\ x_{(k)} - x_{(k-1)}\ _\infty$
0	0	0	0	—
1	0.50000	0.50000	0.87500	8.8×10^{-1}
2	0.93750	0.93750	0.98438	4.4×10^{-1}
3	0.99219	0.99219	0.99805	5.5×10^{-2}
4	0.99902	0.99902	0.99976	6.8×10^{-3}
5	0.99988	0.99988	0.99997	8.5×10^{-4}

Relaxação do método de Jacobi

Expressão de recorrência

$$x_{i,(k+1)} = x_{i,(k)} + \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_{j,(k)} \right]$$

Expressão de recorrência com relaxação ($\omega > 0$)

$$x_{i,(k+1)} = x_{i,(k)} + \omega \cdot \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_{j,(k)} \right]$$

$0 < \omega < 1 \rightarrow$ sub-relaxação

$\omega > 1 \rightarrow$ sobre-relaxação

Relaxação do método de Gauss-Seidel

Expressão de recorrência

$$x_{i,(k+1)} = x_{i,(k)} + \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_{j,(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij}x_{j,(k)} \right]$$

Expressão de recorrência com relaxação ($\omega > 0$)

$$x_{i,(k+1)} = x_{i,(k)} + \omega \cdot \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_{j,(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij}x_{j,(k)} \right]$$

$0 < \omega < 1$ → **sub-relaxação**

$\omega > 1$ → **sobre-relaxação (SOR)**

Gauss-Seidel com relaxamento: exemplo

Comparar o método de Gauss-Seidel e o método SOR com $\omega = 1.25$ na resolução do sistema de equações

$$\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 &= 24 \\ 3x_1 + 4x_2 - x_3 &= 30 \\ -x_2 + 4x_3 &= -24 \end{cases}$$

cuja solução é $x_1 = 3$, $x_2 = 4$, $x_3 = -5$. Em ambos os casos partir de $x_{1,(0)} = x_{2,(0)} = x_{3,(0)} = 1$.

Exemplo: Gauss-Seidel

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$x_{3,(k)}$
0	1.00000	1.00000	1.00000
1	5.25000	3.81250	-5.04688
2	3.14063	3.88281	-5.02930
3	3.08789	3.92676	-5.01831
4	3.05493	3.95422	-5.01144
5	3.03433	3.97139	-5.00715
6	3.02146	3.98212	-5.00447
7	3.01341	3.98882	-5.00279
8	3.00838	3.99302	-5.00175

Exemplo: SOR

k	$x_{1,(k)}$	$x_{2,(k)}$	$x_{3,(k)}$
0	1.00000	1.00000	1.00000
1	6.10000	3.61000	-6.31700
2	2.73100	3.92500	-4.75910
3	3.12130	3.97810	-5.05475
4	2.99545	3.99205	-4.99144
5	3.00807	3.99690	-5.00264
6	3.00118	3.99877	-4.99984
7	3.00087	3.99951	-5.00018
8	3.00027	3.99980	-5.00002

Vamos agora ver ...

8 Sistemas de equações lineares

- Eliminação gaussiana
- Estratégias de pivotação
- Erro e resíduo de uma solução aproximada
- Perturbações no sistema de equações
- Métodos iterativos
- Inversão de matrizes

Inversão de matrizes

Calcular A^{-1} é equivalente a resolver $AX = I$

Ou seja, resolver simultaneamente n sistemas de n equações

Eliminação de Gauss-Jordan

Inversão de matrizes

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{array} \right]$$



$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & \cdots & 0 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{array} \right]$$

Inversão de matrizes

Em cada etapa

- efectuar escolha de pivot
 - pivotação parcial
 - pivotação total
- anular toda a coluna

Nota: Na pivotação total trocas de colunas em A reflectem-se em trocas de linhas em X !

Um novo capítulo ...

- 4 Aproximação de funções
- 5 Interpolação polinomial
- 6 Integração numérica
- 7 Sobre normas de vectores e matrizes
- 8 Sistemas de equações lineares
- 9 Integração de Equações diferenciais

Vamos agora ver ...

