```
% produzem os resultados pela decomposicao LU
A =
    4.0000    4.0000    2.0000   -4.0000   -4.0000   -3.0000
         0    2.0000         0         0         0         0
         0         0    1.0000         0         0   -1.0000
    0.2500   -0.5000   -0.5000    1.0000         0    0.2500
         0    0.5000         0   -1.0000   -1.0000    0.2500
    0.2500   -0.5000   -0.5000   -1.0000   -1.0000    0.7500
Det = 6
Pivot = 3     4     6     2     5     1
% vetor de termos independentes
b =
     0
     0
     1
     2
     0
     0
% As substituicoes sucessivas pivotal resultam em
y =
    1.0000
    2.0000
         0
    0.7500
   -0.2500
    1.2500
% As substituicoes sucessivas produzem a solucao
x =
    0.6667
    1.0000
    1.6667
    0.3333
    0.6667
    1.6667
```

Os coeficientes estequiométricos são obtidos pela solução do sistema acrescido de $x_7 = 1 \longrightarrow x = [0{,}6667\ 1{,}0000\ 1{,}6667\ 0{,}3333\ 0{,}6667\ 1{,}6667\ 1]^T$.

Análise dos resultados

Usualmente, os coeficientes estequiométricos são expressos como números inteiros. Pela regra de Cramer, para obter x com valores inteiros basta mutiplicá-lo pelo determinante de A, no caso, $\det(A) = 6$. Para mais uma simplificação, divide-se o valor obtido por 2, resultando em

$$x = [2\ 3\ 5\ 1\ 2\ 5\ 3]^T.$$

Portanto, a equação química balanceada torna-se

$$2KMnO_4 + 3H_2SO_4 + 5NaNO_2 \longrightarrow K_2SO_4 + 2MnSO_4 + 5NaNO_3 + 3H_2O.$$

2.11 Exercícios

Seção 2.1

2.1. Sejam as matrizes e vetores

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -3 & 0 \\ 1 & 4 & 6 \\ 5 & -2 & 8 \end{bmatrix},\ B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 9 \\ 4 & 2 & -1 \\ -3 & 6 & 5 \end{bmatrix},$$

$$x = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \text{ e } y = \begin{bmatrix} 10 \\ 20 \\ 30 \end{bmatrix}.$$

Calcular
a) $A + B$.
b) Ax.
c) AB.
d) $x^T y$.
e) xy^T.

2.2. Verificar que $(A+B)^T = A^T + B^T$ usando as matrizes A e B do Exercício 2.1.

2.3. Calcular os autovalores das matrizes dadas abaixo, verificar que

$$\text{traço}(A) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \text{ e } \det(A) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i.$$

e observar que os autovalores $\lambda(A) = \lambda(A^T)$.
a) $A = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$.
b) $A = \begin{bmatrix} 5 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}$.
c) $A = \begin{bmatrix} -1 & 5 \\ -2 & 5 \end{bmatrix}$.

2.4. Dado o vetor $x = [1\ 2\ 3\ 4\ 5]^T$, calcular as normas
a) $\|x\|_1$.
b) $\|x\|_2$.
c) $\|x\|_\infty$.

2.5. Calcular as normas da matriz

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 4 & -1 \\ 2 & 9 & 3 \\ 8 & -6 & 7 \end{bmatrix}.$$

a) $\|A\|_1$.
b) $\|A\|_\infty$.
c) $\|A\|_F$.

