

Métodos Numéricos

Rui F. Vigelis

rfvigelis@gmail.com

Universidade Federal do Ceará – UFC

Versão:

2023-04-09 11:44:57

Objetivos:

- Capacitar o aluno a identificar e enfrentar os problemas de Engenharia que possam ser resolvidos com técnicas de Métodos Numéricos.

Frequência:

- $\geq 75\%$, que equivale a um máximo de 16 horas em faltas.

Avaliação:

- 3 avaliações progressivas distribuídas durante o semestre.

Critério de aprovação:

- Se $7 \leq \text{MAPs}$, o aluno é aprovado por média.
- Se $4 \leq \text{MAPs} < 7$, o aluno faz a prova de avaliação final.
- Se $4 \leq \text{NAF}$ e $5 \leq \text{MAF} = \frac{\text{MAPs} + \text{NAF}}{2}$, o aluno é aprovado.
- Caso contrário, o aluno é reprovado.

Bibliografia:

- Franco, Neide Bertoldi. **Cálculo Numérico**, 1a. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.
- Chapra, Steven C. & Canale, Raymond P. **Métodos Numéricos para Engenharia**, 5a. ed. Porto Alegre: AMGH, 2011.

Conteúdo:

- Análise de arredondamento (AP1)
- Raízes reais de funções reais (AP1)
- Solução de sistemas lineares (AP2)
- Interpolação polinomial (AP3)
- Integração numérica (AP3)
- Solução numérica de equações diferenciais ordinárias (AP3)

Definição (Sistema de Ponto Flutuante)

Um número real $x \neq 0$ é chamado de ponto flutuante (normalizado) se pode ser expresso como

$$x = \pm 0, d_1 d_2 \cdots d_t \times \beta^e,$$

em que

- β é a **base**,
- t é o número de dígitos na **mantissa**, com $d_1 \neq 0$ e $0 \leq d_j \leq \beta - 1$, para $j = 1, \dots, t$, e
- e é o **exponente**, com $-m \leq e \leq M$.

Usamos a notação $F(\beta, t, m, M)$ para o conjunto de todos os pontos flutuantes, fixados β , t , m e M , e adicionando algumas exceções como o zero.

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

- Muitos programas de computação numérica adotam o padrão IEEE (754 2008) para precisão dupla com 64 bits: 1 para o sinal, 11 para o expoente, 52 para a mantissa.
- No padrão IEEE para precisão dupla, pode-se representar números positivos entre $2,23 \times 10^{-308}$ e $1,79 \times 10^{308}$, aproximadamente.
- O padrão IEEE possui uma representação especial para o zero, $\pm\infty$ (obtido após a divisão por zero), e NaN (Not a Number, que se obtém em certas operações como $0/0$).

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

- Seja x um número real dentro dos limites de representação do sistema em ponto flutuante.
- Se x não pertence ao conjunto $F(\beta, t, m, M)$, ele é representado pelo seu arredondamento em ponto flutuante, que consiste em encontrar $\bar{x} \in F(\beta, t, m, M)$ tal que $|x - \bar{x}|$ seja o menor possível.
- Seja $\text{fl}(\cdot)$ a função que associa um número real x ao seu arredondamento em ponto flutuante.
- O valor $|x - \bar{x}|$ é chamado **erro absoluto** de arredondamento, e $|x - \bar{x}|/|x|$ é chamado de **erro relativo** de arredondamento.

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

- Utilizaremos a seguinte regra para arredondamento em ponto flutuante.
- Se $x = 0$, então $\bar{x} = 0$.
- Se $x \neq 0$, escolhemos f_x e g_x tais que

$$|x| = f_x \times \beta^e + g_x \times \beta^{e-t}, \quad \text{em que } \beta^{-1} \leq f_x < 1 \text{ e } 0 \leq g_x < 1.$$

- O valor absoluto do número arredondado é então dado por

$$|\bar{x}| = \begin{cases} f_x \times \beta^e, & \text{se } g_x < \frac{1}{2}, \\ f_x \times \beta^e + \beta^{e-t}, & \text{se } g_x \geq \frac{1}{2}, \end{cases}$$

e com isso $\bar{x} = (\text{sign} x)|\bar{x}|$.

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

Exemplo

Represente no sistema $F(10, 3, 5, 5)$ os números:

$$\begin{array}{lll} x_1 = 1234,56, & x_2 = -0,00054962, & x_3 = 0,9995, \\ x_4 = 123456,7, & x_5 = 0,0000001. \end{array}$$

$$\text{R.: } \bar{x}_1 = 0,123 \times 10^4, \bar{x}_2 = -0,550 \times 10^{-3}, \bar{x}_3 = 0,100 \times 10^1, \\ |x_4| = 0,1234567 \times 10^6, |x_5| = 0,1 \times 10^{-6}.$$

Definição (Épsilon da Máquina)

O **épsilon da máquina**, denotado por ε_{mach} , é a metade da distância entre 1 e o menor número em ponto flutuante estritamente maior que 1.

- O épsilon da máquina de um sistema $F(\beta, t, m, M)$ é

$$\varepsilon_{mach} = \frac{1}{2}\beta^{1-t}.$$

- No padrão IEEE para precisão dupla, tem-se

$$\varepsilon_{mach} = 2^{-52} \approx 2,2 \times 10^{-16}.$$

- O épsilon da máquina ε_{mach} fornece um limitante superior para o erro relativo do arredondamento em ponto flutuante.

Proposição

Seja x qualquer número real dentro dos limites de representação do sistema. Então existe ε com $|\varepsilon| \leq \varepsilon_{mach}$ tal que

$$\text{fl}(x) = x(1 + \varepsilon).$$

- Se $g_x < \frac{1}{2}$, então

$$\begin{aligned}|x - \bar{x}| &= |f_x \times \beta^e + g_x \times \beta^{e-t} - f_x \times \beta^e| \\ &= g_x \times \beta^{e-t} < \frac{1}{2}\beta^{e-t}.\end{aligned}$$

- Se $g_x \geq \frac{1}{2}$, então

$$\begin{aligned}|x - \bar{x}| &= |f_x \times \beta^e + g_x \times \beta^{e-t} - f_x \times \beta^e - \beta^{e-t}| \\ &= |g_x - 1| \times \beta^{e-t} \leq \frac{1}{2}\beta^{e-t}.\end{aligned}$$

- Em ambos os casos,

$$\frac{|x - \bar{x}|}{|x|} \leq \frac{\frac{1}{2}\beta^{e-t}}{\beta^{-1} \times \beta^e} = \frac{1}{2}\beta^{1-t},$$

visto que $|x| \geq \beta^{-1} \times \beta^e$.

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

- As operações aritméticas básicas $+$, $-$, \times e $/$ com números reais, quando realizadas no computador com sistema $F(\beta, t, m, M)$ serão denotadas por \oplus , \ominus , \otimes e \oslash .
- As operações aritméticas de ponto flutuante são definidas de modo a satisfazer o axioma:

Axioma das Operações de Ponto Flutuante

Seja $*$ uma operação aritmética básica, e \circledast a respectiva operação em ponto flutuante. A operação \circledast satisfaz

$$x \circledast y = \text{fl}(x * y),$$

para quaisquer $x, y \in F(\beta, t, m, M)$.

- As operações de ponto flutuante não são nem associativas e nem distributivas!

Exemplo

Considere o sistema $F(10, 3, 5, 5)$. Sejam $x = \text{fl}(11,4)$, $y = \text{fl}(3,18)$ e $z = \text{fl}(5,05)$. Efetue as operações:

- (a) $(x \oplus y) \oplus z$ e $x \oplus (y \oplus z)$;
- (b) $(y \otimes x) \oslash z$ e $(y \oslash z) \otimes x$;
- (c) $y \otimes (z \oplus x)$ e $(y \otimes z) \oplus (y \otimes x)$.

R.: (a) $0,197 \times 10^2$ e $0,196 \times 10^2$; (b) $0,719 \times 10^1$ e $0,718 \times 10^1$; (c) $0,525 \times 10^1$ e $0,524 \times 10^1$.

- Em vista do axioma das operações de ponto flutuante, tem-se:

Proposição

Para quaisquer $x, y \in F(\beta, t, m, M)$, existe ε com $|\varepsilon| \leq \varepsilon_{mach}$ tal que

$$x \circledast y = (x * y)(1 + \varepsilon),$$

em que $*$ denota uma operação aritmética básica, e \circledast a respectiva operação em ponto flutuante.

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

- A seguir veremos dois efeitos numéricos que contribuem para que o resultado obtido não tenha crédito: o cancelamento subtrativo, e a propagação de erro.
- Sejam x e y dois números reais dentro dos limites de representação do sistema.
- Na soma desses números em ponto flutuante, tem-se:

$$\begin{aligned}\text{fl}(x) \oplus \text{fl}(y) &= [\text{fl}(x) + \text{fl}(y)](1 + \varepsilon_1) \\ &= [x(1 + \varepsilon_2) + y(1 + \varepsilon_3)](1 + \varepsilon_1) \\ &= x + x(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_1\varepsilon_2) + y + y(\varepsilon_1 + \varepsilon_3 + \varepsilon_1\varepsilon_3)\end{aligned}$$

com $|\varepsilon_1|, |\varepsilon_2|, |\varepsilon_3| \leq \varepsilon_{mach}$.

- Deste modo, para o erro absoluto (EA), podemos escrever

$$EA = |\text{fl}(x) \oplus \text{fl}(y) - (x + y)| \leq (|x| + |y|)(2\varepsilon_{mach} + \varepsilon_{mach}^2).$$

- Já para o erro relativo (ER), temos

$$ER = \frac{|\text{fl}(x) \oplus \text{fl}(y) - (x + y)|}{|x + y|} \leq \frac{|x| + |y|}{|x + y|} (2\varepsilon_{mach} + \varepsilon_{mach}^2).$$

- Como consequência, o erro relativo pode ser grande se $|x + y|$ for pequeno, ou seja, se $x \approx -y$.
- Neste caso, tem-se o chamado **cancelamento subtrativo**.

Exemplo

No sistema $F(10, 10, 10, 10)$, calcule

$$x = \sqrt{9876} - \sqrt{9875}.$$

- Além do cancelamento, pode ocorrer a **propagação de erro**, que é observada em uma sequência de operações aritméticas.

Exemplo

Considerando o sistema $F(10, 3, 5, 5)$, calcule o polinômio

$$P(x) = x^3 - 6x^2 + 4x - 0.1,$$

no ponto 5,24, e compare o resultado com o valor exato

$$P(5,24) = -0,007776.$$

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

- Um algoritmo \mathcal{A} é uma sequência de operações aritméticas que gera uma saída y dada uma entrada x .
- Seja \mathcal{P} o problema ao qual o algoritmo \mathcal{A} se propõe a resolver.
- O algoritmo \mathcal{A} é chamado de **preciso** (em inglês, *accurate*) se o seu erro relativo é pequeno, ou seja, se

$$\frac{|\mathcal{P}(x) - \mathcal{A}(x)|}{|\mathcal{P}(x)|}$$

é da ordem de ε_{mach} .

Métodos Numéricos

Análise de arredondamento em ponto flutuante

- Dependendo do contexto, um algoritmo preciso pode ser difícil de ser implementado, pois sempre há a presença de erros de arredondamento em ponto flutuante.
- Podemos usar como requisito outra noção que nos permite analisar a influência de erros de arredondamento em um algoritmo.

Algoritmo Regressivamente Estável

Um algoritmo \mathcal{A} , usado para resolver um problema \mathcal{P} , é chamado de **regressivamente estável** (em inglês, *backward stable*) se

$$\mathcal{P}(\tilde{x}) = \mathcal{A}(x),$$

para algum \tilde{x} com

$$\frac{|\tilde{x} - x|}{|x|}$$

da ordem de ε_{mach} .