9

Integração de Equações diferenciais

- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- Método de Taylor
- Consistência e Convergência
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

EDOs — problema de valor inicial

Dados

- uma função $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$
- um intervalo real $[t_0, T]$
- e valores $x_{0,0}, x_{0,1}, \dots, x_{0,n-1} \in \mathbb{R}$

consiste em determinar $x : [t_0, T] \rightarrow \mathbb{R}$ que verifique

$$x^{(n)}(t) = f(t, x(t), x'(t), \dots, x^{(n-1)}(t)), \quad t \in]t_0, T[,$$

com a condições iniciais

$$x(t_0) = x_{0,0} \quad x'(t_0) = x_{0,1} \quad \dots \quad x^{(n-1)}(t_0) = x_{0,n-1}.$$

Métodos numéricos: descrição geral

Produzem valores aproximados da solução da EDO num conjunto de pontos $\{t_i\}_{i=0}^n$ tal que

$$t_0 < t_1 < \cdots < t_N = T.$$

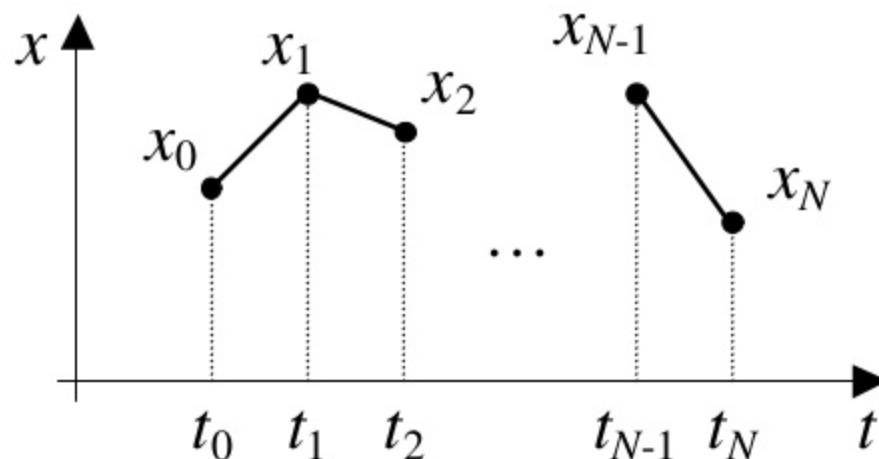
designado por **malha**.

- os pontos t_i são os **nós** da malha
- as distâncias $h_i = t_i - t_{i-1}$ designam-se por **passos**
- a malha é **uniforme** se todos os passos forem iguais
- o valor $h = \max_{1 \leq i \leq N} h_i$ é o **passo da malha**

Métodos numéricos: descrição geral

Resolução numérica de um **problema de valor inicial**:

- ① Definir uma malha $\{t_i\}_{i=0}^N$ no intervalo $[t_0, T]$;
- ② Para i de 1 até N determinar x_i , que será o valor da solução aproximada no nó t_i . **Nota:** x_0 é dado!



EDO de ordem 1: soluções aproximadas

x → solução exacta

$x_{(h)}$ → solução aproximada (com passo h)

$$e_{(h)} = x - x_{(h)}$$

$x_{(h)}$ definida nos nós t_i → $x_i = x_{(h)}(t_i)$

EDO de ordem 1: soluções aproximadas

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} f(t, \xi(t)) dt$$

$$\frac{x(t+h) - x(t)}{h} = \frac{1}{h} \int_t^{t+h} f(t, \xi(t)) dt = F(t, x) = F_h(t, x) + T_h(t, x)$$

$$F_h(t, x) \approx \frac{1}{h} \int_t^{t+h} f(t, \xi(t)) dt$$

$$x(t+h) \approx x(t) + hF_h(t, x)$$

$T_h(t, x)$ **erro de truncatura**

EDO de ordem 1: soluções aproximadas

Os valores x_i obtêm-se pela expressão de recorrência

$$x_{i+1} = x_i + hF_h(t_i, x_i), \quad i = 0, 1, \dots, N - 1.$$

x_0 é o valor inicial dado

Vamos agora ver ...

