UDESC
UNIVERSIDADE
DO ESTADO DE
SANTA CATARINA

Cálculo Numérico

Grupo de Estudos do Ensino de Matemática - UDESC/Ibirama

Cálculo Numérico

Elaboração: *Ma. Andresa Pescador*
Ma. Thiane Pereira Poncetta Coliboro

Colaboradores: *Edson Elias Citadin*
Ma. Janaína Poffo Possamai
M. Jarbas Cleber Ferrari
Paolo Moser
M. Rogério Simões

Instituição: UDESC - Universidade do Estado de Santa Catarina

CEAVI - Centro de Educação Superior do Alto Vale do Itajaí

O Grupo de Estudos do Ensino de Matemática tem como objetivo produzir material didático para servir de instrumento de apoio ao processo de ensino-aprendizagem buscando qualificar e uniformizar a práticas das disciplinas da grande área Matemática na UDESC/Ibirama, através de um embasamento teórico claro, aprofundando os temas mais relevantes e organizando os conteúdos em tópicos.

Ibirama, 14 de dezembro de 2015.

Capítulo 1

Conceitos Gerais e Erros

1.1 Introdução

Considere o seguinte problema:

Determinar a altura de um edifício dispondo de apenas de uma bolinha de metal e um cronômetro.

Para calcular a altura podemos fazer uso dos conhecimentos da Física e utilizar a equação que descreve o deslocamento de um objeto em queda livre dada por

$$d = d_0 + v_0 t + \frac{1}{2} a t^2$$

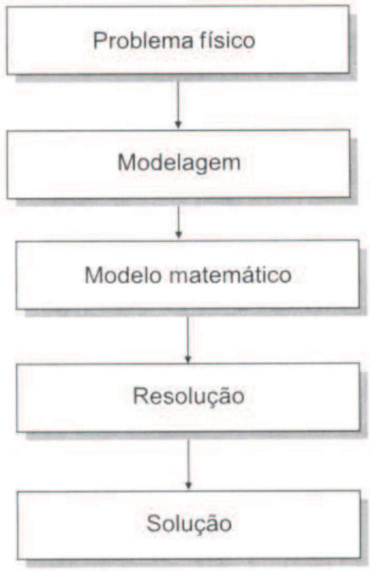
em que d_0 é a posição inicial, v_0 é a velocidade inicial, t é o tempo, a é a aceleração (neste caso a aceleração da gravidade) e d é a distância que o objeto percorreu.

Tendo esta expressão, pode-se subir ao topo do edifício e medir o tempo que a bolinha gasta para tocar o solo. Por exemplo, se o tempo foi de $t = 3$ segundos então a altura é de $44,1$ metros pois

$$d = 0 + 0 \cdot 3 + \frac{1}{2} \cdot 9,8 \cdot 3^2 = 44,1$$

Este é um exemplo simples de como podemos transformar situações reais em equações matemáticas e obter a solução do problema real por meio da solução da equação.

Em geral, a resolução de problemas físicos envolvem várias fases que podem ser assim estruturadas:



A partir do problema físico, considerando-se as características de cada situação e limitações de cada situação, chega-se a um modelo matemático.

Uma vez feita a modelagem matemática, a fase seguinte consiste na resolução do modelo matemático. Nesta fase deve-se verificar a existência e unicidade da solução para o problema. Feito ou admitido isso, resolver o modelo matemático numericamente significa obter uma solução, mesmo que aproximada, exclusivamente por processos numéricos.

A área da matemática que trata da concepção de processos numéricos e estuda sua praticabilidade para encontrar aproximações à solução do modelo matemático denomina-se *Análise Numérica.*

Foi com o surgimento do computador na década de 40 que a importância da análise numérica começou a ser notada, uma vez que, por meio do processamento eletrônico de dados, as técnicas numéricas se tornaram viáveis.

O cálculo numérico tem sua importância centrada no fato de que, mesmo quando a solução analítica é difícil de ser obtida, as técnicas numéricas podem ser empregadas sem maiores dificuldades. Até mesmo quando o problema não possui uma solução analítica, pode-se tentar obter, numericamente, uma solução aproximada que atenda ao problema real.

Exemplo 1 São exemplos de problemas sem solução analítica que podem ser resolvidos usando o cálculo numérico:

a) $x^6 - 20x^5 - 110x^4 + 50x^3 - 5x^2 + 70x - 100 = 0$

b) $\displaystyle\int_0^1 e^{x^2} dx$

c) $y'' = y^2 + t^2$

Com a popularização de computadores de baixo custo e de alta capacidade de processamento, praticamente todas as atividades de Engenharia tem feito uso cada vez mais intensivo dos métodos e técnicas computacionais na resolução de problemas reais. No entanto, o uso do computador como ferramenta de trabalho requer o entendimento dos seus princípios de operação e de como eles interferem nos resultados obtidos. O entendimento desses procedimentos numéricos exige conhecimento prévio de conceitos de cálculo diferencial e integral e da álgebra linear, bem como conhecimentos básicos de programação para computadores digitais.

1.2 Conceitos Básicos

Problema Numérico

É o tipo de problema que é resolvido por meio de cálculo numérico, onde tanto os dados de entrada (informações canhecidas) como os resultados (dados de saída) para o problema são conjuntos numéricos finitos.

A equação $x^6-20x^5-110x^4+50x^3-5x^2+70x-100 = 0$ é exemplo de um problema numérico, sendo os dados de entrada os coeficientes do polinômio $p(x) = x^6-20x^5-110x^4+50x^3-5x^2+70x-100$ dados no conjunto $E = \{1, -20, -110, 50, -5, 70, -100\}$ e os dados de saída, os valores de x que satisfazem a equação, ou seja, as raízes de $p(x)$.

Já o problema de valor de contorno

$$\begin{cases} y'' = y^2 + t^2, \ \text{para } t \in (0, 5) \\ y(0) = 0 \\ y(5) = 1 \end{cases} \tag{1.1}$$

não é um problema numérico já que os dados não se apresentam como uma quantidade finita de números reais. No entanto, isso não significa que esse problema não possa ser resolvido numericamente. Quando o modelo matemático não conduz a uma problema numérico, primeiramente, é preciso transformá-lo num problema numérico. Na equação (1.1), usando-se os conceitos de diferenças finitas apresentados no Apêndice A, pode ser transformada na seguinte equação:

$$\begin{cases} y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} = h^2(t_i^2 + y_i^2), \quad i = 1, 2, \ldots, m-1 \\ y_0 = 0 \\ y_m = 1 \end{cases} \tag{1.2}$$

onde $y_i = y(t_i)$. O problema (1.2) é agora um problema numérico, pois os dados de entrada formam um conjunto finito de números. Resolvê-lo implica calcular y_1, y_2, ..., y_{m-1}, que são os valores aproximados da função solução $y(t)$, nos pontos t_1, t_2, ..., t_{m-1}, que são igualmente espaçados com espaçamento h.

Método Numérico

Método numérico é um conjunto de procedimentos utilizados para transformar um modelo matemático num problema numérico ou um conjunto de procedimentos para resolver um problema numérico. A escolha do método mais eficiente para resolver um problema numérico deve envolver os seguintes aspectos:

(i) precisão desejada para os resultados;

(ii) capacidade do método em conduzir aos resultados desejado, isto é, o método deve ser convergente e uma velocidade de convergência satisfatória;

(iii) esforço ou complexidade computacional (número de operações aritméticas e lógicas realizadas, tempo de processamento, economia de memória necessária para a resolução)

Algoritmo

É a descrição sequencial dos passos que caracterizam um método numérico. O algoritmo fornece uma descrição completa de operações bem definidas por meios das quais o conjunto de dados de entrada é transformado em dados de saída. Por operações bem definidas entendem-se as aritméticas e lógicas que um computador pode realizar. Dessa forma, um algoritmo consiste de uma sequência de n passos, cada um envolvendo um número finito de operações. Ao fim desses n passos, o algoritmo deve fornecer valores ao menos "próximos" daqueles que são procurados. O número n pode não ser conhecido *a priori*. É o caso de algoritmos iterativos. Nesse caso, em geral tem-se para n apenas uma cota superior.

Iteração

Uma das idéias fundamentais do cálculo numérico é a de *iteração* ou *aproximação sucessiva*. Num sentido amplo, iteração significa a repetição de um processo. Grande parte dos métodos numéricos são iterativos. Um método iterativo se caracteriza por envolver os seguintes elementos constitutivos:

(i) **Aproximação inicial:** consiste em uma primeira aproximação para a solução desejada do problema numérico;

(ii) **Equação de recorrência:** equação por meio da qual, partindo-se da tentativa inicial, são realizadas as iterações para a solução desejada;

(iii) **Critério de parada:** é o instrumento por meio do qual o procedimento iterativa é finalizado.

Maiores detalhes sobre métodos iterativos serão discutidos ao longo dos capítulos.

1.3 Erros

Segundo Sperandio e Mendes (2003), na busca da solução do modelo matemático por meio de cálculo numérico, os erros surgem de várias fontes e merecem cuidado especial. Do contrário, pode-se chegar a resultados distantes do que se esperaria ou até mesmo obter outros que não têm nenhuma relação com a solução do problema original.

As principais fontes de erro são as seguintes:

(i) erros nos dados de entrada;

(ii) erros no estabelecimento do modelo matemático;

(iii) erros de arredondamento durante a computação;

(iv) erros de truncamento;

(v) erros de memória;

(vi) erros humanos;

Erros nos dados de entrada

Os dados de entrada do problema numérico contêm uma imprecisão inerente, isto é, não há como evitar que ocorram, uma vez que representam medidas obtidas usando equipamentos específicos, como, por exemplo, no caso de medidas de corrente e tensão num circuito elétrico, ou então podem ser dados resultantes de pesquisas ou levantamentos, como no caso de dados populacionais obtidos num recenseamento. Portanto, é preciso minimizar os erros no restante do processo de resolução do problema físico já que estas imprecisões nesta fase são inevitáveis.

Como exemplo, voltemos ao problema de calcular a a altura de um edifício dispondo de uma bolinha de metal e um cronômetro. Usando a equação $d = d_0 + v_0 t + \frac{1}{2}at^2$ com $t = 3$ segundos obtemos uma altura de $44,1$ metros. No entanto, se o cronômetro marcasse $t = 3,5$ segundos, a altura obtida seria de 60 metros. Ou seja, um erro de $16,7\%$ no valor lido no cronômetro causaria um erro de 36% na altura do edifício.

Erros no modelo matemático

O modelo matemático para o problema real deve traduzir e representar o fenômeno que está ocorrendo no mundo físico. Entretanto, nem sempre isso é fácil. Normalmente, são necessárias simplificações no modelo físico para se obter um modelo matemático que fornecerá uma solução para o problema original. As simplificações realizadas se constituem em fonte de erro, o que pode implicar a necessidade de reformulação do modelo físico e matemático.

Por exemplo, na equação citada anteriormente, $d = d_0 + v_0 t + \frac{1}{2}at^2$, não se leva em consideração, dentre outros fatores, a resistência do ar.

Erros de arredondamento

Os erros de arredondamento surgem devido ao fato de algumas propriedades básicas da aritmética real não valerem quando executadas no computador, pois, enquanto na matemática alguns números são representados por infinitos dígitos, na máquina isso não é possível. Por exemplo $1 \div 3 = 0,333...$. Qualquer representação com finitos algarismos 3 será uma aproximação do resultado esperado. Tem-se, então, um erro de arredondamento.

Também, devido ao fato da máquina usar uma quantidade finita de dígitos, os números com mais dígitos do que esse máximo não serão representados corretamente. Assim, não é possível representar todos os números de um dado intervalo $[a, b]$.

Os erros de arredondamento dependem de como os números são representados na máquina, e a representação, por sua vez, depende da base em que são escritos os números e da quantidade máxima de dígitos usados nessa representação. Quanto maior o número de dígitos utilizados após a vírgula, maior será a precisão.

Observação: Para números na base 10 (decimal), costuma-se arredondar um número usando k casas decimais após a vírgula da seguinte forma: se a $(k+1)$-ésima casa decimal for maior ou igual a 5, adiciona-se 1 ao algarismo da k-ésima casa decimal. Caso contrário, mantém-se as k primeiras casas decimais, sem modificações. Por exemplo, considerando 4 casas decimais após a vírgula tem-se

$$2,14357234 \approx 2,1436$$

$$2,14382932 \approx 2,1438$$

Vale ressaltar que o arredondamento é feito após cada operação, o que pode fazer com que as operações aritméticas (adição, subtração, divisão e multiplicação), associativas e distributivas em aritmética infinita, percam tais propriedades.

Exercício: Efetue as operações a seguir usando arredondamento após cada operação. Compare os resultados.

a) $(11,4 + 3,18) + 5,05$ e $11,4 + (3,18 + 5,05)$

b) $\dfrac{3,18 \times 11,4}{5,05}$ e $\dfrac{3,18}{5,05} \times 11,4$

c) $3,18 \times (5,05 + 11,4)$ e $3,18 \times 5,05 + 3,18 \times 11,4$

Um fato importante quando se trata de erros de arredondamento deve-se a base utilizada. É usual representar e realizar operações com números na base decimal mas um número real pode ser representado em qualquer base. Existem máquina que operam na base 2 (binária) e outras operam na base 8 (octal).

Na iteração entre o usuário e o computador que opera em base binária, por exemplo, ocorre o seguinte: o usuário passa seus dados na base decimal, e toda a informação é convertida para a base binária pelo computador. Os resultados obtidos no sistema binário são convertidos para o sistema decimal e, finalmente, transmitidos ao usuário. Esse processo de conversão de base pode se constituir em fonte de erro de arredondamento.

Além disso, um número pode ter representação finita em uma base e não finita em outra. Por exemplo, em base decimal, o número 0,6 é possui um representação finita mas em base binária sua representação é $0,100\overline{1100}...$

Observação: Não se pretende discutir detalhadamente neste material os conceitos de sistemas de numeração (bases e conversões), aritmética de ponto flutuante ou tipos de dados numéricos no computador. Tais tópicos podem ser encontrados nas referências bibliográficas, em especial nos livros de [1] a [4].

Erros de truncamento

Truncar um número após k casas decimais depois da vírgula é simplesmente cortar os seus dígitos a partir do $k + 1$. Por exemplo, considerando o truncamento 4 casas decimais após a vírgula tem-se

$$2,14357234 \approx 2,1435$$
$$2,14382932 \approx 2,1438$$

Outra situação onde ocorre erro de truncamento é o de funções representadas por séries de potência. Sabe-se que

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots$$

Por se tratar de uma série infinita, devemos escolher um número limitado de termos da série para que possamos calcular o valor numérico da função e^x e, independente da quantidade de algarismos significativos utilizados, o resultado será sempre aproximado. Esse constitui o erro de truncamento.

Exercício: Calcule o valor de e^2 usando:

a) a série truncada contendo 3 termos e usando oito dígitos após a vírgula

b) a série truncada contendo 7 termos e usando oito dígitos após a vírgula

Compare o resultado com $e^2 = 7,38905610$.

Erros de memória

Não enquadrados nos erros descritos anteriormente os erros por estouro de memória são conhecidos como *overflow* e *underflow*. O erro de overflow ocorre quando o resultado de uma operação aritmética ultrapassa o maior valor representado pela máquina. Analogamente, o erro de underflow ocorre para um resultado inferior ao menor valor que a máquina consegue representar. Esses limitantes superior e inferior dependem de cada máquina.

Erros humanos

Os erros humanos podem ocorrer em qualquer momento do processo de resolução, caracterizando-se principalmente por informações incorretas no modelo matemático ou problema numérico.

Análise de erros

Para Sperandio e Mendes (2003), a partir do momento em que se calcula um resultado por aproximação, é preciso saber como estimar ou delimitar o erro cometido na aproximação. Sem isso, a aproximação obtida não tem significado.

Para estimar o erro utiliza-se os conceitos de erro relativo e erro absoluto, definidos como:

- Erro Absoluto: $E_a = |\text{valor exato} - \text{valor aproximado}|$
- Erro Relativo: $E_r = \dfrac{|\text{valor exato} - \text{valor aproximado}|}{|\text{valor exato}|}$

  O erro relativo é frenquentemente dado como uma porcentagem.

Exemplo 2 Sendo $x = 200$ o valor exato e $\overline{x} = 202$ o valor aproximado então os erros absoluto e relativo são:

$$
\begin{aligned}
E_a &= |200 - 202| = 2 \\
E_r &= \frac{|200 - 202|}{|200|} = 0,01 \text{ (isto é, 1\% de erro).}
\end{aligned}
$$

Exercício: Calcular os erros absoluto e relativo.

(a) $x = 1000$ e $\overline{x} = 1001$.

(b) $x = 17,5894$ e $\overline{x} = 17,6287$.

Em certas situações, também é possível delimitar o erro, isto é, estabelecer a menor das cotas superiores para o erro. A delimitação do erro é sempre desejável, pois com ela tem-se um valor em que o erro cometido seguramente é inferior a um limite.

Quando os resultados obtidos por um algoritmo são vetores, para o cálculo dos erros relativo e absoluto é necessário o conceito de *norma vetorial.*

1.4 Normas

O modo usual de expressar a magnitude de um vetor é por meio de um escalar denominado *Norma.* No caso de um vetor x com n coordenadas, as normas são definidas em termos da norma-p.

$$||x||_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p} \tag{1.3}$$

A partir desta equação geral, obtem-se as três normas vetoriais mais comuns.

- Norma da soma das magnitudes ou Norma 1:

$$||x||_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| \tag{1.4}$$

- Norma Euclidiana ou Norma 2:

$$||x||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2} \tag{1.5}$$

- Norma do Máximo ou Norma Infinito:

$$||x||_\infty = \lim_{p\to\infty} \sqrt[p]{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p} = \max_{1\leq i\leq n} |x_i| \tag{1.6}$$

Formalmente, uma norma vetorial é uma função $||\cdot|| : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ que associa um número real a cada vetor e que satisfaz as condições:

(i) $||x|| \geq 0$

(ii) $||x|| = 0$ se, e somente se, $x = \vec{0}$

(iii) $||kx|| = |k|\ ||x||$

(iv) $||x + y|| \leq ||x|| + ||y||$

em que $x, y \in \mathbb{R}^n$ são vetores e $k \in \mathbb{R}$ é um escalar.

Exemplo 3 Calcular as normas 1, 2 e ∞ do vetor $x = [3, -5, 1]$.

(a) $||x||_1 = |3| + |-5| + |1| = 9$

(b) $||x||_2 = \sqrt{(3)^2 + (-5)^2 + (1)^2} = 5,9161$

(c) $||x||_\infty = \max\{|3|, |-5|, |1|\} = 5$

Uso de normas vetoriais para calcular erros

Se x é o vetor contendo os valores exatos e $\overline{x}$ contém os valores aproximados obtidos por algum método numérico então os erros relativo e absoluto são definidos como:

- Erro Absoluto:

$$E_a = \|x - \overline{x}\| \tag{1.7}$$

- Erro Relativo:

$$E_r = \frac{\|x - \overline{x}\|}{\|x\|} \tag{1.8}$$

Exercício: Calcular os erros absoluto e relativo para os vetores dados a seguir.

(a) $x = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 4 \end{bmatrix}$ e $\overline{x} = \begin{bmatrix} 1,87 \\ 0,93 \\ 4,35 \end{bmatrix}$. (b) $x = \begin{bmatrix} 3,585 \\ -1,254 \\ 0,876 \end{bmatrix}$ e $\overline{x} = \begin{bmatrix} 3,674 \\ -1,100 \\ 0,912 \end{bmatrix}$.

Normas Matriciais

Também é possível calcular normas quando o objeto de estudo são matrizes. Nesse caso, se A é uma matriz com entradas reais, uma função $|| \cdot || : M_{m\times n} \to \mathbb{R}$ é uma norma matricial se satisfaz

(i) $||A|| \geq 0$

(ii) $||A|| = 0$ se, e somente se, A for a matriz nula

(iii) $||kA|| = |k|\ ||A||$, k escalar

(iv) $||A + B|| \leq ||A|| + ||B||$, B sendo matriz da mesma ordem de A

As normas matriciais mais comuns são:

- Norma da soma máxima das colunas:

$$||A||_1 = \max_{1\leq j\leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \tag{1.9}$$

- Norma da soma máxima das linhas:

$$||A||_\infty = \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \tag{1.10}$$

- Norma de Frobenius:

$$||A||_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} (a_{ij})^2} \tag{1.11}$$

Exemplo 4 Calcular as normas 1, ∞, e F da matriz $A = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$.

(a) $||A||_1 = \max\{|2| + |3|, |-1| + |5|\} = \max\{5, 6\} = 6$

(b) $||A||_\infty = \max\{|2| + |-1|, |3| + |5|\} = \max\{3, 8\} = 8$

(c) $||A||_F = \sqrt{(2)^2 + (-1)^2 + (3)^2 + (5)^2} = \sqrt{39} \approx 6,2450$

Exercício: Calcule as normas 1, ∞, e F das matrizes a seguir:

(a) $M = \begin{bmatrix} 4 & -2 & 3 \\ 0 & 2 & -1 \\ 3 & 5 & 1 \end{bmatrix}$ (b) $I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$

1.5 Efeitos numéricos

Além dos problemas dos erros causados pelas operações aritméticas, existem certos efeitos numéricos que contribuem para que o resultado obtido não seja o desejado. Dentre eles podemos citar:

(i) cancelamento;

(ii) instabilidade numérica;

(iii) mal condicionamento.

Cancelamento

O cancelamento ocorre quando dois números aproximadamente iguais são subtraídos e é a maior fonte de erro nas operações de ponto flutuante.

Exemplo 5 Resolva o sistema $\begin{cases} 0,003x_1 + 30x_2 = 5,001 \quad \text{(I)} \\ 1x_1 + 4x_2 = 1 \quad \text{(II)} \end{cases}$ usando arredondamento com 4 casas decimais após a vírgula.

(a) Encontre x_2 e, usando a equação (I), encontre x_1.

(b) Encontre x_2 e, usando a equação (II), encontre x_1.

(c) Compare os resultados obtidos sabendo que a solução exata deste sistema é $x_1 = \dfrac{1}{3}$ e $x_2 = \dfrac{1}{6}$.

(d) Repita os itens anteriores usando 6 casas decimais.

Instabilidade numérica

Um dos aspectos importantes do cálculo numérico é manter o "controle" dos erros de arredondamento e truncamento. Dada uma sequência de operações, é importante saber como o erro se propaga ao longo das operações subsequentes. Se a propagação não é significativa, então se diz que o problema é *estável numericamente*. Caso contrário, se os erros intermediários têm uma influência muito grande no resultado final, tem-se a chamada *instabilidade numérica*.

Exemplo 6 Sabe da aritmética que

$$1 = \frac{3^4}{3^4} = (1 \div 3^4) \times 3^4 = (((((((((1 \div 3) \div 3) \div 3) \div 3) \times 3) \times 3) \times 3) \times 3)$$

Vamos realizar a operação acima usando arredondamento com 3 casas depois da vírgula. Assim:

$$\begin{aligned}
(((((((((1 \div 3) \div 3) \div 3) \div 3) \times 3) \times 3) \times 3) \times 3) \\
(((((((0,333 \div 3) \div 3) \div 3) \times 3) \times 3) \times 3) \times 3) \\
((((((0,111 \div 3) \div 3) \times 3) \times 3) \times 3) \times 3) \\
(((((0,037 \div 3) \times 3) \times 3) \times 3) \times 3) \\
((((0,012 \times 3) \times 3) \times 3) \times 3) \\
(((0,036 \times 3) \times 3) \times 3) \\
((0,108 \times 3) \times 3) \\
(0,324 \times 3) \\
0,972
\end{aligned}$$

Após nove operações aritméticas, o valor inicial 1 foi reduzido a 0,972. O erro ocorrido deve-se ao arredondamento utilizado ao usarmos 0,333 ao invés de $\frac{1}{3}$. O erro inicial, menor do que 0,0004, acabou se propagando em cada uma das operações aritméticas. Perceba que o erro absoluto final foi de 0,028, 70 vezes maior do que o erro inicial.

Mal condicionamento

Franco (2006) estabelece que a maioria dos processos numéricos segue a seguinte linha geral:

- Dados são fornecidos;
- Os dados são processados de acordo com o algoritmo;
- Resultados são produzidos.

Se os resultados dependem continuamente dos dados, isto é, pequenas alterações nos dados fornecidos produzem pequenas mudanças nos resultados, diz-se que o problema é bem condicionado. Caso contrário, o problema é *mal condicionado*. O exemplo a seguir traz um problema mal condicionado.

Exemplo 7 Considere o sistema linear $Ax = b$, com

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0.99 \\ 0.99 & 0.98 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad b = \begin{pmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{pmatrix},$$

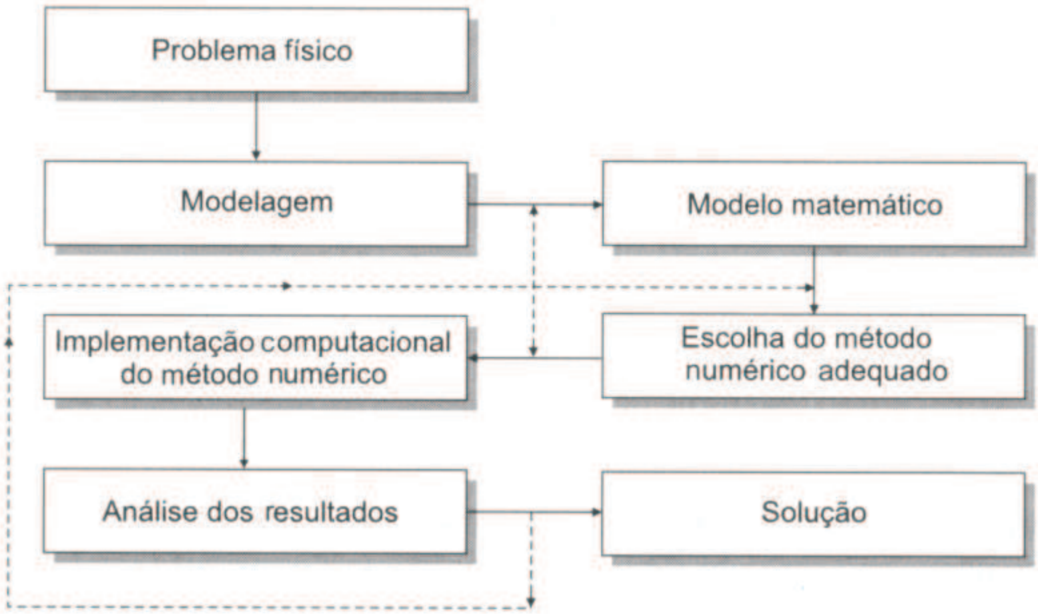
cuja solução exata é $x = [\ 1 \ \ 1\ ]^T$.

Se substituirmos o vetor b por um vetor com uma pequena perturbação $\widetilde{b} = [\ 1.99\ ;\ 1.98\ ]^T \approx b$ obtemos como solução do sistema $Ay = \widetilde{b}$ o vetor $y = [\ 100\ ;\ -99\ ]^T$. Portanto, uma pequena perturbação no vetor de termos independentes ocasionou uma grande modificação no vetor solução.

Considere agora a matriz $\widetilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0.99 \\ 0.99 & 0.99 \end{pmatrix} \approx A$. A solução exata do sistema $\widetilde{A}z = b$ é $z = [\ 2 \ \ -1/99\ ]^T$. Neste caso, foi uma pequena perturbação na matriz dos coeficientes que acarretou uma grande mudança no vetor solução. Estes problemas são causados porque a matriz A é quase singular sendo $\det(A) = -10^{-4}$.

1.6 Conclusão

Com algumas ideias preliminares e que são básicas para o cálculo numérico, o fluxograma apresentado na seção 1.1 deste capítulo, que indicava as fases de resolução de um problema real, pode agora ser assim reestruturado:



Capítulo 2

Sistemas de Equações Lineares

Denomina-se *sistema linear de n equações e n incógnitas* $x_1,\ x_2,\ \ldots,\ x_n$ todo sistema da forma:

$$S_n : \begin{cases} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \ldots & & \vdots & = & \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \ldots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{cases} \tag{2.1}$$

Por uma questão de conveniência costuma-se escrever o sistema linear na forma matricial

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & ... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & ... & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & ... & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & ... & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \Rightarrow Ax = b \tag{2.2}$$

em que

- A é chamada de *matriz dos coeficientes*;
- b é a *matriz dos termos independentes*;
- x é a *vetor das incógnitas.*

Em alguma situações, para simplificação, representamos o sistema linear S_n através da sua *matriz aumentada* dada por:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & ... & a_{1n} & | & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & ... & a_{2n} & | & b_2 \\ \vdots & \vdots & ... & \vdots & | & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & ... & a_{nn} & | & b_n \end{bmatrix} \tag{2.3}$$

Um sistema linear pode ser classificado como:

- *sistema possível (compatível) e determinado* (SPD): possui uma única solução;
- *sistema possível (compatível) e indeterminado* (SPI): possui infinitas soluções;
- *sistema impossível (incompatível)* (SI): não possui solução.