Exemplo

Mostre que a operação $\text{fl}(x) \oplus \text{fl}(y)$, que é usado para resolver a soma $x + y$, é regressivamente estável num sistema de ponto flutuante com épsilon da máquina ε_{mach} .

Definição

Dada uma função $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$, um número $\alpha \in [a, b]$ tal que

$$f(\alpha) = 0$$

é chamado de raiz (ou zero) de f . Dizemos também que α é uma solução da equação $f(x) = 0$.

- Nem sempre é possível encontrar uma expressão analítica para a raiz de uma função.
- Neste caso, recorreremos a métodos numéricos para aproximar a raiz da função.

- Para garantir a existência de uma raiz de f em $[a, b]$, podemos fazer uso do seguinte resultado:

Teorema de Bolzano

Seja $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua. Se $f(a)f(b) < 0$, i.e., $f(a)$ e $f(b)$ tem sinais opostos, então existe pelo menos um $\alpha \in (a, b)$ tal que $f(\alpha) = 0$.

- O Teorema de Bolzano é uma consequência do Teorema do Valor Intermediário, visto em Cálculo I.
- Além de garantir a existência da raiz, o Teorema de Bolzano é a base para o método da bissecção.

Métodos Numéricos

Método da bissecção

- Seja f uma função real contínua definida no intervalo $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$.
- O método da bissecção consiste no seguinte procedimento:
 - Calcule o ponto médio do intervalo:

$$m = \frac{a + b}{2}.$$

- Substitua a ou b por m de modo que o novo intervalo contém uma raiz:
$$\text{se } f(m)f(b) < 0, \text{ então } a \leftarrow m, \text{ senão } b \leftarrow m.$$
 - Repita os passos anteriores até $(b - a) \leq 2\delta$.
- O ponto médio entre a e b consiste na estimativa da raiz de f .

- Na n -ésima iteração, o intervalo resultante terá comprimento $\frac{b-a}{2^n}$, que converge para zero com $n \rightarrow \infty$.
- A condição de parada é satisfeita se

$$n \geq \log_2\left(\frac{b-a}{\delta}\right) - 1$$

- Neste caso, o erro absoluto da aproximação satisfaz $|m - \alpha| \leq \delta$.

Métodos Numéricos

Método da bissecção

- Inicialização:
 - Escolha a_0 e b_0 de modo que $f(a_0)f(b_0) < 0$.
- Para $n \geq 0$:
 - Faça $x_n = \frac{a_n + b_n}{2}$.
 - Pare se $f(x_n) = 0$ ou $\frac{b_n - a_n}{2} \leq \delta$.
 - Se $f(a_n)f(x_n) < 0$, escolha $[a_{n+1}, b_{n+1}] = [a_n, x_n]$,
caso contrário, $[a_{n+1}, b_{n+1}] = [x_n, b_n]$.

Métodos Numéricos

Método da bissecção

Exemplo

Use o método da bissecção para encontrar uma estimativa para a raiz da função

$$f(x) = e^x - 2x - 1,$$

no intervalo $[1, 2]$, considerando uma tolerância $(b_n - a_n)/2 < \delta = 5 \times 10^{-2}$.

Exemplo

Aplique o método da bissecção para encontrar a raiz da função

$$f(x) = \sin(2x) - \cos(3x),$$

no intervalo $[0, 1]$, com tolerância $(b_n - a_n)/2 < \delta = 5 \times 10^{-2}$.

Métodos Numéricos

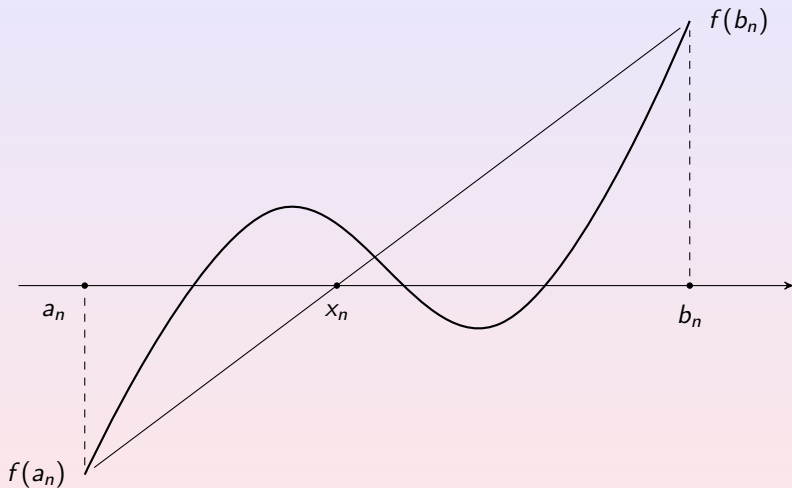
Método da posição falsa (ou *regula falsi*)

- O método da bissecção, que considera apenas o sinal de f nos extremos dos intervalos, pode ser modificado para considerarmos os valores de f .
- No método da posição falsa, em vez de escolhermos o ponto médio do intervalo, adotamos a intersecção do eixo x com a reta que passa pelos pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$.
- Essa intersecção é dada por

$$m = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}.$$

Métodos Numéricos

Método da posição falsa (ou *regula falsi*)



Métodos Numéricos

Método da posição falsa (ou *regula falsi*)

- Inicialização:
 - Escolha a_0 e b_0 de modo que $f(a_0)f(b_0) < 0$.
- Para $n \geq 0$:
 - Faça $x_n = b_n - f(b_n) \frac{b_n - a_n}{f(b_n) - f(a_n)}$.
 - Pare se $|f(x_n)| < \varepsilon$.
 - Se $f(a_n)f(x_n) < 0$, escolha $[a_{n+1}, b_{n+1}] = [a_n, x_n]$,
caso contrário, $[a_{n+1}, b_{n+1}] = [x_n, b_n]$.

Métodos Numéricos

Método da posição falsa (ou *regula falsi*)

Exemplo

Use o método da posição falsa para encontrar uma estimativa para a raiz da função

$$f(x) = e^x - 2x - 1,$$

no intervalo $[1, 2]$, considerando uma tolerância $|f(x_n)| < \varepsilon = 5 \times 10^{-2}$.

Exemplo

Usando o método da posição falsa, encontre a raiz da função

$$f(x) = \sin(2x) - \ln(x),$$

no intervalo $[1, 3]$, com tolerância $|f(x_n)| < \varepsilon = 10^{-4}$.

Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo

- Seja f é uma função contínua em $[a, b]$.
- No lugar da equação $f(x) = 0$, consideramos o problema na forma

$$x = g(x),$$

em que g é tal que $f(\alpha) = 0$ se e somente se $\alpha = g(\alpha)$.

- Uma função g como acima é chamada de função de iteração, e um número α satisfazendo $\alpha = g(\alpha)$ é chamado ponto fixo de g .
- Dada uma aproximação inicial x_0 , o método da iteração de ponto fixo define as aproximações sucessivas

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad \text{para } n \geq 0.$$

- Espera-se que $x_n \rightarrow \alpha$ com $n \rightarrow \infty$.

Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo

Exemplo

Considere a função $f(x) = e^x - 2x - 1$. Mostre que $g_1(x) = (e^x - 1)/2$ e $g_2(x) = \ln(2x + 1)$ são funções de iteração para $f(x)$.

Teorema (*)

Seja $g: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de iteração contínua, com ponto fixo $\alpha \in (a, b)$. Assuma que g é derivável em (a, b) , e a derivada $g'(x)$ satisfaz $|g'(x)| \leq M < 1$, para todo $x \in (a, b)$. Seja $x_0 \in [a, b]$ qualquer. Então a iteração de ponto fixo

$$x_{n+1} = g(x_n), \quad n \geq 0,$$

está bem definida ($x_n \in [a, b]$ para todo $n \geq 1$), e converge para α .

- Pelo Teorema do Valor Médio, existe η entre x_{n-1} e α tal que

$$g(x_{n-1}) - g(\alpha) = g'(\eta)(x_{n-1} - \alpha).$$

- Deste modo, podemos escrever

$$|x_n - \alpha| = |g(x_{n-1}) - g(\alpha)| = |g'(\eta)||x_{n-1} - \alpha| \leq M|x_{n-1} - \alpha|.$$

- Com isso, obtemos

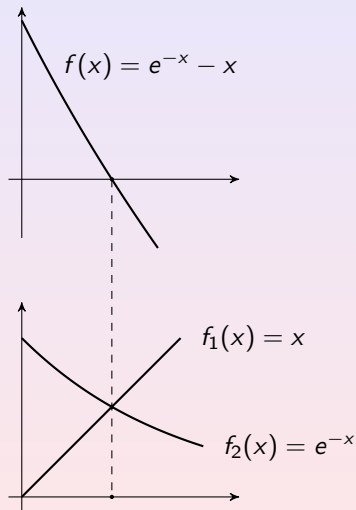
$$|x_n - \alpha| \leq M^n |x_0 - \alpha|, \quad \text{para todo } n \geq 0.$$

- Como $M < 1$, concluimos que $x_n \in [a, b]$ para todo $n \geq 1$, e

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - \alpha| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} M^n |x_0 - \alpha| = 0.$$

Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo



Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo

- Inicialização:
 - Escolha x_0 .
- Para $n \geq 0$:
 - Faça $x_{n+1} = g(x_n)$.
 - Pare se $|f(x_{n+1})| < \varepsilon$.

Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo

Exemplo

Considere a função $f(x) = e^x - 2x - 1$. Usando a aproximação inicial $x_0 = 1$, determine as aproximações $\{x_n\}$ considerando as funções de iteração:

(a) $g_1(x) = (e^x - 1)/2;$

(b) $g_2(x) = \ln(2x + 1).$

Exemplo

Aplique o método da iteração de ponto fixo para encontrar a raiz da função $f(x) = x^3 - x^2 - 3$ no intervalo $[1, 3]$, com função de iteração $g(x) = (x^2 + 3)^{1/3}$, ponto inicial $x_0 = 2,5$, e tolerância $|f(x_{n+1})| < \varepsilon = 10^{-1}$. Verifique as hipóteses que garantem a convergência do método.

Definição

Seja $\{x_n\}$ uma sequência convergindo para α , e seja $e_n = x_n - \alpha$ seu erro. Considere a condição

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

para números reais $p \geq 1$ e $\mu \geq 0$.

- Para $p = 1$,
 - se $\mu = 0$, a convergência é **superlinear**,
 - se $0 < \mu < 1$, a convergência é **linear** com **taxa de convergência** μ ,
 - se $\mu = 1$, a convergência é **sublinear**.
- Para $p > 1$ e $\mu > 0$, a convergência é dita ser de **ordem** p . Em particular, se $p = 2$, a convergência é **quadrática**, e se $p = 3$, a convergência é **cúbica**.

Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo

Definição

A **ordem de convergência** e a **taxa de convergência** de um método numérico são definidas como a ordem de convergência e a taxa de convergência da sequência $\{x_n\}$ resultante da aplicação do método numérico.

