

Apostila de Métodos Numéricos

Creto A. Vidal¹

`mailto:cvidal@lia.ufc.br``cvidal@lia.ufc.br`

3 de julho de 2012
Versão 9.0

¹<http://www.dc.ufc.br>Departamento de Computação - UFC

Abstract

These class notes were organized as a supporting material for the courses of Numerical Methods I and II of Federal University of Ceará. They are based on the book, Numerical Methods in C by Shoichiro Nakamura.

Resumo

Estas notas de aula foram elaboradas para servir de apoio aos cursos de Métodos Numéricos I e II da Universidade Federal do Ceará. Elas são baseadas no livro, Applied Numerical Mehtods in C by Shoichiro Nakamura.

Sumário

1	Cálculo do Zeros de Funções Não-Lineares	4
1.1	Introducao	4
1.2	Metodo da Bissecão	4
1.3	Métodos da Posição Falsa e da Posição Falsa Modificado	8
1.3.1	Método da Posição Falsa	8
1.3.2	Método da Posição Falsa Modificado	9
1.4	Método de Newton	9
1.4.1	Características	9
1.4.2	Descrição do Método	10
1.5	Método da Secante	13
1.5.1	Características	13
1.5.2	Descrição	14
1.6	Método das Substituições Sucessivas (Iteração de Ponto Fixo)	14
1.6.1	Descrição	14
1.6.2	Características	15
1.6.3	Notas	15
1.6.4	Forma sistemática de encontrar $\overline{f'}(x)$	17
1.7	Método de Bairstow	18
1.7.1	Características do método	18
1.7.2	Descrição	19
1.7.3	Notas	21
2	Integração Numérica	22
2.1	Introdução	22
2.2	Regra do Trapézio	23
2.2.1	Erro da Regra do Trapézio	23
2.2.2	Múltiplos Intervalos	25
2.3	Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson	26
2.3.1	Erros das Regras de Simpson	27
2.4	Integração de Romberg	27
2.5	Fórmulas de Newton-Cotes	28
2.6	Quadraturas de Gauss	31
2.6.1	Quadraturas de Gauss-Legendre	31
2.6.2	Outras Quadraturas de Gauss	37
2.7	Roteiro da Aula	38
2.8	Integração de Funções com Limites Infinitos ou Singularidades (Integrais Impróprias)	40
2.8.1	Tipo 1	41

2.8.2	Tipo 2	42
2.9	Integração Numérica em um Domínio Bidimensional	44
2.10	Integração	46
3	Diferenciação Numérica	47
3.1	Expansão de Taylor	47
3.2	Diferenças Finitas	50
3.3	Método da Diferenciação dos Polinômios de Interpolação de Newton	52
3.4	Aproximação de Derivadas Parciais por Diferenças Finitas	54
3.4.1	Solução do Problema de Dirichlet	55
4	Solução de Sistemas de Equações Algébricas Lineares	57
4.1	Métodos de Eliminação de Gauss e Gauss-Jordan	57
4.2	Método de Eliminação de Gauss Padrão com Pivotação	57
4.3	Problemas não resolvíveis	59
4.4	Matrizes, Vetores e Inversão de Matrizes	60
4.4.1	Matriz Nula	61
4.4.2	Matriz Identidade	61
4.4.3	Matriz Transposta de A	61
4.4.4	Matriz Inversa	61
4.4.5	Matriz Ortogonal	61
4.4.6	Vetor Nulo	61
4.4.7	Vetor Unitário	61
4.4.8	Vetor Transposto	61
4.4.9	Inversão de uma Matriz	62
4.5	Decomposição LU	62
4.6	Cálculo de Determinante	63
4.6.1	Propriedades dos Determinantes	64
4.6.2	Cálculo Numérico do Determinante de $[A]_{n \times n}$	65
4.7	Problemas Mal Condicionados	66
4.8	Soluções de Sistemas de Equações com M equações e N incógnitas	67
5	Autovetores e Autovalores	70
5.1	Introdução	70
5.1.1	Propriedades dos Auto-Valores	71
5.2	Método de Interpolação	72
5.3	Método de Householder para Matrizes Simétricas	79
5.3.1	Autovalores de uma Matriz Tridiagonal	83
5.4	Método da Potência	85
5.4.1	Regular	85
5.4.2	Inverso	87
5.4.3	Deslocado (<i>Shifted</i>) ou <i>Wielandt</i>	88
5.5	Método da Iteração QR	88
5.5.1	Método de Jacobi	89
5.5.2	Método QR	91