Em termos do determinante da matriz dos coeficientes A temos

- Se $\det(A) \neq 0$ então o sistema $Ax = b$ é SPD com $x = A^{-1}b$, em que A^{-1} é a matriz inversa de A
- Se $\det(A) = 0$ então o sistema $Ax = b$ é SPI ou SI, dependendo do lado direito b.

Exemplo 8 Classifique os sistemas lineares a seguir:

(a) $\begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ x_1 + x_2 = 1 \end{cases}$

(b) $\begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ x_1 - x_2 = 0 \end{cases}$

(c) $\begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ 2x_1 + 2x_2 = 0 \end{cases}$

Quando $b = \vec{0}$ o sistema é chamado *homogêneo*. Um sistema homogêneo sempre admite, pelo menos, a solução trivial $x = \vec{0}$.

2.1 Sistemas Triangulares

2.1.1 Sistema Triangular Inferior (Lower Triangular System)

Sistema da forma $Ax = b$ com A triangular inferior.

$$S_n : \begin{cases} l_{11}x_1 & = & c_1 \\ l_{21}x_1 + l_{22}x_2 & = & c_2 \\ l_{31}x_1 + l_{32}x_2 + l_{33}x_3 & = & c_3 \\ \vdots & & \vdots \\ l_{n1}x_1 + l_{n2}x_2 + ... + l_{n,n-1} + l_{nn}x_n & = & c_n \end{cases}$$

A solução do sistema é calculada por substituições sucessivas, pois determina-se x_1, em seguida, x_2, e assim por diante até obter x_n.

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{c_1}{l_{11}} \\ x_2 &= \frac{c_2 - l_{21}x_1}{l_{22}} \\ x_3 &= \frac{c_3 - l_{31}x_1 - l_{32}x_2}{l_{33}} \\ &\vdots \\ x_n &= \frac{c_n - l_{n1}x_1 - l_{n2}x_2 - \cdots - l_{n,n-1}x_{n-1}}{l_{nn}} \end{aligned}$$

As substituições sucessivas podem ser resumidas como:

$$x_i = \frac{c_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}x_j}{l_{ii}}, \qquad i = 1, 2, ..., n.$$

Para garantir que o sistema linear triangular admita uma única solução é necessário que $l_{ii} \neq 0$, para todo $i = 1, 2, ..., n$.

Exemplo 9 Calcular a solução do sistema triangular inferior, usando substituições sucessivas:

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 5 & 0 & 0 \\ 1 & -6 & 8 & 0 \\ -1 & 4 & -3 & 9 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 48 \\ 6 \end{bmatrix}$$

2.1.2 Sistema Triangular Superior (Upper Triangular System)

Sistema da forma $Ax = b$ com A triangular superior.

$$S_n : \begin{cases} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + u_{13}x_3 + \cdots + u_{1,n}x_n &= d_1 \\ u_{22}x_2 + u_{23}x_3 + \cdots + \ldots\ u_{2n}x_n &= d_2 \\ \vdots & \vdots \\ u_{n-1,n-1}x_{n-1} + u_{n-1,n}x_n &= d_{n-1} \\ u_{nn}x_n &= d_n \end{cases}$$

A solução do sistema é calculada por <u>substituições retroativas</u>, pois determina-se x_n, em seguida, x_{n-1}, e assim por diante até obter x_1.

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{d_n}{u_{nn}} \\ x_{n-1} &= \frac{d_{n-1} - u_{n-1,n}x_n}{u_{n-1,n-1}} \\ &\vdots \\ x_2 &= \frac{d_2 - u_{23}x_3 - \cdots - u_{2n}x_n}{u_{22}} \\ x_1 &= \frac{d_1 - u_{12}x_2 - u_{13}x_3 - \cdots - u_{1n}x_n}{u_{11}} \end{aligned}$$

As substituições retroativas podem ser representadas por

$$x_i = \frac{d_i - \displaystyle\sum_{j=1+1}^{n} u_{ij}x_j}{u_{ii}}, \qquad i = n, n-1, ..., 1.$$

Exercícios:

(a) $$\begin{bmatrix} 5 & -2 & 6 & 1 \\ 0 & 3 & 7 & -4 \\ 0 & 0 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 28 \\ 8 \end{bmatrix}$$

(b) $$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 - 5x_3 + x_4 = -10 \\ x_2 + x_3 - 2x_4 = -1 \\ 4x_3 - 5x_4 = 3 \\ 2x_4 = 2 \end{cases}$$

(c) $$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 - 5x_3 + x_4 = -10 \\ x_3 - 2x_4 = 0 \\ 4x_3 - 5x_4 = 3 \\ 2x_4 = 2 \end{cases}$$

(d) $$\begin{cases} 3x_1 + 4x_2 - 5x_3 + x_4 = -10 \\ x_3 - 2x_4 = -1 \\ 4x_3 - 5x_4 = 3 \\ 2x_4 = 2 \end{cases}$$

Como os sistemas triangulares são mais fáceis de serem resolvidos, muitos métodos numéricos para resolução de sistemas lineares baseiam-se em triangularizar a matriz dos coeficientes, criando um sistema linear equivalente ao inicial, isto é, que apresenta a mesma solução.

2.2 Métodos para Resolução de Sistemas Lineares e Análise de Erros

Estudaremos duas classes de métodos para sistemas lineares: os métodos diretos e os iterativos. A definição e características de cada uma dessas classes serão apresentadas mais adiante.

Nesse momento, vale ressaltar que dado um sistema $Ax = b$, a exatidão da solução $\overline{x}$ obtida por um método numérico deve ser verificada, para garantir que o sistema foi resolvido, exata ou aproximadamente. Para determinar o grau de exatidão, calcula-se o vetor resíduo dado por

$$r = A\overline{x} - b.$$

Se $\|r\| \approx 0$, para alguma norma, então $\overline{x}$ é uma boa aproximação para a solução exata do sistema $Ax = b$. Se o resíduo for o vetor nulo então a solução obtida é a solução exata.

Se a solução exata do sistema é conhecida, pode-se comparar a solução $\overline{x}$ obtida através dos erros relativo e absoluto. Quanto mais próximos os valores dos erros estiverem de zero, mais próximo da solução exata está o vetor $\overline{x}$.

Existem outras expressões para analisar o erro e a estabilidade do sistema, as quais não trataremos aqui. Mais detalhes em Sperandio, 2003.

2.3 Métodos Diretos

Segundo Sperandio (2003), métodos diretos são métodos numéricos que, na ausência de erros de erredondamento, determinam uma solução exata do sistema linear após um número finito de passos previamente conhecidos.

A seguir vamos estudar alguns dos métodos diretos mais conhecidos.

2.3.1 Eliminação de Gauss

Da Álgebra Linear sabe-se que dois sistemas lineares são *equivalentes* se possuem o mesmo conjunto solução. Um sistema de equações lineares se transforma num sistema equivalente quando se efetuam as seguintes operações elementares:

- permutação (troca) de duas equações ($L_i \leftrightarrow L_k$);
- multiplicação de uma equação por um número real diferente de zero ($L_i \leftarrow \lambda L_i$);
- substituição de uma equação por sua soma com outra equação previamente multiplicada por um número real diferente de zero ($L_i \leftarrow L_i + \lambda L_k$).

Esses são os conceitos básicos para a definição do Método de Gauss, cujo objetivo é transformar um sistema $Ax = b$ em um sistema triangular superior $Ux = d$ equivalente, por meio das operações elementares.

Exemplo 10 Resolver o sistema abaixo pelo método de eliminação de Gauss e verificar a exatidão da solução através do resíduo:

$$\begin{cases} x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 11 \\ -2x_1 + 8x_2 - x_3 = -15 \\ 4x_1 - 6x_2 + 5x_3 = 29 \end{cases}$$

Resolução: Primeiramente, vamos escrever a matriz aumentada do sistema, dada por

$$[A \mid b\,] = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 & | & 11 \\ -2 & 8 & -1 & | & -15 \\ 4 & -6 & 5 & | & 29 \end{bmatrix}$$

Para transformar a matriz A em triagular superior, os elementos da primeira coluna abaixo da diagonal devem ser eliminados, baseando-se no elemento da diagonal da primeira linha $a_{11} = 1$. Por esta razão, a_{11} é chamado de elemento pivô e a linha que o contém é a linha pivotal. Assim, para eliminar $a_{21} = -2$, a primeira linha deve ser multiplicada por um fator m_{21} e somada à segunda linha. Este fator é tal que $m_{21}a_{11} + a_{21} = 0$, ou seja,

$$m_{21} = -\frac{a_{21}}{a_{11}} = -\frac{-2}{1} = 2.$$

A nova linha 2 será $L_2 \leftarrow 2L_1 + L_2$.

Do mesmo modo, para eliminar $a_{31} = 4$ deve-se multiplicar a primeira linha por m_{31} e somar à terceira linha, tal que $m_{31}a_{11} + a_{31} = 0$, resultando em

$$m_{31} = -\frac{a_{31}}{a_{11}} = -\frac{4}{1} = -4,$$

e assim, $L_3 \leftarrow -4L_1 + L_3$.

Após estas duas operações elementares, o sistema equivalente intermediário será

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 & | & 11 \\ 0 & 2 & 3 & | & 7 \\ 0 & 6 & -3 & | & -15 \end{bmatrix}$$

Agora, para eliminar o elemento da segunda coluna abaixo da diagonal, deve-se usar $a_{22} = 2$ como pivô e a segunda linha como pivotal. A segunda linha é multiplicada pelo fator m_{32} e somada à terceira linha, com $m_{32}a_{22} + a_{32} = 0$ resultando em $m_{32} = -3$. A nova linha 3 será $L_3 \leftarrow -3L_2 + L_3$.

Note que a notação L_2, não representa é linha 2 do sistema original, e sim a segunda linha da matriz aumentada do passo anterior do escalonamento.

O sistema triangular superior equivalente obtido será

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 & | & 11 \\ 0 & 2 & 3 & | & 7 \\ 0 & 0 & -12 & | & -36 \end{bmatrix} \text{ ou na forma de sistema } \begin{cases} x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 11 \\ 2x_2 + 3x_3 = 7 \\ -12x_3 = -36 \end{cases}$$

Resolvendo o sistema obtemos $\overline{x} = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 3 \end{bmatrix}$ e $r = A\overline{x} - b = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$, o que indica que $\overline{x}$ é a solução exata do sistema linear.

Observação: Considere a matriz abaixo.

$$\begin{array}{ll} \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \cdots & a_{kj} & \cdots & a_{kn} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \\ \\ L_k: \text{ linha } k \\ \\ L_i: \text{ linha } i \\ \\ \\ \end{array} \end{array}$$

Se desejamos zerar o elemento a_{ij} usando a linha k, temos que encontrar o número real $m_{ij} \neq 0$ tal que

$$m_{ij}a_{kj} + a_{ij} = 0 \Rightarrow m_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{kj}}.$$

O número $m_{ij} = -\dfrac{a_{ij}}{a_{kj}}$ é chamado de <u>multiplicador</u> e a operação elementar será

$$L_i \leftarrow L_i + -\frac{a_{ij}}{a_{kj}} L_k$$

Exercícios: Calcule a solução dos sistemas lineares a seguir e o vetor resíduo.

1. $\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5 \\ 4x_1 + 4x_2 - 3x_3 = 3 \\ 2x_1 - 3x_2 + x_3 = -1 \end{cases}$

2. $\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 + x_4 = -6 \\ 2x_1 + x_2 - 4x_3 - 2x_4 = -7 \\ 4x_1 + 10x_2 - 6x_3 + x_4 = 1 \\ x_1 + 3x_2 + x_3 + 4x_4 = 12 \end{cases}$

3. No sistema abaixo use arredondamento com 1 casas decimais após a vírgula em cada operação

elementar.

$$\begin{cases} 5,4x_1 - 8,4x_2 = 5,4 \\ 3x_1 - 6,3x_2 - 2,7x_3 = -2,4 \\ 8,5x_1 - 13,4x_2 + 1,2x_3 = 10,9 \end{cases}$$

4. No sistema abaixo use arredondamento com 2 casas decimais após a vírgula. Dica: use $m_{21} = -\dfrac{24,5}{8,7}$ na forma de fração, sem efetuar a divisão.

$$\begin{cases} 8,7x_1 + 3x_2 + 9,3x_3 + 11x_4 = 16,4 \\ 24,5x_1 - 8,8x_2 + 11,5x_3 - 45,1x_4 = -49,7 \\ 52,3x_1 - 84x_2 - 23,5x_3 + 11,4x_4 = -80,8 \\ 21x_1 - 81x_2 - 13,2x_3 + 21,5x_4 = -106,3 \end{cases}$$

2.3.2 Método de Gauss-Jordan

O objetivo é transformar o sistema $Ax = b$ em um sistema diagonal equivalente, até que a matriz dos coeficientes tenha as seguintes características:

(i) o primeiro elemento não nulo de cada linha deve ser um;

(ii) os demais elementos desta coluna devem ser zero;

(iii) se houver alguma linha nula esta deve ser a última.

O procedimento é aplicado na matriz aumentada $[A \mid b\,]$, inicialmente zerando os elementos abaixo da disgonal principal de A, assim como na Eliminação Gaussiana, e depois, zerando os elementos acima da diagonal principal. Por final, transformar os pivôs em um, quando possível.

Exemplo 11 Usando o método de Gauss-Jordan, verifique que o vetor $\overline{x} = [1\ 1\ 1]^T$ é solução do sistema

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 4 \\ 2x_1 - x_2 - x_3 = 0 \\ x_1 - x_2 - x_3 = -1 \end{cases}$$

Exercícios: Resolver os sistemas usando Gauss-Jordan e calcular o vetor resíduo.

1. $\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 = -5 \\ 2x_1 + x_2 - 4x_3 = -9 \\ 4x_1 + 10x_2 - 6x_3 = 2 \end{cases}$

2. $\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 = -5 \\ 2x_1 - 3x_2 - 2x_3 = -1 \\ 4x_1 + 10x_2 - 6x_3 = 2 \end{cases}$

2.3.3 Método do Pivoteamento

O método de Gauss irá falhar quando um pivô for nulo, pois, neste caso, não será possível calcular os multiplicadores m_{ij} utilizados na eliminação. Este sério problema pode ser evitado pelo uso da estratégia do pivateamento, que consiste na troca de linhas e/ou colunas da matriz dos coeficientes de um sistema $Ax = b$.

Essa estratégia é usada não só quando os sistemas que apresentam um pivô nulo, mas também quando o pivô é próximo de zero.

O pivoteamento garante que o pivô seja não nulo, exceto quando a matriz for singular. Outra vantagem é que todos os multiplicadores satisfazem $-1 \leq m_{ij} \leq 1$, evitando, assim, que eles sejam muito grandes. Multiplicadores grandes podem ampliar os erros de arredondamento de tal modo a comprometer a solução do sistema. Com base na teoria de erros, pode-se mostrar que o erro de arredondamento diminui quando a estratégia de pivoteamento é usada.

Essa troca pode ser efetuada por meio de duas estratégias:

- **Pivoteamento Parcial**: o elemento pivô é escolhido como o elemento de maior módulo da coluna cujos elementos serão eliminados. Para eliminar o elemento da segunda coluna, escolhe-se o maior elemento, em módulo, desta coluna, sem considerar o elemento da primeira linha. Em geral, no passo k, escolhe-se o pivô utilizando as linhas $k, k+1, \ldots, n$.

- **Pivoteamento Completa**: o elemento pivô é escolhido como o elemento de maior módulo de toda a matriz dos coeficientes. Nesse caso, no passo k, escolhe-se o pivô dentre todos os elementos qua ainda atuam no processo de eliminação.

  A estratégia do pivotamento completo não é muito empregada, pois envolve uma comparação extensa entre todos os elementos da matriz e troca de linha e colunas. Isso acarreta um processo com esforço computacional maior que a estratégia de pivotamento parcial.

Segundo Sperandio, o escalonamento e o pivoteamento não devem ser entendidos como regra sem exceção mas sim como uma alternativa a que pode se recorrer para controlar erros de arredondamento.

Exemplo 12 Resolver o sistema abaixo pelo método de Gauss com pivoteamento parcial e completo.

$$\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 = -5 \\ 2x_1 - 3x_2 - 2x_3 = -1 \\ 4x_1 + 10x_2 - 6x_3 = 2 \end{cases}$$

Note que o pivoteamento evitou o aparecimento do pivô nulo na posição a_{22}.

Exemplo 13 Colocar exemplo que o pivoteamento contorne os erros de arredondamento. Ver pagina 70 Sperandio, página 129 Ruggiero, pagina

Exercícios: Resolver os sistemas pelo método de Gauss com pivoteamento parcial e, em seguida, usando pivoteamento completo.

1. $\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 = -5 \\ 2x_1 + x_2 - 4x_3 = -9 \\ 4x_1 + 10x_2 - 6x_3 = 2 \end{cases}$

2. $\begin{bmatrix} -3 & -2 & -1 & 1 & | & -5 \\ 6 & 2 & 2 & -8 & | & 2 \\ 0 & -3 & -5 & 7 & | & -1 \\ 0 & 2 & 4 & 0 & | & 6 \end{bmatrix}$

3. $\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 = 2 \\ 8x_1 + x_2 - 4x_3 = 5 \\ 4x_1 - 2x_2 - 6x_3 = -4 \end{cases}$

2.3.4 Fatoração LU

Em diversas situação, é possível escrever uma matriz como um produto de outras matrizes. Esse procedimento é chamada de *fatoração* ou *decomposição de matrizes.*

A fatoração LU consiste em decompor uma matriz A como um produto de duas matrizes, uma triangular inferior L e uma triangular superior U.

Exemplo 14 (a) $\begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 8 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

(b) $\begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & -1 \\ 4 & -6 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 4 & 3 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -12 \end{bmatrix}$

Cálculo dos fatores L e U

A matriz triangular superior U é a mesma do método de Gauss.

A matriz triangular inferior L é da forma:

$$\begin{cases} l_{ij} = 0, \text{ para } i < j \\ l_{ij} = 1, \text{ para } i = j \\ l_{ij} = -m_{ij}, \text{ para } i > j \end{cases}$$

em que m_{ij} são os multiplicadores usados no processo de eliminação de Gauss.

Observações:

(i) As matrizes L e U não são únicas.

Por exemplo, $\begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 8 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 8 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3/4 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$

(ii) Se no passo k da eliminação de Gauss forem criados pivôs unitários, por uma operação elementar da forma $L_i \leftarrow \lambda\, L_i$, entao $l_{ii} = 1/\lambda$, como no exemplo a seguir.

Exemplo 15 Considere a matriz $A = \begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$

- Sem criar pivôs temos:

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \\ L_2 \leftarrow L_2 + 1/2\ L_1 \\ L_3 \leftarrow L_3 - 1/2\ L_1 \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ 0 & 2 & -5 \\ 0 & -4 & 5 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ L_3 \leftarrow L_3 + 2L_2 \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & -5 \end{bmatrix}$$

Assim,

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & -5 \end{bmatrix}$$

- Criando pivôs temos:

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} L_1 \leftarrow 1/4\ L_1$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 5/2 & -3/2 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \\ L_2 \leftarrow L_2 + 2L_1 \\ L_3 \leftarrow L_3 - 2L_1 \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 5/2 & -3/2 \\ 0 & 2 & -5 \\ 0 & -4 & 5 \end{bmatrix} L_2 \leftarrow 1/2\ L_2$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 5/2 & -3/2 \\ 0 & 1 & -5/2 \\ 0 & -4 & 5 \end{bmatrix} \begin{array}{l} \\ \\ L_3 \leftarrow L_3 + 4L_2 \end{array}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 5/2 & -3/2 \\ 0 & 1 & -5/2 \\ 0 & 0 & -5 \end{bmatrix}$$

Assim,

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ -2 & 2 & 0 \\ 2 & -4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 5/2 & -3/2 \\ 0 & 1 & -5/2 \\ 0 & 0 & -5 \end{bmatrix}$$

Exercício: Determine a fatoração LU da matriz $A = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 2 \\ -2 & 8 & 0 \\ 4 & -9 & 5 \end{bmatrix}$ usando apenas operações elementares da forma $L_i \leftarrow L_i + \lambda\, L_k$. Repita o exercício com a criação de pivô unitários.

Resolução de Sistemas Lineares usando a Fatoração LU

A decomposição LU pode ser utilizada na resolução de sistemas lineares $Ax = b$ da seguinte forma:

$$Ax = b \Rightarrow LUx = b \Rightarrow \begin{cases} \text{Resolver } Ly = b \text{ obtendo } y \\ \text{Resolver } Ux = y \text{ obtendo } x \end{cases}$$

Os sistemas $Ly = b$ e $Ux = y$ são triangulares e podem ser resolvidos pelas substituições sucessivas e retroativas, respectivamente.

Uma das vantagens da utilização da decomposição LU na resolução de sistemas é a fato das matrizes L e U poderem ser utilizadas para diferentes lados direitos b, ao contrário dos métodos de Gauss e Gauss-Jordan, que modificam o lado direito juntamente com a matriz dos coeficientes.

Exemplo 16 Resolva o sistema linear a seguir usando a fatoração LU da matriz dos coeficientes.

$$\begin{cases} x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 11 \\ -2x_1 + 8x_2 - x_3 = -15 \\ 4x_1 - 6x_2 + 5x_3 = 29 \end{cases}$$

Exercício: Resolva o sistema dado no exemplo anterior, sendo o lado direito dado por $b = \begin{bmatrix} 0 \\ 5 \\ 3 \end{bmatrix}$.

Exercício: Resolva o sistema linear a seguir usando a fatoração LU da matriz dos coeficientes.

$$\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 = -5 \\ 2x_1 + x_2 - 4x_3 = -9 \\ 4x_1 + 10x_2 - 6x_3 = 2 \end{cases}$$

Fatoração LU com Pivoteamento Parcial

Quando o pivoteamento parcial for usado na Eliminação de Gauss, a fatoração LU é da forma $PA = LU$, em que

- L é formada pelos multiplicadores, sendo que a ordem em que os multiplicadores são atribuídos a cada linha de L é dada pelos índices das linhas pivotais.

- U é obtida pelo Método de Gauss com pivoteamento parcial;

- P é chamada de matriz de permutações e será constituída das linhas de uma matriz identidade I permutadas na mesma ordem que foram permutadas as linhas de A.

Exemplo 17 Considere a matriz $A = \begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix}$

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ L_2 \leftarrow L_2 + 1/2\ L_1 \quad (l_{21} = -m_{21} = -1/2\ ) \\ L_3 \leftarrow L_3 - 1/2\ L_1 \quad (l_{31} = -m_{31} = 1/2\ ) \end{matrix}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ 0 & 2 & -5 \\ 0 & -4 & 5 \end{bmatrix} L_2 \leftrightarrow L_3 \begin{matrix} (l_{21} = 1/2\ ) \\ (l_{31} = -1/2\ ) \end{matrix}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ 0 & -4 & 5 \\ 0 & 2 & -5 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ L_3 \leftarrow L_3 + 1/2\ L_2 \end{matrix}$$

$$\begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ 0 & -4 & 5 \\ 0 & 0 & -5/2 \end{bmatrix}$$

Assim,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ -2 & -3 & -2 \\ 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 \\ -1/2 & -1/2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 10 & -6 \\ 0 & -4 & 5 \\ 0 & 0 & -5/2 \end{bmatrix}$$

Para a resolução de um sistema linear $Ax = b$ em que $PA = LU$, deve-se utilizar:

$$Ax = b \Rightarrow PAx = Pb \Rightarrow LUx = Pb \Rightarrow \begin{cases} \text{Resolver } Ly = Pb \text{ obtendo } y \\ \text{Resolver } Ux = y \text{ obtendo } x \end{cases}$$

Exemplo 18 Resolva o sistema linear a seguir pela fatoração LU da matriz dos coeficientes, usando pivoteamento parcial no escalonamento.

$$\begin{cases} x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 11 \\ -2x_1 + 8x_2 - x_3 = -15 \\ 4x_1 - 6x_2 + 5x_3 = 29 \end{cases}$$

Exercício: Resolva o sistema linear a seguir pela fatoração LU da matriz dos coeficientes, usando pivoteamento parcial no escalonamento.

$$\begin{cases} -2x_1 + 3x_2 + x_3 = -5 \\ 2x_1 + x_2 - 4x_3 = -9 \\ 4x_1 + 10x_2 - 6x_3 = 2 \end{cases}$$

2.3.5 Decomposição de Cholesky

O Processo de Cholesky é definido para a resolução de sistemas lineares (n x n) cuja matriz do sistema é Simétrica e Definida Positiva (Ruggiero). A decomposição feita a seguir considera estas hipóteses.

Seja:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \ldots\ldots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 & 0 \\ \ldots\ldots & & & \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & \cdots & g_{n1} \\ 0 & g_{22} & \cdots & g_{n2} \\ & \ldots\ldots & & \\ 0 & 0 & 0 & g_{nn} \end{pmatrix}$$

Aplicando a definição de produtos de matrizes obtemos:

(a) Elementos diagonais.

$$a_{11} = g_{11}^2$$

$$a_{22} = g_{21}^2 + g_{22}^2$$

$$\vdots$$

$$a_{nn} = g_{n1}^2 + g_{n2}^2 + \ldots + g_{nn}^2$$

Assim:

$$\begin{cases} g_{11} = \sqrt{a_{11}} \\ g_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \qquad i = 2, 3, \ldots, n \end{cases} \tag{2.4}$$

(b) Elementos não diagonais.

b.1) Primeira coluna

$$a_{21} = g_{21} g_{11}$$

$$a_{31} = g_{31} g_{11}$$

$$\vdots$$

$$a_{n1} = g_{n1} g_{11}$$

b.2) Segunda coluna

$$a_{32} = g_{31} g_{21} + g_{32} g_{22}$$

$$a_{42} = g_{41} g_{21} + g_{42} g_{22}$$

$$\vdots$$

$$a_{n2} = g_{n1} g_{21} + g_{n2} g_{22}$$

b.3) Para a j-ésima coluna, teríamos:

$$a_{j+1,j} = g_{j+1,1}g_{j1} + g_{j+1,2}g_{j2} + ... + g_{j+1,j}g_{jj}$$

$$a_{j+2,j} = g_{j+2,1}g_{j1} + g_{j+2,2}g_{j2} ... + g_{j+2,j}g_{jj}$$

$$\vdots$$

$$a_{nj} = g_{n1}g_{j1} + g_{n2}g_{j2} + ... + g_{nj}g_{jj}$$

Assim:

$$\begin{cases} g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}, i = 2, 3..., n \\ g_{ij} = \left(a_{ij} - \displaystyle\sum_{k=1}^{j-1} g_{ik}g_{jk} \right) / g_{jj}, \quad 2 < j < i \end{cases} \tag{2.5}$$

Utilizadas numa ordem conveniente as fórmulas 2.4 e 2.5 determinam os g_{ij}. Uma ordem conveniente pode ser : $g_{11}, g_{21}, g_{31}, ..., g_{n1}; g_{22}, g_{32}, ..., g_{n2}; ...g_{nn}$

Observação:

1 Temos que na decomposição LU, $\det A = u_{11}u_{22}...u_{nn}$, uma vez que os elementos diagonais de L são unitários.

No caso do método de Cholesky temos: $A = G \cdot G^t$

$\det(A) = (\det(G))^2 = (g_{11}g_{22}...g_{nn})^2$

2 Uma vez calculado G, a solução de $Ax = b$ fica reduzida a solução do par de sistemas triangulares:

$$Gy = b$$

$$G^t x = y$$

Exemplo 19 Seja:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$$

a.) Verificar se A pode ser decomposta em $G.G^t$

b.) Decompor A em $G.G^t$

c.) Calcular o determinante de A.

d.) Resolver o sistema $Ax = b$ onde $b = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}$

Solução:

a.) A é simétrica. Devemos verificar se é positiva definida. Temos:

$$\det(A_1) = 1 > 0$$

$$\det(A_2) = 1 > 0$$

$$\det(A_3) = \det(A) = 2 > 0$$

Logo A pode ser decomposta em $G.G^t$

b.)

$$g_{11} = \sqrt{a_{11}} \Longrightarrow g_{11} = 1$$
$$g_{21} = \frac{a_{21}}{g_{11}} \Longrightarrow g_{21} = 1$$
$$g_{31} = \frac{a_{31}}{g_{11}} \Longrightarrow g_{31} = 0$$
$$g_{22} = (a_{22} - g_{21}^2)^{\frac{1}{2}} \Longrightarrow g_{22} = 1$$
$$g_{32} = \frac{a_{32} - g_{31}g_{21}}{g_{22}} \Longrightarrow g_{32} = -1$$
$$g_{33} = (a_{33} - g_{31}^2 - g_{32}^2)^{\frac{1}{2}} \Longrightarrow g_{33} = \sqrt{2}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & \sqrt{2} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}$$

c.) $\det A = (g_{11}g_{22}g_{33})^2 = 2$

d.) Devemos resolver dois sistemas:

d1.) $Gy = b$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & \sqrt{2} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}$$

Portanto :

$$y_1 = 2$$

$$y_1 + y_2 = 1 \Longrightarrow y_2 = -1$$

$$-y_2 + \sqrt{2}y_3 = 7 \Longrightarrow y_3 = 2\sqrt{2}$$

d2.) $G^t.x = y$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} . \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 2\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

Portanto:

$$\sqrt{2}x_3 = 2\sqrt{2} \Longrightarrow x_3 = 2$$

$$x_2 - x_3 = -1 \Longrightarrow x_2 = 1$$

$$x_1 + x_2 = 2 \Longrightarrow x_1 = 1$$

Logo a solução de

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix} \text{ é } x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

2.4 Métodos Iterativos

No capítulo 1, foi apresentado a definição de método iterativo. Vimos que um método desse tipo possui os seguintes elementos:

(i) Aproximação ou chute inicial: consiste em uma primeira aproximação para a solução desejada do problema numérico;

(ii) Equação de recorrência: equação por meio da qual, partindo-se da tentativa inicial, são realizadas as iterações para a solução desejada;

(iii) Critério de parada: é o instrumento por meio do qual o procedimento iterativa é finalizado.