Seção 2.2

2.6. Resolver o sistema triangular inferior por meio das substituições sucessivas

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ -2 & 5 & 0 \\ 1 & 7 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

2.7. Calcular a solução do sistema triangular superior utilizando as substituições retroativas

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 5 \\ 0 & 4 & -3 \\ 0 & 0 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 19 \\ 3 \\ -7 \end{bmatrix}.$$

2.8. Achar a solução do sistema triangular superior

$$\begin{bmatrix} 7 & 0 & -3 & 5 \\ 0 & -1 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 4 & -3 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -9 \\ 12 \\ -3 \\ 5 \end{bmatrix}.$$

2.9. Implementar, em qualquer linguagem de programação, o algoritmo de substituições sucessivas mostrado na Figura 2.3.

2.10. Implementar, em uma linguagem de programação, o algoritmo de substituições retroativas apresentado na Figura 2.4.

Seção 2.3

Resolver os sistemas abaixo pelo método de eliminação de Gauss, com a estratégia indicada e usando 3 casas decimais; verificar também a unicidade e exatidão da solução.

2.11. Sem pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 4 \\ -3 & -1 & 4 \\ 2 & 14 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 13 \\ 8 \\ 50 \end{bmatrix}.$$

2.12. Com pivotação parcial

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

2.13. Sem e com pivotação parcial, comparando os resultados

$$\begin{bmatrix} 1 & -3 & 5 & 6 \\ -8 & 4 & -1 & 0 \\ 3 & 2 & -2 & 7 \\ 1 & 2 & 5 & -4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17 \\ 29 \\ -11 \\ 7 \end{bmatrix}.$$

2.14. Sem e com pivotação parcial, comparando os resultados

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

2.15. Com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 3 & 2 & 4 \\ 8 & -2 & 9 & -1 & 2 \\ 5 & 1 & 1 & 7 & 2 \\ -2 & 4 & 5 & 1 & 0 \\ 7 & -3 & 2 & -4 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -5 \\ 6 \\ -1 \\ 8 \end{bmatrix}.$$

Seção 2.4

Resolver os sistemas a seguir pelo método da decomposição LU, com a estratégia indicada, e verificar a unicidade e exatidão da solução.

2.16. Efetuar os cálculos utilizando apenas 4 decimais

$$\begin{bmatrix} 2 & 6 & -3 \\ 1 & 3{,}001 & 2 \\ 4 & -1 & 9 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 9 \\ 29 \end{bmatrix}.$$

a) Sem pivotação.
b) Com pivotação parcial.

2.17. Com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -5 & -1 & 4 \\ 2 & 4 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17 \\ -2 \\ 24 \end{bmatrix}.$$

2.18. Com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & 3 & 8 \\ 1 & 6 & 2 & -3 \\ 5 & 5 & 1 & 0 \\ 2 & 4 & -2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 43 \\ 7 \\ 18 \\ 8 \end{bmatrix}.$$

2.19. Com pivotação parcial

$$\begin{bmatrix} 1 & -4 & -1 \\ -2 & 9 & 3 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

2.20. Implementar, em uma linguagem de programação, os algoritmos de decomposição LU e de substituições sucessivas pivotal apresentados nas Figuras 2.5 e 2.6.

Seção 2.5

Calcular a solução dos sistemas a seguir utilizando a decomposição de Cholesky e verificar a exatidão e unicidade da solução.

2.21.
$$\begin{bmatrix} 9 & -6 & 3 \\ -6 & 29 & -7 \\ 3 & -7 & 18 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ -8 \\ 33 \end{bmatrix}.$$

2.22.
$$\begin{bmatrix} 4 & -2 & 4 & 10 \\ -2 & 2 & -1 & -7 \\ 4 & -1 & 14 & 11 \\ 10 & -7 & 11 & 31 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ -1 \\ -2 \end{bmatrix}.$$

2.23.
$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -3 & 0 & 3 \\ 2 & 5 & -1 & 1 & 4 \\ -3 & -1 & 50 & 1 & -19 \\ 0 & 1 & 1 & 6 & 0 \\ 3 & 4 & -19 & 0 & 39 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17 \\ 41 \\ -45 \\ 30 \\ 51 \end{bmatrix}.$$

2.24. Implementar o algoritmo de decomposição de Cholesky, mostrado na Figura 2.7, em qualquer linguagem de programação.

2.25. Implementar o algoritmo de decomposição LDL^T, apresentado na Figura 2.8, utilizando qualquer linguagem de programação.