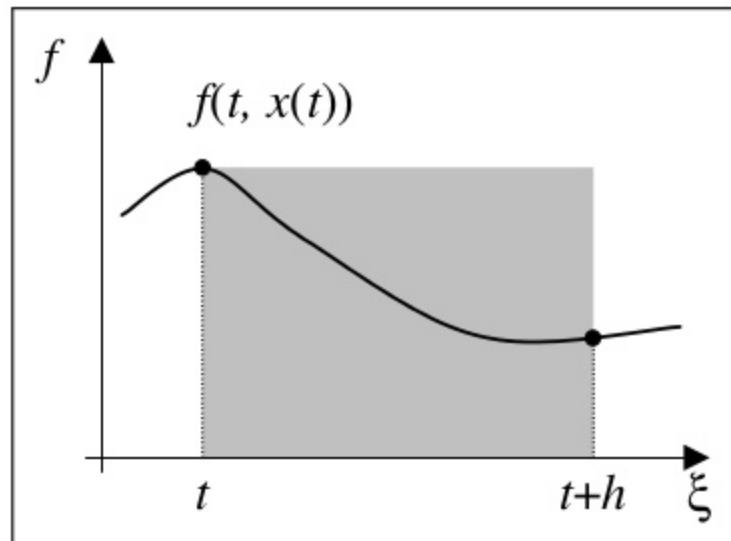
9

Integração de Equações diferenciais

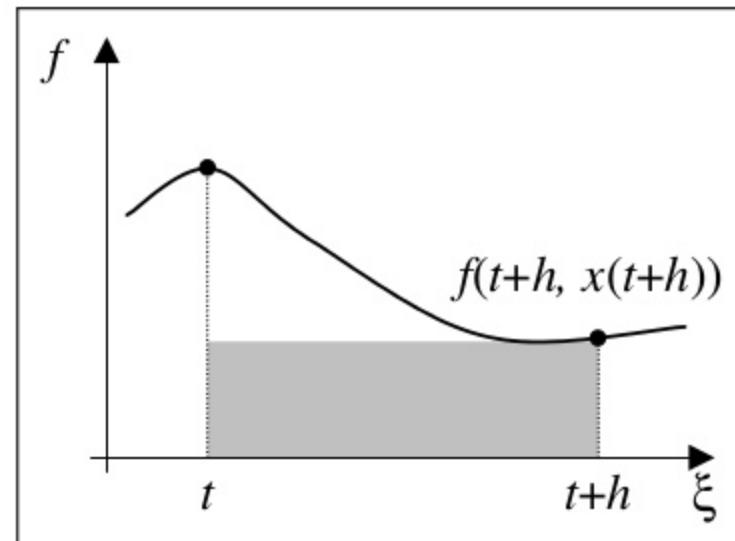
- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- Método de Taylor
- Consistência e Convergência
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

Métodos de Euler

O integral $\int_t^{t+h} f(\xi, x(\xi)) d\xi$ pode ser aproximado pelas áreas dos rectângulos como se mostra nas figuras.



Rectângulo à esquerda



Rectângulo à direita

Método de Euler (progressivo)

Caracteriza-se por

- $F_h(t, x) = f(t, x(t))$
- $T_h(t, x) = \frac{h}{2}f'(\zeta, x(\zeta))$

A expressão de recorrência para determinação de x_h será

$$x_{i+1} = x_i + hf(t_i, x_i), \quad i = 0, 1, \dots, N - 1,$$

onde $x_0 = x(t_0)$ é a condição inicial.

Método de Euler progressivo: exemplo

Utilizar o método de Euler progressivo com passo $h = 0.1$ para obter uma solução aproximada de

$$x' = 1 + t - x, \quad t \in [0, 1]$$

com $x(0) = 1$.