No caso dos métodos iterativos para um sistema linear $Ax = b$, o objetivo é encontrar uma aproximação $\overline{x}$ para a solução exata do sistema. A partir de uma aproximação inicial $x^{(0)}$, é calculada uma sequência de soluções aproximadas $x^{(1)}, x^{(2)}, ...$ O vetor $\overline{x}$ é escolhido como sendo a primeira das aproximações $x^{(k)}$ que satisfaz o critério de parada estipulado.

Se x é a solução exata do sistema e $x^{(k)}$ são as aproximações calculadas, dizemos que o método iterativo é convergente se

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

para alguma norma (1, 2 ou ∞).

Vamos estudar dois método iterativos para sistemas lineares: o Método de Jacobi e o Método de Gauss-Seidel.

2.4.1 Método de Jacobi

Seja um sistema linear

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ...a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ...a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad = \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + ...a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

com $a_{ii} \neq 0$ para todo i.

Vamos obter a equação de recorrência para o método de Jacobi.

Isola-se x_1 na primeira equação, x_2 na segunda equação, x_3 na terceira equação e assim por diante. Desta forma obtem-se:

$$\left\{\begin{aligned} x_1 &= \frac{b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n)}{a_{11}} \\ x_2 &= \frac{b_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n)}{a_{22}} \\ &\vdots \\ x_n &= \frac{b_n - (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1})}{a_{nn}} \end{aligned}\right. \tag{2.6}$$

Podemos reescrever as equações (2.6) como $x = Fx + d$ em que

$$F = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \cdots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad d = \begin{bmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{bmatrix} \tag{2.7}$$

Portanto, o método de Jacobi funciona do seguinte modo:

(a) Escolhe-se uma aproximação inicial $x^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}\right)$;

(b) Geram-se sucessivas $x^{(k)}$ a partir da iteração $x^{(k+1)} = Fx^{(k)} + d$ para $k = 0, 1, 2, ...$

(c) Continua-se iterando até o critério de parada seja alcançado.

Critério de Parada

Como critério de parada, podemos usar

- $||x^{(k)} - x^{(k-1)}|| < \varepsilon$ em que $\varepsilon > 0$ é a tolerância pequena.
- $\dfrac{||x^{(k)} - x^{(k-1)}||}{||x^{(k)}||} < \varepsilon.$
- $k > k_{max}$ em que k_{max} é o número máximo de iterações.

Os dois primeiros critérios são, respectivamente, os erros absoluto e relativo entre as iterações $x^{(k)}$ e $x^{(k-1)}$. Para tal cálculo pode-se usar qualquer umas das normas 1, 2 ou ∞. Quando não for indicado a norma, deve-se usar $||x||_\infty = \max\{|x_i|\}$.

Exemplo 20 Resolver o seguinte sistema pelo Método de Jacobi com aproximação inicial $x^{(0)} = (0, 0)$ e critério da parada $||x^{(k)} - x^{(k-1)}||_\infty < 10^{-2}$ ou $k > 10$. Compare a solução obtida com a solução exata $x_1 = x_2 = 1$.

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

Critério de Convergência

Dado um sistema $Ax = b$, é condição suficiente para a convergência do método iterativo de Jacobi que a matriz dos coeficientes A seja diagonal estritamente dominante por linhas, ou seja,

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1\,,\,j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{2.8}$$

Em outras palavras, cada elemento de uma linha que pertença a diagonal principal dever ser maior em módulo que a soma dos módulos dos demais elementos desta linha da matriz dos coeficientes.

A convergência é também garantida se a matriz A for diagonal estritamente dominante por colunas.

Note que no exemplo anterior, a matriz dos coeficientes $A = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$ satisfaz o critério de convergência.

No caso do critério não ser satisfeito, nada se pode afirmar sobre a convergência do método iterativo, tendo em vista que a condição dada é apenas suficiente, e não uma condição necessária para a convergência.

Exemplo 21 Resolver o seguinte sistema linear pelo Método de Jacobi com aproximação inicial $x^{(0)} = (0, 0, 0)$ e critério da parada $||x^{(k)} - x^{(k-1)}||_\infty < 10^{-2}$.

$$\begin{cases} 3x_1 - 18x_2 + 2x_3 = -4,2 \\ 29,4x_1 + 3x_2 - 5x_3 = 10,9 \\ 7,4x_1 - 5,1x_2 + 37,1x_3 = 47,4 \end{cases}$$

2.4.2 Método de Gauss-Seidel

O Método de Gauss-Seidel pode ser visto como um aperfeiçoamento do Método de Jacobi. Para obter

Procedemos de maneira análoga ao método de Jacobi, usando as equações (2.6) obtemos o seguinte sistema de recorrência:

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{b_1 - (a_{12}x_2^{(k)} + a_{13}x_3^{(k)} + \cdots + a_{1n}x_n^{(k)})}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{b_2 - (a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{23}x_3^{(k)} + \cdots + a_{2n}x_n^{(k)})}{a_{22}} \\ &\vdots \\ x_n^{(k+1)} &= \frac{b_n - (a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} + \cdots + a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)})}{a_{nn}} \end{aligned}$$

novamente admitindo que $a_{ii} \neq 0$ para todo $i = 1, \ldots, n$.

Ou seja, no momento de se calcular $x_i^{(k+1)}$ usamos todos os valores $x_1^{(k+1)}, \ldots, x_{i-1}^{(k+1)}$ que já foram calculados e os valores $x_{i+1}^{(k+1)}, \ldots, x_n^{(k+1)}$ do passo anterior.

Convergência e Critério de Parada

A condição de convergência para para o Método de Gauss-Seidel é a mesma do Método de Jacobi, ou seja, a matriz dos coeficientes do sistema deve ser diagonal estritamente dominante por linhas ou por colunas.

Também, para o critério de parada, podemos adotar os mesmos vistos para o Método de Jacobi.

Exemplo 22 Resolver o seguinte sistema com aproximação inicial $x^{(0)} = (0,0)$ e critério da parada $||x^{(k)} - x^{(k-1)}||_\infty < 10^{-2}$.

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

Sabendo que a solução exata é $x = [1\ ;\ 1]^T$, calcule o erro absoluto e relativo usando a norma-∞.

Exemplo 23 Resolver o seguinte sistema com aproximação inicial $x^{(0)} = (0,0,0)$ e critério da parada $||x^{(k)} - x^{(k-1)}||_\infty < 10^{-2}$.

$$\begin{cases} 10x_1 + 2x_2 + 6x_3 = 28 \\ x_1 + 10x_2 + 9x_3 = 7 \\ 2x_1 - 7x_2 - 10x_3 = -17 \end{cases}$$

2.4.3 Outros Métodos Iterativos

Em geral, dado um sistema linear $Ax = b$ pode-se definir um método iterativo para resolver o sistema linear pela equação de recorrência

$$x = Fx + d$$

em que F tem a mesma dimensão de A. Assim, dada uma aproximação inicial x^0, obtem-se os demais termos da sequência de aproximações como

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= Fx^{(0)} + d \\ x^{(2)} &= Fx^{(1)} + d \\ &\vdots \\ x^{(k+1)} &= Fx^{(k)} + d \end{aligned}$$

Para obter F e d podemos adotar diferentes estratégias. Por exemplo,

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ x &= Ax + x - b \\ x &= (A+I)x - b \end{aligned}$$

o que forneceria $F = A + I$ e $d = -b$, sendo I a matriz identidade da mesma ordem de A.

Critério de Convergência

Um método iterativo dado pela equação de recorrência $x^{(k+1)} = Fx^{(k)} + d$ converge com qualquer valor inicial $x^{(0)}$ se, e somente se, $\rho(F) < 1$, sendo $\rho(F)$ o raio espectral (maior autovalor em módulo) da matriz de iteração F.

Em algumas situações, a determinação do raio espectral da matriz iteração pode requerer maior esforço computacional que a própria solução do sistema linear.

2.5 Aplicações de Sistemas Lineares

Cálculo de Estruturas; Cálculo de Redes Elétricas; Solução de Equações Diferenciais; etc.

2.6 Lista de Exercícios

1. Resolver os sistemas por um método direto.

(a) $\begin{cases} 6x_1 + 2x_2 - 1x_3 &= 7 \\ 2x_1 + 4x_2 + 1x_3 &= 7 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 &= 13 \end{cases}$

(b) $\begin{cases} 10x_1 + 1x_2 - x_3 &= 10 \\ x_1 + 10x_2 + x_3 &= 12 \\ 2x_1 - 1x_2 + 10x_3 &= 11 \end{cases}$

(c) $\begin{cases} 4x_1 - 6x_2 - x_3 &= -7 \\ 2x_1 - 3x_2 + x_3 &= -5 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 &= 4 \end{cases}$

(d) $\begin{bmatrix} 5 & 2 & 1 \\ -1 & 4 & 2 \\ 2 & -3 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -12 \\ 20 \\ 3 \end{bmatrix}$

(e) $\begin{cases} 2x_1 + 3x_2 + x_3 - x_4 &= 6,9 \\ -x_1 + x_2 - 4x_3 + x_4 &= -6,6 \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 &= 10,2 \\ 4x_1 - 5x_2 + x_3 - 2x_4 &= -12,3 \end{cases}$

(f) $\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 &= 10 \\ 2x_1 + x_2 + 2x_3 + 3x_4 &= 7 \\ 3x_1 + 2x_2 + x_3 + 2x_4 &= 6 \\ 4x_1 + 3x_2 + 2x_3 + x_4 &= 5 \end{cases}$

(g) $\begin{cases} x_2 + 3x_3 + 2x_4 + 4x_5 &= 3 \\ 8x_1 - 2x_2 + 9x_3 - x_4 + 2x_5 &= -5 \\ 5x_1 + x_2 + x_3 + 7x_4 + 2x_5 &= 6 \\ -2x_1 + 4x_2 + 5x_3 + x_4 &= -1 \\ 7x_1 - 3x_2 + 2x_3 - 4x_4 + x_5 &= 8 \end{cases}$

(h) $\begin{cases} 4x_1 - x_2 + 3x_3 + 8x_4 &= 43 \\ x_1 + 6x_2 + 2x_3 - 3x_4 &= 7 \\ 5x_1 + 5x_2 + x_3 &= 18 \\ 2x_1 + 4x_2 - 2x_3 + x_4 &= 8 \end{cases}$

(i) $\begin{cases} 4x_1 + 3x_2 + 2x_3 + x_4 &= 10 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 &= 5 \\ x_1 - x_2 - x_3 - x_4 &= -1 \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 &= 3 \end{cases}$

(j) $\begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 &= 0 \\ 3x_1 + 9x_2 + 5x_3 &= 4 \\ x_1 + 5x_2 + 7x_3 &= 5 \end{cases}$

(k) Use 4 casas decimais

$$\begin{cases} 0,8754x_1 + 3,0081x_2 + 0,9358x_3 + 1,1083x_4 = 0,8472 \\ 2,4579x_1 - 0,8758x_2 + 1,1516x_3 - 4,5148x_4 = 1,1221 \\ 5,2350x_1 - 0,8473x_2 - 2,3582x_3 + 1,1419x_4 = 2,5078 \\ 2,1015x_1 + 8,1083x_2 - 1,3233x_3 + 2,1548x_4 = -6,4984 \end{cases}$$

2. Resolva os seguintes sistemas lineares utilizando o método de Gauss com pivotamento parcial:

(a) $\begin{bmatrix} 3 & -2 & 5 & 1 \\ -6 & 4 & -8 & 1 \\ 9 & -6 & 19 & 1 \\ 6 & 4 & -6 & 15 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ -9 \\ 23 \\ 11 \end{bmatrix}$

(b) $\begin{bmatrix} 0,25 & 0,36 & 0,12 \\ 0,12 & 0,16 & 0,24 \\ 0,14 & 0,21 & 0,25 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1,142 \\ 0,296 \\ 0,442 \end{bmatrix}$

(c) $$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 2 & -1 \\ 3 & 2 & -3 & -2 \\ 4 & 3 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 1 \\ 14 \\ 12 \end{bmatrix}$$

3. Resolva os seguintes sistemas lineares utilizando decomposição LU.

(a) $$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 \\ -1 & 4 & 2 \\ 2 & -3 & 10 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -12 \\ 20 \\ 3 \end{pmatrix}$$

(b) $$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

(c) $$\begin{cases} 9x_1 - 6x_2 + 3x_3 &= -3 \\ -6x_1 + 29x_2 - 7x_3 &= -8 \\ 3x_1 - 7x_2 + 18x_3 &= 33 \end{cases}$$

4. Determinar o vetor solução para o sistema abaixo por um método iterativo partindo de $\overrightarrow{x^{(0)}} = [1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1]^T$, com precisão $\varepsilon < 10^{-4}$ e como número máximo de iterações k=30:

$$\begin{cases} 10x_1 + x_2 + x_3 + 2x_4 + 3x_5 - 2x_6 &= 6,57 \\ 4x_1 - 20x_2 + 3x_3 + 2x_4 - x_5 + 7x_6 &= -68,448 \\ 5x_1 - 3x_2 + 15x_3 - x_4 - 4x_5 + x_6 &= -112,05 \\ -x_1 + x_2 + 2x_3 + 8x_4 - x_5 + 2x_6 &= -3,968 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 + 3x_4 + 9x_5 - x_6 &= -2,18 \\ -4x_1 + 3x_2 + x_3 + 2x_4 - x_5 + 12x_6 &= 10,882 \end{cases}$$

5. Resolver usando Jacobi, com no máximo 10 iterações:

$$\begin{cases} x_1 - 0,25x_2 - 0,25x_3 &= 0 \\ -0,25x_1 + x_2 - 0,25x_4 &= 0 \\ -0,25x_1 + x_3 - 0,25x_4 &= 0,25 \\ -0,25x_2 + x_4 &= 0,25 \end{cases}$$

User $\overrightarrow{x}^{(0)} = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0]^T$ e $\varepsilon < 10^{-2}$

6. Resolver usando Gauss-Seidel, com no máximo 10 iterações:

$$\begin{cases} 5x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 &= 5 \\ x_1 + 9x_2 - 3x_3 + 4x_4 &= 26 \\ 3x_2 - 7x_3 + 2x_4 &= -7 \\ -2x_1 + 2x_2 - 3x_3 + 10x_4 &= 33 \end{cases}$$

Use $\overrightarrow{x}^{(0)} = [1 \quad 3 \quad 1 \quad 3]^T$ e $\varepsilon < 10^{-2}$

7. Resolver o sistema a seguir pelos métodos iterativos de Jacobi e de Gauss-Seidel com k máximo $= 10$ ou $\varepsilon < 10^{-3}$. Use $\overrightarrow{x}^0 = [1\ ;\ 2\ ;\ 3\ ;\ 4]$

$$\begin{cases} 10x_1 + 2x_2 - 3x_3 + 5x_4 = 48 \\ x_1 + 8x_2 - x_3 + 2x_4 = 4 \\ 2x_1 - x_2 - 5x_3 + x_4 = -11 \\ -x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 20x_4 = 150 \end{cases}$$

8. Sejam as matrizes:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & -4 \\ 2 & 10 & 4 \\ -4 & 4 & 9 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 \\ 1 & 3 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 16 \\ 9 \end{pmatrix}$$

Usando b dado acima, escolha adequadamente e resolva um dos sistemas $Ax = b$, $Bx = b$, pelo processo de Cholesky.

9. Resolva o sistema abaixo pelo processo de Cholesky, completando adequadamente os espaços em branco. $\begin{cases} 2x_1 + x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 + 10x_2 + x_3 = 6 \\ x_1 + 2x_2 - 4x_3 = -6 \end{cases}$

10. Considerando-se que o sistema de equações lineares algébricas Ax=b onde A é a matriz não singular, é transformado no sistema equivalente Bx=c, com $B = A^t.A; C = A^t.b$ onde A^t é a trasposta de A, então , o último sistema pode sempre ser resolvido pelo processo de Cholesky (isto é, a matriz B satisfaz às condições para a aplicação do método.) Aplicar a técnica acima para achar, pelo processo de Cholesky, a solução do sistema:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Gabarito

1. (a) $\overrightarrow{x} = [1\ ;\ 1\ ;\ 1]$
   (b) $\overrightarrow{x} = [1\ ;\ 1\ ;\ 1]$
   (c) $\overrightarrow{x} = [1\ ;\ 2\ ;\ -1]$
   (d) $\overrightarrow{x} = [-4\ ;\ 3\ ;\ 2]$
   (e) $\overrightarrow{x} = [0,9\ ;\ 2,1\ ;\ 3\ ;\ 4,2]^T$
   (f) $\overrightarrow{x} = [0\ ;\ 1\ ;\ 0\ ;\ 2]^T$
   (g) $\overrightarrow{x} = [2,347\ ;\ 4,354\ ;\ -2,391\ ;\ -1,768\ ;\ 2,339]$
   (h) $\overrightarrow{x} = [1\ ;\ 2\ ;\ 3\ ;\ 4]$
   (i) Sistema indeterminado com $Sol = \{(x_1, x_2, x_3, x_4)\ /\ x_1 = 1 - x_3 - 2x_4 \text{ e } x_2 = 2 - 2x_3 - 3x_4\}$
   (j) Sistema impossível
   (k) Solução exata: $\overline{x} = [1,\ -1,\ 2,\ 1]^T$.

2. (a) $\overrightarrow{x} = [1/3\ ;\ 0\ ;\ 1\ ;\ 1]$
   (b) $\overrightarrow{x} = [1,4\ ;\ 2,6\ ;\ -1,2]$

(c) $\overrightarrow{x} = [4,08\ ;\ -0,31\ ;\ -1,31\ ;\ 0,77]$

3. (a) $\overrightarrow{x} = [-4\ ;\ 3\ ;\ 2]$

   (b) $\overrightarrow{x} = [1\ ;\ 1\ ;\ 1]$

   (c) $\overrightarrow{x} = [-1\ ;\ 0\ ;\ 2]$

4. $\overrightarrow{x} = [1,222\ ;\ 2,968\ ;\ -7,393\ ;\ 0,866\ ;\ -0,410\ ;\ 1,014]^T$

5. $\overrightarrow{x} = [0,107\ ;\ 0,09\ ;\ 0,342\ ;\ 0,272]^T$

6. $\overrightarrow{x} = [1\ ;\ 2\ ;\ 3\ ;\ 4]^T$

7. $\overrightarrow{x} = [3\ ;\ -1\ ;\ 5\ ;\ 7]$

8.

9.

10.

2.7 Exercícios Aplicados

1. Sistema Esparso:
   EDO de 2^a Ordem:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + f(x) = 0; \quad y(0) = y(1) = 0$$

Fisicamente pode-se pensar que esta EDO (problema de contorno) é o modelo de uma barra fina aquecida no eixo x, no intervalo $0 \leq x \leq 1$. y(x) é a temperatura da barra em estado estacionário no ponto x, e a função -f(x) fornece a taxa na qual o calor está sendo gerado (ou suprido) na barra no ponto x. As condições dos extremos significam que cada extremidade da barra é mantida em temperatura zero. Para isso faz-se uma substituição da equação diferencial por um sistema de diferenças finitas (ver Apêndice A). Isto implica num sistema $Ay = b$ onde A é uma matriz tridiagonal,

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$, por exemplo se n=9 então A é 9×9;

y é nosso objetivo e $b = h^2(f(x_1), f(x_2), ..., f(x_n))^T$ sendo que $h = \dfrac{1}{n+1}$ (que é a subdivisão dos intervalos, tendo $x_i = i.h$).

Escolha $f(x) = 12x$ e resolva o sistema pelos métodos iterativos conhecidos (Jacobi ou Gauss-Seidel); Compare os resultados; Tente plotar a solução exata e as soluções encontradas;
Solução Exata: $y(x) = 2x - 2x^3$

2.8 Exercícios Práticos

1. Implementar um dos métodos diretos para sistemas lineares.

2. Implementar os métodos iterativos de Gauss-Seidel e de Jacobi.

Capítulo 3

Interpolação

Exemplo 24 A tabela a seguir mostra o número de habitantes da cidade de Belo Horizonte em 4 anos diferentes:

ano	1950	1960	1970	1980
n^o hab.	352724	683908	1235030	1814990

A partir dessas informações, como determinar o número aproximado de habitantes de Belo Horinzonte em 1975?

Em diversas aplicações práticas, conhece-se apenas um conjunto finito e discreto de pontos (x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n) com $x_k \in [a, b]$, para $k = 0, 1, \ldots, n$. Neste caso, tendo-se que trabalhar com a função $y = f(x)$ associada a tais pontos e não dispondo de sua forma analítica, pode-se substituí-la por outra função, que seja uma aproximação da função desejada, deduzida a partir dos dados tabelados.

A partir da função aproximada, chamada de *função interpoladora* e denotada por $\widetilde{f}(x)$, é possível calcular um aproximação para a função original $f(x)$ para pontos no intervalo (x_0, x_n), desde que:

$$\begin{aligned}
\widetilde{f}(x) &= f(x), \quad \text{se } x = x_i \quad \text{para } i = 0, 1, 2, \ldots, n \\
\widetilde{f}(x) &\approx f(x), \quad \text{se } x \neq x_i
\end{aligned}$$

A função $\widetilde{f}(x)$ é escolhida observando-se características do conjunto de pontos conhecidos, podendo ser um função afim, quadrática, trigonométrica, exponencial, etc. A interpolação mais comum é aquela em que $\widetilde{f}(x)$ é uma função polinomial.

3.1 Interpolação Polinomial

Dados $n+1$ pontos (x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n), queremos interpolar estes pontos por um polinômio $p_n(x)$ de grau menor ou igual a n, tal que:

$$y_i = p_n(x_i), \quad \text{para } i = 0, 1, ..., n. \tag{3.1}$$

Esta condição é essencial na interpolação pois o polinômio deve coincidir com a função $y = f(x)$ em todos os pontos conhecidos.

Representando o polinômio interpolador por

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n,$$

obter o polinômio interpolador significa obter os coeficientes a_0, a_1, ..., a_n.

Utilizando os pontos dados e a condição (3.1), obtemos o seguinte sistema de equações lineares com $(n+1)$ equações e $(n+1)$ variáveis:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 {x_0}^2 + \cdots + a_n {x_0}^n = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 {x_1}^2 + \cdots + a_n {x_1}^n = y_1 \\ \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 {x_n}^2 + \cdots + a_n {x_n}^n = y_n \end{cases} \tag{3.2}$$

A matriz dos coeficientes desse sistema é dada por

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & {x_0}^2 & \cdots & {x_0}^n \\ 1 & x_1 & {x_1}^2 & \cdots & {x_1}^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_n & {x_n}^2 & \cdots & {x_n}^n \end{bmatrix}$$

que é uma matriz de Vandermonde e, portanto, desde que x_0, x_1, ..., x_n sejam pontos distintos, temos $\det(A) \neq 0$, o que implica em um sistema possível e determinado (uma única solução).

Podemos ter interpolações polinomiais lineares, quadráticas, cúbicas, etc. , dependendo do grau do polinômio interpolador $p_n(x)$. Por exemplo:

- Para obter um polinômio interpolador de grau um (reta) usa-se examente dois pontos conhecidos;
- Para obter um polinômio interpolador de grau dois (parábola) usa-se examente três pontos conhecidos;
- Para obter um polinômio interpolador de grau três (cúbica) usa-se examente quatro pontos conhecidos.

Atenção: Note que a relação entre o número de pontos utilizados na interpolação e o grau do polinômio interpolador é dada por $n+1$ pontos fornecendo um polinômio de grau n. Essa relação deve ser satisfeita para garantir a existência e a unicidade do polinômio interpolador.

Há diversas formas de se obter os coeficientes de $p_n(x)$, dentre elas:

- Resolução do sistema linear (3.2);
- Método de Lagrange;
- Método de Newton.

A seguir, discutiremos mais detalhadamente cada um dos métodos.

3.1.1 Resolução de Sistema Linear

Vamos considerar o caso em que são dados dois pontos distintos (x_0, y_0) e (x_1, y_1) e deseja-se obter o polinômio interpolador de grau menor ou igual a um que passa por tais pontos. Neste caso, $p_1(x) = a_0 + a_1 x$ e o sistema utilizado para obter os coeficientes do polinômio é dado por:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 = y_0 \\ a_0 + a_1 x_0 = y_0 \end{cases}$$

devido as condições $p_1(x_0) = y_0$ e $p_1(x_1) = y_1$.

Na forma matricial temos

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 \\ 1 & x_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \end{bmatrix} \tag{3.3}$$

Exemplo 25 Sejam dois pontos $(0; 1,35)$ e $(1; 2,94)$ ponto do gráfico de uma função $y = f(x)$. Obter uma aproximação para $f(0,73)$ usando interpolação linear.

Tendo três pontos (x_0, y_0), (x_1, y_1) e (x_2, y_2), podemos obter um polinômio quadrático de interpolação. A saber, se $p_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$, os seus coeficientes são dados pela resolução do sistema:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 {x_0}^2 = y_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 {x_1}^2 = y_1 \\ a_0 + a_1 x_2 + a_2 {x_2}^2 = y_2 \end{cases}$$

Exemplo 26 Usando interpolação quadrática, obtenha uma aproximação para $f(0,8)$ usando os pontos da tabela:

x	-1	0	2
$f(x)$	4	1	-1

Exemplo 27 Obtenha o polinômio que interpola os pontos da tabela a seguir:

x	1	5	7
$f(x)$	7	39	67

Exemplo 28 Obtenha $p_3(x)$ que interpola os pontos da tabela abaixo. Use três casas decimais depois da vírgula e resolva o sistema linear pelo método de Gauss.

x	0,1	0,2	0,3	0,4
$f(x)$	5	13	-4	-8

Exercício: Obtenha o polinômio interpolador para os dados da população de Belo Horizonte apresentados no início deste capítulo e calcule uma aproximação para a população em 1975. Sabendo que a população em 1975 era de 1.557.464 habitantes, calcule o erro relativo obtido com a aproximação.

3.1.2 Método de Lagrange

O Método de Lagrange é uma opção para obter o polinômio interpolador $p_n(x)$ que não necessita da resolução de um sistema lienar. Neste caso, o polinômio interpolador de grau n é obtido a partir de uma soma de polinômios também de grau n.

Sejam (x_0, y_0), (x_1, y_1), $\ldots$, (x_n, y_n) pontos distintos. O polinômio que interpola os $n+1$ pontos dados, tem grau menor ou igual a n e é dado por

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k L_k(x) \tag{3.4}$$

em que

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0)\ldots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\ldots(x - x_n)}{(x_k - x_0)\ldots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\ldots(x_k - x_n)} = \prod_{i=0,\ i\neq k}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}, \tag{3.5}$$

para $k = 0, 1, \ldots, n$.

A dedução da forma de Lagrange para o polinômio interpolador pode ser obtida em livros de Cálculo Numérico.