Teorema

Suponha que as condições do Teorema () são satisfeitas. Assuma também que g' é contínua em $[a, b]$, e $x_n \neq \alpha$ para todo $n \geq 0$. Seja $e_n = x_n - \alpha$. Se $g'(\alpha) \neq 0$, então*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|} = |g'(\alpha)|.$$

Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo

- Pelo Teorema do Valor Médio, existe ξ_n entre x_n e α tal que

$$g(x_n) - g(\alpha) = g'(\xi_n)(x_n - \alpha), \quad \text{para } n \geq 0.$$

- Portanto, $\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \alpha$, e, por g' ser contínua,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} g'(\xi_n) = g'(\alpha).$$

- Deste modo, temos

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - \alpha|}{|x_n - \alpha|} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|g(x_n) - g(\alpha)|}{|x_n - \alpha|} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|g'(\xi_n)(x_n - \alpha)|}{|x_n - \alpha|} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} |g'(\xi_n)| = |g'(\alpha)|. \end{aligned}$$

Teorema

Suponha que as condições do Teorema (*) são satisfeitas. Assuma também que g'' é contínua em $[a, b]$, e $x_n \neq \alpha$ para todo $n \geq 0$. Seja $e_n = x_n - \alpha$. Se $g'(\alpha) = 0$ e $g''(\alpha) \neq 0$, então

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^2} = \frac{1}{2} |g''(\alpha)|.$$

Métodos Numéricos

Método da iteração de ponto fixo

- Pela expansão de Taylor, existe ξ_n entre x_n e α tal que

$$g(x_n) = g(\alpha) + g'(\alpha)(x_n - \alpha) + \frac{1}{2}g''(\xi_n)(x_n - \alpha)^2,$$

que implica

$$g(x_n) - g(\alpha) = \frac{1}{2}g''(\xi_n)(x_n - \alpha)^2.$$

- Deste modo, temos

$$\begin{aligned}\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^2} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|x_{n+1} - \alpha|}{|x_n - \alpha|^2} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|g(x_n) - g(\alpha)|}{|x_n - \alpha|^2} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|\frac{1}{2}g''(\xi_n)(x_n - \alpha)^2|}{|x_n - \alpha|^2} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2}|g''(\xi_n)| = \frac{1}{2}|g''(\alpha)|.\end{aligned}$$

Métodos Numéricos

Método de Newton

- Considere a função de iteração

$$g(x) = x + A(x)f(x), \quad \text{com } f'(x) \neq 0,$$

onde a função $A(x)$ é escolhida de modo que $A(\alpha) \neq 0$.

- Se escolhermos $A(x)$ tal que $g'(\alpha) = 0$, teremos que $|g'(x)| < 1$ para todo x numa vizinhança de α , o que garante a convergência do método.
- Derivando $g(x)$, obtemos

$$g'(x) = 1 + A'(x)f(x) + A(x)f'(x).$$

- Escolhendo

$$A(x) = -\frac{1}{f'(x)},$$

segue que $g'(\alpha) = 0$.

- Assim, a escolha

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

define o processo iterativo

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

chamado de **método de Newton**.

- O método de Newton sempre converge se $|x_0 - \alpha|$ for suficientemente pequeno.

Teorema

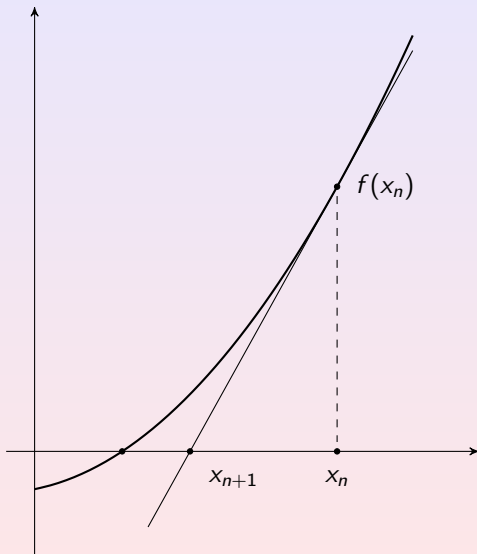
Assuma que f'' é contínua em $[a, b]$, com $f'(\alpha) \neq 0$ e $f''(\alpha) \neq 0$. Seja $\{x_n\}$ a sequência obtida no método de Newton. Suponha que $x_n \neq \alpha$ para todo $n \geq 0$. Seja $e_n = x_n - \alpha$. Então

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^2} = \frac{1}{2} \left| \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)} \right|.$$

- Esse resultado é uma consequência de $g'(\alpha) = 0$ e $g''(\alpha) = \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)}$.

Métodos Numéricos

Método de Newton



Métodos Numéricos

Método de Newton

- Inicialização:
 - Escolha x_0 .
- Para $n \geq 0$:
 - Faça $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$.
 - Pare se $|f(x_{n+1})| < \varepsilon$.

Métodos Numéricos

Método de Newton

Exemplo

Use o método de Newton para encontrar uma estimativa para a raiz positiva da função

$$f(x) = e^x - 2x - 1,$$

com aproximação inicial $x_0 = 1$ e tolerância $\varepsilon = 10^{-5}$.

Exemplo

Use o método de Newton para encontrar a raiz da função

$f(x) = \sin(x) - e^{-x}$ no intervalo $[0, 1]$, com ponto inicial $x_0 = 0,0$ e tolerância $|f(x_{n+1})| < \varepsilon = 10^{-5}$.

- Uma modificação do método de Newton consiste em substituir a derivada $f'(x_n)$ pelo quociente

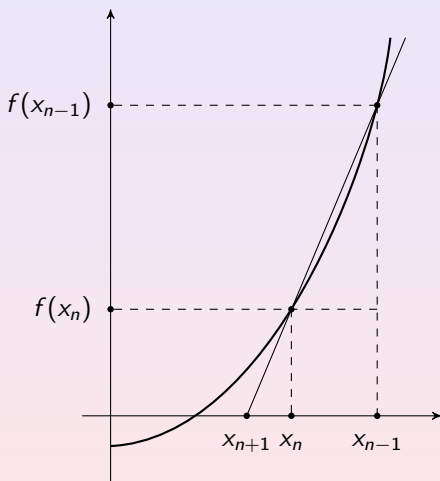
$$f'(x_n) \simeq \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}.$$

- O método de Newton, com essa modificação, é conhecido como **método das secantes**.
- Com a substituição, obtemos a iteração

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

Métodos Numéricos

Método das secantes



Métodos Numéricos

Método das secantes

- Inicialização:
 - Escolha x_0 e x_1 .
- Para $n \geq 1$:
 - Faça $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$.
 - Pare se $|f(x_{n+1})| < \varepsilon$.

Teorema

Assuma que f' é contínua num intervalo I contendo a raiz α de f satisfazendo $f'(\alpha) \neq 0$. Seja $\{x_n\}$ a sequência obtida no método das secantes, com x_0 e x_1 suficientemente próximos a α . Suponha que $x_n \neq \alpha$ para todo $n \geq 0$. Seja $e_n = x_n - \alpha$. Então

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

em que $c > 0$ e $p = (1 + \sqrt{5})/2 \simeq 1,618$.

Métodos Numéricos

Método das secantes

Exemplo

Use o método das secantes para encontrar uma estimativa para a raiz positiva da função

$$f(x) = e^x - 2x - 1,$$

com aproximações iniciais $x_0 = 1$ e $x_1 = 2$ e tolerância $\varepsilon = 10^{-3}$.

Exemplo

Aplique o método das secantes para encontrar a raiz da função $f(x) = \cos(x) - e^{-x}$ no intervalo $[1, 2]$, com pontos iniciais $x_0 = 1,0$ e $x_1 = 1,2$, e tolerância $|f(x_{n+1})| < \varepsilon = 10^{-3}$.

Um sistema de n equações lineares é escrito como:

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

em que a_{ij} são os coeficientes, b_i são os termos independentes, e x_i são as incógnitas.

Uma forma conveniente de representar um sistema de n equações lineares é em sua forma matricial:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

ou, simplesmente,

$$Ax = b$$

em que A é chamada de matriz dos coeficientes, b é o vetor do termo independente, e x é o vetor solução.

Métodos numéricos para solução de sistemas de equações lineares podem ser classificados como:

- Métodos Exatos: Executados com um número finito de operações, fornecem a solução exata. Porém, devido a erros de arredondamento, problemas com propagação de erros podem acontecer.
- Métodos Iterativos: A solução é obtida com uma dada precisão, como resultado de um processo iterativo convergente.

Definição

Seja $C = (c_{ij})$ uma matriz quadrada. A matriz C é chamada de triangular superior (triangular inferior) se $c_{ij} = 0$ para $i > j$ ($i < j$).

Definição

Um sistema de equações lineares é chamado de triangular superior (triangular inferior) se a matriz dos coeficientes for triangular superior (triangular inferior).

Assumindo $a_{ii} \neq 0$, o sistema triangular superior

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

pode ser resolvido usando a seguinte fórmula, chamada de substituição reversa:

$$\begin{cases} x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} \\ x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j}{a_{ii}}, & i = n-1, \dots, 1 \end{cases}$$

Métodos Numéricos

Solução de sistemas triangulares

Já o sistema triangular inferior, com $a_{ii} \neq 0$,

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

pode ser resolvido usando a seguinte fórmula, chamada de substituição direta:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j}{a_{ii}}, & i = 2, \dots, n \end{cases}$$

Exemplo

Resolva o sistema triangular superior

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \\ -3 \end{pmatrix}.$$

R.: $(-2, 0, 1)^T$.

Exemplo

Resolva o sistema triangular superior

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & -3 & 5 \\ 0 & 0 & 7 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 7 \\ -13 \\ 4 \end{pmatrix}.$$

R.: $(1, -3, -1, 2)^T$.

Exemplo

Resolva o sistema triangular inferior

$$\begin{pmatrix} -7 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 9 & -5 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -21 \\ 7 \\ 39 \end{pmatrix}.$$

R.: $(3, -2, 1)^T$.

Exemplo

Resolva o sistema triangular inferior

$$\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 2 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 3 & 0 \\ 2 & -1 & -2 & -5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 0 \\ 16 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

R.: $(-1, 2, 3, -1)^T$.

Métodos Numéricos

Método da eliminação de Gauss

Considere a matriz aumentada

$$\tilde{A}^{(1)} = (A^{(1)}, b^{(1)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} & b_3^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{pmatrix},$$

em que $a_{ij}^{(1)} = a_{ij}$ e $b_i^{(1)} = b_i$.

Em cada estágio do método da eliminação de Gauss, os elementos da k -ésima coluna abaixo da diagonal são zerados.

Métodos Numéricos

Método da eliminação de Gauss

Na primeiro estágio, obtemos

$$\tilde{A}^{(2)} = (A^{(2)}, b^{(2)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \cdots & a_{1n}^{(2)} & b_1^{(2)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & b_3^{(2)} \\ & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{pmatrix},$$

Já no segundo,

$$\tilde{A}^{(3)} = (A^{(3)}, b^{(3)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(3)} & a_{12}^{(3)} & a_{13}^{(3)} & \cdots & a_{1n}^{(3)} & b_1^{(3)} \\ & a_{22}^{(3)} & a_{23}^{(3)} & \cdots & a_{2n}^{(3)} & b_2^{(3)} \\ & & a_{33}^{(3)} & \cdots & a_{3n}^{(3)} & b_3^{(3)} \\ & & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & a_{n3}^{(3)} & \cdots & a_{nn}^{(3)} & b_n^{(3)} \end{pmatrix}$$

Continuamos até chegarmos à matriz triangular superior

$$\tilde{A}^{(n)} = (A^{(n)}, b^{(n)}) = \begin{pmatrix} a_{11}^{(n)} & a_{12}^{(n)} & a_{13}^{(n)} & \cdots & a_{1n}^{(n)} & b_1^{(n)} \\ & a_{22}^{(n)} & a_{23}^{(n)} & \cdots & a_{2n}^{(n)} & b_2^{(n)} \\ & & a_{33}^{(n)} & \cdots & a_{3n}^{(n)} & b_3^{(n)} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

Podemos então encontrar a solução de $Ax = b$ como solução do sistema triangular superior $A^{(n)}x = b^{(n)}$.

Métodos Numéricos

Método da eliminação de Gauss

- Para zerar os elementos da k -ésima coluna abaixo da diagonal, substituímos a i -ésima linha pela diferença entre a i -ésima linha e a k -ésima linha multiplicada por $m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$.
- Equivalentemente, para $k = 1, \dots, n - 1$,

$$\begin{cases} m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \\ a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)} \end{cases}$$

para $i = k + 1, \dots, n$ e $j = k, \dots, n$.

- O termo $a_{kk}^{(k)}$ é chamado de pivô.

Resultado

Para garantirmos que $a_{kk}^{(k)} \neq 0$, para $k = 1, \dots, n$, devemos assumir que $\det(A_k) \neq 0$, em que $A_k = (a_{ij})_{k \times k}$ é o menor principal de A de ordem k .