Seção 2.7

2.26. Formular um esquema para refinar a solução de um sistema linear quando a matriz dos coeficientes for simétrica usando a decomposição de Cholesky.

2.27. Mostrar como calcular a inversa de uma matriz não simétrica utilizando a decomposição LU com pivotação parcial.

2.28. Seja o sistema

$$\begin{bmatrix} 5 & -2 & 3 \\ -2 & 10 & 4 \\ 3 & 4 & 20 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 31 \\ -10 \\ 81 \end{bmatrix}.$$

Considerando que o fator L de Cholesky seja

$$\begin{bmatrix} 2{,}24 & 0 & 0 \\ -0{,}89 & 3{,}03 & 0 \\ 1{,}34 & 1{,}71 & 3{,}91 \end{bmatrix},$$

calcular e refinar o vetor solução até que a condição $\|c\|_\infty < 10^{-3}$ seja satisfeita.

2.29. Calcular a inversa da matriz A pela decomposição LU com pivotação parcial, sendo

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 6 & 4 \\ 2 & -3 & 1 \\ 5 & 5 & 8 \end{bmatrix}.$$

2.30. Mostrar como fazer o refinamento da inversa quando a matriz for simétrica e quando ela for não simétrica.

Seção 2.8

2.31. Resolver o sistema dado a seguir pelos métodos iterativos de Jacobi e de Gauss-Seidel com $\frac{\|x^k - x^{k-1}\|_\infty}{\|x^k\|_\infty} < 10^{-3}$ ou $k_{\max} = 10$

$$\begin{bmatrix} 10 & 2 & -3 & 5 \\ 1 & 8 & -1 & 2 \\ 2 & -1 & -5 & 1 \\ -1 & 2 & 3 & 20 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 48 \\ 4 \\ -11 \\ 150 \end{bmatrix}.$$

2.32. Seja o sistema linear com a matriz dos coeficientes proposta por Collatz [9]

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 6 \\ 9 \end{bmatrix}.$$

Verificar a convergência dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel e justificar os resultados.

2.33. Seja o sistema linear com a matriz dos coeficientes também proposta por Collatz

$$\begin{bmatrix} 1 & -0{,}5 & 0{,}5 \\ 1 & 1 & 1 \\ -0{,}5 & -0{,}5 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 12 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Verificar a convergência dos métodos de Jacobi e Gauss-Seidel e justificar os resultados.

2.34. Implementar o algoritmo do método de Jacobi mostrado na Figura 2.9 em qualquer linguagem de programação.

2.35. Implementar, em qualquer linguagem de programação, o algoritmo do método de Gauss-Seidel apresentado na Figura 2.10.

Seção 2.9

2.36. Calcular $\kappa_1(H_2)$, $\kappa_2(H_2)$ e $\kappa_\infty(H_2)$ utilizando (2.42).

2.37. Implementar o algoritmo da Figura 2.13 em qualquer linguagem de programação.

2.38. Calcular H_4 e H_4^{-1} usando o algoritmo implementado no Exercício 2.37.

2.39. Mostrar que $H_4H_4^{-1} = I_4$.

2.40. Calcular $\|H_4\|_\infty$, $\|H_4^{-1}\|_\infty$ e $\kappa_\infty(H_4)$ e comparar os resultados com aqueles apresentados na Tabela 2.10.