Método de Euler progressivo: exemplo

t_i	x_i	x_{i+1}
0.0	1.0000	1.0000
0.1	1.0000	1.0100
0.2	1.0100	1.0290
0.3	1.0290	1.0561
0.4	1.0561	1.0905
0.5	1.0905	1.1314
0.6	1.1314	1.1783
0.7	1.1783	1.2305
0.8	1.2305	1.2874
0.9	1.2874	1.3487
1.0	1.3487	—

Método de Euler regressivo

Caracteriza-se por

- $F_h(t, x) = f(t + h, x(t + h))$
- $T_h(t, x) = -\frac{h}{2}f'(\zeta, x(\zeta))$

A expressão de recorrência para determinação de x_h será

$$x_{i+1} = x_i + hf(t_{i+1}, x_{i+1}), \quad i = 0, 1, \dots, N-1,$$

onde $x_0 = x(t_0)$ é a condição inicial.

Método de Euler regressivo: exemplo

Utilizar o método de Euler regressivo com passo $h = 0.1$ para obter uma solução aproximada de

$$x' = 1 + t - x, \quad t \in [0, 1]$$

com $x(0) = 1$.

Método de Euler regressivo: exemplo

t_i	x_i	x_{i+1}
0.0	1.0000	1.0091
0.1	1.0091	1.0264
0.2	1.0264	1.0513
0.3	1.0513	1.0830
0.4	1.0830	1.1209
0.5	1.1209	1.1645
0.6	1.1645	1.2132
0.7	1.2132	1.2665
0.8	1.2665	1.3241
0.9	1.3241	1.3855
1.0	1.3855	—

Vamos agora ver ...

9

Integração de Equações diferenciais

- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- **Método de Taylor**
- Consistência e Convergência
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

Método de Taylor de ordem p

Caracteriza-se por

- $F_h(t, x) = f(t, x(t)) + \frac{h}{2}f'(t, x(t)) + \cdots + \frac{h^{p-1}}{p!}f^{(p-1)}(t, x(t))$
- $T_h(t, x) = \frac{h^p}{(p+1)!}f^{(p)}(\zeta, x(\zeta)), \quad \zeta \in [t, t+h]$

A expressão de recorrência é

$$x_{i+1} = x_i + hf(t_i, x_i) + \frac{h^2}{2}f'(t_i, x_i) + \cdots + \frac{h^p}{p!}f^{(p-1)}(t_i, x_i)$$

para $i = 0, 1, \dots, N - 1$.

Métodos de Taylor: exemplo

Utilizar o método de Taylor de ordem 2 com passo $h = 0.1$ para obter uma solução aproximada de

$$x' = 1 + t - x, \quad t \in [0, 1]$$

com $x(0) = 1$.

Métodos de Taylor: exemplo

t_i	x_i	x_{i+1}
0.0	1.0000	1.0050
0.1	1.0050	1.0190
0.2	1.0190	1.0412
0.3	1.0412	1.0708
0.4	1.0708	1.1071
0.5	1.1071	1.1494
0.6	1.1494	1.1972
0.7	1.1972	1.2500
0.8	1.2500	1.3072
0.9	1.3072	1.3685
1.0	1.3685	—

Vamos agora ver ...

9

Integração de Equações diferenciais

- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- Método de Taylor
- **Consistência e Convergência**
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

Consistência

Método **consistente** se

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|T_h\| = 0$$

Ordem de consistência $p > 0$ se

$$\|T_h\| \leq ch^p$$

Convergência

Método **convergente** se

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|e_{(h)}\| = \lim_{h \rightarrow 0} \max_{t \in [t_0, T]} |e_{(h)}(t)| = 0$$

Ordem de convergência $p > 0$ se

$$\|e_{(h)}\| \leq ch^p$$

Consistência e convergência

Teorema

Se um método de passo simples verificar a condição

$$|F_h(t, v) - F_h(t, w)| \leq L_h |v - w|, \quad t \in [t_0, T],$$

para todo o $h > 0$ suficientemente pequeno, onde L_h é independente de h (condição de Lipschitz) então será consistente se e só se for convergente. Mais ainda, para h suficientemente pequeno, tem-se que

$$|e_{(h)}(t)| \leq e^{L_h(t-t_0)} |e_0| + \frac{\|T_h\|}{L_h} [e^{L_h(t-t_0)} - 1], \quad t \in [t_0, T],$$

onde $e_0 = x(t_0) - x_{(h)}(t_0)$.