6	Solução de Problemas de Valores Iniciais de Equações Diferenciais Ordinárias	93
6.1	Introdução	93
6.1.1	Problema da Queda Livre	93
6.1.2	Problema da Queda Livre com Resistência do Ar	94
6.1.3	Métodos Numéricos para Problemas de Valor-Inicial	98
6.2	Métodos de Euler	99
6.2.1	<i>Forward</i> Euler	99
6.2.2	<i>Backward</i> Euler	100
6.2.3	Método de Euler Modificado	100
6.3	Métodos de Runge-Kutta	101
6.3.1	Introdução	101
6.3.2	Runge-Kutta de Segunda Ordem	102
6.3.3	Runge-Kutta de Terceira Ordem	102
6.3.4	Runge-Kutta de Quarta Ordem	103
6.4	Métodos Preditores-Corretores	104
6.4.1	Introdução	104
6.4.2	Método Preditor-Corretor de Adams de Terceira Ordem	105
6.4.3	Método Preditor-Corretor de Adams de Quarta Ordem	107
6.4.4	Vantagens e Desvantagens	108
6.5	Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas	109
6.5.1	Métodos Implícitos	110
6.5.2	Método Exponencial	111
6.5.3	Método de Ajuste Exponencial	112
6.6	Condições de Contorno	113
7	Solução de Problemas de Valores de Contorno de Equações Diferenciais Ordinárias	115
7.1	Problemas de Valores de Contorno para Barras e Placas	115
7.2	Algoritmo de Solução para Sistemas Tridiagonais	116

Capítulo 1

Cálculo do Zeros de Funções Não-Lineares

1.1 Introdução

- Raiz de função não linear
 - encontrar x tal que $f(x) = 0$.
- Exemplos:
 - $3x^4 + 3x^3 - 16x^2 + 4x + 1 = 0$.
 - $\tan(x) = \tanh(x)$.
- Motivação para soluções numéricas:
 - poucas equações não-lineares apresentam soluções analíticas
- Métodos numéricos iterativos
- Todo método tem limitações

1.2 Metodo da Bissecão

- Características do método
 - necessita o intervalo que contém a raiz
 - não necessita continuidade da derivada de $f(x)$
 - aplica-se a qualquer tipo de equação, inclusive funções não analíticas
 - baseado no fato de que quando a raiz de $f(x)$ está em $[a, c]$ os sinais nas duas extremidades mudam: $f(a) \times f(c) \leq 0$ (ver figura 1.1).

$$\begin{aligned}\frac{c_0 - a_0}{2^{n+1}} &\leq \textit{tol} \\ \Rightarrow \frac{c_0 - a_0}{\textit{tol}} &\leq 2^{(n+1)} \\ \Rightarrow n + 1 &\geq \log_2 \left(\frac{c_0 - a_0}{\textit{tol}} \right) = \frac{\ln \left(\frac{c_0 - a_0}{\textit{tol}} \right)}{\ln(2)}\end{aligned}$$

Algoritmo 1 Método da Bisseção

htbp

Inicialização: $i = 0, a_0 = a, c_0 = c$

Iteração i:

1. tamanho do intervalo, $s_i = c_i - a_i = \frac{s_0^{(i)}}{2}$

2. Se $\frac{s_i}{2} \leq \text{tol}$

$$x_i = \frac{(a_i + c_i)}{2}$$

$$\text{err}_i = \frac{s_i}{2} = \frac{s_0^{(i+1)}}{2}$$

sai

Se $\frac{s_i}{2} > \text{tol}$, vá para 3.