Note que

$$L_k(x_i) = \begin{cases} 0 \text{ se } i \neq k \\ 1 \text{ se } i = k \end{cases}$$

e, portanto,

$$P_n(x_i) = y_i \cdot 1 = y_i = f(x_i),$$

ou seja, o polinômio interpolador coincide com a função nos pontos conhecidos.

Exemplo 29 Obtenha o polinômio interpolador para os pontos da tabela a seguir usando o Método de Lagrange.

k	0	1	2
x_k	1	5	7
y_k	7	39	67

Resolução: Pelo fórmula de Lagrange temos

$$\begin{aligned}
p_2(x) &= \sum_{k=0}^{2} y_k\, L_k(x) \\
&= y_0\, L_0(x) + y_1\, L_1(x) + y_2\, L_2(x) \\
&= y_0\, \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1\, \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\
&= 7\, \frac{(x-5)(x-7)}{(1-5)(1-7)} + 39\, \frac{(x-1)(x-7)}{(5-1)(5-7)} + 67\, \frac{(x-1)(x-5)}{(7-1)(7-5)} \\
&= x^2 + 2x + 4
\end{aligned}$$

Exemplo 30 Dados os pontos da tabela abaixo, determine uma aproximação para $f(0,3)$ usando interpolação pelo Método de Lagrage.

x	0	0,2	0,4	0,5
$y = f(x)$	0	2,008	4,064	5,125

Exemplo 31 Usando o Método de Lagrange, determine o polinômio interpolador para os pontos tabelados a seguir:

x	-1	0	2
$f(x)$	4	1	-1

Exemplo 32 Usando o Método de Lagrange, determine o polinômio interpolador para os pontos tabelados a seguir:

x	-2	-1	2	3
$f(x)$	3	-2	4	5

Exercício: Calcule o polinômio interpolador do exemplo anterior utilizando o solução do sistema linear através do Método de Gauss, usando duas casas decimais depois da vírgula.

Observação: O Método de Lagrange fornece o mesmo polinômio da solução do sistema linear visto anteriomente. A saber, dados $n+1$ pontos distintos, existe um e somente um polinômio $p_n(x)$ de grau menor ou igual a n que satisfaz $p_n(x_i) = y_i$, para todo $i = 0, 1, \ldots, n$.

Exercício: Resolva o sistema (3.3), obtendo os valores de a_0 e a_1 em função dos pontos conhecidos. Em seguida, obtenha o polinômio interpolador que passa pelos pontos (x_0, y_0) e (x_1, y_1) pelo Método de Lagrange. Compare os resultados.

Esquema Prático de Lagrange

Quando se deseja obter a imagem do polinômio interpolador para algum $x_{obj} \in [x_0, x_n]$, $x_{obj} \neq x_k$, $\forall k$, não é necessário calcular a forma explícita de $p_n(x)$. Nesse caso, podemos utilizar o chamado *Esquema Prático de Lagrange*.

Inicialmente, constrói-se a tabela a seguir:

	Diferenças				Produtos das Diferenças
	x_0	x_1	...	x_n	
x_0	—	$x_0 - x_1$	...	$x_0 - x_n$	$Prod_0$ $(x_0 - x_1) \cdot (x_0 - x_2) \cdot ... \cdot (x_0 - x_n)$
x_1	$x_1 - x_0$	—	...	$x_1 - x_n$	$Prod_1$ $(x_1 - x_0) \cdot (x_1 - x_2) \cdot ... \cdot (x_1 - x_n)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_n	$x_n - x_0$	$x_n - x_1$	...	—	$Prod_n$ $(x_n - x_0) \cdot (x_n - x_1) \cdot ... \cdot (x_n - x_{n-1})$
x_{obj}	Dif_0 $x_{obj} - x_0$	Dif_1 $x_{obj} - x_1$	...	Dif_n $x_{obj} - x_n$	$Prod_{obj}$ $(x_{obj} - x_0) \cdot (x_{obj} - x_1) \cdot ... \cdot (x_{obj} - x_n)$

Após calcular todos os elementos da tabela, o valor de $p_n(x_obj)$ é dado por

$$P_n(x_{obj}) = y_0 \cdot \frac{\frac{Prod_{obj}}{Dif_0}}{Prod_0} + y_1 \cdot \frac{\frac{Prod_{obj}}{Dif_1}}{Prod_1} + \cdots + y_n \cdot \frac{\frac{Prod_{obj}}{Dif_n}}{Prod_n} \tag{3.6}$$

Exemplo 33 Dados os pontos a seguir, obtenha uma aproximação para o valor de $f(3,6)$ usando e o esquema prático de Lagrange

k	0	1	2
x_k	1	5	7
$f(x_k) = y_k$	7	39	67

Exemplo 34 Dados os pontos da tabela a seguir, calcule uma aproximação para $f(0,47)$ usando um polinômio interpolador de grau 3 e o esquema prático de Lagrange

	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
x	0,2	0,34	0,4	0,52	0,6	0,72
$f(x) = y$	0,16	0,22	0,27	0,31	0,34	0,37

3.1.3 Método de Newton

No Método de Newton, dados $n + 1$ pontos distintos, (x_0, y_0), (x_1, y_1), ..., (x_n, y_n), o polinômio interpolador $p_n(x)$ de grau n é obtido pela soma de polinômios de grau 1, grau 2, $\cdots$, grau $n - 1$ e grau n, isto é, polinômio de grau menor ou igual a $p_n(x)$.

Tais polinômios são definidos com o auxílio das chamadas diferenças divididas, que veremos a seguir.

Diferenças Divididas

Sejam $n+1$ pontos distintos x_0, x_1, ..., x_n no intervalo $[a, b]$ e sejam $y_i = f(x_i) = f_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$, as imagens dos respectivos pontos.

Define-se as diferenças divididas, denotadas por $f[\cdot]$, como

$$\begin{aligned} f[x_i] &= f(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots, n \\ f[x_0, x_1, ..., x_n] &= \frac{f[x_1, x_2, ..., x_n] - f[x_0, x_1, ..., x_{n-1}]}{x_n - x_0} \end{aligned}$$

em que $f[x_0, x_1, ..., x_n]$ é a diferença dividida de ordem n da função $f(x)$ sobre os pontos $x_0, x_1, ..., x_n$.

Assim, usando a definição temos:

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1] &= \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} \\ f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} \\ f[x_0, x_1, x_2, x_3] &= \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Observe que, do lado direito de cada uma das igualdades anteriores devemos aplicar sucessivamente a definição de diferença dividida até que os cálculos envolvam apenas o valor da função nos pontos, isso é:

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_1 - x_0} = \frac{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2 - x_0}$$

Entretanto, podemos calcular as diferenças divididas de uma função, de uma maneira mais simples, conforme segue:

Para calcular as diferenças divididas de uma função $f(x)$ sobre os pontos $x_0, ..., x_n$, construímos a tabela de diferenças divididas:

x_i	$f[x_i]$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}...$	
x_0	$f[x_0] = f_0$			
		$f[x_0, x_1] = \dfrac{f[x_1] - f[x_o]}{x_1 - x_0}$		
x_1	$f[x_1] = f_1$		$f[x_0, x_1, x_2] = \dfrac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$	
		$f[x_1, x_2] = \dfrac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1}$		$\dots$
x_2	$f[x_2] = f2$		$f[x_1, x_2, x_3] = \dfrac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1}$	
		$f[x_2, x_3] = \dfrac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2}$		$\dots$
x_3	$f[x_3] = f3$		$f[x_2, x_3, x_4] = \dfrac{f[x_3, x_4] - f[x_2, x_3]}{x_4 - x_2}$	
		$f[x_3, x_4] = \dfrac{f[x_4] - f[x_3]}{x_4 - x_3}$	$\vdots$	$\dots$
x_4	$f[x_4] = f_4$	$\vdots$		
$\vdots$	$\vdots$			

A tabela é construída da seguinte forma:

a) a primeira coluna é constituída dos pontos $x_k, k = 0, 1, ..., n$

b) a segunda contém os valores de $f(x)$ nos pontos $x_k, k = 0, 1, ..., n$

c) nas colunas 3,4,5,... estão as diferenças divididas de ordem 1,2,3... Cada uma dessas diferenças é uma fração cujo numerador é sempre a diferença entre duas diferenças divididas consecutivas e de ordem imediatamente inferior, e cujo denominador é a diferença entre os dois extremos dos pontos envolvidos.

Exemplo utilizando diferenças divididas

Pela seguinte função tabelada, construir a tabela de diferenças divididas:

x	-2	-1	0	1	2
$f(x)$	-2	29	30	31	62

Solução: Utilizando o esquema anterior, obtemos a tabela:

x_i	$f[x_i]$	$f[x_i, x_j]$	$f[x_i, x_j, x_k]$	$f[x_i, ..., x_l]$	$f[x_i], ..., x_m]$
-2	-2				
		$\frac{29-(-2)}{-1-(-2)} = 31$			
-1	29		$\frac{1-31}{0-(-2)} = -15$		
		$\frac{30-29}{0-(-1)} = 1$		$\frac{0-(-15)}{1-(-2)} = 5$	
0	30		$\frac{1-1}{1-(-1)} = 0$		$\frac{5-5}{2-(-2)} = 0$
		$\frac{31-30}{1-0} = 1$		$\frac{15-0}{2-(-1)} = 5$	
1	31		$\frac{31-1}{2-0} = 15$		
		$\frac{62-31}{2-1} = 31$			
2	62				

Assim, o elemento 0 corresponde à diferença dividida $f[x_1, x_2, x_3]$. Portanto, usando a definição, segue que: $f[x_1, x_2, x_3] = \dfrac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1}$ e, usando o item c) anterior temos que: $f[x_1, x_2, x_3] = \dfrac{1-1}{1-(-1)} = 0$

Fórmula de Newton

Para obtermos a fórmula de Newton do polinômio de interpolação precisamos inicialmente definir algumas funções. Para tanto consideremos que $f(x)$ seja contínua e que possua derivadas contínuas em $[a, b]$ e, além disso, que os pontos $x_0, x_1, ..., x_n$ sejam distintos em $[a, b]$. Definimos então as funções:

$$
\begin{aligned}
f[x_0, x] &:= \frac{f[x] - f[x_0]}{x - x_0}, \text{ definida em } [a, b], \text{ para } x \neq x_0 && (3.7)\\
f[x_0, x_1, x] &:= \frac{f[x_0, x] - f[x_0, x_1]}{x - x_1}, && (3.8)\\
&\quad\ \text{definida em } [a, b], \text{ para } x \neq x_0 \text{ e } x \neq x_1 &&\\
&\ \ \vdots &&\\
f[x_0, x_1, \cdots, x_n, x] &:= \frac{f[x_0, x_1, ..., x_{n-1}, x] - f[x_0, x_1, ..., x_n]}{x - x_n}, && (3.9)\\
&\quad\ \text{definida em } [a, b], \text{ para } x \neq x_k\ ,\ k = 0, 1, ..., n &&
\end{aligned}
$$

Observe que nestas funções acrescentamos, sucessivamente, na diferença dividida, o próximo ponto da tabela. Nosso objetivo agora é encontrar uma fórmula de recorrência para $f(x)$. Assim de (3.7), temos:

$$f(x) = f[x_0] + (x - x_0) f[x_0, x].$$

De (3.8), usando (3.7), obtemos:

$$f[x_0, x_1, x](x - x_1) = f[x_0, x] - f[x_0, x_1]$$

$$=> \ f[x_0, x_1, x](x - x_1) = \frac{f[x] - f[x_0]}{x - x_0} - f[x_0, x_1]$$

$$=> \ f(x) = f[x_0] + (x - x_0) f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1) f[x_0, x_1, x]$$

De maneira análoga, de (3.9), segue que:

$$
\begin{aligned}
f(x) = \{ & f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] \\
& +(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)f[x_0, x_1, x_2, x_3] + ...] \\
& +(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{n-1})f[x_0, x_1, ..., x_n]\}_1. \\
& +\{(x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)f[x_0, x_1, ..., x_n, x]\}_2.
\end{aligned}
$$

Obtivemos, assim, uma fórmula de recorrência para $f(x)$.

Sendo que $\{..\}_1$ na equação anterior representa a **Fórmula de Newton do Polinômio de Interpolação.** e $\{..\}_2$ é o **erro de truncamento.**

$$
\begin{aligned}
P_n(x) &= f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \cdots \\
&+(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})f[x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n] = \{...\}_1
\end{aligned}
\tag{3.10}
$$

Teorema:
Para $x \in [a, b], x \neq x_k, \quad k = 0, \cdots, n,$

$$
f[x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n, x] = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}; \quad \xi \in (x_0, x_n).
$$

Exemplo 35 Dados os pontos da tabela a seguir, calcule uma aproximação para $f(0,47)$ usando um polinômio interpolador de grau 3 e o Método de Newton.

x	0,2	0,34	0,4	0,52	0,6	0,72
$f(x) = y$	0,16	0,22	0,27	0,31	0,34	0,37

3.2 Erro na Interpolação Polinomial

É o polinômio de interpolação uma boa aproximação para $f(x)$? Para respondermos esta pergunta devemos estudar a teoria do termo do erro. Para isso devemos conhecer os seguintes teoremas:

Teorema de Rolle: Seja $f(x)$ contínua em $[a, b]$ e diferenciável em cada ponto de (a, b). Se $f(a) = f(b)$, então existe um ponto $x = \xi, a < \xi < b$, tal que $f^{'}(\xi) = 0$.
Prova: Pode ser encontrada em [7].

Teorema de Rolle generalizado: Seja $n \geq 2$. Suponhamos que $f(x)$ seja contínua em $[a, b]$ e que $f^{(n-1)}(x)$ exista em cada ponto de (a, b). Suponhamos que $f(x_1) = f(x_2) = \cdots = 0$ para $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leq b$. Então existe um ponto $\xi, x_1 < \xi < x_n$, tal que $f^{(n-1)}(\xi) = 0$.
Prova: A prova é feita aplicando-se sucessivamente o Teorema de Rolle.

Teorema: Seja $f(x)$ contínua em $[a, b]$ e suponhamos que $f^{n+1}(x)$ exista em cada ponto (a, b). Se $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leq b$, então:

$$
R_n(f; x) = f(x) - P_n(f; x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi) \tag{3.11}
$$

onde $\min\{x, x_0, x_1, \cdots, x_n\} < \xi < \max\{x, x_0, x_1, \cdots, x_n.\}$ O ponto ξ depende de x.
Prova: Pode ser encontrada em [5].

O termo $R_n(f; x)$ na expressão acima é chamado **termo do erro** ou **erro de truncamento.** É o erro que se comete no ponto x quando se substitui a função por seu polinômio de interpolação calculado em x. Na prática, para estimar o erro cometido ao aproximar o valor da função num ponto por seu polinômio de interpolação, fazemos:

$$|R_n(f; x)| \leq \frac{|x - x_0||x - x_1| \cdots |x - x_n|}{(n+1)!} \cdot \max_{a \leq t \leq b} |f^{(n+1)}(t)|. \tag{3.12}$$

Exemplo 36 Dada a tabela

x	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
e^{3x}	1	1,3499	1,8221	2,4596	3,3201	4,4817

Calcular um limitante superior para o erro de truncamento quando avaliamos $f(0,25)$, onde $f(x) = xe^{3x}$, usando polinômio de interpolação do **segundo grau.**

Solução:

$$|R_2(f; x)| \leq \frac{|x - x_0| \cdot |x - x_1| \cdot |x - x_2|}{3!} \cdot \max_{x_0 \leq t \leq x_2} |f^{'''}(t)|.$$

Como $f(t) = te^{3t}$, segue que;

$$f^{'}(t) = e^{3t} + 3te^{3t} = e^{3t}(1 + 3t),$$

$$f^{''}(t) = 3e^{3t}(1 + 3t) + 3e^{3t} = 6e^{3t} + 9te^{3t},$$

$$f^{'''}(t) = 18e^{3t} + 9e^{3t} + 27te^{3t} = 27e^{3t}(1 + t).$$

Como queremos estimar o valor da função xe^{3x} no ponto $0,25$ usando polinômio do segundo grau, devemos tomar três pontos consecutivos na vizinhança de $0,25$. Tomando então: $x_0 = 0,2, x_1 = 0,3$ e $x_3 = 0,4$, obtemos:

$$\max_{x_0 \leq t \leq x_2} |f^{'''}(t)| = 27e^{3(0,4)}(1 + 0,4) = 125,4998.$$

Estamos, portanto, em condições de calcular um limitante superior para o erro de truncamento. Assim:

$$|R_2(f; x)| \leq \frac{|0.25 - 0.2| \cdot |0.25 - 0.3| \cdot |0.25 - 0.4|}{6}(125.4998) \simeq 0.0078 \simeq 8 \times 10^{-3}.$$

Pelo resultado obtido, vemos que, se tomarmos um polinômio do segundo grau para avaliar $f(0.25)$, obteremos o resultado com duas casas decimais corretas!!

Observações:

O número de zeros depois do ponto decimal, no resultado do erro, fornece o número de dígitos significativos corretos que teremos na aproximação.

Observe que poderíamos ter tomado: $x_0 = 0.1, x_1 = 0.2$ e $x_3 = 0.3$. Se tomarmos estes pontos, obtemos que $|R_2(f;x)| \simeq 0.0054$, o que implica que obteremos duas casas decimais corretas na aproximação. Assim, tanto faz tomarmos um ponto à esquerda e dois à direita de 0.25, ou dois pontos à esquerda e um à direita, que o erro será da mesma ordem de grandeza.

3.3 Lista de Exercícios

1. A tabela 1 relaciona o calor específico da água com a temperatura.

t (°C)	200	220	240	260	280
c_p $(Kcal/(Kg°\text{C}))$	1,075	1,102	1,136	1,183	1,250

Tabela 1

Calcular a capacidade calorífica c_p da água à temperatura $t = 250°$C, usando:

(a) interpolação linear obtendo os coeficientes pela calculadora. Escreva o sistema linear associado à interpolação.

(b) interpolação linear pelo método do Lagrange, determinando a forma do polinômio.

(c) interpolação linear pelo método do Newton. Determine o polinômio e compare com os item anteriores.

(d) interpolação quadrática obtendo os coeficientes pela calculadora. Escreva o sistema linear associado à interpolação.

(e) interpolação quadrática pelo método do Lagrange, determinando a forma do polinômio.

(f) interpolação quadrática pelo método do Newton. Determine o polinômio e compare com o item (b).

2. Seja a tabela 2 relacionando a temperatura com a densidade do mercúrio (Hg).

t (°C)	-20	20	100	200	300
ρ (g/cm^3)	13,645	13,546	13,352	13,115	12,881

Tabela 2

Determinar a densidade ρ do mercúrio à temperatura $t = 25°$C, usando

(a) interpolação linear, obtendo os coeficientes na calculadora.

(b) interpolação quadrática, obtendo os coeficientes na calculadora.

(c) interpolação cúbica usando o esquema prático de Lagrange.

3. Por três dias consecutivos em determinada cidade foram medidas as temperaturas que segue indicado na tabela abaixo, em graus Celsius.

Altitude (m)	Ponto de Ebulição da Água (^{o}C)
850	97,18
950	96,84
1050	96,51
1150	96,18
1250	95,84
-	-
2600	91,34
2700	91,01
2800	90,67
2900	90,34
3000	90,00

Tabela 3.1: Pontos de ebulição da água de acordo com a altitude

Hora/Dia	1	2	3
8	16	14	17
10	19	16	18
12	22	17	20
14	25	19	23

Estimar a temperatura média destes 3 dias às 11h usando interpolação polinomial de maior grau possível usando o Método de Newton, fornecendo a forma dos polinômios interpoladores. Dica: Faça uma interpolação para cada dia, obtendo a temperatura às 11h e, em seguida, faça a média.

4. Um automóvel percorreu um trajeto que liga 2 cidades de 80 km e foi registrado as distâncias percorridas nos tempos indicados abaixo.

Tempo	$0'$	$15'$	$30'$	$45'$	$60'$
Distância	0 km	20 km	35 km	53 km	80 km

Usando interpolação polinomial de maior grau possível pelo método do sistema linear (exibindo o sistema linear e resolvendo com o auxílio do VCN), determine:

(a) A distância percorrida após 35 minutos.

(b) O tempo para 60 km.

5. Sabe-se que o ponto de ebulição da água varia com a altitude, conforme mostra a Tabela 3.1.

(a) Usando interpolação polinomial de grau 3 pelo método de Newton (sem determinar o polinômio explicitamente), determine a que temperatura a água entra em ebulição no Pico da Bandeira, cuja altitude é de 2890 m. Calcule o polinômio cúbico no VCN.

(b) Use interpolação linear pelo método que desejar para obter a temperatura de ebulição à 2890 m e compare o resultado com o obtido no item (a).

6. Usando os cinco primeiros pontos da tabela 3.1 na interpolação, determinar o ponto de ebulição da água em Belo Horizonte que possui altitude igual a 1000 m. Use o esquema prático de Lagrange.

7. A velocidade do som na água varia com a temperatura. A tabela a seguir traz algumas velocidades de acordo com a temperatura.

Temp (°C)	86	93,3	98,9	104,4	110
Veloc (m/s)	1552	1548	1544	1538	1532

Tabela 4

Usando os valores da tabela 4, determinar:

(a) o valor aproximado da velocidade do som na água a 100°C, usando interpolação linear, obtendo o polinômio pelo método de Lagrange.

(b) o valor aproximado da velocidade do som na água a 95°C, usando interpolação quadrática, obtendo o polinômio pelo método de Newton.

(c) o valor aproximado da temperatura que faz com que a velocidade seja de 1550 m/s, usando interpolação quadrática obtendo os coeficientes pela calculadora. Escreva o sistema linear associado à interpolação.

8. Um automóvel percorreu 160 km numa rodovia que liga duas cidades e gastou, neste trajeto, 2 horas e 30 minutos. A tabela 5 dá o tempo gasto e a distância percorrida em alguns pontos entre as duas cidades.

Tempo (min)	0	10	30	60	90	120	150
Distância (km)	0	8	27	58	100	145	160

Tabela 5

(a) Qual foi aproximadamente a distância percorrida pelo automóvel nos primeiros 45 minutos da viagem, considerando apenas os 4 primeiros pontos da tabela? Use o método que desejar, sem explicitar o polinômio interpolador.

(b) Quantos minutos o automóvel gastou para chegar à metade do caminho? Use interpolação quadrática pelo método que desejar, exibindo o polinômio interpolador.

9. Considerando a função $y = f(x)$ dada pela tabela abaixo, determine o polinômio interpolação de maior grau utilizando o método de Newton.

x	-1	0	1	2
$f(x)$	-2	0	2	4

10. Considere a função $y = \sin x$ tabelada a seguir.

x	$1,2$	$1,3$	$1,4$	$1,5$
$\sin x$	$0,932$	$0,964$	$0,985$	0.997

(a) Usando interpolação linear pelo método prático de Lagrange, calcular uma aproximação para o valor de $\sin(1,34)$. Use 4 casas demais depois da vírgula.

(b) Usando a função REG da calculadora, determine o polinômio interpolador de grau 2 e forneça o valor aproximado de $\sin(1,34)$.

(c) Calcule o valor exato de $\sin(1,34)$ e compare com os valores obtidos nos itens (a) e (b).

11. Calcular o valor de α, β e γ na tabela a seguir, sabendo que ela corresponde a um polinômio de terceiro grau. Use o método que desejar. Dica: Note que conhecemos 4 pontos da tabela!

x	0	1	2	3	4	5	6
$f(x)$	-1	α	5	β	7	γ	13

12. Obtenha o polinômio de interpolação sobre todos os pontos da tabela abaixo pelo método de Lagrange e, usando este polinômio, calcule $f(0,5)$.

x	-2	-1	0	1
$f(x)$	15	0	-1	0

13. A raiz de uma função pode ser aproximada pela raiz do seu polinômio de interpolação. Use uma parábola interpoladora para determinar a raiz da função tabelada a seguir. Use 4 casas decimais depois da vírgula.

x	1	2	3	4	5	6
$f(x)$	$0,841$	$0,909$	$0,141$	$-0,757$	$-0,959$	$-0,279$

14. A densidade da água ρ em várias temperaturas é dada na tabela a seguir:

T	0	5	10	15	20	25	30	35	40
ρ	$0,9999$	$0,9998$	$0,9997$	$0,9991$	$0,9982$	$0,9971$	$0,9957$	$0,9941$	0.9902

Calcular, usando o VCN e o maior grau possível de polinômio interpolador os valores de $\rho(13)$ e $\rho(27)$.

15. Um pára-quedista realizou seis saltos, pulando de alturas distintas em cada salto. Foi testada a precisão de seus saltos em relação a um alvo de acordo com a altura. A distância apresentada na tabela seguinte é relativa ao alvo.

	Altura (m)	Distância do Alvo (m)
1^o salto	1500	35
2^o salto	1250	25
3^o salto	1000	15
4^o salto	750	10
5^o salto	500	7

Levando em consideração os dados da tabela acima, a que provável distância do alvo cairia o pára-quedista se ele saltasse de uma altura de 850 metros? Use interpolação linear e quadratica, obtendo os coeficientes do polinômio com o auxílio da calculadora.

16. Conhecendo o diâmetro e a resistividade de um fio cilíndrico, verificou-se a resistência do fio de acordo com o comprimento. Os dados obtidos estão indicados a seguir:

Comprimento (m)	500	1000	1500	2000	2500	3000	3500	4000
Resistência(Ohms)	$2,74$	$5,48$	$7,90$	$11,00$	$13,93$	$16,43$	$20,24$	$23,52$

determine quais serão as prováveis resistências deste fio para o comprimento de:

(a) 1730 m, usando um polinômio interpolador de 2º grau, obtido pelo método de Lagrange.

(b) 3200 m, usando um polinômio interpolador de 3º grau, obtido pelo método de Newton.

17. Sendo 200 candelas a intensidade de uma lâmpada, foi calculada a iluminação em casos de incidência normal sobre uma superfície situada a distâncias conhecidas, quando para cada distância foi calculada a iluminação, conforme a tabela a seguir:

Distância (metros)	1,00	1,25	1,50	1,75	2,00	2,25	2,50
Iluminação (Lux)	200	128	88,39	65,30	50,00	39,50	32,00

Usando a função REG da calculadora, obter a iluminação se a superfície estiver situada a:

(a) 1,60 m da lâmpada, usando um polinômio interpolador linear.

(b) 2,38 m da lâmpada, usando um polinômio interpolador quadrático.

Gabarito

1. $P_1(x) = 0,572 + 0,00235x$ e $P_1(250) = 1,1595$.

   $P_2(x) = 2,132 - 0,01015x + 2,5 \cdot 10^{-5}x^2$ e $P_2(250) = 1,157$ (usando 240, 260 e 280)

   $P_2(x) = 1,586 - 0,005775x + 1,625 \cdot 10^{-5}x^2$ e $P_2(250) = 1,157875$ (usando 220, 240 e 260)

2. $P_1(25) = 13,5339$, $P_2(25) = 13,5337$ e $P_3(25) = 13,5337$

3. 1º dia: $P_3(x) = 4 + 1,5x$ e $P_3(11) = 20,5$

   2º dia: $P_3(x) = -44 + 15,583x - 1,375x^2 + 0,0417x^3$ e $P_3(11) = 16,5$

   3º dia: $P_3(x) = 23 - 1,75x + 0,125x^2$ e $P_3(11) = 18,875$

   $TEMP_M(11) = 18,625°$C

4. (a) 40,3292 km. (b) 49,45 minutos.

5. (a) 90,37312°C (b) 90,373°C

6. 96,66°C.

7. (a) 1542,8 m/s (b) 1546,87 m/s (c) 89,9°C

8. (a) 42,56 km (b) 77,24 minutos.

9. $P(x) = 2x$

10. (a) $P_1(x) = 0,691 + 0,21x$ e $P_1(1,34) = 0,9724$

    (b) $P_2(x) = -0,31 + 1,695x - 0,55x^2$ e $P_2(1,34) = 0,97372$

    (c) $\sin(1,34) = 0,97348$

11. $\alpha = 3$, $\beta = 6$ e $\gamma = 9$.

12. $P_3(x) = -1 + 2x + x^2 - 2x^3$ e $f(0,5) \approx P_3(0,5) = 0$.

13. $P_2(x) = 2,055 - 0,443x - 0,065x^2$ e $P_2(x) = 0$ se $x = 3,167$.

14. $\rho(13) = 0,9993937060352$ e $\rho(27) = 0,9965734474752$.

15. $P_1(850) = 12$ e $P_2(850) = 11,76$

16. (a) $P_2(x) = 2,68 + 0,00144x + 1,36 \cdot 10^{-6}x^2$ e $P_2(1730) = 9,24$.