Convergência e arredondamento

Se o cálculo de cada valor x_i estiver associado um erro de arredondamento majorado por δ é possível verificar que

$$|e_{(h)}(t)| \leq e^{L_h(t-t_0)} |e_0| + \left(\frac{\|T_h\|}{L_h} + \frac{\delta}{h} \right) [e^{L_h(t-t_0)} - 1], \quad t \in [t_0, T]$$

pelo que quando $h \rightarrow 0$ o termo δ/h impede que o erro $e_{(h)}$ se aproxime de zero.

Vamos agora ver ...

9

Integração de Equações diferenciais

- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- Método de Taylor
- Consistência e Convergência
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

Métodos de Runge-Kutta

- têm ordens de consistência elevadas
- não necessitam de calcular derivadas de f
- o cálculo de x_{i+1} é feito avaliando f em pontos “intermédios” entre (t_i, x_i) e (t_{i+1}, x_{i+1})
- ordem de convergência é igual à ordem de consistência

Métodos de Runge-Kutta

x_{i+1} é obtido calculando f em s pontos

$$F_1 = f(t_i, x_i)$$

$$F_2 = f(t_i + \alpha_2 h, x_i + h\beta_{21} F_1)$$

$$F_3 = f(t_i + \alpha_3 h, x_i + h(\beta_{31} F_1 + \beta_{32} F_2))$$

...

$$F_s = f(t_i + \alpha_s h, x_i + h(\beta_{s,1} F_1 + \beta_{s,2} F_2 + \dots + \beta_{s,s-1} F_{s-1}))$$

$$x_{i+1} = x_i + h(w_1 F_1 + w_2 F_2 + \dots + w_s F_s)$$

s = ordem de consistência (para $s \leq 4$)

Runge-Kutta de 2^a ordem

Expressão de recorrência

$$F_1 = f(t_i, x_i)$$

$$F_2 = f(t_i + \alpha_2 h, x_i + h\beta_{21} F_1)$$

$$x_{i+1} = x_i + h(w_1 F_1 + w_2 F_2)$$

Condições para obter ordem de consistência 2

$$w_1 + w_2 = 1$$

$$\alpha_2 w_2 = \frac{1}{2}$$

$$\beta_{21} w_2 = \frac{1}{2}$$

Runge-Kutta de 2^a ordem

Método de Euler modificado $w_1 = w_2 = \frac{1}{2}$, $\alpha_2 = \beta_{21} = 1$

$$F_1 = f(t_i, x_i)$$

$$F_2 = f(t_i + h, x_i + hF_1)$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(F_1 + F_2)$$

Método de Heun $w_1 = \frac{1}{4}$, $w_2 = \frac{3}{4}$, $\alpha_2 = \beta_{21} = \frac{2}{3}$

$$F_1 = f(t_i, x_i)$$

$$F_2 = f(t_i + \frac{2}{3}h, x_i + \frac{2}{3}hF_1)$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{4}(F_1 + 3F_2)$$

Runge-Kutta de 4^a ordem

Um dos métodos mais usados é

$$F_1 = f(t_i, x_i)$$

$$F_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2}F_1\right)$$

$$F_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2}F_2\right)$$

$$F_4 = f(t_i + h, x_i + hF_3)$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{6}(F_1 + 2F_2 + 2F_3 + F_4)$$

Métodos de Runge-Kutta: exemplo

Com um passo $h = 0.1$ obter uma solução aproximada de

$$\begin{aligned}x' &= 1 + t - x, \quad t \in [0, 1] \\x(0) &= 1\end{aligned}$$

pelo método

- a) de Euler modificado;
- b) de Runge-Kutta de 4^a ordem.