Métodos Numéricos

Método da eliminação de Gauss

Para calcularmos o número de operações no método da eliminação de Gauss, escrevemos

$$\begin{aligned}\# \text{ operações} &= \sum_{k=1}^{n-1} (\# \text{ operações no estágio } k) \\ &= \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^n (\# \text{ operações na linha } i)\end{aligned}$$

- Com isso, temos

$$\# \text{ divisões} = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^n 1 = \frac{(n-1)n}{2}$$

e

$$\begin{aligned} \# \text{ multiplicações} &= \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{i=k+1}^n \{[n - (k-1)] + 1\} \\ &= \frac{2n^3 + 3n^2 - 5n}{6} \end{aligned}$$

- O número de subtrações é igual ao número de multiplicações.
- Portanto, o método da eliminação de Gauss possui uma complexidade aritmética da ordem de n^3 .

Métodos Numéricos

Método da eliminação de Gauss

Exemplo

Use o método da eliminação de Gauss para resolver o sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 \\ -1 & 0 & 0 \\ 2 & -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

R.: $(1, 1, 1)^T$.

Exemplo

Use o método da eliminação de Gauss para resolver o sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & -3 & 2 \\ 2 & -2 & 3 \\ 3 & -13 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 15 \\ 47 \end{pmatrix}.$$

R.: $(4, -2, 1)^T$.

Métodos Numéricos

Método da eliminação de Gauss

Exemplo

Usando o método da eliminação de Gauss, resolva o sistema

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ -3 & 5 & -3 & 2 \\ 1 & -5 & -6 & 2 \\ 3 & -11 & -8 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -8 \\ 21 \\ 3 \\ -8 \end{pmatrix}.$$

R.: $(-1, 2, -2, 1)^T$.

Exemplo

Usando o método da eliminação de Gauss, resolva o sistema

$$\begin{pmatrix} 3 & -2 & 1 & -1 \\ 6 & -6 & 1 & 1 \\ -9 & -2 & -8 & 17 \\ -6 & -2 & -4 & 7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -15 \\ -30 \\ 48 \\ 25 \end{pmatrix}.$$

R.: $(-3, 2, -1, 1)^T$.

Exemplo

Resolva o sistema

$$\begin{cases} 0,0003x_1 + 3,0000x_2 = 2,0001 \\ 1,0000x_1 + 1,0000x_2 = 1,0000 \end{cases}$$

usando o método da eliminação de Gauss, com quatro e cinco algarismos significativos.

R.: $(1,0000; 0,6666)^T$, $(0,40000; 0,66666)^T$, $(1/3, 2/3)^T$.

Exemplo

Resolva o sistema

$$\begin{cases} 1,0000x_1 + 1,0000x_2 = 1,0000 \\ 0,0003x_1 + 3,0000x_2 = 2,0001 \end{cases}$$

usando o método da eliminação de Gauss, com quatro e cinco algarismos significativos.

R.: $(0,3334; 0,6666)^T$, $(0,33334; 0,66666)^T$, $(1/3, 2/3)^T$.

Pivotamento parcial

No método da eliminação de Gauss com pivotamento parcial, antes de iniciar o k -ésimo estágio, as linhas da matriz $A^{(k)}$ são permutadas de modo que $|a_{kk}^{(k)}| \geq |a_{ik}^{(k)}|$, para $i = k, \dots, n$. O pivô é escolhido como sendo um dos elementos de maior valor absoluto dentre $a_{kk}^{(k)}, a_{k+1,k}^{(k)}, \dots, a_{nk}^{(k)}$.

Exemplo

Resolva o sistema $Ax = b$, em que

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -2 & -1 \\ 2 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & -8 \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad b = \begin{pmatrix} -1 \\ 10 \\ -6 \end{pmatrix},$$

usando o método da eliminação de Gauss com pivotamento parcial.

R.: $x = (3, 1, 2)^T$.

Exemplo

Resolva o sistema abaixo, com precisão de duas casas decimais, usando o método da eliminação de Gauss com pivotamento parcial:

$$\begin{pmatrix} -2 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 \\ 3 & 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

(Obs.: O arredondamento deve ser aplicado a cada operação aritmética.)

R.: $(-0,74; 1,24; -1,74)^T$.

- Seja A uma matriz quadrada. A fatoração LU da matriz A se refere ao produto

$$A = LU,$$

em que L é uma matriz triangular inferior, com os termos da diagonal iguais a 1, e U é uma matriz triangular superior.

- Uma aplicação do método da eliminação de Gauss fornece a decomposição LU da matriz A .

- Organizamos os multiplicadores $m_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$ na matriz triangular inferior

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & m_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

- Seja $U = A^{(n)}$ a matriz triangular superior obtida no final do método da eliminação de Gauss.
- Essas matrizes satisfazem

$$A = LU.$$

- Uma vez encontrada a fatoração LU da matriz A , o sistema $Ax = b$ é resolvido da seguinte forma:
 - Primeiro, usando substituição direta, resolve-se $Ly = b$.
 - Depois, usando substituição reversa, resolve-se $Ux = y$.
- O procedimento acima é útil no caso em que o sistema linear $Ax = b$ precisa ser resolvido, com a mesma matriz A , e diferentes vetores b , pois não é necessário fatorar a matriz A novamente.

Exemplo

Encontre a fatoração LU da matriz

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 3 \\ -2 & 7 & 4 \\ 3 & 9 & -15 \end{pmatrix},$$

e posteriormente resolva o sistema $Ax = b$ para $b = (5, 18, 21)^T$ e $b = (5, 9, -12)^T$.

$$\text{R.: } \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -3 & 5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & -2 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -4 \\ 2 \\ -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}.$$

Exemplo

Encontre a fatoração LU da matriz

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & -2 & -1 \\ 4 & 4 & -1 & -6 \\ 4 & 14 & -19 & 16 \\ -4 & 2 & -17 & 22 \end{pmatrix},$$

e posteriormente resolva o sistema $Ax = b$ para $b = (-3, -11, 21, 43)^T$ e $b = (-8, -20, 8, 54)^T$.

$$R.: \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & -4 & 1 & 0 \\ -2 & -4 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 3 & -2 & -1 \\ 0 & -2 & 3 & -4 \\ 0 & 0 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 3 \\ -3 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 \\ -3 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Métodos Numéricos

Método de Jacobi

Isolando a variável x_i na i -ésima linha do sistema

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

podemos escrever

$$\begin{cases} x_1 = (b_1 - a_{12}x_2 - \cdots - a_{1n}x_n)/a_{11} \\ x_2 = (b_2 - a_{21}x_1 - \cdots - a_{2n}x_n)/a_{22} \\ \vdots \\ x_n = (b_n - a_{n1}x_1 - \cdots - a_{n,n-1}x_{n-1})/a_{nn} \end{cases}$$

Métodos Numéricos

Método de Jacobi

No método de Jacobi, a sequência de aproximações $x^{(k)}$ para a solução do sistema $Ax = b$ é dada pela fórmula recursiva

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - \dots - a_{1n}x_n^{(k)})/a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = (b_2 - a_{21}x_1^{(k)} - \dots - a_{2n}x_n^{(k)})/a_{22} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = (b_n - a_{n1}x_1^{(k)} - \dots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k)})/a_{nn} \end{cases}$$

em que assumimos $a_{ii} \neq 0$.

Podemos reescrever a fórmula recursiva para o método de Jacobi na forma matricial

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(b - Mx^{(k)}), \quad k \geq 0,$$

em que D e M são matrizes satisfazendo $A = D + M$, com

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad M = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

- Para a parada do método de Jacobi podemos usar o critério

$$\frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|_{\infty}}{\|x^{(k+1)}\|_{\infty}} < \varepsilon,$$

dada uma tolerância $\varepsilon > 0$.

- A norma $\|\cdot\|_{\infty}$ corresponde ao maior dos valores absolutos dos componentes do vetor, i.e., se $x = (x_1, \dots, x_n)^T$ então

$$\|x\|_{\infty} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$$

Métodos Numéricos

Método de Jacobi

Exemplo

Use o método de Jacobi, com aproximação inicial $x^{(0)} = (0,0)^T$, e $\varepsilon = 5 \times 10^{-2}$ para o critério de parada, para encontrar a solução do sistema linear

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

R.:

| k | $x^{(k)}$ | $\frac{\ x^{(k)} - x^{(k-1)}\ _{\infty}}{\ x^{(k)}\ _{\infty}}$ |
|-----|------------------------|---|
| 0 | $(0,00000; 0,00000)^T$ | |
| 1 | $(0,33333; 0,25000)^T$ | 1,00000 |
| 2 | $(0,50000; 0,33333)^T$ | 0,33333 |
| 3 | $(0,55555; 0,37500)^T$ | 0,09999 |
| 4 | $(0,58333; 0,38888)^T$ | 0,04762 |

Exemplo

Considere o sistema linear

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 1 \\ 1 & -3 & -1 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Dada a aproximação inicial $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$, encontre as aproximações sucessivas $x^{(1)}$, $x^{(2)}$, $x^{(3)}$ e $x^{(4)}$, usando o método de Jacobi.

R.: Solução: $(0,04; -1,16; -0,48)^T$. Aproximações:

| k | $x^{(k)}$ |
|-----|------------------------------------|
| 0 | $(0,00000; 0,00000; 0,00000)^T$ |
| 1 | $(0,50000; -1,33333; -0,50000)^T$ |
| 2 | $(-0,04166; -1,00000; -0,25000)^T$ |
| 3 | $(0,06250; -1,26388; -0,52083)^T$ |
| 4 | $(-0,00173; -1,13889; -0,46875)^T$ |

Métodos Numéricos

Método de Gauss–Seidel

No método de Gauss–Seidel, a sequência de aproximações $x^{(k)}$ para a solução do sistema $Ax = b$ é dada pela fórmula recursiva (assumimos $a_{ii} \neq 0$)

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (b_1 - a_{12}x_2^{(k)} - \dots - a_{1n}x_n^{(k)})/a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = (b_2 - a_{21}x_1^{(k+1)} - \dots - a_{2n}x_n^{(k)})/a_{22} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = (b_n - a_{n1}x_1^{(k+1)} - \dots - a_{n,n-1}x_{n-1}^{(k+1)})/a_{nn} \end{cases}$$

ou, equivalentemente,

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right),$$

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

Métodos Numéricos

Método de Gauss–Seidel

Vamos reescrever a fórmula recursiva na forma matricial. Para isso, passamos todos o termos do estágio $k + 1$ para o lado esquerdo da igualdade. Assim, obtemos

$$\left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} \right) + a_{ii} x_i^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)},$$

e então

$$\sum_{j=1}^i a_{ij} x_j^{(k+1)} = b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}.$$

Métodos Numéricos

Método de Gauss-Seidel

Sejam L e U tais que $A = L + U$, com

$$L = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad \text{e} \quad U = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Com isso, obtemos a seguinte fórmula na forma matricial:

$$Lx^{(k+1)} = b - Ux^{(k)}, \quad (*)$$

que resulta em

$$x^{(k+1)} = L^{-1}(b - Ux^{(k)}).$$

Métodos Numéricos

Método de Gauss–Seidel

- O sistema (*) pode ser resolvido usando substituição direta.
- Usamos como critério de parada no método de Gauss–Seidel o mesmo critério usado no método de Jacobi.