    (b) $P_3(x) = 85,48 - 0,075x + 2,47 \cdot 10^{-5}x^2 - 2,45 \cdot 10^{-9}x^3$ e $P_3(3200) = 17,90$

17. (a) $P_1(x) = 226,93 - 92,36x$ e $P_1(1,60) = 79,15$.

    (b) $P_2(x) = 242 - 144x + 24x^2$ e $P_2(2,38) = 35,23$.

Capítulo 4

Ajuste de Curvas

4.1 Introdução

Na engenharia comumente faz-se o uso de medições experimentais para relacionar duas ou mais variáveis. Objetiva-se que esta relação tenha um comportamento matemático adequado. Escreve-se este comportamento por meio de um modelo onde tem-se a relação entre uma *variável dependente (variável resposta)* com uma, ou mais, *variáveis independentes.* O gráfico destes pontos é chamado diagrama de dispersão e segue na figura abaixo sua ilustracão.

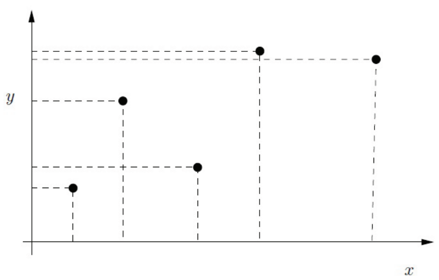


Figura 4.1: Gráfico de Dispersão

Entretanto, dado um diagrama de dispersão, é pouco provável que haja uma curva que passe exatamente por cada ponto e que descreva fielmente o sistema observado em laboratório. A razão disto é que a obtenção de dados experimentais possuem erros inerentes ao processo. Além do mais, algumas variáveis podem sofrer alterações durante a experiência, o que irá provocar desvios na resposta.

Como o sistema da experiência é descrito por um conjunto de pontos, então a abordagem a ser apresentada será válida para os casos discretos. Assim, o problema de ajustar um curvas no caso em que se tem uma tabela de pares de pontos $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$, com x_i e $i = 1, 2, \ldots, n$, pertencentes ao intervalo $[a, b]$ e $y_i = f(x_i)$, consiste em dadas $m + 1$ funções $g_0(x), g_1(x), \cdots, g_m(x)$, contínuas em $[a, b]$, obter $m + 1$ coeficientes $\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_m$ de tal forma que a combinação linear

$$\widetilde{y} = \widetilde{f}(x) = \beta_0 g_0(x) + \beta_1 g_1(x) + \cdots + \beta_m g_m(x) \tag{4.1}$$

seja tal que a função aproximação $\widetilde{f}(x_i)$ e a função original $f(x_i)$ estejam próximas, em algum sentido.

Este é um modelo matemático linear do sistema real pois os coeficientes β_i a serem determinados aparecem linearmente arranjados, embora as funções $g_i(x)$ possam ser não-lineares, como $g_0(x) = e^x$ e $g_1(x) = 1 + x^2$, por exemplo.

A questão é como escolher adequadamente estas funções auxiliares g e, em seguida, determinar os coeficientes β_i. Para isto, normalmente faz-se a observação do diagrama de dispersão para ver a forma geral dos pontos, ou então deve-se basear em fundamentos teóricos do experimento, em geral fornecido.

A medida de quão próximas estão as funções $\widetilde{y} = \widetilde{f}(x)$ e $y = f(x)$ será dada pela distância D definida como

$$D = ||\overrightarrow{\widetilde{y}} - \overrightarrow{y}||_2^2 \tag{4.2}$$

em que

$$\overrightarrow{\widetilde{y}} = \begin{bmatrix} \widetilde{f}(x_1) \\ \widetilde{f}(x_2) \\ \vdots \\ \widetilde{f}(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \widetilde{y_1} \\ \widetilde{y_2} \\ \vdots \\ \widetilde{y_n} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \overrightarrow{y} = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Como $\widetilde{y} = \beta_0 g_0(x) + \beta_1 g_1(x) + \cdots + \beta_m g_m(x)$ obtemos D como uma função dos coeficientes β_i.

Assim, $\widetilde{y}$ será uma boa aproximação para a função original quando a distância

$$\begin{aligned} D(\beta_0, \beta_1, \cdots, \beta_m) &= ||\overrightarrow{\widetilde{y}} - \overrightarrow{y}||_2^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} (\widetilde{y_i} - y_i)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{n} (\beta_0 g_0(x_i) + \beta_1 g_1(x_i) + \cdots + \beta_m g_m(x_i) - y_i)^2 \end{aligned}$$

for mínima. A minimização é baseado nos coeficientes β_i e essa técnica recebe o nome de *Método dos Mínimos Quadrados.*

Para a minimização, sabe do Cálculo Diferencial que para determinar o valor mínimo da função D (ou o seu valor crítico) deve-se derivar parcialmente esta função e obter o conjunto ordenado $(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m)$ que torne nulas todas as derivadas parciais. Dessa forma, desejamos que

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial \beta_0} &= 2\sum_{i=1}^{n} [\beta_0 g_0(x_i) + \beta_1 g_1(x_i) + \cdots + \beta_m g_m(x_i) - y_i] g_0(x_i) = 0 \\ \frac{\partial D}{\partial \beta_1} &= 2\sum_{i=1}^{n} [\beta_0 g_0(x_i) + \beta_1 g_1(x_i) + \cdots + \beta_m g_m(x_i) - y_i] g_1(x_i) = 0 \\ \frac{\partial D}{\partial \beta_2} &= 2\sum_{i=1}^{n} [\beta_0 g_0(x_i) + \beta_1 g_1(x_i) + \cdots + \beta_m g_m(x_i) - y_i] g_2(x_i) = 0 \\ &\vdots \\ \frac{\partial D}{\partial \beta_m} &= 2\sum_{i=1}^{n} [\beta_0 g_0(x_i) + \beta_1 g_1(x_i) + \cdots + \beta_m g_m(x_i) - y_i] g_m(x_i) = 0 \end{aligned}$$

Rearranjando os termos das equações acima obtemos o sistema linear

$$\begin{pmatrix} \sum (g_0(x_i))^2 & \sum g_0(x_i)g_1(x_i) & \cdots & \sum g_0(x_i)g_m(x_i) \\ \sum g_0(x_i)g_1(x_i) & \sum (g_1(x_i))^2 & \cdots & \sum g_1(x_i)g_m(x_i) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum g_0(x_i)g_m(x_i) & \sum g_1(x_i)g_m(x_i) & \cdots & \sum (g_m(x_i))^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i g_0(x_i) \\ \sum y_i g_1(x_i) \\ \vdots \\ \sum y_i g_m(x_i) \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

em que $\sum$ representa o somatório $\sum\limits_{i=1}^{n}$. Essa notação será adotada de agora em diante, por simplificação.

As equações deste sistema são chamadas de *Equações Normais* e este pode ser solucionado por qualquer método numérico, como Gauss, Gauss-Jordan, Jacobi, etc. Nota-se que a matriz dos coeficientes deste sistema é simétrica com relação a diagonal principal, ou seja, a parte triangular inferior é igual a parte triangular superior.

O *Ajuste de Curvas* é também conhecido como *Regressão*.

Exemplo 37 Ajuste os pontos da tabela abaixo à função $\widetilde{f}(x) = \beta_0 x^2$.

x	-1,0	-0,8	-0,6	-0,5	-0,3	0,0	0,2	0,4	0,5	0,7	1
y	2,05	1,15	0,45	0,40	0,50	0,30	0,20	0,58	0,52	1,20	2,05

4.1.1 Forma Matricial para gerar as Equações Normais

Sejam $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_n, y_n)$ os n pontos conhecidos da função $y = f(x)$ e a função de ajuste da forma

$$\widetilde{f}(x) = \beta_0 g_0(x) + \beta_1 g_1(x) + \cdots + \beta_m g_m(x).$$

Neste caso, o sistema linear (4.3) que fornece os coeficientes β_0, β_1, ..., β_m é dado como

$$(A^T A)\beta = A^T y. \tag{4.4}$$

em que

$$A = \begin{pmatrix} g_0(x_1) & g_1(x_1) & \cdots & g_m(x_1) \\ g_0(x_2) & g_1(x_2) & \cdots & g_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ g_0(x_n) & g_1(x_n) & \cdots & g_m(x_n) \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad y = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Exemplo 38 Ajustar os pontos abaixo à função $\widetilde{f}(x) = \beta_0 x + \beta_1 e^x$. Use o sistema da equação (4.4).

i	1	2	3	4	5
x_i	1,3	3,4	5,1	6,8	8,0
y_i	2,0	5,2	3,8	6,1	5,8

4.1.2 Avaliação da Qualidade do Ajuste

A questão fundamental é qual a função que representa o melhor ajuste entre todas as outras funções. Um método pelo qual podemos avaliar a qualidade de um ajuste é através do chamado *Coeficiente de Correlação de Pearson*.

Se n é o número de pontos utilizados no ajuste, o Coeficiente de Correlação de Pearson, denotado por R^2, pode ser calculado como:

$$R^2 = 1 - \frac{n \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \widetilde{f}(x_i) \right)^2}{n \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} y_i \right)^2}. \tag{4.5}$$

O coeficiente satisfaz $R^2 \in [0, 1]$. Quanto mais próximo de 1 for o valor de R^2, melhor será o ajuste.

Se $R^2 = 1$ então é porque ocorre $\widetilde{f}(x_i) = y_i$ para todo $i = 1, 2, \ldots, n$. Em outras palavras, a função de ajuste $\widetilde{f}(x)$ é na verdade uma função interpoladora.

Exemplo 39 Ajuste os pontos da tabela a seguir à função $\widetilde{f}(x) = \beta_0 + \beta_1 e^x$ e calcule a qualidade do ajuste.

x	0,0	0,1	0,2	0,3
y	1,9	2,13	2,23	2,49

Exemplo 40 Calcule o coeficiente de correlação de Pearson para os ajustes feitos nos exemplos 48 e 49.

A seguir vamos conhecer alguns ajustes mais comuns, dado um conjunto de ponto distintos (x_1, y_1), (x_2, y_2), ..., (x_n, y_n) em que $y_i = f(x_i)$.

4.2 Ajuste Linear - Caso simples

O modelo mais simples de relacionar duas variáveis é através de uma equação de reta, caracterizando o comportamento linear do sistema que foi submetido à experiência. Se a distribuição dos pontos no diagrama de dispersão assume uma aparência de reta, então pode-se usar como função de ajuste

$$\widetilde{f}(x) = \beta_0 + \beta_1 x \tag{4.6}$$

Note que nesse caso

$$g_0(x) = 1 \quad \text{e} \quad g_1(x) = x$$

Para determinar os coeficientes β_0 e β_1 utilizamos as equações normais apresentadas na equação (4.3) e que podem ser obtidas a partir da resolução do sistema $(A^T A)\beta = A^T y$ em que

$$A = \begin{pmatrix} g_0(x_1) & g_1(x_1) \\ g_0(x_2) & g_1(x_2) \\ \vdots & \vdots \\ g_0(x_n) & g_1(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$$

sendo (x_i, y_i), com $i = 1, 2, \ldots, n$, os pontos conhecidos.

Calculando $A^T A$ e $A^T y$ obtemos o sistema linear

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_i \\ & \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \\ \sum y_i . x_i \end{pmatrix} \tag{4.7}$$

Exemplo 41 Ajustar os pontos abaixo a uma reta e verificar a qualidade do ajuste. Faça o esboço do diagrama de dispersão.

i	1	2	3	4	5
x_i	1,3	3,4	5,1	6,8	8,0
y_i	2,0	5,2	3,8	6,1	5,8

Resposta: $\widetilde{f}(x) = 2,01 + 0,522x$.

Exemplo 42 Faça um ajuste linear dos pontos abaixo.

i	1	2	3	4	5	6
x_i	-2,0	-0,5	1,2	2,1	3,5	5,4
y_i	4,4	5,1	3,2	1,6	0,1	-0,4

4.3 Ajuste Linear - Caso múltiplo

Quando a variável resposta y depende de duas ou mais variáveis explicativas e o gráfico de dispersão apresenta um comportamento linear, pode-se então aplicar o ajuste linear múltiplo. Para estes casos, se $y = y(x_1, x_2, \cdots, x_m)$ e a função de ajuste é dada por:

$$\widetilde{f}(x_1, x_2, \cdots, x_m) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_m x_m \tag{4.8}$$

sendo as funções g auxiliares definidas como:

$$\begin{aligned} g_0(x_1, x_2, \cdots, x_m) &= 1 \\ g_1(x_1, x_2, \cdots, x_m) &= x_1 \\ g_2(x_1, x_2, \cdots, x_m) &= x_2 \\ &\vdots \\ g_m(x_1, x_2, \cdots, x_m) &= x_m \end{aligned}$$

Conhecendo-se n pontos associados a função $y = f(x_1, x_2, \cdots, x_m)$, o tabelamento da função é dado como

i	1	2	3	$\cdots$	n
x_{1i}	x_{11}	x_{12}	x_{13}	$\cdots$	x_{1n}
x_{2i}	x_{21}	x_{22}	x_{23}	$\cdots$	x_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_{mi}	x_{m1}	x_{m2}	x_{m3}	$\cdots$	x_{mn}
y_i	y_1	y_2	y_3	$\cdots$	y_n

Note que no caso em que depende de duas variáveis independentes, ou seja, $y = y(x_1, x_2)$, a função acima tem o gráfico representado por um plano.

Pode-se mostrar, de maneira análoga ao ajuste linear simples, que os coeficientes $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m$ que minimizam a soma dos quadrados dos desvios é a solução do seguinte sistema de equações lineares

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_{1i} & \sum x_{2i} & \cdots & \sum x_{mi} \\ \sum x_{1i} & \sum (x_{1i})^2 & \sum x_{1i}x_{2i} & \cdots & \sum x_{1i}x_{mi} \\ \sum x_{2i} & \sum x_{2i}x_{1i} & \sum (x_{2i})^2 & \cdots & \sum x_{2i}x_{mi} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum x_{mi} & \sum x_{mi}x_{1i} & \sum x_{mi}x_{2i} & \cdots & \sum (x_{mi})^2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1i}y_i \\ \sum x_{2i}y_i \\ \vdots \\ \sum x_{mi}y_i \end{pmatrix}. \qquad (4.9)$$

Exemplo 43 Ajustar os pontos da tabela abaixo à função $\widetilde{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2$ e determinar a qualidade do ajuste.

i	1	2	3	4	5	6	7	8
x_{1i}	-1	0	1	2	4	5	5	6
x_{2i}	-2	-1	0	1	1	2	3	4
y_i	13	11	9	4	11	9	1	-1

Resposta: $b_0 = 4,239$; $b_1 = 3,4$; $b_2 = -6,464$; $R^2 = 0,977$

4.4 Ajuste Polinomial de maior grau

Um caso especial de ajuste de curvas ocorre quando o diagrama de dispersão não apresenta as características lineares presentes nos outros tipos de ajuste. Nestas situações pode-se realizar o ajuste polinomial de maior grau, sendo a função de ajuste um polinômio da forma

$$\widetilde{f}(x) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \cdots + \beta_m x^m, \quad m \geq 2 \qquad (4.10)$$

em que

$$g_0(x) = 1, \quad g_1(x) = x, \quad g_2(x) = x^2, \quad \ldots, \quad g_m(x) = x^m.$$

Para o ajuste polinomial de curvas, o sistema linear que fornece os coeficientes β_i é da forma

$$\begin{pmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^m \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^{m+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \cdots & \sum x_i^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sum x_i^m & \sum x_i^{m+1} & \sum x_i^{m+2} & \cdots & \sum x_i^{2m} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^m y_i \end{pmatrix} \qquad (4.11)$$

Exemplo 44 Ajustar os pontos da tabela abaixo à equação $\widetilde{y} = b_0 + b_1x + b_2x^2$.

i	1	2	3	4	5	6
x_i	-2	-1,5	0	1	2,2	3,1
y_i	-30,5	-20,2	-3,3	8,9	16,8	21,4

Resposta: $b_0 = -2,018$; $b_1 = 11,33$; $b_2 = -1,222$; $R^2 = 0,977$

4.5 Ajustes Não-Polinomiais

Considere uma função de ajuste da forma

$$\widetilde{f}(x) = \beta_0 e^{\beta_1 x}$$

Nesse caso, a função $\widetilde{f}(x)$ não pode ser escrita como a combinação linear apresentada na equação (4.1) pois a função $g_0(x) = e^{\beta_1 x}$ não estão completamente determinada. Aqui, e em situações análogas, não é possível obter os coeficientes β_i a partir da resolução de um sistema linear.

Para obter os coeficientes da função de ajuste pode-se aplicar propriedades algébricas na equação $\widetilde{y} = \widetilde{f}(x)$ de forma a poder obter os coeficientes β_i através de um sistema linear. Esse processo é conhecido como *linearização.*

É importante observar que os parâmetros assim obtidos não são ótimos dentro do critério dos mínimos quadrados. Isto porque o que se ajusta é o problema linearizado, e não o original.

Nosso objetivo consiste na linearização do problema, através de transformações convenientes, de modo que o método dos mínimos quadrados possa ser aplicado. Ilustra-se na sequencia alguns casos.

a) Para aproximar a função **exponencial de base *e*** do tipo $y = a \cdot e^{bx}$ faz-se a seguinte linearização, usando as propriedade no logarítmo neperiano:

$$\begin{aligned} y &= a \cdot e^{bx} \\ \ln y &= \ln(a \cdot e^{bx}) \\ \ln y &= \ln a + \ln(e^{bx}) \\ \underbrace{\ln y} &= \underbrace{\ln a} + \underbrace{b}\, x \\ \widetilde{f}(x) &= \beta_0 + \beta_1\, x \end{aligned}$$

Note que, neste caso as funções auxiliares do ajuste linear são dadas por $g_0(x) = 1$ e $g_1(x) = x$.

b) Para aproximar a função **exponencial de base *b*** do tipo $y = a \cdot b^x$ faz-se a linearização, por uma transformação logarítma: $\ln y = \ln a + x \ln b$, sendo que para reduzir este ao problema original (linear) basta escolher $\widetilde{f}(x) = \ln y$, $\beta_0 = \ln a$, $\beta_1 = \ln b$; $g_0(x) = 1$ e $g_1(x) = x$.

c) Para aproximar a função **potência** do tipo $y = ax^b$ faz-se a linearização, por uma transformação logarítma: $\ln y = \ln a + b \ln x$, sendo que para reduzir este ao problema original (linear) basta escolher $\widetilde{f}(x) = \ln y$, $\beta_0 = \ln a$, $\beta_1 = b$; $g_0(x) = 1$ e $g_1(x) = \ln x$.

d) Para aproximar a função **hiperbólica** do tipo $y = \dfrac{1}{a + bx}$ faz-se a linearização: $\dfrac{1}{y} = a + bx$, sendo que para reduzir este ao problema original (linear) basta escolher $\widetilde{f}(x) = \dfrac{1}{y}$, $\beta_0 = a$, $\beta_1 = b$; $g_0(x) = 1$ e $g_1(x) = x$.

e) Para aproximar a função do tipo $y = \sqrt{a + bx}$ faz-se a linearização: $y^2 = a + bx$, sendo que para reduzir este ao problema original (linear) basta escolher $\widetilde{f}(x) = y^2$, $\beta_0 = a$, $\beta_1 = b$; $g_0(x) = 1$ e $g_1(x) = x$.

f) Para aproximar a função do tipo $y = x\ln a + bx$ faz-se a linearização, por uma transformação logarítma: $e^{\frac{y}{x}} = a + bx$, sendo que para reduzir este ao problema original (linear) basta escolher $\widetilde{f}(x) = e^{\frac{y}{x}}$, $\beta_0 = a$, $\beta_1 = b$; $g_0(x) = 1$ e $g_1(x) = x$.

g) Para aproximar a função do tipo $y = \dfrac{a + x^2}{b + x}$ faz-se a linearização

$$\begin{aligned} y(b+x) &= a + x^2 \\ by &= a + x^2 - xy \\ y &= \frac{a}{b} - \frac{1}{b}(xy - x^2) \end{aligned}$$

sendo que para reduzir este ao problema original (linear) basta escolher $\widetilde{f}(x) = y$, $\beta_0 = \dfrac{a}{b}$, $\beta_1 = -\dfrac{1}{b}$; $g_0(x) = 1$ e $g_1(x) = xy - x^2$.

A seguir alguns exemplos de linearização quando a variável dependente depende de mais de uma variável independente:

a) Para $y = a \cdot x_1^b \cdot x_2^c \cdot x_3^d$ obtemos a linearização $\ln y = \ln a + b \cdot \ln x_1 + c \cdot \ln x_2 + d.\ln x_3$

b) Para $y = e^{a+bx_1+cx_2}$ obtemos a linearização $\ln y = a + bx_1 + cx_2$

c) Para $y = \dfrac{1}{a + bx_1 + cx_2}$ obtemos a linearização $\dfrac{1}{y} = a + bx_1 + cx_2$

d) Para $y = \dfrac{1}{1 + e^{a+bx_1+cx_2}}$ obtemos a linearização $\ln\left(\dfrac{1}{y} - 1\right) = a + bx_1 + cx_2$

Exemplo 45 Ajustar os pontos abaixo à equação $\widetilde{y} = ae^{bx}$ usando linearização.

i	1	2	3	4	5
x_i	0,1	1,5	3,3	4,5	5
y_i	5,9	8,8	12	19,8	21,5

Calcule o coeficiente de correlação de Pearson.

Exemplo 46 Use a função de regressão exponencial disponível na sua calculadora e compare o resultado com o exemplo anterior. Observe também o valor do coeficiente R^2.

Consulte a seção 4.6, se necessário.

Exemplo 47 Ajustar os pontos da tabela do exemplo anterior à equação $\widetilde{y} = ab^x$ e compare os resultados.

4.6 Usando a Calculadora CASIO fx-82MS

Cuidado com a diferença entre LINEARIZAÇÃO e USO NA CALCULADORA. Atenção nos somatórios.

A calculadora científica CASIO traz algumas ferramentas que nos auxiliam nas principais funções de ajustes de curvas. Segue o passo a passo.

1. Limpar a calculadora: Utilize as teclas $\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{MODE}}$ $\boxed{3}$ $\boxed{=}$ $\boxed{=}$.

2. Escolher a função: Utilize a tecla $\boxed{\text{MODE}}$ para selecionar o modo REG. Neste modo, a tecla $\boxed{\text{M+}}$ funciona como a tecla $\boxed{\text{DT}}$.

3. Ao selecionar o modo REG a calculadora exibirá as seguintes telas.

$$\boxed{\text{LIN(1)}\quad\text{LOG(2)}\quad\text{EXP(3)}}\quad \boxed{\blacktriangleright}\quad \boxed{\text{PWR(1)}\quad\text{INV(2)}\quad\text{QUAD(3)}}$$

4. Basta pressionar a tecla numérica ($\boxed{1}$, $\boxed{2}$ ou $\boxed{3}$) que corresponde ao tipo de ajuste que deseja utilizar.

   $\boxed{1}$ (Lin) : Regressão Linear
   $\boxed{2}$ (Log) : Regressão Logarítmica
   $\boxed{3}$ (Exp) : Regressão Exponencial
   $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{1}$ (Pwr) : Regressão de Potência
   $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{2}$ (Inv) : Regressão Inversa
   $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{3}$ (Quad) : Regressão Quadrática

5. Para introduzir os dados use a seguinte sequência de teclas: <dados-x> $\boxed{,}$ <dados-y> $\boxed{\text{DT}}$

6. Os resultados podem ser chamados usando as teclas seguintes.

Valor	Operação
$\sum x^2$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{1}$
$\sum x$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{2}$
n	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{3}$
$\sum y^2$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{1}$
$\sum y$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{2}$
$\sum xy$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{3}$
Coeficiente A	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-VAR}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{1}$
Coeficiente B	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-VAR}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{2}$
Coeficiente r	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-VAR}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{3}$
$\sum x^3$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{1}$
$\sum x^2y$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{2}$
$\sum x^4$	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-SUM}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{3}$
Coeficiente C	$\boxed{\text{SHIFT}}$ $\boxed{\text{S-VAR}}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{\blacktriangleright}$ $\boxed{3}$

7. Tipos de ajustes possiveis:

Linear	$y = A + Bx$
Quadrática	$y = A + Bx + Cx^2$
Logarítmica	$y = A + B\ln x$
Exponencial	$y = Ae^{Bx}$
Potência	$y = A.x^B$
Inversa	$y = A + B\dfrac{1}{x}$

Os modelos mais atuais da calculadora CASIO também possui a função de ajuste. Para acessar tais funções, consulte o manual do usuário.

4.7 Lista de Exercícios

Resolver com o auxílio da função REG da calculadora, quando for possível.

1. Considere os pontos abaixo:

i	1	2	3	4	5	6
x_i	-2,0	-0,5	1,2	2,1	3,5	5,4
y_i	4,4	5,1	3,2	1,6	0,1	-0,4

   (a) Fazer o diagrama de dispersão.

   (b) Ajustar os pontos a uma reta.

   (c) Representar a reta no diagrama de dispersão.

   (d) Forneça o sistema linear associado ao ajuste linear (equações normais).

   (e) Determinar o coeficiente de correção de Pearson.

2. Considere a tabela abaixo.

i	1	2	3	4
x	$1,4$	$2,1$	$3,0$	$4,4$
y	$4,2$	$2,3$	$1,9$	$1,1$

   (a) Calcule manualmente o coeficiente de correção de Pearson R^2 do modelo $u = b_0 + b_1x$ e depois compare com o resultado fornecido pela calculadora.

   (b) Forneça o sistema associado ao ajuste linear.

   (c) Faça um ajuste quadrático da função tabelada.

   (d) Forneça o sistema associado ao ajuste quadrático.

   (e) Calcule o coeficiente de correção de Pearson R^2 para o modelo quadrático.

3. (CAMPOS, 2010) Transforme os modelos abaixo em relações lineares:

   (a) $y = \dfrac{a}{b + cx}$

   (b) $y = ab^x$

   (c) $y = \dfrac{1}{1 + e^{bx}}$

4. (CAMPOS, 2010) Seja a tabela:

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_i	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
y_i	1	5	8	14	18	26	44	51	79	102

   Usando as informações acima, determine:

   (a) o modelo de ajuste linear $u_1 = b_0 + b_1x$ e seu R^2. Use a calculadora.

   (b) o modelo de ajuste quadrático $u_2 = b_0 + b_1x + b_2x^2$ e seu R^2. Obtenha os coeficientes b_i na calculadora e o coeficiente R^2 calcule manualmente.

(c) o modelo de ajuste cúbico $u_3 = b_0 + b_1x + b_2x^2 + b_3x^3$ e seu R^2 com o auxílio do VCN.

(d) o modelo de ajuste $u_p = ax^b$ (potência) e seu R^2. Use a calculadora.

(e) o modelo de ajuste exponencial $u_e = ae^{bx}$ e seu R^2. Use a calculadora.

(f) Comparando os coeficientes de correção de Pearson, determine qual ajuste fornece uma melhor aproximação.

5. (CAMPOS, 2010) Seja a tabela abaixo, contendo o tempo de germinação de sementes (dias) em função da temperatura média do solo (°C) para doze locais de plantio. Com base na tabela, determine uma relação da forma $y = a \cdot b^x$ entre a temperatura e o tempo de germinação das sementes.

Temperatura(°C)	14	6	3	6	7	6	7	4	8	7	6	4
Germinação (dias)	10	26	41	29	27	27	19	28	19	31	29	33

6. (FRANCO, 2006) Considere os dados da tabela abaixo.

x	-2	-1	1	2
y	1	-3	1	9

(a) Pelo método dos mínimos quadrados, ajuste à tabela as funções:

(i) $f(x) = ax^2 + bx$

(ii) $g(x) = ax^2 + c$

(iii) $h(x) = ax^2 + bx + c$

(b) Qual das funções fornece o melhor ajuste segundo o critério dos mínimos quadrados? Justifique.

7. (FRANCO, 2006) Calcular a aproximação, usando mínimos quadrados da forma: $f(x) = ae^x + be^{-x}$ correspondente aos dados:

x_i	0	$0,5$	$1,0$	$1,5$	$2,0$	$2,5$
y_i	$5,02$	$5,21$	$6,49$	$9,54$	$16,02$	$24,53$

8. (FRANCO, 2006) Considere os dados:

x_i	0	$0,5$	$1,0$	$1,5$	$2,0$	$2,5$
y_i	$5,02$	$5,21$	$6,49$	$9,54$	$16,02$	$24,53$

(a) calcule os coeficientes da função de ajuste exponencial $f(x) = ae^{bx}$

(b) Calcule o coeficiente de correlação.