Método de Euler modificado: exemplo

t_i	x_i	F_1	F_2	x_{i+1}
0.0	1.000000	0.000000	0.100000	1.005000
0.1	1.005000	0.095000	0.185500	1.019025
0.2	1.019025	0.180975	0.262878	1.041218
0.3	1.041218	0.258782	0.332904	1.070802
0.4	1.070802	0.329198	0.396278	1.107076
0.5	1.107076	0.392924	0.453632	1.149404
0.6	1.149404	0.450596	0.505537	1.197210
0.7	1.197210	0.502790	0.552511	1.249975
0.8	1.249975	0.550025	0.595022	1.307228
0.9	1.307228	0.592772	0.633495	1.368541
1.0	1.368541	—	—	—

Runge-Kutta de 4^a ordem: exemplo

t_i	x_i	$F_{1,i}$	$F_{2,i}$	$F_{3,i}$	$F_{4,i}$	x_{i+1}
0.0	1.00000	0.00000	0.05000	0.04750	0.09525	1.00484
0.1	1.00484	0.09516	0.14040	0.13814	0.18135	1.01873
0.2	1.01873	0.18127	0.22221	0.22016	0.25925	1.04082
0.3	1.04082	0.25918	0.29622	0.29437	0.32974	1.07032
0.4	1.07032	0.32968	0.36320	0.36152	0.39353	1.10653
0.5	1.10653	0.39347	0.42380	0.42228	0.45124	1.14881
0.6	1.14881	0.45119	0.47863	0.47726	0.50346	1.19659
0.7	1.19659	0.50341	0.52824	0.52700	0.55071	1.24933
0.8	1.24933	0.55067	0.57314	0.57201	0.59347	1.30657
0.9	1.30657	0.59343	0.61376	0.61274	0.63216	1.36788
1.0	1.36788	—	—	—	—	—

Comparação entre métodos: exemplo

t_i	Euler prog.	Euler reg.	Taylor 2	R-K 4	Sol. exacta
0.0	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
0.1	1.000000	1.009091	1.005000	1.004838	1.004837
0.2	1.010000	1.026446	1.019025	1.018731	1.018731
0.3	1.029000	1.051315	1.041218	1.040818	1.040818
0.4	1.056100	1.083013	1.070802	1.070320	1.070320
0.5	1.090490	1.120921	1.107076	1.106531	1.106531
0.6	1.131441	1.164474	1.149404	1.148812	1.148812
0.7	1.178297	1.213158	1.197210	1.196586	1.196585
0.8	1.230467	1.266507	1.249975	1.249329	1.249329
0.9	1.287420	1.324098	1.307228	1.306570	1.306570
1.0	1.348678	1.385543	1.368541	1.367880	1.367879

Vamos agora ver ...

9

Integração de Equações diferenciais

- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- Método de Taylor
- Consistência e Convergência
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

Sistemas de equações diferenciais

$$\begin{cases} x'_1(t) &= f_1(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) \\ x'_2(t) &= f_2(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) \\ &\vdots \\ x'_n(t) &= f_n(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t)) \end{cases}$$

Problema de valor inicial: determinar as funções x_1, x_2, \dots, x_n que satisfazem estas equações diferenciais num intervalo $[t_0, T]$ e as condições iniciais

$$x_1(t_0) = x_{1,0}, \quad x_2(t_0) = x_{2,0}, \quad \dots, \quad x_n(t_0) = x_{n,0}$$

Sistemas de equações diferenciais

Em notação vectorial

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{x}(t))$$

onde $\mathbf{f} : \mathbb{R}^{1+n} \rightarrow \mathbb{R}^n$ é definida por $\mathbf{f} = [f_1 \quad f_2 \quad \dots \quad f_n]^T$ e $\mathbf{x} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ é definida por $\mathbf{x} = [x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_n]^T$.