Métodos Numéricos

Método de Gauss–Seidel

Exemplo

Use o método de Gauss–Seidel, com aproximação inicial $x^{(0)} = (1, 1)^T$, e $\varepsilon = 5 \times 10^{-2}$ para o critério de parada, para encontrar a solução do sistema linear

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

R.:

| k | $x^{(k)}$ | $\frac{\ x^{(k)} - x^{(k-1)}\ _{\infty}}{\ x^{(k)}\ _{\infty}}$ |
|-----|-------------------------|---|
| 0 | $(1,00000; 1,00000)^T$ | |
| 1 | $(-0,20000; 0,45000)^T$ | 2,66670 |
| 2 | $(0,02000; 0,50500)^T$ | 0,43564 |
| 3 | $(-0,00200; 0,49950)^T$ | 0,04404 |

Exemplo

Considere o sistema linear

$$\begin{pmatrix} 4 & -2 & 1 \\ 1 & -3 & -1 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Dada a aproximação inicial $x^{(0)} = (1, 1, 1)^T$, use o método de Gauss-Seidel, para encontrar as aproximações sucessivas $x^{(1)}$, $x^{(2)}$ e $x^{(3)}$.

R.: Solução: $(0,04; -1,16; -0,48)^T$. Aproximações:

| k | $x^{(k)}$ |
|-----|------------------------------------|
| 0 | $(1,00000; 1,00000; 1,00000)^T$ |
| 1 | $(0,75000; -1,41666; -0,12500)^T$ |
| 2 | $(-0,17708; -1,35069; -0,58854)^T$ |
| 3 | $(-0,02821; -1,14655; -0,51410)^T$ |

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel

Os métodos de Jacobi e Gauss–Seidel podem ser expressos na forma matricial como

$$x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + g, \quad \text{para } k \geq 0, \quad (*)$$

com x satisfazendo a igualdade $x = Cx + g$ se, e somente se, $Ax = b$.

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel

- Com respeito ao método de Jacobi, temos

$$x^{(k+1)} = D^{-1}(b - Mx^{(k)}) = -D^{-1}Mx^{(k)} + D^{-1}b,$$

e a fórmula (*) é satisfeita para $C = -D^{-1}M$ e $g = D^{-1}b$.

- Para esses valores de C e g , vemos que

$$Ax = (D + M)x = b$$

é equivalente a

$$x = D^{-1}(b - Mx) = Cx + g.$$

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel

- Já no método de Gauss–Seidel, o desenvolvimento

$$x^{(k+1)} = L^{-1}(b - Ux^{(k)}) = -L^{-1}Ux^{(k)} + L^{-1}b$$

implica que (*) é satisfeita para $C = -L^{-1}U$ e $g = L^{-1}b$.

- Com esses valores de C e g , temos que

$$Ax = (L + U)x = b$$

é equivalente a

$$x = L^{-1}(b - Ux) = Cx + g.$$

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel

Subtraindo as equações $x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + g$ e $x = Cx + g$, obtemos

$$x^{(k+1)} - x = C(x^{(k)} - x)$$

Usando a desigualdade triangular, chegamos a

$$\begin{aligned} |x_i^{(k+1)} - x_i| &= \left| \sum_{j=1}^n c_{ij}(x_j^{(k)} - x_j) \right| \leq \sum_{j=1}^n |c_{ij}| \cdot |x_j^{(k)} - x_j| \\ &\leq \left(\sum_{j=1}^n |c_{ij}| \right) \cdot \max_{1 \leq j \leq n} |x_j^{(k)} - x_j| \end{aligned}$$

Deste modo,

$$\max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k+1)} - x_i| \leq \left[\max_{1 \leq i \leq n} \left(\sum_{j=1}^n |c_{ij}| \right) \right] \cdot \max_{1 \leq j \leq n} |x_j^{(k)} - x_j|$$

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel

Definindo

$$\|C\| = \max_{1 \leq i \leq n} \left(\sum_{j=1}^n |c_{ij}| \right)$$

podemos escrever

$$\|x^{(k+1)} - x\|_{\infty} \leq \|C\| \cdot \|x^{(k)} - x\|_{\infty}$$

Consequentemente,

$$\|x^{(k)} - x\|_{\infty} \leq \|C\|^k \cdot \|x^{(0)} - x\|_{\infty}.$$

Portanto, se $\|C\| < 1$ então $\|x^{(k)} - x\|_{\infty} \rightarrow 0$, que implica $x_i^{(k)} \rightarrow x_i$ para $i = 1, \dots, n$.

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel

Teorema (Critério de convergência)

Se $\|C\| < 1$ então a sequência

$$x^{(k+1)} = Cx^{(k)} + g, \quad k \geq 0,$$

converge para $x = Cx + g$.

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel

No método de Jacobi, a matriz C é dada por

$$C = -D^{-1}M = -\begin{pmatrix} 0 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \dots & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & \dots & \frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

A desigualdade

$$\|C\| = \max_{1 \leq i \leq n} \left(\sum_{j \neq i} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| \right) < 1$$

é satisfeita se e somente se

$$\sum_{j \neq i} |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad \text{para } i = 1, \dots, n. \quad (*)$$

Uma matriz A satisfazendo (*) é chamada de diagonalmente estritamente dominante.

Métodos Numéricos

Convergência nos métodos de Jacobi e Gauss–Seidel

É possível verificar que, se A é diagonalmente estritamente dominante, então o método de Gauss–Seidel também converge.

Teorema (Critério das linhas)

Se a matriz A é diagonalmente estritamente dominante, i.e.,

$$\sum_{j \neq i} |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad i = 1, \dots, n,$$

então os métodos de Jacobi e Gauss–Seidel geram uma sequência que converge para a solução do sistema linear $Ax = b$, qualquer que seja a aproximação inicial $x^{(0)}$.

Exemplo

Verifique se o critério das linhas é válido para o sistema linear

$$\begin{cases} 8x_1 + 2x_2 - 2x_3 - 3x_4 = 1 \\ 2x_1 + 9x_2 + 3x_3 + 4x_4 = 5 \\ 3x_1 - 2x_2 + 7x_3 - 3x_4 = 3 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 8x_4 = 2 \end{cases}$$

R.: Não é satisfeito.

Métodos Numéricos

Método QR

- O método QR é usado para encontrar os autovalores de uma matriz A .
- Um número $\lambda \in \mathbb{R}$ é dito ser um autovalor da matriz A se existir um vetor v tal que

$$Av = \lambda v.$$

- O vetor v que satisfaz a equação acima é chamado de autovetor.
- Numa matriz triangular (superior ou inferior), seus autovalores correspondem aos elementos de sua diagonal.

- Na fatoração QR a matriz A é escrita como o produto

$$A = QR,$$

em que Q é uma matriz ortonormal, e R é uma matriz triangular superior.

- Uma matriz Q é chamada de ortonormal se

$$Q^T Q = Q Q^T = I.$$

- Se A é não singular, então a fatoração QR é única se é requerido que os elementos da diagonal de R são positivos.

Métodos Numéricos

Método QR

- Para encontramos a fatoração QR de uma matriz $A = (a_{ij})_{n \times n}$, pode-se usar o processo de Gram–Schmidt.
- Para isso, expressamos a matriz A como

$$A = (a_1, \dots, a_n),$$

em que $a_j = (a_{1j}, \dots, a_{nj})^T$ são os vetores coluna de A .

- No processo de Gram–Schmidt, um conjunto ortonormal de vetores coluna são gerados a partir dos vetores coluna de A .
- Dado um vetor coluna a , denotamos $\|a\| = (a^T a)^{1/2}$.

- Os vetores q_i são obtidos como

$$\begin{cases} a'_i = a_i - \sum_{k=1}^{i-1} (q_k^T a_i) q_k, \\ q_i = \frac{a'_i}{\|a'_i\|}. \end{cases}$$

- A matriz Q é então composta pelos vetores coluna q_i :

$$Q = (q_1, \dots, q_n).$$

- Já as entradas da matriz $R = (r_{ij})$ são dadas como

$$r_{ij} = \begin{cases} q_i^T a_j, & i \leq j, \\ 0, & i > j. \end{cases}$$

- Os valores de r_{ij} são encontrados durante o cálculo dos vetores coluna q_i .

Exemplo

Usando o processo de Gram–Schmidt, encontre a fatoração QR da matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 3 \end{pmatrix}.$$

$$\text{R.: } A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{5} & 2\sqrt{5} \\ 0 & \sqrt{5} \end{pmatrix}.$$

Exemplo

Usando o processo de Gram-Schmidt, encontre a fatoração QR da matriz

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 10 & 3 \\ 1 & -4 & -3 \\ 2 & 1 & -6 \end{pmatrix}.$$

$$\text{R.: } A = \begin{pmatrix} 2/3 & 2/3 & 1/3 \\ 1/3 & -2/3 & 2/3 \\ 2/3 & -1/3 & -2/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 6 & -3 \\ 0 & 9 & 6 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Exemplo

Usando o processo de Gram–Schmidt, encontre a fatoração QR da matriz

$$A = \begin{pmatrix} -2 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 4 & 0 & 3 \\ -2 & 2 & 3 & 2 \\ 2 & 4 & 2 & 7 \end{pmatrix}.$$

$$\text{R.: } A = \begin{pmatrix} -1/2 & 1/2 & -1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 & 1/2 & -1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 & 3 \\ 0 & 6 & 3 & 7 \\ 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Métodos Numéricos

Método QR

- O método QR usa transformações de similaridade para transformar a matriz A na forma triangular.
- Uma transformação de similaridade é definida como $A' = M^{-1}AM$.
- As matrizes A e A' são ditas ser similares.
- Os autovalores de matrizes similares são idênticos, porém com autovetores diferentes.

- No método QR o produto $A = QR$, obtido na fatoração QR, é invertido resultando na matriz

$$A' = RQ.$$

- A matrizes A e A' são similares, e portanto têm os mesmos autovalores.
- Este resultado segue das igualdades abaixo:

$$Q^{-1}AQ = Q^{-1}QRQ = RQ = A'.$$

Métodos Numéricos

Método QR

- No método QR, dada a matriz $A^{(k)}$ no k -ésimo estágio, encontramos sua decomposição QR como

$$A^{(k)} = Q^{(k)} R^{(k)},$$

e então calculamos

$$A^{(k+1)} = R^{(k)} Q^{(k)}.$$

- A inicialização é dada por $A^{(0)} = A$.
- Os elementos da diagonal de $A^{(k)}$ convergem para os autovalores de A , a medida que $A^{(k)}$ se aproxima da forma triangular superior.

Teorema

Seja A uma matriz não singular tendo autovalores

$$\lambda_1, \dots, \lambda_n, \quad \text{com} \quad |\lambda_1| > \dots > |\lambda_n| > 0.$$

Escolha a matriz X tal que

$$X^{-1}AX = \Lambda := \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$

Suponha que X^{-1} admite uma decomposição LU. Seja $\{A^{(k)}\}$, com $A^{(0)} = A$, a sequência gerada no método QR. Denote por $a_{ij}^{(k)}$ a entrada de posição ij de $A^{(k)}$. Então

$$a_{ij}^{(k)} \rightarrow 0, \quad \text{para } i > j,$$

e

$$a_{ii}^{(k)} \rightarrow \lambda_i, \quad \text{para } i = 1, \dots, n,$$

Exemplo

Aplique o método QR, com 3 iterações, à matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

R.:

Exemplo

Aplique o método QR, com 3 iterações, à matriz

$$A = \begin{pmatrix} 25 & 32 & 40 \\ 32 & 1 & 8 \\ 40 & 8 & 37 \end{pmatrix}.$$

R.: $\Lambda = \text{diag}(81, -27, 9)$.

- No problema de interpolação, dado um conjunto de pares ordenados, $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, com x_0, x_1, \dots, x_n distintos, que organizamos na tabela

| | | | | |
|-----|-------|-------|----------|-------|
| x | x_0 | x_1 | \cdots | x_n |
| y | y_0 | y_1 | \cdots | y_n |

procuramos uma função φ que interpola os pontos tabelados, ou seja,

$$\varphi(x_k) = y_k, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

- Na interpolação polinomial, a função φ é um polinômio de grau $\leq n$.
- Desta forma, desejamos encontrar um polinômio p_n de grau $\leq n$ tal que

$$p_n(x_k) = y_k, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

- Denotando

$$p_n(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \cdots + \alpha_n x^n,$$

queremos então encontrar $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$ tais que

$$\alpha_0 + \alpha_1 x_k + \cdots + \alpha_n x_k^n = y_k, \quad k = 0, \dots, n,$$

que corresponde a um sistema linear com $n + 1$ equações e $n + 1$ incógnitas.