3. Calcule

$$b_i = \frac{(a_i + c_i)}{2}$$

$$f(a_i) * f(b_i)$$

$$f(b_i) * f(c_i)$$

4. Se $f(a_i) * f(b_i) \leq 0$, (raiz em $[a_i, b_i]$)

faça $i = i + 1, c_i = b_{i-1}$, vá para 1.

Se $f(b_i) * f(c_i) \leq 0$, (raiz em $[b_i, c_i]$),

faça $i = i + 1, a_i = b_{i-1}$, vá para 1.

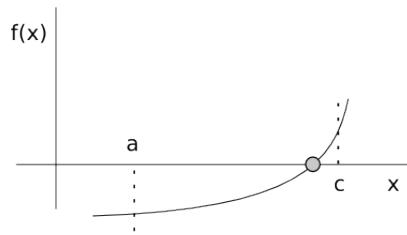


Figura 1.1: Função $f(x)$ com isolamento $[a,c]$.

$$\Rightarrow n \geq \ln \left(\frac{c_0 - a_0}{\ln(2)} - 1 \right)$$

Observações:

- após n iterações o tamanho do intervalo é $\frac{(c-a)_0}{2^n}$
- o erro máximo na n -ésima iteração é $\text{err}_n = \frac{s_n}{2} = \frac{s_0}{2^{(n+1)}}$
- Se tol é dada, o número de iterações necessárias é dado por

$$\frac{c_0 - a_0}{2^{(n+1)}} < \text{tol}$$

ou

$$n \geq \frac{\ln \left(\frac{c_0 - a_0}{\text{tol}} \right)}{\ln(2) - 1}$$

Exemplo 1.1

- $c_0 - a_0 = 1$ e $\text{tol} = 0.0001$
- $n \geq \frac{\ln \left(\frac{1}{0.0001} \right)}{\ln(2)} - 1 = 13.28 - 1 = 12.28$
- $n = 13$ (14ª iteração)

Exemplo 1.2

A raiz de $f(x) = e^x - x = 0$ está no intervalo $[0,2]$. Encontre uma aproximação da raiz dentro de uma tolerância de 0.01 pelo método da bisseção.

Solução:

1. Solução exata: $e^x - 2 = 0 \Rightarrow e^x = 2 \Rightarrow x = \ln 2 = 0.6931$
2. Solução pelo método da bisseção (ver tabela 1.1)

Notas:

1. O critério $f(a) * f(b) \leq 0$ é satisfeito sempre que o número de raízes no intervalo for ímpar. Assim o método encontra uma das raízes (ver figura 1.2).
2. O método da bisseção não pode encontrar um par de raízes duplas porque a função tangencia o eixo x (ver figura 1.3).

Iteração	a	b	c	f(a)	f(b)	f(c)	Erro máximo
0	0	1	2	-1	0.7182	5.3890	1
1	0	0.5	1	-1	-0.3512	0.7182	0.5
2	0.5	0.75	1	-0.3512	0.1170	0.7182	0.25
3	0.5	0.625	0.75	-0.3512	-0.1317	0.1170	0.125
4	0.625	0.6875	0.75	-0.1317	-0.0112	0.1170	0.0625
5	0.6875	0.7187	0.75	-0.0112	0.0518	0.1170	0.03125
6	0.6875	0.7031	0.7187	-0.0112	0.0200	0.0518	0.015625
7	0.6875	0.6953	0.7031	-0.0112	0.0043	0.0200	0.0078125

Tabela 1.1: A oitava aproximação da raiz é $x = 0.6953$ o máximo erro possível é $0.0078 < 0.01$.

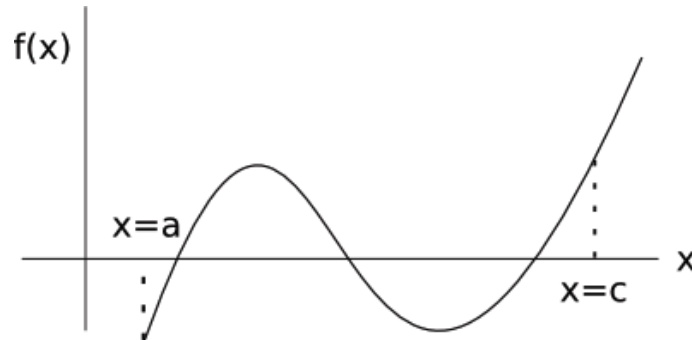


Figura 1.2: Função $f(x)$ com número de raízes ímpar.