Problema de valor inicial: determinar a função \mathbf{x} que satisfaz a equação diferencial vectorial num intervalo $[t_0, T]$ e a condição inicial

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0,$$

Sistemas de EDO — Métodos numéricos

Malha $\{t_i\}_{i=0}^N$ de passo h no intervalo $[t_0, T]$

$\mathbf{x}_h \rightarrow$ solução aproximada do problema de valor inicial

$\mathbf{x}_i = \mathbf{x}_h(t_i)$ obtidos pela expressão de recorrência

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + h \mathbf{F}_h(t_i, \mathbf{x}_i)$$

para $i = 0, 1, \dots, N - 1$, sendo \mathbf{x}_0 dado.

Sistemas de EDO — Métodos numéricos

- Método de Euler progressivo

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + h\mathbf{f}(t_i, \mathbf{x}_i)$$

- Método de Taylor de ordem 2

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + h\mathbf{f}(t_i, \mathbf{x}_i) + \frac{h^2}{2}\mathbf{f}'(t_i, \mathbf{x}_i)$$

- Método de Euler modificado

$$\mathbf{F}_1 = \mathbf{f}(t_i, \mathbf{x}_i)$$

$$\mathbf{F}_2 = \mathbf{f}(t_i + h, \mathbf{x}_i + h\mathbf{F}_1)$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \frac{h}{2}(\mathbf{F}_1 + \mathbf{F}_2)$$

- ...

Vamos agora ver ...

9

Integração de Equações diferenciais

- Problema de valor inicial
- Métodos de Euler
- Método de Taylor
- Consistência e Convergência
- Métodos de Runge-Kutta
- Sistemas de equações diferenciais
- Equações diferenciais de ordem n

Equações diferenciais de ordem n

Determinar a função $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ que é solução de

$$x^{(n)}(t) = f(t, x(t), x'(t), \dots, x^{(n-1)}(t))$$

no intervalo $[t_0, T]$ e satisfaz as condições iniciais

$$x(t_0) = x_0$$

$$x'(t_0) = x'_0$$

...

$$x^{(n-1)}(t_0) = x_0^{(n-1)}$$

Equações diferenciais de ordem n

Considerando as funções x_1, x_2, \dots, x_n definidas por

$$x_1(t) = x(t)$$

$$x_2(t) = x'(t)$$

...

$$x_n(t) = x^{(n-1)}(t)$$

conclui-se que $x'_i(t) = x_{i+1}(t)$ para $i = 1, 2, \dots, n-1$

e também que

$$x'_n(t) = [x^{(n-1)}]'(t) = x^{(n)}(t) = f(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$$

Equações diferenciais de ordem n

O sistema de equações diferenciais toma a forma

$$x'_1(t) = x_2(t)$$

$$x'_2(t) = x_3(t)$$

...

$$x'_n(t) = f(t, x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))$$

devendo a sua solução satisfazer as condições iniciais

$$x_1(t_0) = x_0, \quad x_2(t_0) = x'_0, \quad \dots, \quad x_n(t_0) = x_0^{(n-1)}$$

Equações de ordem n : exemplo

Determinar, pelo método de Euler progressivo com passo 0.05, uma solução aproximada de

$$\theta'' + 10 \sin \theta = 0, \quad t \in [0, 0.5], \quad \theta(0) = 0.1, \quad \theta'(0) = 0.$$

Sistemas de equações diferenciais: exemplo

t_i	$x_{1,i} = \theta_i$	$x_{2,i}$	$x_{1,i+1}$	$x_{2,i+1}$
0.00	0.1000	0.0000	0.1000	-0.0499
0.05	0.1000	-0.0499	0.0975	-0.0998
0.10	0.0975	-0.0998	0.0925	-0.1485
0.15	0.0925	-0.1485	0.0851	-0.1947
0.20	0.0851	-0.1947	0.0754	-0.2372
0.25	0.0754	-0.2372	0.0635	-0.2748
0.30	0.0635	-0.2748	0.0498	-0.3066
0.35	0.0498	-0.3066	0.0344	-0.3314
0.40	0.0344	-0.3314	0.0179	-0.3486
0.45	0.0179	-0.3486	0.0004	-0.3576
0.50	0.0004	-0.3576	—	—