- Na forma matricial, escrevemos

$$V\alpha = y,$$

em que

$$V = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix}, \quad \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad y = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

- A matriz V é chamada de matriz de Vandermonde.
- O sistema $V\alpha = y$ admite uma única solução, ou seja, $\det(V) \neq 0$, se os pontos x_0, x_1, \dots, x_n forem distintos.

Teorema (Existência e Unicidade)

Considere o conjunto $\{(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$, com $x_i \neq x_j$ para $i \neq j$. Então existe um único polinômio p_n de grau $\leq n$ tal que $p_n(x_k) = y_k$, para $k = 0, 1, \dots, n$.

Exemplo

Resolva um sistema linear para encontrar o polinômio de grau ≤ 2 que interpola os pontos dados na tabela

| | | | |
|-----|------|-----|------|
| x | -1 | 2 | 3 |
| y | -4 | 5 | 12 |

R.: $p_2(x) = -3 + 2x + x^2$.

- A matriz de Vandermonde apresenta problemas de mal condicionamento.
- Portanto, o polinômio obtido da solução do sistema $V\alpha = y$ pode conter erros de arredondamento.
- Veremos formas de encontrar o polinômio p_n que não utilizam a matriz de Vandermonde.

- Considere os polinômios

$$\begin{aligned} L_i(x) &= \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \cdots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \cdots (x_i - x_n)} \\ &= \prod_{k \neq i} \frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)}, \end{aligned}$$

para $i = 0, 1, \dots, n$.

- Note que L_i é um polinômio de grau n com raízes $x_0, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$.
- Além disso, esses polinômios satisfazem

$$L_i(x_k) = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k. \end{cases}$$

- No método de Lagrange, o polinômio interpolador é dado como

$$\begin{aligned} p_n(x) &= y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + \cdots + y_n L_n(x) \\ &= \sum_{k=0}^n y_k L_k(x). \end{aligned}$$

Exemplo

Use o método de Lagrange para encontrar o polinômio de grau ≤ 2 que interpola os pontos dados na tabela

| | | | |
|-----|------|-----|------|
| x | -1 | 2 | 3 |
| y | -4 | 5 | 12 |

$$\text{R.: } p_2(x) = -3 + 2x + x^2.$$

Exemplo

Usando o Método de Lagrange, encontre o valor do polinômio em $x = 1$, passando pelos pontos dados na tabela abaixo:

| | | | | |
|-----|------|------|------|-------|
| x | -2 | -1 | 3 | 4 |
| y | 12 | 6 | 42 | 126 |

$$\text{R.: } p_3(1) = -12.$$

Exemplo

Usando o Método de Lagrange, encontre o valor do polinômio em $x = 1$, passando pelos pontos dados na tabela abaixo:

| | | | | | |
|-----|-----|----|----|---|---|
| x | -3 | -2 | -1 | 0 | 2 |
| y | -41 | -8 | 1 | 2 | 4 |

R.: $p_4(1) = 3$.

- O cálculo dos polinômios L_0, L_1, \dots, L_n é computacionalmente custoso.
- Como alternativa, temos o método de Newton em que o polinômio interpolador é dado por

$$p_n(x) = \alpha_0 + \alpha_1(x - x_0) + \alpha_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ \dots + \alpha_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}),$$

em que $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$ são obtidos da solução do sistema linear

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & \\ 1 & (x_1 - x_0) & & & \\ 1 & (x_2 - x_0) & (x_2 - x_0)(x_2 - x_1) & & \\ 1 & \vdots & \vdots & \ddots & \\ 1 & (x_n - x_0) & (x_n - x_0)(x_n - x_1) & \dots & (x_n - x_0) \dots (x_n - x_{n-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

- Os coeficientes $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$ podem ser obtidos usando substituição direta.

Alternativamente, podemos calcular os coeficientes $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$ usando o operador diferenças divididas:

- Ordem 0: $f[x_k] = f(x_k) = y_k$;
- Ordem 1: $f[x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_k] - f[x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}}$;
- Ordem 2: $f[x_{k-2}, x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_{k-1}, x_k] - f[x_{k-2}, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-2}}$;
- Ordem l : $f[x_{k-l}, \dots, x_k] = \frac{f[x_{k-l+1}, \dots, x_k] - f[x_{k-l}, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-l}}$.

Métodos Numéricos

Interpolação

Os cálculos podem ser organizados na seguinte tabela:

| x | Ordem 0 | Ordem 1 | Ordem 2 | Ordem 3 | ... | Ordem n |
|----------|----------------|-------------------|--------------------|-------------------------------------|----------|---------------------------|
| x_0 | $y_0 = f[x_0]$ | | | | | |
| | | $f[x_0, x_1]$ | | | | |
| x_1 | $y_1 = f[x_1]$ | | $f[x_0, x_1, x_2]$ | | | |
| | | $f[x_1, x_2]$ | | $f[x_0, x_1, x_2, x_3]$ | | |
| x_2 | $y_2 = f[x_2]$ | | $f[x_1, x_2, x_3]$ | | | |
| | | $f[x_2, x_3]$ | | $f[x_1, x_2, x_3, x_4]$ | \ddots | |
| x_3 | $y_3 = f[x_3]$ | | $f[x_2, x_3, x_4]$ | | | $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ |
| | | $f[x_3, x_4]$ | \vdots | \vdots | | |
| x_4 | $y_4 = f[x_4]$ | \vdots | | $f[x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$ | \ddots | |
| \vdots | \vdots | $f[x_{n-1}, x_n]$ | \ddots | | | |
| x_n | $y_n = f[x_n]$ | \ddots | | | | |

- Em termos do operador diferenças divididas, os coeficientes $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$ são dados por

$$\alpha_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k], \quad k = 0, \dots, n.$$

- Portanto,

$$p_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ \dots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}).$$

- Na prática, o valor do polinômio $p_n(x)$ para determinado x é obtido usando parênteses encaixados.
- O polinômio

$$p_n(x) = \alpha_0 + \alpha_1(x - x_0) + \alpha_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots \\ \cdots + \alpha_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})$$

pode ser reescrito como

$$p_n(x) = \alpha_0 + (x - x_0)(\alpha_1 + (x - x_1)(\alpha_2 + \\ + (x - x_2)(\alpha_3 + \cdots + (x - x_{n-1})\alpha_n) \cdots)).$$

- Deste modo, o polinômio no método de Newton resulta em

$$p_n(x) = f[x_0] + (x - x_0)(f[x_0, x_1] + (x - x_1)(f[x_0, x_1, x_2] + \\ + (x - x_2)(f[x_0, x_1, x_2, x_3] + \cdots + (x - x_{n-1})f[x_0, x_1, \dots, x_n]) \cdots)).$$

Exemplo

Use o método de Newton para encontrar o polinômio de grau ≤ 2 que interpola os pontos dados na tabela

| | | | |
|-----|------|-----|------|
| x | -1 | 2 | 3 |
| y | -4 | 5 | 12 |

R.: $p_2(x) = -3 + 2x + x^2$.

Exemplo

Usando o Método de Newton, encontre o valor do polinômio em $x = 3$, passando pelos pontos dados na tabela abaixo:

| | | | | |
|-----|-------|------|------|------|
| x | -3 | -2 | -1 | 0 |
| y | -60 | -9 | 2 | -3 |

R.: $p_3(3) = 126$.

Exemplo

Usando o Método de Newton, encontre o valor do polinômio em $x = 1$, passando pelos pontos dados na tabela abaixo:

| | | | | | |
|-----|----|----|----|---|---|
| x | -3 | -2 | -1 | 0 | 2 |
| y | -9 | -6 | 1 | 2 | 3 |

R.: $p_4(1) = -1,6$.

- Vamos assumir que os pontos $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ satisfazem

$$y_k = f(x_k), \quad k = 0, \dots, n,$$

em que f é a função a ser aproximada por um polinômio p_n de grau $\leq n$.

- O erro \mathcal{E}_n em $x \in [x_0, x_n]$, resultante da interpolação polinomial por p_n , é definido como

$$\mathcal{E}_n(x) = |f(x) - p_n(x)|.$$

Teorema

Considere $n + 1$ pontos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, com $n \geq 0$. Seja f uma função com derivada de ordem $n + 1$ contínua no intervalo $[x_0, x_n]$. Se p_n é o polinômio que interpola f nos pontos x_0, \dots, x_n , então

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^n (x - x_k), \quad x \in [x_0, x_n],$$

em que $x_0 \leq \xi \leq x_n$.

Consequentemente, o erro da interpolação polinomial satisfaz

$$\mathcal{E}_n(x) \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \left| \prod_{k=0}^n (x - x_k) \right|, \quad x \in [x_0, x_n],$$

em que

$$M_{n+1} = \max_{x \in [x_0, x_n]} |f^{(n+1)}(x)|.$$

- Vamos mostrar que

$$f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \pi(x), \quad x \in [x_0, x_n],$$

em que

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

- Fixado $x \neq x_k$ em $[x_0, x_n]$, defina a função

$$\mathcal{A}(t) = f(t) - p_n(t) - \frac{f(x) - p_n(x)}{\pi(x)} \pi(t), \quad t \in [x_0, x_n].$$

- Note que

$$\mathcal{A}(x) = 0 \quad \text{e} \quad \mathcal{A}(x_0) = 0, \mathcal{A}(x_1) = 0, \dots, \mathcal{A}(x_n) = 0,$$

já que $f(x_k) = p_n(x_k)$, para $k = 0, \dots, n$.

- Consequentemente, \mathcal{A} possui $n + 2$ raízes em $[x_0, x_n]$.

- Pelo Teorema de Rolle, \mathcal{A}' possui $n + 1$ raízes em (x_0, x_n) .
- Novamente, pelo Teorema de Rolle, \mathcal{A}'' possui n raízes em (x_0, x_n) .
- Aplicando repetidas vezes o Teorema de Rolle, concluímos que $\mathcal{A}^{(n+1)}$ possui uma raiz $\xi \in (x_0, x_n)$.
- Logo, temos

$$\mathcal{A}^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - p_n^{(n+1)}(\xi) - \frac{f(x) - p_n(x)}{\pi(x)}(n+1)! = 0.$$

- Como $p_n^{(n+1)}(t) = 0$, chegamos então a

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

Corolário

Considere $n + 1$ pontos igualmente espaçados:

$$x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Seja f uma função com derivada de ordem $n + 1$ contínua no intervalo $[x_0, x_n]$. Se p_n é o polinômio que interpola f nos pontos x_0, \dots, x_n , então o erro da interpolação polinomial satisfaz

$$\mathcal{E}_n(x) \leq \frac{M_{n+1} h^{n+1}}{4(n+1)}, \quad x \in [x_0, x_n],$$

em que

$$M_{n+1} = \max_{x \in [x_0, x_n]} |f^{(n+1)}(x)|.$$

Métodos Numéricos

Interpolação

- Fixado $x \in [x_0, x_n]$, seja $0 \leq l \leq n$ tal que $x \in (x_{l-1}, x_l)$.
- Usando as desigualdades

$$(x - x_k) \leq h(l - k), \quad \text{para } 0 \leq k \leq l - 2,$$

$$(x - x_{l-1})(x_l - x) \leq \frac{h^2}{4},$$

$$(x_k - x) \leq h(k - l + 1), \quad \text{para } l + 1 \leq k \leq n,$$

e

$$(n - l + 1) \leq \binom{n}{l} \Rightarrow l! \cdot (n - l + 1)! \leq n!,$$

podem escrever

$$\begin{aligned} |\pi(x)| &= \prod_{k=0}^n |x - x_k| \\ &= \prod_{k=0}^{l-2} (x - x_k)(x - x_{l-1})(x_l - x) \prod_{k=l+1}^n (x_k - x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\leq \left[\prod_{k=0}^{l-2} h(l-k) \right] \frac{h^2}{4} \left[\prod_{k=l+1}^n h(k-l+1) \right] \\ &= \frac{h^{n+1}}{4} \left[\prod_{k=0}^{l-2} (l-k) \right] \left[\prod_{k=l+1}^n (k-l+1) \right] \\ &= \frac{h^{n+1}}{4} \cdot l! \cdot (n-l+1)! \\ &\leq \frac{h^{n+1}}{4} n! \end{aligned}$$

- Com isso, chegamos a

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_n(x) &= |f(x) - p_n(x)| = \left| \pi(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \right| \\ &\leq \frac{h^{n+1}}{4} n! \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} = \frac{M_{n+1} h^{n+1}}{4(n+1)}. \end{aligned}$$

Exemplo

Obtenha uma aproximação para $\ln(2,3)$ e uma estimativa para o seu erro usando interpolação polinomial. Para isso, considere a tabela

| x | 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------|---|--------|--------|--------|
| $\ln(x)$ | 0 | 0,6931 | 1,0986 | 1,3863 |

R.: $p_3(2,3) = 0,8373$, $\mathcal{E}_3(2,3) \leq 0,375$.