9. Usando o método dos mínimos quadrados, encontre a e b tais que $y = ax^b$ ajusta os dados:

x	$0,1$	$0,5$	$1,0$	$2,0$	$3,0$
y	$0,005$	$0,5$	4	30	110

10. (FRANCO, 2006) Considere a tabela:

x	$1,0$	$1,5$	$2,0$	$2,5$	$3,0$
y	$1,1$	$2,1$	$3,2$	$4,4$	$5,8$

Ajuste os pontos acima por uma função do tipo $y = x\ln(ax+b)$ usando o método dos mínimos quadrados.

11. (FRANCO, 2006) Deseja-se aproximar uma função $f(x) > 0$ tabelada por uma função do tipo: $y = \dfrac{x^2}{\ln(ax^4+bx^2+c)}$ usando o método dos mínimos quadrados. Podemos aproximar $f(x)$ diretamente por esta função? Caso não seja possível, quais são as transformações necessárias?

12. (FRANCO, 2006) Considere a tabela:

t	$3,8$	$7,0$	$9,5$	$11,3$	$17,5$	$31,5$	$45,5$	$64,0$	$95,0$
y	$10,0$	$12,5$	$13,5$	$14,0$	$15,0$	$16,0$	$16,5$	$17,0$	$17,5$

Por qual das funções abaixo você ajustaria esta tabela?

(a) $y(t) = \dfrac{t}{a+bt}$

(b) $y(t) = ab^t$

13. Considere os dados da tabela

i	1	2	3	4	5	6	7	8
x_{1i}	-1	0	1	2	4	5	5	6
x_{2i}	-2	-1	0	1	1	2	3	4
y_i	13	11	9	4	11	9	1	-1

(a) Ajustar os pontos da tabela abaixo à equação $\widetilde{y} = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2$, usando os sistema linear apresentado na seção 4.2 da apostila. Resolva o sitema no VCN

(b) Calcule o coeficiente de correlação de Pearson.

(c) Com o auxílio do VCN, confira os resultados dos itens (a) e (b), usando a funçao Ajuste Linear Múltiplo com Termo Independente.

14. (FRANCO, 2006) A tabela abaixo lista o número de acidentes em veículos motorizados no Brasil em alguns anos entre 1980 e 2006.

Ano	Número de acidentes	Acidentes por 10.000 veículos
1980	8.300	1.688
1985	9.900	1.577
1990	10.400	1.397
1993	13.200	1.439
1997	13.600	1.418
2000	13.700	1.385
2006	14.600	1.415

(a) Calcule a regressão linear do número de acidentes no tempo. Use-a para prever o número de acidentes no ano de 2010.(Isto é chamado análise de série temporal, visto que é uma regressão no tempo, e é usada para prognosticar o futuro).

(b) Calcule uma regressão quadrática do número de acidentes por 10.000 veículos. Use esta para prognosticar o número de acidentes por 10.000 veículos no ano de 2007.

15. (FRANCO, 2006) A tabela a seguir lista o total de água (A) consumida nos Estados Unidos em bilhões de galões por dia:

Ano	1960	1970	1980	1990	2000
A	$136,43$	$202,70$	$322,90$	$411,20$	$494,10$

(a) Encontre uma regressão exponencial de consumo de água no tempo.

(b) Use os resultados do item (a) para prever o consumo de água nos anos de 2008 e 2010.

16. (FRANCO, 2006) O número de números primos menores que x é denotado por $\Pi(x)$ e vale a tabela:

x	100	1000	10000	100000
$\Pi(x)$	25	168	1229	9592

(a) Determinar pelo método dos mínimos quadrados, para os dados acima, uma expressão do tipo: $\Pi(x) = a + b\dfrac{x}{\log_{10} x}$.

(b) Estimar o número de números primos de seis dígitos usando o item (a).

17. (FRANCO, 2006) Após serem efetuados medições num gerador de corrente contínua, foram obtidos os seguintes valores, indicados por um voltímetro e um amperímetro.

I(carga(A))	$1,58$	$1,80$	$2,15$	$2,5$	$3,01$	$3,5$	$4,0$	$4,5$	$4,8$
V	210	195	160	120	90	60	80	120	150

Faça um gráfico de dispersão com os dados com o auxílio de um *software*.

(a) Ajuste os dados por um polinômio de grau adequado.

(b) Estime o valor a ser obtido no voltímetro quando o amperímetro estiver marcando 3,05 A.

18. (FRANCO, 2006) A tabela abaixo lista o Produto Nacional Bruto (PNB) em dólares constantes e correntes. Os doláres constantes representam o PNB baseado no valor do dólar em 1987. Os dólares correntes são simplesmente o valor sem nenhum ajuste de inflação.

Ano	PNB (dólar corrente em milhares)	PNB(dólar constante em milhões)
1980	$248,8$	$355,3$
1985	$398,0$	$438,0$
1989	$503,7$	$487,7$
1994	$684,9$	$617,8$
1998	$749,9$	$658,1$
2001	$793,5$	$674,6$
2003	$865,7$	$707,6$

Estudos mostram que a melhor forma de trabalhar os dados é aproximá-los por uma função do tipo: $y = ax^b$. Assim:

(a) Utilize a função $y = ax^b$ para cada um dos PNBs no tempo.

(b) Use os resultados da parte (a) para prever os PNBs no ano 2006.

(c) O que você pode concluir sobre a taxa de inflação no ano de 2006?

19. A madeira com uma grande porcentagem de nós não é tão resistente quanto a madeira sem nós. Foram estabelecidas normas para determinar a relação de resistência entre uma viga com nós e uma viga sem nós. Para vigas ou pranchas, os nós são medidos na face estreita da viga. A relação de resistência percentual R depende da largura L da face e do tamanho T do nó. A tabela destas relações de resistência é dada abaixo

		L (em mm)			
		75	100	125	150
	12,5	85	90	125	150
	25,0	75	78	82	85
T	37,5	57	67	73	85
(em mm)	50,0	35	55	64	70
	65,5	18	47	56	61

Usando ajuste linear múltiplo e o auxílio do VCN, determine a função $R(L, T) = \alpha + \beta\, L + \gamma\, T$ que melhor ajusta os dados da tabela. Usando esta função, determine a proporção de resistência para nós com largura de face de 118 mm e de 40 mm de tamanho.

20. (FRANCO, 2006) Em um estudo, determinou-se que a vazão de água em uma tubulação está relacionada com o diâmetro e com a inclinação dessa tubulação(em relação à horizontal). Os dados experimentais estão na tabela; O estudo tambem sugere que a equação que rege a vazão da água tem a seguinte forma: $Q = a_0 D^{a_1} S^{a_2}$, onde Q é a vazão (em $\frac{m^3}{s}$, S é a inclinação da tabulação, D é o diâmetro da tubulação (em m) e a_0, a_1 e a_2 são constantes a determinar.

Experimento	Diâmetro	Inclinação	Vazão $\left(\frac{m^3}{s}\right)$
1	1	$0,001$	$1,4$
2	2	$0,001$	$8,3$
3	3	$0,001$	$24,2$
4	1	$0,001$	$4,7$
5	2	$0,01$	$28,9$
6	3	$0,01$	$84,0$
7	1	$0,05$	$11,1$
8	2	$0,05$	$200,0$

(a) Usando a equação anterior e o método dos mínimos quadrados, determine a_0, a_1 e a_2.

(b) Use o resultado do item (a) para estimar a vazão em $\frac{m^3}{s}$ para uma tubulação com um diâmetro de $2,5$ m e uma inclinação de $0,0025$.

21. (FRANCO, 2006) Os dados das tabelas a seguir mostram a quantidade de alcatrão e nicotina (em miligrama) de várias marcas de cigarro, com e sem filtro.

Com filtro										
Alcatrão	8,3	12,3	18,6	22,9	23,1	24,0	27,3	30,0	35,9	41,5
Nicotina	0,32	0,46	1,10	1,32	1,26	1,44	1,42	1,96	2,23	2,20

Sem filtro										
Alcatrão	32,5	33,0	34,2	34,8	36,5	37,2	38,4	41,1	41,6	43,4
Nicotina	1,69	1,76	1,48	1,88	1,73	2,12	2,35	2,46	1,97	2,65

(a) Calcule as regressões lineares do tipo $y = ax + b$ para a relação entre nicotina (y) e alcatrão (x) em ambos os casos (com e sem filtro).

(b) Usando as funções de ajuste, determine a partir de qual quantidade de alcatrão, os cigarros com filtro contêm menos nicotina que os sem filtro.

22. **Conscientização dos consumidores:** Um automóvel faz 28 milhas por galão a velocidades de até, e inclusive, 50 milhas por hora. Em velocidades maiores que 50 milhas por hora, o número de milhas por galão cai a uma taxa de 12 por cento para cada 10 milhas por hora. Se s é a velocidade (em milhas por hora) e y é o número de milhas por galão, então $y = 28e^{0,6-0,012s}$, $\quad s > 50$. Use estas informações e uma planilha para completar a tabela. O que se pode concluir?

Velocidade (s)	50	55	60	65	70
Milhas por Galão (y)					

23. **Tomada de Decisão: Vendas -** As vendas S (em milhões de dólares) da Avon Products de 1998 a 2005 são mostradas na tabela. (*Fonte: Avon Products, Inc.*)

t	8	9	10	11	12	13	14	15
S	5212,7	5289,1	5673,7	5952,0	6170,6	6804,6	7656,2	8065,2

Um modelo para estes dados é dado por $S = 2962,6e^{0,0653t}$, em que t representa o ano, com $t = 8$ correspondendo à 1998.

(a) Quão bem o modelo ajusta os dados?

(b) Determine um modelo linear para os dados. Quão bem o modelo linear ajusta os dados? Qual modelo, exponencial ou linear, é mais adequado?

(c) Use o modelo de crescimento exponencial e o modelo linear da parte (b) para estimar quando as vendas excederam 10 bilhões de dólares.

24. **População:** A população P (em milhares) de Las Vegas, Nevada, entre 1960 e 2005 pode ser modelada por $P = 68,4e^{0,0467t}$, em que t é o tempo em anos, com $t = 0$ correspondendo a 1960. (*Fonte: U.S.Census Bureau*)

(a) Determine as populações em 1960, 1970, 1980, 1990, 2000 e 2005.

(b) Explique porque os dados não se ajustam a um modelo linear.

(c) Use o modelo para estimar quando a população excederá 900000 pessoas.

25. **Tensão-deformação de aço:** Calcular o módulo de Young de uma barra de aco a partir de valores de tensão t, em ton/cm^2, e deformacão d (adimensional) constantes usando a tabela abaixo, sabendo que se pode determinar os parâmetros da relação linear entre a deformação d e a tensão t pela expressão $t = E.d + t_0$, onde E é o módulo de Young e t_0 é a pré-tensão.

i	1	2	3	4	5	6	7
$d \times 10^3$	0,15	0,52	0,76	1,01	1,12	1,42	1,52
t (ton/cm^2)	0,586	1,253	1,946	2,394	2,716	3,136	3,591

...continuação

i	8	9	10	11	12	13	14
$d \times 10^3$	1,66	1,86	2,08	2,27	2,56	2,86	3,19
t (ton/cm^2)	3,885	4,291	4,725	5,047	5,383	5,845	6,223

Gabarito

1. (a) Desenho
   (b) $\widetilde{y} = 3,62 - 0,798x$
   (c) Desenho
   (d) $\begin{pmatrix} 6 & 9,7 \\ 9,7 & 51,51 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ -5,96 \end{pmatrix}$
   (e) $R^2 = 0,889$

2. (a) $u = 4,89 - 0,92x$ e $R^2 = 0,8246$.
   (b) $\begin{pmatrix} 4 & 10,9 \\ 10,9 & 34,73 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9,5 \\ 21,25 \end{pmatrix}$
   (c) $\widetilde{y} = 7,81 - 3,27x + 0,4x^2$
   (d) $\begin{pmatrix} 4 & 10,9 & 34,73 \\ 10,9 & 34,73 & 124,19 \\ 34,73 & 124,19 & 479,10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9,5 \\ 21,25 \\ 56,77 \end{pmatrix}$
   (e) $R^2 = 0,9434$.

3. (a) $\dfrac{1}{y} = \dfrac{b}{a} + \dfrac{c}{a}x$.
   (b) $\ln y = \ln a + x \ln b$
   (c) $ln\left(\dfrac{1}{y} - 1\right) = bx$

4. (a) $u_1 = -65,38 + 10,55x$ e $R^2 = 0,8858$
   (b) $u_2 = 51,72 - 16,59x + 1,43x^2$ e $R^2 = 0,9897$
   (c) $u_3 = -42,45 + 17x - 2,31x^2 + 0,13x^3$ e $R^2 = 0,9949$
   (d) $u_p = 2,38 \cdot 10^{-3}x^{4,0697}$ e $R^2 = 0,9715$
   (e) $u_e = 0,2612e^{0,4485x}$ e $R^2 = 0,9261$
   (f) O melhor R^2 é o do ajuste cúbico.

5. $y = 55,07 \cdot 0,8870^x$ e $R^2 = 0,8559$.

6. (a) (i) $f(x) = 1,1176x^2 + 2x$ e $R^2 = 0,8746$
   (ii) $g(x) = 2x^2 - 3$ e $R^2 = 0,4737$
   (iii) $h(x) = 2x^2 + 2x - 3$ e $R^2 = 1$
   (b) Ajuste quadrático completo

7. $f(x) = 2,02e^x + 3,01e^{-x}$ e $r^2 = 0,9979$

8. $f(x) = 4,02e^{0,67x}$ e $r^2 = 0,9483$ (calcule manualmente o r^2)

9. $y = 4,08x^{2,93}$ e $r^2 = 0,9926$

10. $y = x\ln(1,12x + 1,91)$ e $r^2 = 0,9201$

11. Não, é preciso linearizar a função, deixando da forma $e^{\frac{x^2}{y}} = ax^4 + bx^2 + c$

12. (a) $y(t) = \dfrac{t}{0,19 + 0,06t}$ e $r^2 = 0,9874$
    (b) $y(t)$=12,56 $1,0045^t$ e $r^2 = 0,6318$

13. Usar o VCN

14. (a) $u_1 = -498016,3866 + 255,8824x$, $u_1(2010) = 16.307$ acidentes e $R^2 = 0,9087$.
    (b) $u_2 = 3217678,9542 - 3217,298x + 0,8046x^2$, $u_2(2007) = 1.433$ e $R^2 = 0,9311$.

15. $u_e = 1,7241 \cdot 10^{-26}e^{0,0328x}$

16. (a) $\Pi(x) = 12,82 + 0,48\dfrac{x}{\log_{10} x}$ e $r^2 = 0,999989887$
    (b) $\Pi(1\,000\,000) - \Pi(100\,000) = 70400$

17. Ajuste ajuste quadrático e confira seu resultado no VCN

18. (a) Usando os anos da forma $x = [80\ 85\ 89\ 94\ 98\ 101\ 103]$ obtemos $y_r = (2,93 \cdot 10^{-7})x^{4,72}$ para o dólar corrente e $y_s = 0,002x^{2,75}$ para o dólar constante.
    (b) $y_r(106) = 1067,5$ e $y_s = 795,8$
    (c) A inflação em 2006 foi de aproximadamente 25,5%

19. Use a função de Ajuste Linear Múltiplo com Termo Independente do VCN para conferir seus cálculos.

20.

21. (a) $y_{cf} = 0,063x - 0,1659$ e $y_{sf} = 0,082x - 1,0467$
    (a) A partir de $46,36$ miligramas de alcatrão.

22.

Velocidade (s)	50	55	60	65	70
Milhas por Galão (y)	28	26,37	24,83	23,39	22,03

Conclui-se que quanto maior a velocidade, menor a rendimento do automóvel.

23. (a) $r^2 = 0,9647$
    (b) $y = 421,6x + 1504,63$ e $r^2 = 0,9424$. O ajuste exponencial é melhor.

(c) Exponencial: $t = 18,63$, isto é, durante o ano de 2008.
Linear: $t = 20,15$, isto é, durante o ano de 2010.

24.

25. $E = 1,9222$

Capítulo 5

Zeros de Funções

Seja $y = f(x)$ uma função contínua definida intervalo $I \subseteq \mathbb{R}$. Chama-se de *zero da função* $f(x)$ o valor $x^* \in I$ que faz com que $f(x^*) = 0$. Chama-se também o número x^* de *raiz da equação* $f(x) = 0$.

Quando $f(x)$ é uma função do primeiro grau, isto é, $f(x) = ax+b$, a solução da equação $ax+b = 0$ é dada popr $x = -\dfrac{b}{a}$. No caso em que $f(x) = ax^2 + bx + c$ é uma função polinomial do segundo grau, usa-se a fórmula de Bhaskara dada por $x = \dfrac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$ que fornece, no máximo, duas raizes reais para $f(x)$.

Para alguns casos particulares de funções, mesmo que não sejam polinomiais, é possível isolar a variável x facilmente na equação $f(x) = 0$. Por exemplo, a raiz da função $f(x) = e^{3x} - 2$ é dada por $x = \dfrac{\ln 2}{3}$.

No entanto, em geral, dependedo da função $f(x)$, obter esta raiz é uma tarefa um pouco mais complexa.

Nosso objetivo é estudar métodos que nos forneçam um modo de obter tal raiz ou pelo menos uma aproximação da raiz x^* que seja tão precisa quanto desejado. Nesse capítulo denotaremos tal aproximação por $\widetilde{x}$.

5.1 Isolamento e Refinanento

O processo de obtenção de uma aproximação $\widetilde{x}$ para uma raiz x^* pode ser dividido em duas etapas:

- Isolamento da raiz;
- Refinamento da raiz.

5.1.1 Isolamento da raiz

Isolar a raiz, isto é, encontrar um intervalo $[a, b]$, preferencialmente o menor possível, que contenha uma e somente uma das raízes da equação $f(x) = 0$.

Para realizar esta etapa, necessitamos de alguns resultados preliminares, dados a seguir:

Resultados importantes

(i) Seja $f(x)$ um função contínua em $[a,b]$. Se $f(a)f(b) < 0$ então existe pelo menos um ponto x^* no intervalo (a,b) tal que $f(x^*) = 0$.

Esse resultado é conhecido como Teorema de Bolzano e a sua demonstração pode ser encontrada em [8]. A figura abaixo ilustra um dos casos em existe apenas uma raiz no intervalo.

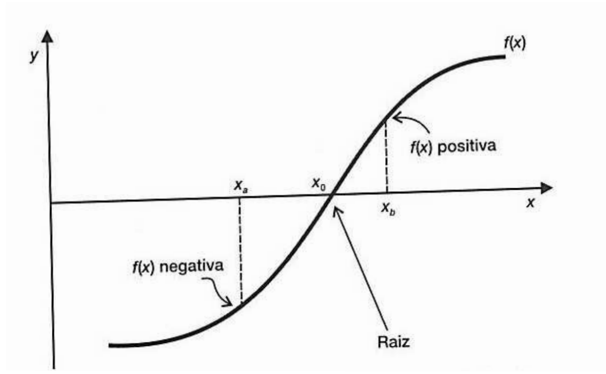


Figura 5.1: Mudança de sinal de uma função contínua

(ii) Em um intervalo $[a,b]$ satisfazendo $f(a)f(b) < 0$, a unicidade da raiz de $f(x)$ pode ser verificada pela derivada da função. A saber, a raiz x^* é única se a derivada $f^{'}(x)$ existir e preservar o sinal dentro do intervalo (a,b), isto é, se $f^{'}(x) > 0$ ou $f^{'}(x) < 0$ para todo $a < x < b$.

A observação acima está relacionada com o fato de que se $f^{'}(x) > 0$ para todo $x \in (a,b)$ então a função é crescente no intervalo. De forma análoga, se $f^{'}(x) < 0$ para todo $x \in (a,b)$ então a função é decrescente.

(iii) Seja $p(x) = a_n x^n + a_{x-1}x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$ um polinômio de grau n. Então $p(x)$ possui, no máximo, n raízes reais. No caso em que o número de raízes reais é igual ao grau do polinômio, denotando as raízes por $x_1^*, x_2^*, \cdots, x_n^*$, é possível fatorar o polinômio como $p(x) = a_n(x-x_1^*)(x-x_2^*)\cdots(x-x_n^*)$.

Uma forma de se isolar as raízes de uma função $f(x)$ usando os resultados anteriores é tabelar $f(x)$ para vários valores de x e avaliar as mudanças de sinal da função, bem como o valor da derivada nos intervalos em que $f(x)$ muda de sinal.

Exemplo 48 Determine os intervalos em que a função $f(x) = x^3 - 9x + 3$ possui raízes. Use o resultado (iii) apresentado anteriormente.

Exemplo 49 Considere a função $f(x) = \sqrt{x} - 5e^{-x}$ definida para $x \geq 0$. Determine os intervalo que contém as raízes da função.

Observação

Para $y = f(x)$ função contínua, o critério $f(a)f(b) < 0$ é suficiente para garantir que existe uma raiz no intervalo (a,b). No entanto, se $f(a)f(b) > 0$, pode ou não existir uma raiz no intervalo, como ilustrado a seguir:

Podemos também determinar os intervalos que possuem os zeros da função graficamente, como ilustrado a seguir.

Exemplo 50 Considere novamente a função $f(x) = x^3 - 9x + 3$ definida no exemplo 48.

Exemplo 51 Considere agora $f(x) = \sqrt{x} - 5e^{-x}$ definida no exemplo 49.

5.1.2 Refinamento da raiz

A etapa do refinamento consiste em melhorar o valor da raiz aproximada até o grau de exatidão requerido.

Esse grau de exatidão pode ser medido por um critério de parada, isto é, uma condição que, quando satisfeita, indica que a aproximações é satisfatória.

5.1.3 Critérios de Parada

Seja $y = f(x)$ uma função contínua e x^* um zero de f. Se estabelecemos uma precisão $\varepsilon > 0$ então $\widetilde{x}$ é uma aproximação de x^* se satisfaz

$$|\widetilde{x} - x^*| < \varepsilon \tag{5.1}$$

No caso em que a raiz exata não é conhecida, pode-se usar como critério da parada a condição

$$|f(\widetilde{x})| < \varepsilon \tag{5.2}$$

5.2 Métodos iterativos para se obter zeros reais de funções

Os métodos discutidos seguir são iterativos, isto é, métodos que necessitam de uma aproximação inicial, uma equações de recorrência e um critério de parada.

O objetivo é construir uma sequência de aproximações para o zero da função, denotada por $x_1, x_2, x_3, \ldots$. O valor x_k escolhido como aproximação será aquele que satisfizer o critério de parada estipulado.

Quanto ao critério de parada, pode-se usar os critérios apresentados nas equações (5.2) e (5.1) da seguinte forma:

$$|x_k - x^*| < \varepsilon \quad \text{ou} \quad |f(x_k)| < \varepsilon$$

Ainda é possível utilizar um critério que depende unicamente da sequência de aproximações fornecida pelo método iterativo, dado por

$$|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon \quad \text{ou} \quad \frac{|x_k - x_{k-1}|}{|x_k|} < \varepsilon \tag{5.3}$$

que são, respectivamente, o erro absoluto e o erro relativo entre dois termos consecutivos da sequência de aproximações.

Este último critério indica que as aproximações estão cada vez mais próximas entre si, mas em algumas situações isso não significa que as aproximações esteja próximas da raiz x^*. Assim, o cálculo de $f(x_k)$ é sempre indicado para verificar se a imagem da função está realmente próxima de zero.

5.3 Método da Bisseção

Seja $f(x)$ um função contínua no intervalo $[a, b]$ satisfazendo $f(a)f(b) < 0$. Vamos supor que existe somente uma raiz real no intervalo $[a, b]$.

O objetivo deste método é reduzir a amplitude do intervalo que contém a raiz até se atingir o critério da parada, usando para isso a sucessiva divisão do intervalo $[a, b]$ ao meio.

O método pode ser descrito pelos passos a seguir, denotando o intervalo usado na k-ésima iteração por $I_k = [a_k, b_k]$ e considerando que existe uma única raiz no intervalo $[a_0, b_0]$.

1. Divide-se o intervalo inicial $I_0 = [a_0, b_0]$ ao meio, obtendo $x_0 = \dfrac{a_0 + b_0}{2}$ ponto médio do intervalo. Formam-se dois intervalos: $[a_0, x_0]$ e $[x_0, b_0]$;
2. Calcula-se $f(x_0)$ e
   - se $f(x_0) = 0$ então $x^* = x_0$
   - se $f(a_0)f(x_0) < 0$ então $I_1 = [a_0, x_0] := [a_1, b_1]$
   - se $f(x_0)f(b_0) < 0$ então $I_1 = [x_0, b_0] := [a_1, b_1]$
3. Calcula-se o ponto médio do intervalo I_1 dado por $x_1 = \dfrac{a_1 + b_1}{2}$ e verifica-se se x_1 satisfaz o critério de parada. Se não, vá para o passo 4;
4. Escolhe-se, dentre os intervalos $[a_1, x_1]$ e $[x_1, b_1]$, o intervalo que contém a raiz e denota-se por I_2. A aproximação x_2 é o ponto médio do intervalo I_2;
5. Repete-se o processo de divisão dos intervalos e verificação do critério de parada até que uma aproximação x_k satisfaça o critério.

Exemplo 52 Calcular um zero da função $f(x) = x^2 + \ln x$ usando como critério da parada $|x_k - x_{k-1}| < 0,01$. Use o intervalo $[0,5\ ;\ 1,0]$ e justifique por que existe um único zero neste intervalo.

Exemplo 53 Calcular um zero da função $f(x) = x^2 - \operatorname{sen} x - 1$ usando como critério da parada $|x_k - x_{k-1}| < 0,01$. Use o intervalo $[0,0\ ;\ 2,0]$.

Exemplo 54 Calcular um zero da função $f(x) = x^2 - 3$ usando como critério da parada $|f(x_k)| < 0,01$. Use o intervalo $[1,0\ ;\ 2,0]$. Existe mais alguma raiz no intervalo? Discuta uma segunda estratégia para resolver a equação $f(x) = 0$.

5.3.1 Estudo de convergência

Note que a cada iteração o conprimento de intervalo é reduzido à metade. Assim, se L_k representa o comprimento do intervalo na k-ésima iteração, temos

$$L_0 = b - a, \quad L_1 = \frac{L_0}{2} = \frac{b-a}{2}, \quad L_2 = \frac{L_1}{2} = \frac{b-a}{4}, \quad \cdots, \quad L_k = \frac{b-a}{2^k}$$

Como x_k e raiz exata x^* pertencem ao intervalo I_k então, se desejamos que $|x_k - x^*| < \varepsilon$ então basta exigir que o comprimento do intervalo I_k seja menor do que ε. Ou seja,

$$\frac{b-a}{2^k} < |x_k - x^*| < \varepsilon$$

Isolando k na inequação acima obtemos uma condição para garantir que o erro satisfaça o critério imposto, dada por

$$k > \frac{\ln(b-a) - \ln(\varepsilon)}{\ln 2}.$$

Exemplo 55 Considerando a função $f(x) = x^2 - \operatorname{sen} x - 1$ e o intervalo $[0,0\ ;\ 2,0]$ dados no exemplo 53, determine o número de iterações mínimas necessária para que a condição $|x_k - x^*| < 10^{-5}$ seja satisfeita.

Discussão do método

O método da Bisseção tem como ponto positivo a não exigência do conhecimento da derivada da função no entanto a convergência é lenta. É indicado para diminuir o intervalo que contém a raiz para posterior aplicação de outro método pois o esforço computacional cresce demasiadamente quando se aumenta a exatidão desejada.

5.4 Método das Cordas

Seja $f(x)$ uma função contínua no intervalo $[a,b]$ satisfazendo

- $f(a)f(b) < 0$,
- existe um única raiz da função no intervalo $[a,b]$ e
- $f''(x)$ tem sinal constante no intervalo $[a,b]$.

Geometricamente, o método das cordas equivale a substituir a curva $y = f(x)$ pela reta secante r que passa pelos pontos $A\,(a, f(a))$ e $B\,(b, f(b))$. Nesse método, um dos pontos iniciais (A ou B) é fixo em todas as iterações.

A figura abaixo ilustra o caso em que $f''(x) > 0$, isto é, a função $f(x)$ tem concavidade para cima.

O chute inicial é um dos extremos do intervalo, escolhido apropriamente, e a primeira aproximação x_1 é a intersecção da reta r com o eixo X.

Vamos deduzir a equação de recorrência utilizada pelo método das cordas que, a partir da aproximação inicial x_0, determina as aproximações x_1, x_2, $\ldots$.