Gerais

2.41. Calcular o determinante da matriz de Vandermonde de ordem 3

$$M = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 \\ 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \end{bmatrix}.$$

2.42. Mostrar que $\|A\|_2 = \max\left(\sqrt{\lambda(A^TA)}\right)$ para a matriz do Exemplo 2.18.

2.43. Sejam uma matriz A de ordem n, um vetor arbitrário y^0 de tamanho n e os vetores $y^k = Ay^{k-1}$, $k = 1, 2, 3, \ldots, n$. O método de Krylov [10] consiste em calcular os coeficientes d_i, $i = n-1, n-2, \ldots, 0$ do polinômio característico $D(\lambda) = \lambda^n + d_{n-1}\lambda^{n-1} + d_{n-2}\lambda^{n-2} + \cdots + d_1\lambda + d_0$ pela solução do sistema linear $Kd = -y^n$, sendo $K = [y^{n-1}\ y^{n-2} \ldots y^0]$. Se a matriz K for singular, deve-se trocar o vetor arbitrário inicial y^0. Determinar o polinômio característico das matrizes abaixo pelo método de Krylov

a) $A = \begin{bmatrix} 7 & 14 & -2 \\ -3 & -10 & 2 \\ -12 & -28 & 5 \end{bmatrix}$ (ver Exemplo 2.42),

b) $B = \begin{bmatrix} 5 & -1 & 3 \\ -1 & 4 & 2 \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix}$.

2.44. Fazer um algoritmo para calcular os coeficentes do polinômio característico de uma matriz pelo método de Krylov.

2.45. Seja a matriz esparsa tridiagonal (todos os elementos fora da faixa compreendendo as três diagonais são nulos)

$$\begin{bmatrix} 4 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 10 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 20 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 12 & 34 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -5 & 2 \end{bmatrix}.$$

Fazer a decomposição de Cholesky e verificar que o fator L mantém o padrão de esparsidade de A.

2.46. Resolver os Exercícios 2.21–2.23 utilizando o algoritmo da decomposição de Cholesky implementado no Exercício 2.24.

2.47. Resolver os Exercícios 2.21–2.23 utilizando o algoritmo da fatoração LDL^T implementado no Exercício 2.25.

2.48. Implementar em qualquer linguagem de programação o algoritmo do método SOR mostrado na Figura 2.11.

2.49. Resolver o sistema do Exercício 2.31 usando a implementação do algoritmo SOR, com diversos valores do parâmetro ω.

2.50. Equilibrar as reações químicas

a) $Au + HCl + HNO_3 \longrightarrow HAuCl_4 + H_2O + NO$

b) $K_2Cr_2O_7 + FeSO_4 + HCl \longrightarrow KCl + CrCl_3 + FeCl_3 + Fe_2(SO_4)_3 + H_2O$.

Capítulo 3

Interpolação polinomial

A necessidade de obter um valor intermediário que não consta de uma tabela ocorre comumente. Dados experimentais, tabelas estatísticas e de funções complexas são exemplos desta situação. Neste capítulo, serão apresentados alguns métodos numéricos para resolver este problema de grande utilidade prática.

O conceito de interpolação não é importante somente na obtenção de valores intermediários em tabelas. Ele é fundamental em outros tópicos abordados em **Algoritmos Numéricos**, como, por exemplo, integração numérica (Capítulo 5), cálculo de raízes de equações (Capítulo 6) e solução de equações diferenciais ordinárias (Capítulo 7).

3.1 Polinômios interpoladores

Seja a Tabela 3.1 a seguir

Tabela 3.1 Dados para interpolação.

x	0,1	0,6	0,8
y	1,221	3,320	4,953

O problema consiste em encontrar o valor correspondente de y para um dado x não pertencente à tabela. Um modo de resolver este problema é obter uma função que relaciona as variáveis x e y. Considerando que os polinômios são as funções mais simples e estudadas, então eles são os mais utilizados para determinar esta relação. Um polinômio construído com o intuito de aproximar uma função é denominado polinômio interpolador. Deste modo, para resolver o problema basta avaliar o polinômio obtido no ponto desejado.

Existem vários métodos para construir um polinômio interpolador a partir de um conjunto de pares (x, y). O esquema mais simples, em termos conceituais, envolve a solução de um sistema de equações lineares.