- Seja $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua e, geralmente, suave.
- Numa quadratura numérica de $n + 1$ pontos, a integral é aproximada da seguinte forma:

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{k=0}^n w_k f(x_k),$$

em que

- $x_0, x_1, \dots, x_n \in [a, b]$ são os nós de integração, e
- w_0, w_1, \dots, w_n são os pesos.
- A quadratura numérica é usada quando a função f é conhecida em apenas alguns pontos, ou quando não é possível calcular $I(f)$ analiticamente.

- Nas fórmulas de Newton–Cotes, os pesos w_k são obtidos usando interpolação polinomial ou interpolação polinomial por partes em pontos $x_0 < x_1 < \dots < x_n$ igualmente espaçados no intervalo $[a, b]$.
- Uma fórmula de Newton–Cotes é chamada de fechada se $x_0 = a$ e $x_n = b$.
- Por outro lado, na fórmula aberta de Newton–Cotes, temos $x_0, x_1, \dots, x_n \in (a, b)$.

- Seja p_n o polinômio de grau n que interpola f nos pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

- Pela forma de Lagrange, temos

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k)L_k(x),$$

em que

$$L_k(x) = \prod_{i \neq k} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}.$$

- Deste modo,

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(x) dx \simeq \int_a^b p_n(x) dx \\ &= \int_a^b \left(\sum_{k=0}^n f(x_k) L_k(x) \right) dx \\ &= \sum_{k=0}^n \left(\int_a^b L_k(x) dx \right) f(x_k) \\ &= \sum_{k=0}^n w_k f(x_k), \end{aligned}$$

em que os pesos w_0, w_1, \dots, w_n são dados por

$$w_k = \int_a^b L_k(x) dx, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

- Na Regra dos Trapézios, consideramos $n = 1$ com $x_0 = a$ e $x_1 = b$.
- Sendo as bases de Lagrange dadas por

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x_1 - x}{h}, \quad \text{e} \quad L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - x_0}{h},$$

em que $h = x_1 - x_0$, temos

$$w_0 = \int_a^b L_0(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{x_1 - x}{h} dx = \frac{h}{2},$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} \frac{x - x_0}{h} dx = \frac{h}{2}.$$

- Com isso, a Regra dos Trapézios resulta em

$$I(f) \simeq T_1(f) = \frac{h}{2}[f(x_0) + f(x_1)].$$

- Para melhorar a aproximação da integral pela Regra dos Trapézios, podemos fazer uma subdivisão do intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

e aplicar a Regra dos Trapézios em cada subintervalo $[x_{k-1}, x_k]$, para $k = 1, \dots, n$.

- Nesse caso, a função f é aproximada por um polinômio linear por partes Π_1 que interpola f em x_0, x_1, \dots, x_n .

- Com isso, temos a aproximação

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b \Pi_1(x)dx = \sum_{k=1}^n \int_{x_{k-1}}^{x_k} \Pi_1(x)dx = T_n(f).$$

- Considerando a aplicação da Regra dos Trapézios em cada subintervalo $[x_{k-1}, x_k]$, obtemos

$$I(f) \simeq T_n(f) = \sum_{k=1}^n \frac{h}{2} [f(x_{k-1}) + f(x_k)].$$

- A Regra dos Trapézios Composta é dada então como

$$I(f) \simeq T_n(f) = \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)].$$

- Seja

$$R_T = I(f) - T_1(f) = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx - \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx.$$

- Considere a função contínua

$$\mathcal{A}(x) = f(x) - p_1(x) - \frac{R_T}{W} \pi(x),$$

em que $\pi(x) = (x - x_0)(x - x_1)$, e

$$W = \int_{x_0}^{x_1} \pi(x) dx = -\frac{h^3}{6} \neq 0.$$

- Como

$$\int_{x_0}^{x_1} \mathcal{A}(x) dx = 0,$$

podemos inferir que existe $u \in (x_0, x_1)$ tal que $\mathcal{A}(u) = 0$.

- Portanto, a função $\mathcal{A}(x)$ tem três zeros distintos em $[x_0, x_1]$.
- Aplicando repetidas vezes o Teorema de Rolle, concluímos que $\mathcal{A}''(x)$ possui uma raiz $\xi \in (x_0, x_1)$.
- Logo, temos

$$0 = \mathcal{A}''(\xi) = f''(\xi) - \frac{R_T}{W} 2!,$$

de onde chegamos então a

$$R_T = \frac{f''(\xi)}{2!} W = \frac{f''(\xi)}{2!} \left(-\frac{h^3}{6}\right) = -\frac{h^3}{12} f''(\xi).$$

- No caso da Regra dos Trapézios Composta, considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^n \left(\frac{h}{2} [f(x_{k-1}) + f(x_k)] - \frac{h^3}{12} f''(\xi_k) \right) \\ &= T_n(f) - \underbrace{\frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^n f''(\xi_k)}_{=R_T}. \end{aligned}$$

- Supondo que f'' é contínua em $[a, b]$, uma aplicação Teorema do Valor Intermediário fornece a existência de $\xi \in (a, b)$ tal que

$$R_T = -\frac{h^3}{12} \sum_{k=1}^n f''(\xi_k) = -\frac{h^3}{12} n f''(\xi) = -n \frac{h^3}{12} f''(\xi).$$

- Portanto, o erro na Regra dos Trapézios Composta, supondo f'' contínua em $[a, b]$, satisfaz

$$|R_T| = |I(f) - T_n(f)| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} M_2,$$

em que

$$M_2 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f''(\xi)|.$$

Exemplo

Usando a Regra dos Trapézios Composta, calcule o valor da integral

$$\int_0^1 e^x dx,$$

com erro $|R_T| < 10^{-2}$.

R.: $n = 5$, $T_5(f) = 1,724005$.

Exemplo

Usando a Regra dos Trapézios Composta, calcule o valor da integral

$$\int_0^1 \ln(\cos x) dx,$$

com erro $|R_T| < 10^{-2}$.

R.: $n = 6$, $T_6(f) = -0,191132$.

Exemplo

Usando a Regra dos Trapézios Composta, calcule o valor da integral

$$\int_0^1 (x - 2)e^x dx,$$

com erro $|R_T| < 7 \times 10^{-3}$.

R.: $n = 6$, $T_6(f) = -2,434253$.

Métodos Numéricos

Integração numérica

- A Regra 1/3 de Simpson é obtida considerando $n = 2$, com

$$x_0 = a, \quad x_1 = (a + b)/2 \quad \text{e} \quad x_2 = b.$$

- Neste caso, as integrais dos polinômios de Lagrange resultam em

$$w_0 = \int_a^b L_0(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} dx = \frac{h}{3},$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} dx = \frac{4h}{3},$$

$$w_2 = \int_a^b L_2(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} dx = \frac{h}{3},$$

que podem ser calculadas considerando $z = x - x_0$.

- Portanto, a Regra 1/3 de Simpson é dada por

$$I(f) \simeq S_2(f) = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)].$$

- Para melhorar a aproximação da integral pela Regra 1/3 de Simpson, podemos fazer uma subdivisão do intervalo $[a, b]$ com pontos

$$x_k = a + \frac{b-a}{n}k, \quad k = 0, 1, \dots, n,$$

e aplicar a Regra 1/3 de Simpson em cada subintervalo $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, para $k = 1, \dots, n/2$.

- Nesse caso, a função f é aproximada por um polinômio quadrático por partes Π_2 que interpola f em x_0, x_1, \dots, x_n .

- Com isso, temos a aproximação

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \simeq \int_a^b \Pi_2(x)dx = \sum_{k=1}^{n/2} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} \Pi_2(x)dx = S_n(f).$$

- Considerando a aplicação da Regra 1/3 de Simpson em cada subintervalo $[x_{2k-2}, x_{2k}]$, obtemos

$$I(f) \simeq S_n(f) = \sum_{k=1}^{n/2} \frac{h}{3} [f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})].$$

- Deste modo, a Regra 1/3 de Simpson Composta é dada como

$$S_n(f) = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

- Assim como na Regra dos Trapézios, pode-se mostrar que o resto na Regra 1/3 de Simpson, supondo $f^{(4)}$ contínua em $[a, b]$, satisfaz

$$R_S = I(f) - S_2(f) = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a, b).$$

- Para isso, denotamos

$$\pi(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2),$$

$$\tilde{\pi}(x) = (x - x_0)(x - x_1)^2(x - x_2),$$

e assim temos

$$W = \int_{x_0}^{x_2} \pi(x) dx = 0,$$

$$\widetilde{W} = \int_{x_0}^{x_2} \tilde{\pi}(x) dx = -\frac{4}{15}h^5 \neq 0.$$

- Considere a função contínua

$$\mathcal{A}(x) = f(x) - p_2(x) - k\pi(x) - \frac{R_S}{W}\tilde{\pi}(x),$$

em que a constante $k \in \mathbb{R}$ é escolhida de modo que

$$\int_{x_0}^{x_1} \mathcal{A}(x) dx = 0,$$

visto que $\int_{x_0}^{x_1} \pi(x) dx \neq 0$.

- Como $\int_{x_0}^{x_2} \mathcal{A}(x) dx = 0$, concluímos que

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathcal{A}(x) dx = 0.$$

- Com isso, existem $u \in (x_0, x_1)$ e $v \in (x_1, x_2)$ tais que $\mathcal{A}(u) = \mathcal{A}(v) = 0$.

- Portanto, a função $\mathcal{A}(x)$ tem cinco zeros distintos em $[x_0, x_2]$.
- Aplicando repetidas vezes o Teorema de Rolle, concluímos que $\mathcal{A}^{(4)}(x)$ possui uma raiz $\xi \in (x_0, x_2)$.
- Logo, temos

$$0 = \mathcal{A}^{(4)}(\xi) = f^{(4)}(\xi) - \frac{R_S}{\widetilde{W}} 4!,$$

de onde chegamos então a

$$R_S = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} \widetilde{W} = \frac{f^{(4)}(\xi)}{4!} \left(-\frac{4}{15} h^5 \right) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi).$$

- No caso da Regra 1/3 de Simpson Composta, considerando a expressão para o resto, obtemos

$$\begin{aligned} I(f) &= \sum_{k=1}^{n/2} \left(\frac{h}{3} [f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})] - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi_k) \right) \\ &= S_n(f) - \underbrace{\frac{h^5}{90} \sum_{k=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_k)}_{=R_S}. \end{aligned}$$

- Supondo que $f^{(4)}$ é contínua em $[a, b]$, o Teorema do Valor Intermediário fornece a existência de $\xi \in (a, b)$ tal que

$$R_S = -\frac{h^5}{90} \sum_{k=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_k) = -\frac{h^5}{90} \left(\frac{n}{2} f^{(4)}(\xi) \right) = -n \frac{h^5}{180} f^{(4)}(\xi).$$

- Portanto, o resto na Regra 1/3 de Simpson Composta, supondo $f^{(4)}$ contínua em $[a, b]$, satisfaz

$$|R_S| = |I(f) - S_n(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{180n^4} M_4,$$

em que

$$M_4 = \max_{a \leq \xi \leq b} |f^{(4)}(\xi)|.$$

Exemplo

Calcule o valor da integral

$$\int_0^1 e^x dx,$$

aplicando a Regra 1/3 de Simpson Composta, com erro $|R_S| < 10^{-4}$.