3. O método pode confundir um ponto de singularidade com uma raiz. Para evitar que isso aconteça, verifique se $|f(c) - f(a)| = 0$ a medida que o processo avança (ver figura 1.4).
4. Quando não se tem informação prévia sobre valores aproximados das raízes, uma maneira fácil de encontrar intervalos contendo raízes é imprimir uma tabela da função para valores de x igualmente espaçados ou plotar a função utilizando computação gráfica.

Nota falada do professor:

- Antes de iniciar o método deve-se identificar por tabela ou gráfico os intervalos que contêm raízes.
- O método encontra a raiz de uma função se a raiz existir no intervalo dado.
- O método encontra a raiz de uma função mesmo quando a função não é analítica.

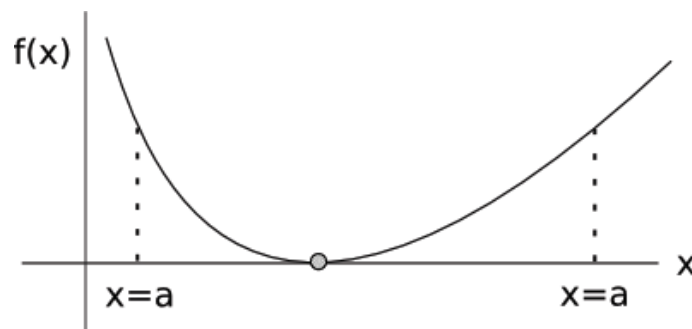


Figura 1.3: Função $f(x)$ com um par de raízes duplas.

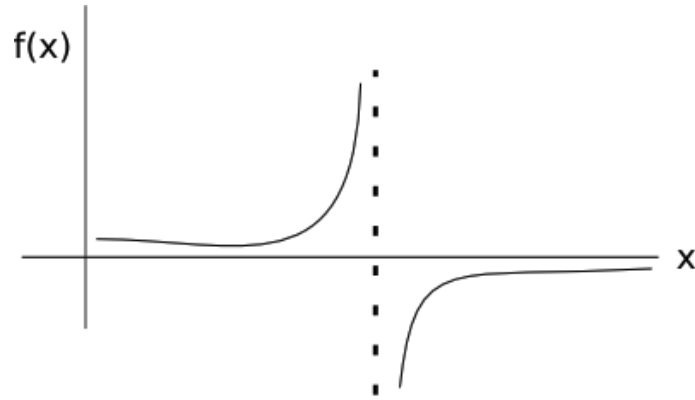


Figura 1.4: Função $f(x)$ onde pode haver confusão entre ponto de singularidade com uma raiz.

- O método não distingue entre uma raiz e um ponto de singularidade.

1.3 Métodos da Posição Falsa e da Posição Falsa Modificado

1.3.1 Método da Posição Falsa

1. Esse método difere do método da bisseção apenas na forma como o ponto b é calculado.

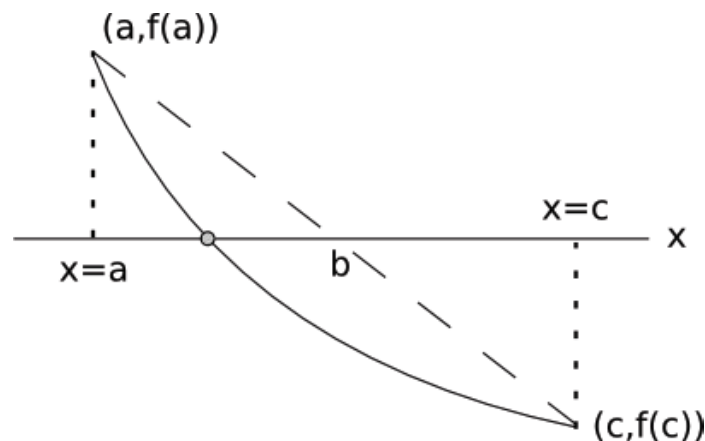


Figura 1.5: Método da Posição Falsa

$$y = f(a) + \frac{f(c) - f(a)}{c - a} * (x - a) \quad (1.1)$$

Para $y = 0$ na equação 1.1 temos:

$$b = a - \frac{c - a}{f(c) - f(a)} * f(a) = \frac{a * f(c) - c * f(a)}{f(c) - f(a)}$$

$$b = \frac{a * f(c) - c * f(a)}{f(c) - f(a)}$$

2. Quando estagnação de um ponto de extremidade ocorre, isto é, quando a sequência de aproximações b_1, b_2, b_3, \dots converge para b por um único lado, a convergência é prejudicada (ver figura 1.6).

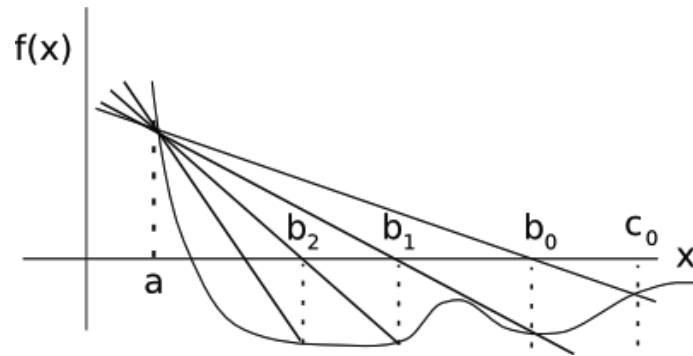


Figura 1.6: A sequência de aproximações converge para b por um único lado.

1.3.2 Método da Posição Falsa Modificado

Esse método elimina o problema de ponto estagnado. Cria-se um contador para verificar quantas vezes o ponto permaneceu um ponto de extremidade. Se o ponto permanecer ponto extremo por mais de duas vezes, divide-se o valor de f (estagnado) por dois.

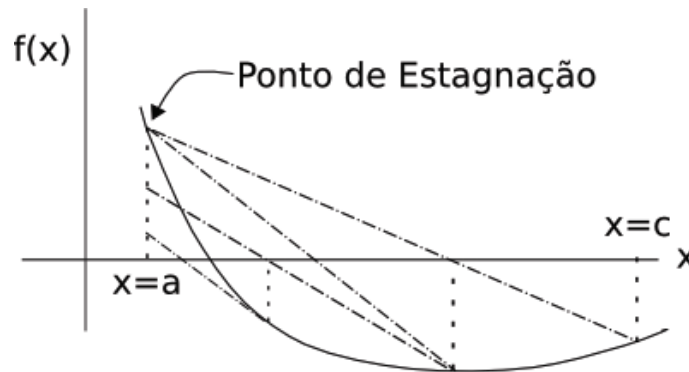


Figura 1.7: Eliminando o problema do ponto de estagnação.

Exemplo 1.3

Usando o método da posição falsa, encontre a menor raiz positiva de $f(x) = \tan(x) - x - 0.5 = 0$, com $\xi = 0.00001$. Sabendo-se que ela se encontra em $0.1 < x < 1.4$.

$$\xi_{MAX} = 0.97603 - 0.97502 = 0.00101$$

$$\xi = 0.97502 - 0.97501 = 0.00001$$

1.4 Método de Newton

1.4.1 Características

- Necessita uma aproximação inicial da raiz desejada.