Considere o caso representado pela figura 5.2, em que

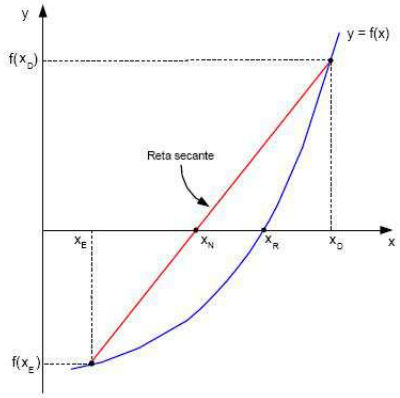


Figura 5.2: Método das cordas

$$f(a) < 0,\ f(b) > 0 \text{ e } f'' > 0.$$

Escolhe-se como aproximação inicial x_0 o extremo de intervalo $[a, b]$ que satisfizer

$$f(x)f''(x) < 0.$$

O outro extremo será denotado por c e será fixo em todas as iterações. O objetivo é descobrir o valor de x_1, intersecção da reta com o eixo X.

Usando os dois triangulos retângulos cujo um dos catetos está sobre o eixo X, podemos deduzir que:

$$\frac{f(b)}{b - x_1} = \frac{-f(a)}{x_1 - a}$$

Como $f(a)f''(a) < 0$ então $x_0 = a$ é a aproximação inicial e $c = b$ é o ponto fixo na recorrência. Assim, isolando-se a aproximação x_1 obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{f(c)}{c - x_1} &= \frac{-f(x_0)}{x_1 - x_0} \\
f(c)\,(x_1 - x_0) &= -f(x_0)\,(c - x_1) \\
x_1 &= \frac{cf(x_0) - x_0 f(c)}{f(x_0) - f(c)}
\end{aligned}$$

Repetindo o processo para a aproximação x_2, considerando a reta que passa por $(x_1, f(x_1))$ e $(c, f(c))$, obtemos

$$x_2 = \frac{cf(x_1) - x_1 f(c)}{f(x_1) - f(c)}$$

Por indução, obtem-se a equação de recorrência

$$x_{k+1} = \frac{cf(x_k) - x_k f(c)}{f(x_k) - f(c)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

em que c é o extremo de $[a, b]$ que satisfaz $f(x)f^{''}(x) > 0$.

Os outros casos que podem ser analisados são:

$$f(a) < 0,\ f(b) > 0 \text{ e } f^{''} < 0$$
$$f(a) > 0,\ f(b) < 0 \text{ e } f^{''} > 0$$
$$f(a) > 0,\ f(b) < 0 \text{ e } f^{''} < 0.$$

No entanto, as deduções são análogas e fornecem a mesma equação de recorrência, mudando apenas a aproximação inicial x_0 e o valor fixo c.

Pode-se resumir o método nos seguintes passos para uma função $f(x)$ definida no intervalo $[a, b]$:

1. Verifique que $f(a)f(b) < 0$, que existe um única raiz da função no intervalo $[a, b]$ e que $f^{''}(x)$ tem sinal constante no intervalo;

2. Se $f(a)f^{''}(a) < 0$ então $x_0 = a$ e $c = b$. Caso contrário, $x_0 = b$ e $c = a$;

3. Aplicar a fórmula de recorrência

$$x_{k+1} = \frac{cf(x_k) - x_k f(c)}{f(x_k) - f(c)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

   até que o critério de parada escolhido seja satisfeito.

Exemplo 56 Obtenha um zero da função $f(x) = 2x^2 + \operatorname{sen} x - 10$ no intervalo $\left[\frac{\pi}{2}, \pi\right]$, usando o Método das Cordas. Utilize como critério de parada $|f(x)| < 10^{-3}$.

Exemplo 57 Obtenha uma raiz da equação $x \ln x = 1$ no intervalo $[1, 2]$, usando o Método das Cordas. Utilize como critério de parada $|x_k - x_{k-1}| < 10^{-3}$.

Discussão do método

Se o ponto fixado c for razoavelmente próximo da raiz o método tem boa convergência, desde que o sinal de $f^{''}(x)$ no intervalo permaneça constante. Se c for demasiadamente distante da raiz, o método pode ter convergência mais lenta que o método da Bisseção.

Existem outros métodos que usam aproximações lineares (retas) para obter um zero da função $f(x)$, como por exemplo o Método de Secante e o Método Pégaso.Informações sobre tais métodos podem ser encontradas em bibliografias de Cálculo Numérico.

5.5 Método de Newton

Seja $f(x)$ uma função contínua no intervalo $[a, b]$ satisfazendo

– $f(a)f(b) < 0$,

– existe um única raiz da função no intervalo $[a, b]$,

– $f^{'}(x)$ é contínua e tem sinal constante no intervalo $[a, b]$ e

– $f^{''}(x)$ é contínua e tem sinal constante no intervalo $[a, b]$.

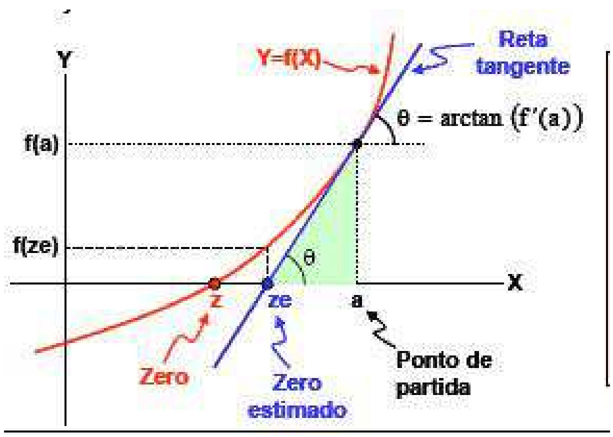


Figura 5.3: Método de Newton

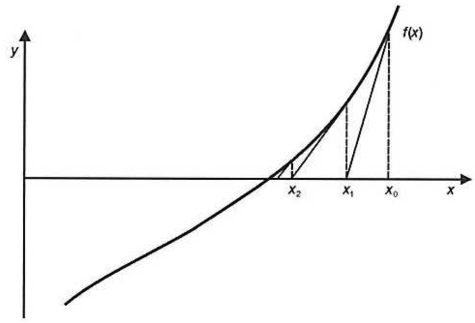


Figura 5.4: Aproximações sucessivas do Método de Newton

Segundo Campos [4], geometricamente o Método de Newton é equivalente a aproximar um arco da curva $y = f(x)$ por uma reta tangente traçada a partir de um ponto da curva, o que faz com que ele seja connhecido também como o Método das Tangentes. As figuras abaixo ilustram o método.

Do Cálculo Diferencial e Integral, considerando um intervalo $[a, b]$, sabe-se que:

- Se $f^{'}(x) > 0$ e $f^{''}(x) > 0$ então a função $f(x)$ é crescente e côncava para cima;
- Se $f^{'}(x) > 0$ e $f^{''}(x) < 0$ então a função $f(x)$ é crescente e côncava para baixo;
- Se $f^{'}(x) < 0$ e $f^{''}(x) > 0$ então a função $f(x)$ é decrescente e côncava para cima;
- Se $f^{'}(x) < 0$ e $f^{''}(x) < 0$ então a função $f(x)$ é decrescente e côncava para baixo.

Para podermos utilizar o Método, apenas uma das situação acima deve ocorrer para todo $x \in [a, b]$. No entanto, a equação de recorrência não depende de qual caso ocorre. Esse fator é utilizado apenas para definir o chute inicial x_0, que é escolhido como o extremo do intervalo $[a, b]$ que satisfizer

$$f(x_0)f^{''}(x_0) > 0.$$

Considere o caso ilustrado pela figura 5.3 em que $f^{'}(x) > 0$ e $f^{''}(x) > 0$. Os demais casos são análogos.

Sabe-se que se θ é a inclinação da reta tangente à curva com equação $y = f(x)$ no ponto $(x_0, f(x_0))$ e se x_1 é a interseção da reta com o eixo X então

$$\tan\theta = f'(x_0) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1}$$

Isolando-se o valor de x_1 obtem-se

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Repetindo o processo para a reta tangente no ponto $(x_1, f(x_1))$, e assim sucessivamente, chega-se a fórmula de recorrência

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Pode-se resumir o método nos seguintes passos para uma função $f(x)$ definida no intervalo $[a, b]$:

1. Verifique que $f(a)f(b) < 0$, que existe um única raiz da função no intervalo $[a, b]$ e que $f'(x)$ e $f^{''}(x)$ têm sinal constante no intervalo;

2. Se $f(a)f^{''}(a) > 0$ então $x_0 = a$. Caso contrário, $x_0 = b$;

3. Aplicar a fórmula de recorrência

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

   até que o critério de parada escolhido seja satisfeito.

Exemplo 58 Obtenha um zero da função $f(x) = 2x^3 + \ln x - 5$ contido no intervalo $[1, 2]$ e adote como critério de parada $|f(x_k)| < 10^{-6}$.

Exemplo 59 Determine a raiz negativa da função $f(x) = x^3 - 5x^2 + x + 3$. Utilize como critério de parada $|x_k - x_{k-1}| < 10^{-5}$.

Exemplo 60 Determine o valor de $\sqrt{7}$ usando o Método de Newton.

Discussão do método

O método de Newton tem uma convergência muita rápida mas requer o conhecimento da forma analítica de $f'(x)$.

Se durante a verificação das hipóteses do método obtém-se $f'(x) = 0$ ou $f^{''}(x) = 0$ para algum $x \in [a, b]$, dividi-se o intervalo em dois e use-se no método o intervalo que contém o raiz.

5.6 Método da Iteração Linear ou Ponto Fixo

Seja $y = f(x)$ uma função contínua num intervalo $[a, b]$ que contenha apenas um número x^* tal que $f(x^*) = 0$ e com $f(a)f(b) < 0$.

O método consiste em, por algum artifício algébrico, transformar a equação $f(x) = 0$ em $x = F(x)$, sendo a função $F(x)$ chamada de *Função Iteração.*

A partir de uma aproximação inicial x_0, obtemos a raiz procurada pela equação de recorrência:

$$x_{k+1} = F(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Para que a equação conduza a uma aproximação de x^*, é necessário que:

– $F(x)$ e $F'(x)$ sejam contínuas em $[a, b]$;

– $|F'(x)| < 1$ para todo $x \in [a, b]$;

– $x_0 \in [a, b]$.

Dada a equação $f(x) = 0$, podemos obter mais de uma função iteração $F(x)$, no entanto, nem todas satisfazem as condições acima.

O método pode ser descrito pelos seguintes passos desde que exista uma única raiz da função $f(x)$ no intervalo $[a, b]$:

1. Obtenha uma função iteração $F(x)$, a partir da equivalência $f(x) = 0 \Leftrightarrow x = F(x)$.

2. Verifique que $F(x)$ satisfaz

   – $F(x)$ e $F'(x)$ sejam contínuas em $[a, b]$;
   – $|F'(x)| < 1$ para todo $x \in [a, b]$;
   – $x_0 \in [a, b]$.

3. Atualize a fórmula de recorrência $x_{k+1} = F(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$ para obter a sequência de aproximações, até que o critério de parada seja satisfeito.

Exemplo 61 Calcule o zero da função $f(x) = x^3 - 9x + 3$ em $[0, 1]$, com $x_0 = 0,5$ e critério de parada $|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon 10^{-4}$.

Exemplo 62 Calcule o zero da função $f(x) = x^2 + x - 6$ em $[-3,5\ ;\ -2,5]$, com $x_0 = -2,8$ e critério de parada $|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon 10^{-4}$.

Exemplo 63 Seja $f(x) = x^2 - \operatorname{sen} x$ com uma única raiz no intervalo $I = [0,5\ ;\ 1,5]$ e $x_0 = 0,9$.

Vamos testar duas funções iteração distintas, dadas a seguir:

- $F_1(x) = x^2 + x - \operatorname{sen} x$ obtida como somando-se x em ambos os lados da equação $f(x) = 0$:

$$\begin{aligned} x^2 - \operatorname{sen} x &= 0 \\ x^2 - \operatorname{sen} x + x &= x \\ x &= x^2 + x - \operatorname{sen} x \end{aligned}$$

  No entanto, a condição $|F'(x)| < 1$ não é satisfeita. (Verifique!)

- $F_2(x) = \sqrt{\operatorname{sen} x}$ obtida isolando o x^2:

$$\begin{aligned} x^2 - \operatorname{sen} x &= 0 \\ x^2 &= \operatorname{sen} x \\ x &= \sqrt{\operatorname{sen} x} \end{aligned}$$

pois $\operatorname{sen}(x) > 0$ para todo $x \in [0,5\ ;\ 1,5]$.

Agora, a condição $|F'(x)| < 1$ é satisfeita para todo x no intervalo. (Verifique!) Portanto, vamos usar F_2 como função iteração. Fazendo as iterações temos

k	x_k	$F(x_k) = \sqrt{\operatorname{sen} x_k}$	$f(x_k) = x_k^2 - \operatorname{sen} x_k$
0	0,9000	0,8851	0,0267
1	0,8851	0,8797	0,0094
2	0,8797	0,8778	0,0033
3	0,8778	0,8771	0,0012
4	0,8771	0,8769	0,0004

Exemplo 64 Obtenha uma raiz da função $f(x) = 3 + \sin x - 2\ln x$ com chute inicial $x_0 = 4$. Teste as funções iteração $F_1(x) = \arcsin(2\ln x - 3)$, $F_2(x) = e^{(3+\sin x)/2}$ e $F_3(x) = x + 3 + \sin x - 2\ln x$

Discussão do método

A maior dificuldade é achar uma função iteração $F(x)$ que satisfaça à condição de convergência. O teste $|F'(x_0)| < 1$ pode levar a um engando se x_0 não estiver suficientemente próximo da raiz.

Sendo x^* a raiz exata, a velocidade de convergência dependerá de $|F'(x^*)|$: quanto menor este valor, maior a convergência.

5.7 Lista de Exercícios

1. Usando um dos métodos estudados calcule uma boa aproximação para pelo menos uma raiz x^* de cada função abaixo. Não esqueça de verificar as exigências o método que for utilizar.

   (a) $f(x) = x^2 - 3$ com erro $\leq 0,01$ sendo $x^* \in [1,0\ ;\ 2,0]$.

   (b) $f(x) = x^3 - 10$ com erro $\leq 0,01$ sendo $x^* \in [2,0\ ;\ 3,0]$.

   (c) $f(x) = x^2 + e^x - 7$ com erro $\leq 10^{-2}$ sendo $x^* \in [1,0\ ;\ 2,0]$.

   (d) $f(x) = e^x - \sin x - 2$ com erro $\leq 10^{-5}$ em $[1,0\ ;\ 1,2]$.

   (e) $f(x) = x^3 - 4x^2 + x + 6$ com erro $< 0,01$ sendo $x^* \in [1,4\ ;\ 2,2]$.

   (f) $f(x) = x^2 - 10\ln x - 5$ com erro $\leq 0,001$ sendo $x^* \in [0,3\ ;\ 1,0]$.

   (g) $f(x) = x^3 - e^{2x} + 3$ com erro $\leq 10^{-3}$ e $x^* \in [0\ ;\ 1,0]$

   (h) $f(x) = 2x^3 + x^2 - 2$ com erro $\leq 0,001$ e $x^* \in [0\ ;\ 1,0]$

   (i) $f(x) = \sin x - \ln x$ com erro $\leq 10^{-3}$ e $x^* \in [2,0\ ;\ 3,0]$

   (j) $f(x) = 3x - \cos x + 4$ com erro $\leq 10^{-3}$ e $x^* \in [-1,5\ ;\ -1,0]$.

   (k) $f(x) = x^2 + e^x - 10$ com erro $< 0,001$ e $x^* \in [-4\ ;\ -3]$

(l) $f(x) = 3 + \sin x - 2\ln x$ com erro $\leq 0,001$. $x^* \in [3,0\ ;\ 4,0]$.

(m) $f(x) = 7x - \sec x$ com erro $\leq 0,001$ e $x^* \in [1,0\ ;\ 2,0]$

(n) $f(x) = 2e^x + x^3$ com erro $\leq 10^{-3}$ e $x^* \in [-1,0\ ;\ 0]$

2. Analise os zeros da função $f(x) = 4x + \sin x - 3\ln x$.

3. Usando o método da Iteracão Linear, calcule uma aproximação para pelo menos uma raiz de cada função $f(x)$ abaixo.

   (a) $f(x) = x^2 - \cos x - 8$ no intervalo $[2,6\ ;\ 2,7]$ com erro menor que 10^{-3}. Use $F(x) = \sqrt{\cos x + 8}$

   (b) $f(x) = e^{\cos x} - 3x + 4$ com erro menor que 10^{-3}. Use $F(x) = \dfrac{e^{\cos x} + 4}{3}$.

   (c) $f(x) = e^x + \cos x - 5$ com erro menor que 10^{-3}

4. (BURIAN, [3]) Você compra um servidor para a sua empresa por R\$20.000 sem entrada, mas com parcelas de R\$5.000 por ano durante 5 anos. Qual a taxa de juros que você está pagando? A fórmula que relaciona o valor presente (P), pagamentos anuais (A), número de anos (n) e a taxa de juros (i) é:

$$A = P.\frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1}$$

5. (BURIAN, [3]) Nos processos de engenharia química, o vapor de água (H_2O) é aquecido a altas temperaturas de forma a ter a dissociação da água, ou quebra em parte, para formar oxigênio (O_2) e hidrogênio (H_2):

$$H_2O \rightarrow H_2 + \frac{1}{2}O_2$$

   Admite-se que esta é a única reação envolvida. A fracão molar (x) de (H_2O) que se dissocia pode ser representada por

$$K_p = \frac{x}{1-x}\sqrt{\frac{2p_t}{2+x}}$$

   onde K_p é a constante de equilíbriio da reação e p_t é a pressão total da mistura. Se $p_t = 2$ atm e $K_p = 0,04568$, determine o valor de x que satisfaz a equação acima.

6. (BURIAN, [3]) A concentração C de uma bactéria poluente em um lago diminui de acordo com

$$C = 80e^{-2t} + 20e^{-0,1t}$$

   Determine o tempo necessário para reduzir a concentração de bactéria a 10.

7. (BURIAN, [3]) O deslocamento horizontal da estrutura de um prédio é definido pela seguinte equação de amortecimento:

$$y = 10e^{-kt}\cos \omega t$$

   onde $k = 0,5$ e $\omega = 2$. Determine o tempo necessário para que o deslocamento horizontal seja 4.

8. (BURIAN, [3]) Uma equipe de engenheiros automobilísticos coreanos desenvolveu um sistema de amortecedores para carros de Fórmula-1. Para dar prosseguimento ao projeto, os engenheiros necessitam do valor numérico da raiz da expressão:

$$f(x) = 4 + x\cos x$$

Determine o resultado com três casas decimais.

9. (BURIAN, [3]) Um equipamento para análises de espectros de ondas de rádio obteve a seguinte expressão para um determinado sinal:

$$Y = u^3 \sin u + \cos u + 3$$

Determine o valor de u que anula Y, partindo de $u_0 = 3$. Use quatro casas decimais.

10. O preço à vista de uma mercadoria é $R\$ \ 1.100,00$, no entanto, ela pode ser financiada por dois planos:

Plano 1: entrada de $R\$ \ 100,00$ e mais 6 prestações de $R\$ \ 224,58$.
Plano 2: sem entrada e 10 prestações de $R\$ \ 163,19$.

Acredita-se que o melhor plano será aquele que tiver a menor taxa de juros. Da Matemática Financeira temos que o juros é dado pela equação

$$\frac{1-(1+j)^{-p}}{j} = \frac{v-e}{m}$$

em que j é a taxa de juros, p é o prazo, v é o preço à vista, e é a entrada e m é a mensalidade. Determine qual dos dois planos é melhor para o consumidor.

SUGESTÃO: Defina a função $f(j) = \dfrac{1-(1+j)^{-p}}{j} - \dfrac{v-e}{m}$ e verifique para que valor de j temos $f(j) = 0$ usando o método que desejar, explicitando-o e exibindo os cálculos.

Gabarito

1. Os valores podem variar um pouco, dependendo do critério de parada utilizado. Na dúvida, use o VCN para conferir seus cálculos.

   (a) $1,7265$
   (b) $2,1543$
   (c) $1,5351$
   (d) $1,0530$
   (e) $2,0002$
   (f) $0,6310$
   (g) $0,5809$
   (h) $0,8580$
   (i) $2,2191$
   (j) $-1,217$
   (k) $1,8714$
   (l) $3,5976$
   (m) $-0,9254$

2. A função não possui raiz real.

3. (a)
   (b) $1,64348$
   (c) $1,6189$
4. Usando o intervalo entre 0,01% e 10% obtemos $i = 0,0793 = 7,93\%$
5. Pelo método das cordas $x = 0,0315$
6. No intervalo $(0,10)$ $t = 6,93164$
7. No intervalo $(0,10)$ $t = 0,576u.t$
8. $x = 8,353$
9. No intervalo $(3,10)$; $u_0 = 3$; $u = 3,20257$
10. Plano 1: $j = 0,0925$;   Plano 2: $j = 0,0790$

Capítulo 6

Integração Numérica

6.1 Introdução

Seja $y = f(x)$ uma função contínua no intervalo $[a, b]$ e sua primitiva dada por $F(x)$, isto é, $F'(x) = f(x)$. Então o valor da integral $\int\limits_a^b$ pode ser calculado como

$$I = \int\limits_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a). \tag{6.1}$$

e, se $f(x) \geq 0$ para todo $x \in [a, b]$, então a integral fornece a área entre o gráfico da função e o eixo X.

Entretanto, em muitas situações, ccorrem

(i) a primitiva $F(x)$ é muito difícil ou até mesmo impossível de ser determinada;

(ii) conhece-se apenas uma tabela de valores da função $f(x)$, o que impossibilita obter $f(x)$ e, consequentemente $F(x)$, analiticamente.

Para esses casos os métodos de integração numérica são as ferramentas adequadas para determinar aproximações para os valores das integrais definidas. Os métodos de integração numérica que veremos a seguir consistem em determinar o valor de uma integral definida utilizando uma sequência de valores tabelados da função $f(x)$.

Estudaremos os seguintes métodos:

- Método dos Trapézios
- Primeira Regra de Simpson
- Segunda Regra de Simpson

Para obter o valor aproximado da I, inicialmente obtém-se o polinômio interpolador $p(x)$ da função $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ e, em seguida, integra-se tal polinômio. Assim

$$I = \int\limits_a^b f(x)\,dx \approx \int\limits_a^b p(x)\,dx$$

O grau do polinômio interpolador dependerá da quantidade de pontos conhecidos.

Como vimos anteriormente, há diversas formas de se obter o polinômio $p(x)$. Em nossos cálculos utilizaremos o Método de Lagrange, em que dados os pontos distintos (x_0, y_0), (x_1, y_1), …, (x_n, y_n) o polinômio é dado pela expressão

$$p(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + \cdots + y_n L_n(x)$$

em que para $k = 0, 1, \ldots, n$,

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0) \ldots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \ldots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \ldots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \ldots (x_k - x_n)}. \tag{6.2}$$

6.2 Método dos Trapézios

Este método consiste em utilizar um polinômio interpolador de grau 1 para aproximar a função $f(x)$, ou seja, uma reta. Geometricamente, a área entre o gráfico de $f(x)$ e o eixo X é então aproximada por um trapézio, de onde segue o nome do método.

Inicialmente, vamos considerar que são conhecidos dois pontos distintos (x_0, y_0) e (x_1, y_1) em que $y_i = f(x_i)$. Do método de Lagrange, sabemos que o polinômio interpolador de grau 1 é dado por

$$p_1(x) = y_0 \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} + y_1 \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}$$

Denotando $h = x_1 - x_0$ a distância das abscissas conhecidas e integrando o polinômio no intervalo $[x_0, x_1]$ temos

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_1} p_1(x)\, dx &= \int_{x_0}^{x_1} -\frac{y_0}{h}(x - x_1) + \frac{y_1}{h}(x - x_0)\, dx \\
&= -\frac{y_0}{h}\frac{(x - x_1)^2}{2} + \frac{y_1}{h}\frac{(x - x_0)^2}{2}\Bigg|_{x_0}^{x_1} \\
&= \frac{y_0}{h}\frac{(x_0 - x_1)^2}{2} + \frac{y_1}{h}\frac{(x_1 - x_0)^2}{2} \\
&= \frac{y_0}{h}\frac{(-h)^2}{2} + \frac{y_1}{h}\frac{h^2}{2} \\
&= \frac{h}{2}(y_0 + y_1)
\end{aligned}$$

Assim

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\,(y_0 + y_1) \tag{6.3}$$

Se $a = x_0$ e $b = x_1$ então

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{(b-a)}{2}\,(f(a) + f(b))$$

Se desejamos dividir o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos então o comprimento h dos subintervalos é dado por

$$h = \frac{b-a}{n}$$

e os pontos no eixo X serão

$$\begin{aligned}
x_0 &= a\\
x_1 &= x_0 + h\\
x_2 &= x_1 + h = x_0 + 2h\\
x_3 &= x_2 + h = x_0 + 3h\\
&\vdots\\
x_n &= x_{n-1} + h = x_0 + nh = b
\end{aligned}$$

Nesse caso, pelo Método dos Trapézios, usa-se um polinômio interpolador de grau 1 para cada par de ponto x_i e x_{i+1}, para $i = 0, 1, \ldots, n-1$. Vamos denotar tal polinômio por $p_1^i(x)$.

Assim, se $y_i = f(x_i)$, segue da equação (6.3), que

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_{x_0}^{x_1} p_1^0(x)\,dx + \int_{x_1}^{x_2} p_1^1(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} p_1^{n-1}(x)\,dx =\\
&= \frac{h}{2}\,(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}\,(y_1 + y_2) + \cdots + \frac{h}{2}\,(y_{n-2} + y_{n-1}) + \frac{h}{2}\,(y_{n-1} + y_n)\\
&= \frac{h}{2}\,(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{n-2} + 2y_{n-1} + y_n)
\end{aligned}$$

A figura abaixo ilustra o Método dos Trapézios.

Em resumo, se $x_0 = a$ e $x_n = b$, o valor da integral $\int_a^b f(x)\,dx$ pode ser aproximado pela expressão

$$I_n^T = \frac{h}{2}\,(y_0 + 2y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{n-2} + 2y_{n-1} + y_n) \tag{6.4}$$

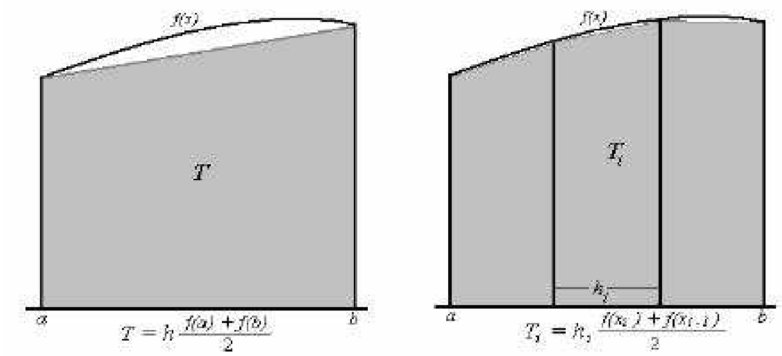


Figura 6.1: Método dos trapézios

em que n é o número de subintervalos de comprimento h e $y_i = f(x_i)$ para $i = 0, 1, \ldots, n$.

Exemplo 65 Determine $\displaystyle\int_{3,0}^{3,6} \frac{1}{x}\, dx$ usando o método do Trapézio com $n = 2$.

Exemplo 66 Determine uma aproximação para $\pi/4$ considerando $\pi/4 = \displaystyle\int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$ e usando a fórmula do trapézio para $n = 10$.

Exemplo 67 Calcule uma aproximação para $\displaystyle\int_0^1 f(x)dx$ para $f(x)$ da tabela a seguir.

x	0	0,25	0,50	0,75	1
$f(x)$	1	1,28	1,65	2,12	2,72

6.2.1 Cota para o erro

Em geral, quanto maior o valor de n, melhor será a aproximação do valor da integral. A saber existe uma maneira de determinar qual o menor número de subintervalos é necessário para garantir que o erro absoluto seja menor do que uma cota $\varepsilon > 0$.

Se $f(x)$ função contínua no intervalo $[a, b]$ e $M > 0$ um valor real tal que $|f''(x)| < M$ para todo $x \in [a, b]$ então para determinar $\displaystyle\int_a^b f(x)dx$ com erro inferior a $\varepsilon > 0$ basta determinar n de modo que

$$n > \sqrt{\frac{M(b-a)^3}{12\,\varepsilon}}.$$

A dedução da expressão acima pode ser obtida em Campos [4].

Exemplo 68 Seja $I = \displaystyle\int_0^1 e^{x^2} dx$, determine em quantos subintervalos devemos dividir $[0, 1]$ para determinar uma aproximação com erro inferior a 10^{-2}.