Exemplo

Calcule o valor da integral

$$\int_1^3 \ln(x+1)dx,$$

aplicando a Regra 1/3 de Simpson Composta, com erro $|R_S| < 10^{-4}$.

R.: $n = 6$, $S_6(f) = 2,158868$.

Exemplo

Calcule o valor da integral

$$\int_0^1 (x \operatorname{sen} x + 4 \cos x) dx,$$

aplicando a Regra 1/3 de Simpson Composta, com erro $|R_S| < 10^{-5}$.

R.: $n = 6$, $S_6(f) = 3,6670538$.

- Na quadratura Gaussiana dada por

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \simeq G_n(f) = \sum_{k=0}^n w_k f(x_k),$$

os nós de integração x_0, x_1, \dots, x_n não são pontos igualmente espaçados em $[a, b]$.

- Tanto os nós de integração como os pesos são escolhidos de modo que $R_{n+1} = 0$ se f for um polinômio de grau $\leq 2n + 1$.

- Para $n = 1$ e $[a, b] = [-1, 1]$, devemos ter

$$G_1(f) = \int_{-1}^1 f(t)dt = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1),$$

sempre que f for um polinômio de grau ≤ 3 .

- Deste modo,

$$\int_{-1}^1 1dx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \Rightarrow w_0 + w_1 = 2,$$

$$\int_{-1}^1 xdx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \Rightarrow w_0 t_0 + w_1 t_1 = 0,$$

$$\int_{-1}^1 x^2 dx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \Rightarrow w_0 t_0^2 + w_1 t_1^2 = \frac{2}{3},$$

$$\int_{-1}^1 x^3 dx = w_0 f(t_0) + w_1 f(t_1) \Rightarrow w_0 t_0^3 + w_1 t_1^3 = 0.$$

- Como consequência, obtemos o seguinte sistema não linear:

$$\begin{cases} w_0 + w_1 = 2 \\ w_0 t_0 + w_1 t_1 = 0 \\ w_0 t_0^2 + w_1 t_1^2 = \frac{2}{3} \\ w_0 t_0^3 + w_1 t_1^3 = 0 \end{cases}$$

cuja solução é

$$t_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad t_1 = +\frac{1}{\sqrt{3}}, \quad \text{e} \quad w_0 = w_1 = 1.$$

- No caso de um intervalo $[a, b]$ qualquer, a mudança de variável

$$x = \frac{1}{2}(a + b + t(b - a))$$

resulta na quadratura Gaussiana dada por

$$G_1(f) = \frac{b-a}{2} \left[f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2\sqrt{3}}\right) \right].$$

Exemplo

Estime $I(f) = \int_0^1 e^x dx$ usando a quadratura Gaussiana $G_1(f)$ e determine o erro resultante.

Exemplo

Estime $I(f) = \int_0^1 (x-2)e^x dx$ usando a quadratura Gaussiana $G_1(f)$ e determine o erro resultante.

Exemplo

Estime $I(f) = \int_1^3 \ln(x+1) dx$ usando a quadratura Gaussiana $G_1(f)$ e determine o erro resultante.

- Um problema de valor inicial (PVI) é uma equação diferencial dada na forma

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = f(x, y), \\ y(x_0) = y_0, \end{cases}$$

em que f é uma função dada, com condição inicial $y(x_0) = y_0$, para x_0 e y_0 fixados.

- Assumiremos que o PVI possui uma única solução $y(x)$.

- Assuma que pontos x_0, x_1, \dots são igualmente espaçados, ou seja,

$$x_{k+1} = x_k + h, \quad k = 0, 1, \dots$$

para dado passo h .

- O método de Euler é dado pela fórmula

$$y_{k+1} = y_k + hf(x_k, y_k), \quad k = 0, 1, \dots$$

- Se $y''(x)$ for contínua, então, pela série de Taylor centrada em x_k temos

$$y(x_k + h) = y(x_k) + y'(x_k)h + \frac{1}{2}y''(\xi)h^2, \quad \xi \in (x_k, x_k + h),$$

que reescrevemos como

$$y(x_{k+1}) = y(x_k) + hf(x_k, y(x_k)) + \frac{1}{2}y''(\xi)h^2,$$

onde usamos $x_{k+1} = x_k + h$ e $y'(x_k) = f(x_k, y(x_k))$.

- Assumindo $y_k = y(x_k)$, o erro do método de Euler em x_{k+1} é então

$$e(x_{k+1}) = |y(x_{k+1}) - y_{k+1}| = \frac{1}{2}|y''(\xi)|h^2 \leq \frac{h^2}{2}M_2,$$

em que

$$M_2 = \max_{x_k \leq \xi \leq x_{k+1}} |y''(\xi)|.$$

Definição

Um método numérico para um PVI é dito ser de ordem p se existe uma constante C tal que o erro $e(x_{k+1}) = |y(x_{k+1}) - y_{k+1}|$, onde se assume $y_k = y(x_k)$, satisfaz

$$e(x_{k+1}) < Ch^{p+1},$$

em que C é uma constante.

Exemplo

Usando o Método de Euler, estabeleça aproximações para o PVI

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = \frac{1}{x+1}, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

no intervalo $[0; 1,2]$, com $h = 0,4$.

Exemplo

Usando o Método de Euler, estabeleça aproximações para o PVI

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = \frac{1}{1 + xy}, \\ y(0) = 0, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 1]$, com $h = 0,25$.

Exemplo

Usando o Método de Euler, estabeleça aproximações para o PVI

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = x^2 - 2y, \\ y(0) = 1, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 1]$, com $h = 0,2$.

Métodos Numéricos

Solução numérica de PVI

- Os chamados métodos de Runge–Kutta de s estágios apresentam a forma

$$y_{k+1} = y_k + h\phi(x_k, y_k), \quad k = 0, 1, \dots,$$

em que $\phi = b_1 k_1 + \dots + b_s k_s$, e

$$k_1 = f(x, y),$$

$$k_2 = f(x + c_2 h, y + h a_{21} k_1),$$

$$k_3 = f(x + c_3 h, y + h(a_{31} k_1 + a_{32} k_2)),$$

$$\vdots$$

$$k_s = f(x + c_s h, y + h(a_{s1} k_1 + \dots + a_{s,s-1} k_{s-1})),$$

com as constantes c_i , a_{ij} , b_j sendo definidas para cada método particular.

- O método de Euler, em que $\phi = f$, é um método de Runge–Kutta de estágio $s = 1$ e ordem $p = 1$.

Métodos Numéricos

Solução numérica de PVI

- As constantes do método de Runge–Kutta podem ser organizados como na tabela

| | | | | | |
|----------|----------|----------|----------|-------------|-------|
| 0 | | | | | |
| c_2 | a_{21} | | | | |
| c_3 | a_{31} | a_{32} | | | |
| \vdots | \vdots | \vdots | \ddots | | |
| c_s | a_{s1} | a_{s2} | \cdots | $a_{s,s-1}$ | |
| | b_1 | b_2 | \cdots | b_{s-1} | b_s |

Métodos Numéricos

Solução numérica de PVI

- Pode-se mostrar que o método de Runge–Kutta de 2 estágios tem ordem $p = 2$ se

$$b_1 + b_2 = 1, \quad b_2 c_2 = \frac{1}{2}, \quad b_2 a_{21} = \frac{1}{2}.$$

- Dois métodos que satisfazem a relação acima são o método de Euler modificado, cujas constantes são dadas na tabela

| | | |
|-----|-----|-----|
| 0 | | |
| 1/2 | 1/2 | |
| | | 0 1 |

e o método de Euler melhorado, com constantes dadas abaixo

| | | |
|---|---|---------|
| 0 | | |
| 1 | 1 | |
| | | 1/2 1/2 |

- O método de Euler modificado apresenta a forma

$$y_{k+1} = y_k + hf\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}f(x_k, y_k)\right).$$

- Já o método de Euler melhorado tem a forma

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2}[f(x_k, y_k) + f(x_k + h, y_k + hf(x_k, y_k))].$$

Exemplo

Compare a solução do PVI

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = -2xy^2, \\ y(0) = 0,5, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 1]$, com 10 subintervalos, usando os métodos de Euler, Euler modificado e Euler melhorado, sabendo que a solução é

$$y(x) = \frac{1}{x^2 + 2}.$$

Métodos Numéricos

Solução numérica de PVI

| x_i | $ y_i^E - y(x_i) $ | $ y_i^{\text{Emod}} - y(x_i) $ | $ y_i^{\text{Emel}} - y(x_i) $ |
|-------|-----------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| 0,0 | 0 | 0 | 0 |
| 0,1 | $2,49 \times 10^{-3}$ | $1,24 \times 10^{-5}$ | $1,24 \times 10^{-5}$ |
| 0,2 | $4,80 \times 10^{-3}$ | $4,76 \times 10^{-5}$ | $2,32 \times 10^{-5}$ |
| 0,3 | $6,73 \times 10^{-3}$ | $9,83 \times 10^{-5}$ | $2,97 \times 10^{-5}$ |
| 0,4 | $8,11 \times 10^{-3}$ | $1,55 \times 10^{-4}$ | $2,89 \times 10^{-5}$ |
| 0,5 | $8,88 \times 10^{-3}$ | $2,06 \times 10^{-4}$ | $1,91 \times 10^{-5}$ |
| 0,6 | $9,04 \times 10^{-3}$ | $2,45 \times 10^{-4}$ | $2,60 \times 10^{-8}$ |
| 0,7 | $8,69 \times 10^{-3}$ | $2,67 \times 10^{-4}$ | $2,70 \times 10^{-5}$ |
| 0,8 | $7,94 \times 10^{-3}$ | $2,71 \times 10^{-4}$ | $5,96 \times 10^{-5}$ |
| 0,9 | $6,93 \times 10^{-3}$ | $2,59 \times 10^{-4}$ | $9,48 \times 10^{-5}$ |
| 1,0 | $5,77 \times 10^{-3}$ | $2,35 \times 10^{-4}$ | $1,30 \times 10^{-4}$ |

Métodos Numéricos

Solução numérica de PVI

- Um método bastante comum de ordem 4 é o método de Runge–Kutta com coeficientes dados na tabela

| | | | | |
|-------|-----|-----|-----|-----|
| 0 | | | | |
| 1/2 | 1/2 | | | |
| 1/2 | 0 | 1/2 | | |
| 1 | 0 | 0 | 1 | |
| <hr/> | | | | |
| | 1/6 | 1/3 | 1/3 | 1/6 |

- Para esses coeficientes o método de Runge–Kutta apresenta a forma

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

em que

$$\begin{aligned}k_1 &= f(x_k, y_k), & k_3 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}k_2\right), \\k_2 &= f\left(x_k + \frac{h}{2}, y_k + \frac{h}{2}k_1\right), & k_4 &= f(x_k + h, y_k + hk_3).\end{aligned}$$

Exemplo

Considere o PVI

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = y, \\ y(0) = 1. \end{cases}$$

Use o método de Euler melhorado e o método de Runge–Kutta de ordem 4 para estimar $y(0,04)$ com $h = 0,04$. Compare com a solução $y(0,04) = e^{0,04}$.