6.3 Primeira Regra de Simpson

A Primeira Regra de Simpson é uma evolução do Método dos Trapézios, consistindo em utilizar um polinômio interpolador de grau 2, denotado por $p_2(x)$, para aproximar a função $f(x)$ e, em seguida, integrar o polinômio.

Inicialmente, vamos considerar que são conhecidos três pontos distintos x_0, x_1 e x_2, com espaçamento $h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1$ e $y_i = f(x_i)$ as respectivas imagens. O polinômio interpolador que passa por esses pontos é dado por

$$\begin{aligned} p_2(x) &= y_0\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + y_1\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + y_2\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\ &= \frac{y_0}{2h^2}(x-x_1)(x-x_2) - \frac{y_1}{h^2}(x-x_0)(x-x_2) + \frac{y_2}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1) \end{aligned}$$

Integrando o polinômio $p_2(x)$ no intervalo $[x_0, x_2]$, como feito anteriormente, temos

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} p_2(x)\,dx &= \int_{x_0}^{x_2} \frac{y_0}{2h^2}(x-x_1)(x-x_2) - \frac{y_1}{h^2}(x-x_0)(x-x_2) + \frac{y_2}{2h^2}(x-x_0)(x-x_1)\,dx \\ &= \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) \end{aligned}$$

Assim

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) \tag{6.5}$$

Se $a = x_0$ e $b = x_2$ e $h = \dfrac{b-a}{2}$ então

$$\int_{a}^{b} f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2)$$

Se desejamos dividir o intervalo $[a, b]$ em n subintervalos então o comprimento h dos subintervalos é dado por

$$h = \frac{b-a}{n}.$$

Agora, usa-se um polinômio interpolador de grau 2 para cada trio de pontos. No entanto, note que n deve ser par pois para obter o polinômio interpolador de grau 2 são necessários 3 pontos, ou seja, 2 subintervalos. Vamos denotar tal polinômio que passa pelos pontos (x_i, y_i) (x_{i+1}, y_{i+1}) e (x_{i+2}, y_{i+2}) por $p_2^i(x)$, para $i = 0, 2, 4, \ldots, n-2$.

Assim, se $y_i = f(x_i)$, segue da equação (6.5), que

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,dx &\approx \int_{x_0}^{x_2} p_2^0(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} p_2^2(x)\,dx + \cdots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} p_2^{n-2}(x)\,dx = \\
&= \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) + \frac{h}{2}(y_2 + 4y_3 + y_4) + \cdots + \frac{h}{2}(y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n) \\
&= \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n)
\end{aligned}
$$

A figura abaixo ilustra o Método de Simpson, que também é conhecido como Método 1/3 de Simpson.

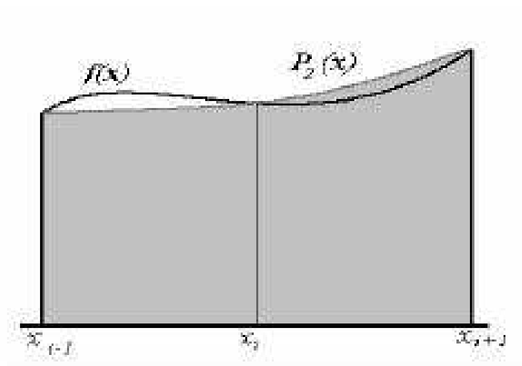


Figura 6.2: Método primeira de Simpson

Em resumo, se $x_0 = a$ e $x_n = b$, o valor da integral $\int_a^b f(x)\,dx$ pode ser aproximado pela expressão

$$I_n^{1/3} = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + 2y_4 + \cdots + 2y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n) \tag{6.6}$$

em que n é um número par de subintervalos de comprimento h e $y_i = f(x_i)$ para $i = 0, 1, \ldots, n$.

Exemplo 69 Determine uma aproximação para o valor da integral $\int_1^3 \frac{\sqrt{x}}{1+x^2}dx$ usando a Primeira Regra de Simpson e $n > 6$. Use 4 casas decimais depois da vírgula em seus cálculos.

Exemplo 70 Calcule $\int_2^4 \frac{\ln(x) + x^2}{(x+3)^2}dx$ com $n = 10$.

6.3.1 Cota para o erro

Se $f(x)$ função contínua no intervalo $[a, b]$ e $M > 0$ um número real tal que $|f^{(4)}(x)| < M$ para todo $x \in [a, b]$ então para determinar $\int_a^b f(x)dx$ com erro inferior a $\varepsilon > 0$ basta determinar n par de modo que

$$n > \sqrt[4]{\frac{M(b-a)^5}{180\,\varepsilon}}.$$

Exemplo 71 Repita o exemplo 68 para determinar o número de intervalos que fornece uma aproximação com erro inferior a 10^{-2}.

Exemplo 72 Considere a função definida como $\phi(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x e^{-t^2}dt$. Determine $\phi(1,43)$ com erro inferior a 10^{-4}.

6.4 Segunda Regra de Simpson

A Segunda Regra de Simpson segue o mesmo racioncínio dos métodos anteriores, mas agora utiliza-se um polinômio interpolador de grau 3 para cada quarteto de pontos.

Considere quatro pontos distintos x_0, x_1, x_2 e x_3, igualmente espaçados com espaçamento h, e $y_i = f(x_i)$. Integrando o polinômio interpolador que passa por esses pontos, como feito anteriormente, obtemos

$$\int_{x_0}^{x_3} p_3(x)\,dx = \frac{3h}{8}\,(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

Se desejamos dividir o intervalo de n subintervalos de abscissas x_0, x_1, $\ldots$, x_n, com n múltiplo de três, e sendo $h = \frac{x_n - x_0}{n}$ o comprimento dos subintervalos $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, 1, \ldots, n$, usa-se um polinômio interpolador de grau 3 para cada quarteto de pontos. Assim, se $x_0 = a$, $x_n = b$, $y_i = f(x_i)$ e $h = \frac{b-a}{n}$ então o valor da integral $\int_a^b f(x)\,dx$ pode ser aproximado pela expressão

$$I_n^{3/8} = \frac{3h}{8}\,(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + 2y_3 + 3y_4 + 3y_5 + 2y_6 + \cdots + 2y_{n-3} + 3y_{n-2} + 3y_{n-1} + y_n)$$

Exemplo 73 Calcular uma aproximação para $I = \int_1^4 \ln\left(x^3 + \sqrt{e^x + 1}\right) dx$ usando a Segunda Regra de Simpson com $n = 3$ e $n = 6$. Calcule o erro absoluto sabendo que o valor exato da integral é $8,56161$. Use 5 casas decimais depois da vírgula.

Exemplo 74 Um carro viaja de uma cidade A até uma cidade B, sendo que foram feitos os seguintes registros sobre sua velocidade:

t_i $(horas)$	0	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5
v_i (Km/h)	0	80	60	95	100	110	100	90

Sabendo-se que o carro chegou a cidade B após 3,5 horas de viagem, calcule a distância entre as duas cidades.

6.4.1 Cota para o erro

Se $f(x)$ função contínua no intervalo $[a,b]$ e $M>0$ um número real tal que $|f^{(4)}(x)|<M$ para todo $x\in[a,b]$ então para determinar $\int_a^b f(x)dx$ com erro inferior a $\varepsilon>0$ basta determinar n múltiplo de 3 de modo que

$$n > \sqrt[4]{\frac{M(b-a)^5}{80\ \varepsilon}}.$$

Exemplo 75 Calcule o valor de $\int\limits_{2}^{3,2} \ln(x+2)-1$ com erro absoluto menor que 10^{-3}.

6.5 Lista de Exercícios

1. Use a fórmula de Simpson com $n=2$ para calcular a integral

   $$\int_0^2 (3x^3-3x+1)dx$$

   Compare seu resultado com o valor exato da integral. Qual seria sua explicação para justificar um resultado tão bom?

2. Podemos calcular $\ln(5)$ com erro inferior a 10^{-3} usando $\ln(5)=\int_1^5 \frac{dx}{x}$.
   Pergunta-se:

   (a) Se usarmos a fórmula dos trapézios em quantos subintervalos devemos dividir o intervalo $[1,5]$?

   (b) E se usarmos a fórmula de Simpson?

   (c) Calcule $\ln(5)$ usando a fórmula de Simpson.

3. Usando os três métodos estudados, calcule $\int\limits_0^3 f(x)\,dx$ para o tabelamento abaixo.

x	0,0	0,5	1,0	1,5	2.0	2,5	3,0
$f(x)$	5,021	6,146	6,630	6,945	7,178	7,364	7,519

4. Calcule $\int_0^1 \frac{\sin(x)}{1+x}dx$ com erro inferior a 10^{-2}.

5. Um corpo se desloca ao longo do eixo $0x$ sob a ação de uma força variável F. Calcular o trabalho realizado para se deslocar o corpo de $x=0$ até $x=3,5$ sendo dado:

x	$0,0$	$0,5$	$1,0$	$1,5$	$2,0$	$2,5$	$3,0$	$3,5$
$F(x)$	$1,5$	$0,75$	$0,5$	$0,75$	$1,5$	$2,75$	$5,5$	$6,75$

6. Uma curva é definida pelos seguintes pares ordenados:

x	$1,0$	$2,0$	$3,0$	$4,0$	$5,0$	$6,0$	$7,0$
$y = f(x)$	$0,0$	$0,6$	$0,9$	$1,2$	$1,4$	$1,5$	$1,7$

Calcule a área limitada pelo eixo dos x, pelas retas $x = 1$ e $x = 7$ e pela curva acima.

7. Dada a tabela abaixo, calcule $\int_{100}^{108} f(x)dx$ por trapézio e pela regra de Simpson de 1/3.

x	100	102	104	106	108
$y = f(x)$	2	$2,0086002$	$2,0170333$	$2,0253059$	$2,0334238$

8. Calcule a integral $\int_0^4 x\sqrt{(1+x)}dx$ pelas três técnicas estudadas usando $h = 0,25$.

9. A equação de um círculo com raio 1 é dada por $x^2 + y^2 = 1$, e sua área é π. Conseqüentemente $\int_{-1}^{1} \sqrt{(1-x^2)}dx = \pi/2$. Avalie a integral usando os métodos de Simpson 1/3 com 8 subintervalos e Simpson 3/8 com 9 subintervalos.

10. Calcule as integrais a seguir pelos três métodos vistos em sala para $n = 12$ e compare os resultados com os fornecidos pelo VCN. Qual o valor de n para que o erro pelo método do Trapézio seja menor que 10^{-5}?

(a) $\int_2^4 \frac{\ln x + x^2}{(x+3)^2}dx.$

(b) $\int_2^4 \frac{1}{\sqrt{25+x^2}}dx.$

(c) $\int_0^2 \frac{e^x}{1+x^2}dx.$

(d) $\int_0^2 \sqrt{4x - x^2}dx.$

(e) $\int_0^1 \ln(1+x^2)dx.$

(f) $\int_3^7 x^2 \ln(x)dx.$

(g) $\int_0^{4\pi} \cos(x)\ln(x)dx.$

(h) $\int_2^4 \ln(x+2) - x\ dx$

(i) $\int_2^3 \frac{\cos(x)}{1+x}\ dx$

(j) $\int_{-1}^0 x\sqrt{x+1}\ dx$

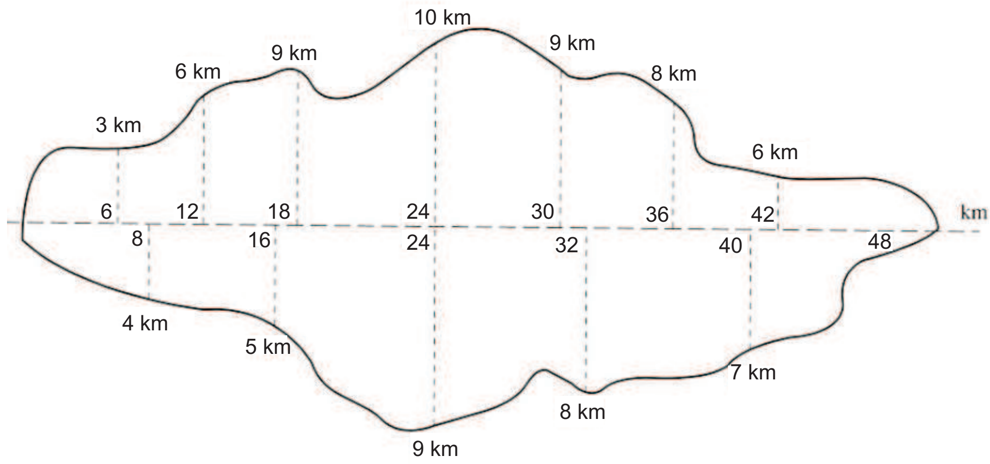
(k) $\int_0^{\pi/2} \operatorname{sen}(x)\cos(x^2)\ dx$

(l) $\int_3^{3,9} x^3 + x^2 + x + 1\ dx$

11. A figura a seguir representa a fotografia de um lago com as medidas em quilômetro. Calcule a área do lago por meio:

(a) da Regra do Trapézio.

(b) das Regras de Simpson (1/3 para a parte de cima e 3/8 para a parte de baixo do lago).



ATENÇÃO: Não esqueça de considerar os pontos final e inicial.

12. Considere a integral $I_n = \int_0^1 x^n e^{x-1}\, dx$, $n = 2, 3, \ldots$ Para o seu cálculo podemos usar sucessivamente o método de integração por partes, o que nos conduz a fórmula de recorrência $I_n = 1 - nI_{n-1}$, em que $n = 2, 3, \ldots$

    (a) Sabendo que $I_1 = \int_0^1 xe^{x-1}\, dx = \frac{1}{e}$ e efetuando os cálculos com seis casas decimais com o auxílio da calculadora, calcule o valor de I_9, recursivamente

    (b) Calcule uma aproximação para a integral I_9 usando o Método do Trapézio com $n = 20$.

    (c) Calcule uma aproximação para a integral I_9 usando a Primeira Regra de Simpson (1/3) com $n = 20$.

    (d) Sabendo que o valor exata da integral I_9 é $0,091612292989$, calcule o erro absoluto nos itens anteriores.

Gabarito

1. $x = 8,0912$

2. a) Valor da integral $= 1,612625$ Valor do somatório $= 16,12625$

   b) Valor da integral $= 1,609487$ Valor do somatório $= 24,142302$

3.

4. Pelo método da segunda regra de Simpson Valor da integral $= 0,279537$ Valor do somatório $7,4543324198$

5. Pela regra dos Trapézios Valor da integral $= 7,9375$ Valor do somatório $31,75$

6. Pelo método da segunda regra de Simpson Valor da integral $= 6,4875$ Valor do somatório $17,3$

7. Pelo método da regra dos Trapézios Valor da integral $= 16,13530$ Valor do somatório $= 16,13530$
   Pelo método da primeira regra de Simpson Valor da integral $= 16,1354098$ Valor do somatório $24,20311$

8. Pelo método da regra dos Trapézios Valor da integral $= 9,668011$ Valor do somatório $= 77,34409$
   Pelo método da segunda regra de Simpson Valor da integral $= 9,78417857$ Valor do somatório $104,36457$

9.

10. (a) $I^T = 2,653417$ e $I^{1/3} = 2,6543335$
    (b) $I^T = 0,342625$ e $I^{1/3} = 0,3426329$
    (c) $I^T = 9,2762118$ e $I^{1/3} = I^{3/8} = 9,2397621$
    (d) $I^T = 3,104518$ e $I^{1/3} = 3,1270082$
    (e) $I^T = 0,6930726$ e $I^{1/3} = I^{3/8} = 0,68641479$
    (f) $I^T = 177,565943$ e $I^{1/3} = 177,483768$
    (g) $I^T = 2,0016373$ e $I^{1/3} = I^{3/8} = 2,0074208$
    (h) Valor exato: $-2,79462$
    (i) Valor exato: $-0,21692$
    (j) Valor exato: $-0,26667$
    (k) $0,8321$
    (l) $52,3640$

11.

12.

Capítulo 7

Sistemas Não Lineares

A idéia é transformar um sistema não linear em um sistema linear usando as séries de Taylor (ou Mc Laurin).

Série de Taylor para funções de uma variável:

$F(x) = F(a) + F'(a)(x-a) + F''(a)\dfrac{(x-a)^2}{2!} + \cdots$

Série de Mc Lauren para funções de uma variável:

$F(x) = F(0) + F'(0)x + F''(0)\dfrac{x^2}{2!} + \cdots$

7.1 Método de Newton

Usando a série de Taylor para funções de duas variáveis, temos:

$$F_1(x_1, x_2) = F_1(x_1^0, x_2^0) + \frac{\partial F_1(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_1}(x_1 - x_1^0) + \frac{\partial F_1(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_2}(x_2 - x_2^0)$$

$$F_2(x_1, x_2) = F_2(x_1^0, x_2^0) + \frac{\partial F_2(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_1}(x_1 - x_1^0) + \frac{\partial F_2(x_1^0, x_2^0)}{\partial x_2}(x_2 - x_2^0)$$

Vamos fazer:

$$\delta_1^0 = x_1 - x_1^0$$

$$\delta_2^0 = x_2 - x_2^0$$

Sendo $\overrightarrow{S_0} = (x_1^0, x_2^0)$ um “chute”inicial.

$$\text{Usando o Jacobiano} = \left(\frac{F_1, F_2}{x_1, x_2}\right) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial F_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_1}{\partial x_2} \\ \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_2}{\partial x_2} \end{pmatrix} \tag{7.1}$$

podemos linearizar o sistema, ou seja:

$$\left.\begin{pmatrix} \dfrac{\partial F_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_1}{\partial x_2} \\ \\ \dfrac{\partial F_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial F_2}{\partial x_2} \end{pmatrix}\right|_{(x_1^0, x_2^0)} \cdot \begin{pmatrix} \delta_1^0 \\ \delta_2^0 \end{pmatrix} = -\left.\begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \end{pmatrix}\right|_{(x_1^0, x_2^0)} \tag{7.2}$$

Resolvemos o sistema linear acima, encontramos os valores de δ_1^0 e δ_2^0. Em seguida, encontramos a primeira aproximação para a solução do sistema não linear:

$$x_1^1 = \delta_1^0 + x_1^0$$

$$x_2^1 = \delta_2^0 + x_2^0$$

A partir daí, recomeçamos um novo sistema linear com a substituição de x_1^1 e x_2^1 nas funções $F_1(x_1, x_2), F_2(x_1, x_2)$ e no Jacobiano descrito acima. E fazemos este processo até encontrarmos uma aproximação da solução que nos traga o erro desejado.

7.2 Lista de Exercícios

$$\begin{cases} x_1x_2 + x_2^2 = -0.9, & ; \\ e^{x_1} + \dfrac{x_1}{x_2} = 8.6964, & . \end{cases} \quad \text{Supondo } \overrightarrow{S_0} = (2, -2) \quad \text{e Erro} \leq 10^{-2}$$

obs: Definimos erro como $\mid x_j^i - x_j^{i-1} \mid$

Solução:

$F_1(x_1, x_2) = x_1x_2 + x_2^2 + 0.9 \Rightarrow F_1(2, -2) = 0.9$

$F_2(x_1, x_2) = e^{x_1} + \dfrac{x_1}{x_2} - 8.6964 \Rightarrow F_2(2, -2) = -2.3073$

$$\text{Jacobiano} = \left.\begin{pmatrix} x_2 & x_1 + 2x_2 \\ e^{x_1} + \dfrac{1}{x_2} & -\dfrac{x_1}{x_2^2} \end{pmatrix}\right|_{(2,-2)} = \begin{pmatrix} -2 & -2 \\ 6.889 & -0.5 \end{pmatrix}$$

Assim, o primeiro sistema linear resultante é:

$$\begin{pmatrix} -2 & -2 \\ 6.889 & -0.5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta_1^0 \\ \delta_2^0 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0.9 \\ -2.3073 \end{pmatrix}$$

$$\text{Cuja solução é: } \begin{cases} \delta_1^0 = 0.3427, \Rightarrow x_1^1 = \delta_1^0 + x_1^0 = 2.3427 & ; \\ \delta_2^0 = 0.1073, \Rightarrow x_2^1 = \delta_2^0 + x_2^0 = -1.8927, & . \end{cases}$$

Como o erro desejado não foi alcançado, devemos reiniciar um novo sistema linear com a substituição de x_1^1 e x_2^1 nas funções $F_1(x_1, x_2), F_2(x_1, x_2)$ e no Jacobiano descrito acima.(e continuar assim sucessivamente até que o erro desejado seja encontrado.)

$F_1(x_1^1, x_2^1) = F_1(2.3427, -1.8927) = 0.0483$

$F_2(x_1^1, x_2^1) = F_2(2.3427, -1.8927) = 0.4751$

$$\text{Jacobiano} = \left.\begin{pmatrix} x_2 & x_1 + 2x_2 \\ e^{x_1} + \dfrac{1}{x_2} & -\dfrac{x_1}{x_2^2} \end{pmatrix}\right|_{(2.3427,-1.8927)} = \begin{pmatrix} -1.8927 & -1.4427 \\ 9.8809 & -0.6539 \end{pmatrix}$$

Assim, o segundo sistema linear resultante é:

$$\begin{pmatrix} -1.8927 & -1.4427 \\ 9.8809 & -0.6539 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta_1^1 \\ \delta_2^1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0.0483 \\ 0.4751 \end{pmatrix}$$

$$\text{Cuja solução é: } \begin{cases} \delta_1^1 = -0.0422, \Rightarrow x_1^2 = \delta_1^1 + x_1^1 = 2.3005 & ; \\ \delta_2^1 = 0.088, \Rightarrow x_2^2 = \delta_2^1 + x_2^1 = -1.8039, & . \end{cases} \quad \text{e assim sucessivamente.}$$

Obs: Quando tivermos um sistema não linear com mais de duas variáveis o método é exatamente o mesmo, apenas aumentando a ordem da matriz Jacobiano, aumentando o número de funções F_i e por fim, aumentando a ordem do sistema linear a ser resolvido.

Exercícios Sugeridos:

1. $\begin{cases} 3x_1^2 + 4x_2^2 = 1 & ; \\ x_1^2 - 8x_2^3 = -1 & . \end{cases}$

   Escolha um chute inicial sabendo que $\overrightarrow{S} = (0, 0.5)$ é a solução.

2. $\begin{cases} x^2 + y^2 - 4 = 0; \\ (x-3)^2 + y^2 - 4 = 0. \end{cases}$

   Suponha $\overrightarrow{S_0} = (1.4, 1.6)$

3. $\begin{cases} x_1 x_2 x_3 + x_1 e^{x_2} - x_2 \cos x_3 = 15.36904, & ; \\ x_1 x_2 + x_2 x_3 + x_1 x_3 = 11, & ; \\ \dfrac{x_1}{x_2} - \dfrac{x_2}{x_3} + \dfrac{x_3}{x_1} = 2.8333, & . \end{cases}$

   Suponha $\overrightarrow{S_0} = (0.8; 2.3; 3.4)$ e Erro $\leq 10^{-2}$

4. $\begin{cases} x_1 \cos x_2 + x_2 \tan x_1 = 2.69867, & ; \\ e^{x_1} - \dfrac{x_1}{x_1 + x_2} = 2.38495, & . \end{cases}$

   Suponha $\overrightarrow{S_0} = (1.2, 1.8)$ e Erro $\leq 10^{-2}$

Apêndice A

Diferenças Finitas

A.1 Aproximação das derivadas de uma função de uma variável por diferenças finitas

Idéia Geral: Discretização do domínio e a substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações envolvendo somente valores numéricos da função. Quando o domínio tem mais de uma variável, esta idéia é aplicada para cada uma delas separadamente. Na prática, as derivadas são substituídas pela razão incremental que converge para o valor da derivada quando o incremento tende a zero.

Seja x_0 um número real pertencente ao domínio em questão e h, um número positivo. Definimos malha de passo h associada a x_0 ao conjunto de pontos:

$$x_i = x_0 + hi \quad\quad i = 1, 2, \cdots, N.$$

Nos pontos desta malha são calculadas aproximações de uma função $y(x)$ e suas derivadas.

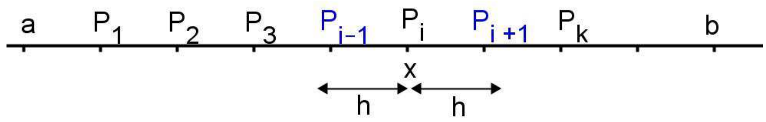


Figura A.1:

$$P_{i+1} \rightarrow y(x+h) \quad \text{e} \quad P_{i-1} \rightarrow y(x-h)$$

Pela série de Taylor tem-se:

$$y(x+h) = y(x) + y^{'}(x)h + y^{''}(x)\frac{h^2}{2!} + y^{'''}(x)\frac{h^3}{3!} + \cdots \tag{A.1}$$

$$y(x-h) = y(x) - y^{'}(x)h + y^{''}(x)\frac{h^2}{2!} - y^{'''}(x)\frac{h^3}{3!} + \cdots \tag{A.2}$$

Subtraindo A.1 e A.2 tem-se:

$$y(x+h) - y(x-h) \approx 2y^{'}(x)h + 2y^{'''}(x)\frac{h^3}{3!} \Rightarrow y^{'}(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} \tag{A.3}$$

Somando A.1 e A.2 tem-se:

$$y(x+h) + y(x-h) \approx 2y(x) + 2y''(x)\frac{h^2}{2!} \Rightarrow y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} \tag{A.4}$$

As equações A.3 e A.4 são conhecidas como diferenças centrais das derivadas y' e y''.

Para resolver o exercício 6 do capítulo 2, que segue

$$\frac{d^2y}{dx^2} + f(x) = 0; \quad y(0) = y(1) = 0 \tag{A.5}$$

onde fisicamente tem-se que esta EDO (problema de contorno) é um modelo de uma barra fina aquecida no eixo X, no intervalo $0 \leq x \leq 1$. A função $y(x)$ é a temperatura da barra em estado estacionário no ponto 0x, e a função $-f(x)$ fornece a taxa na qual o calor está sendo gerado (ou suprido) na barra no ponto x.

As condições dos extremos significam que cada extremidade da barra é mantida em temperatura zero. Para isso faz-se uma substituição da Equação Diferencial por um sistema de Diferenças Finitas. Ou seja, faz-se a discretização:

$$\begin{aligned} x_1 &= a + h \\ x_2 &= a + 2h \\ &\vdots \\ x_{n-1} &= a + (n-1)h \\ y_i &= y(x_i) \end{aligned}$$

Tem-se

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = -f(x_i)$$

Ou seja

$$\begin{aligned} y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} &= -h^2 f(x_i) \\ y_0 &= y(a) \\ y_n &= y(b) \end{aligned}$$

Isto implica num sistema $Ay = b$ onde A é uma matriz tridiagonal,

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix},$$

y é nosso objetivo e

$$b = h^2(f(x_1), f(x_2), ..., f(x_n))^T$$

sendo que $h = \dfrac{1}{n+1}$ (que é a subdivisão dos intervalos).

Referências Bibliográficas

[1] BARROSO, Leônidas Conceição; et all. Cálculo Numérico (Com Aplicações). 2ª edição, São Paulo: Editora Harba, 1987.

[2] BURDEN, Richard L.; FAIRES, J. Douglas. Análise Numérica. Trad. 8ª edição, São Paulo:Cengage Learning, 2008.

[3] BURIAN, Reinaldo; LIMA, Antonio Carlos de; HETEM JUNIOR, Annibal. Cálculo Numérico - Fundamentos de Informática. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

[4] CAMPOS, FILHO, Frederico Ferreira. Algoritmos Numéricos. 2010.

[5] FRANCO, Neide Bertoldi. Cálculo Numérico. São Paulo: Pearson, 2006.

[6] GILAT, Amos; SUBRAMANIAM, Vish. Métodos Numéricos para Engenheiros e Cientistas - Uma introdução com aplicações usando o MATLAB. Porto Alegre: Bookman, 2008.

[7] GUIDORIZZI. Hamilton Luiz, Um curso de Cálculo. Volume 2, Rio de Janeiro, 3 ed. 1998.

[8] GUIDORIZZI. Hamilton Luiz, Um curso de Cálculo. Rio de Janeiro: LTC, 2001.

[9] RUGGIERO, Márcia A. G.; LOPES, Vera L. da R. Cálculo Numérico - Aspectos teóricos e Computacionais. 2ª edição, São Paulo: McGraw-Hill Ltda, 1996.

[10] SPERANDIO, Décio; MENDES, João Teixeira; SILVA, Luiz Henry Monken e. Cálculo Numérico: Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos. São Paulo:Prentice Hall, 2003.