Iteração	a	b	c	f(a)	f(b)	f(c)
0	0.01	0.24771	1.4	-0.49967	-0.49481	3.8979
1	0.24771	0.48102	1.4	-0.49481	-0.45911	1.9489
2	0.48102	0.77533	1.4	-0.45911	-0.29527	0.97447
3	0.77533	1.0110	1.4	-0.29527	0.084850	0.48724
4	0.77533	0.95842	1.0110	-0.29527	-0.034845	0.084850
5	0.95842	0.97374	1.0110	-0.034845	-0.0027664	0.084850
6	0.97374	0.97603	1.0110	-0.0027664	0.0021981	0.042425
7	0.97374	0.97501	0.97603	-0.0027664	-0.0000061	0.0021981
8	0.97501	0.97502	0.97603	-0.0000061	0.0000000	0.0021981

Tabela 1.2: Exemplo de iterações do método da posição falsa modificado.

- Usa a reta tangente calculada analiticamente.
- Pode ser aplicado para o cálculo de raízes complexas.
- Derivado a partir da expansão de Taylor.

1.4.2 Descrição do Método

$$f(x) = 0 = f(x_0 + f'(x_0) * (x - x_0)) + O(h^2) \quad (1.2)$$

$$\left(\frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} * h^n \right)$$

onde $h = x - x_0$.

Desprezando $O(h^2)$ e resolvendo 1.2, temos:

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad (1.3)$$

Devido ao erro de truncamento, x encontrado em 1.3 não é a solução de 1.2, mas é uma melhor aproximação do que x_0 .

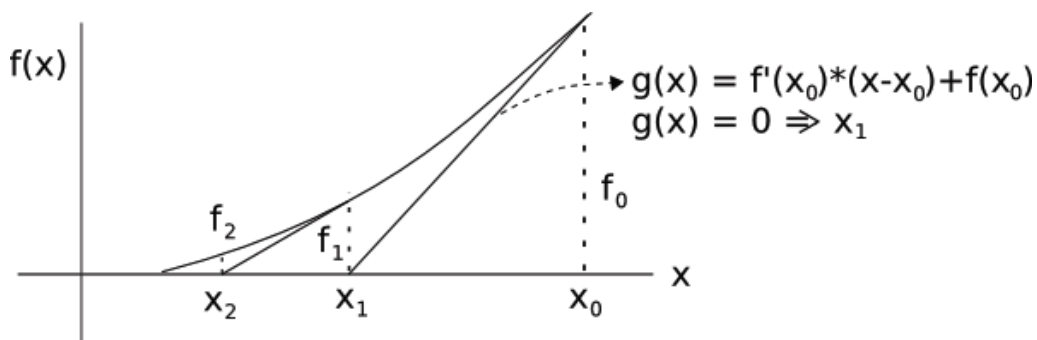


Figura 1.8: Ilustração para o método de Newton.

$$x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}$$

Notas:

i). O cálculo de $f'(x)$ pode ser difícil ou impossível. Nesses casos utiliza-se aproximação por diferenças finitas:

- *Forward* $\rightarrow f'(x_{i-1}) \approx \frac{f(x_{i-1} + h) - f(x_{i-1})}{h}$ onde h é um valor pequeno.
- *Backward* $\rightarrow f'(x_{i-1}) \approx \frac{f(x_{i-1}) - f(x_{i-1} - h)}{h}$

- ii). Pequenos erros no cálculo de $f'(x_{i-1})$ não afetam muito a taxa de convergência.
- iii). Se $f(x)$ não tem ponto de singularidade na vizinhança da raiz, as duas aproximações por diferenças finitas funcionam bem.
- iv). Este método é de primeira ordem porque utiliza a primeira derivada.
- v). Métodos de segunda ordem teriam uma convergência mais rápida, mas o cálculo de derivada segunda, geralmente, elimina a vantagem sobre o método de primeira ordem.

Exemplo 1.4

Derive um esquema iterativo baseado no método de Newton para encontrar a raiz cúbica de um número. Encontre a raiz de 155.

Solução:

$$\sqrt[3]{a} = x \Rightarrow x^3 = a \Rightarrow f(x) = x^3 - a$$

Aplique o método de Newton

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = x_n - \frac{x_n^3 - a}{3 * x_n^2}$$

$$x_{n+1} = \frac{2}{3} * x_n + \frac{a}{3 * x_n^2}$$

Cálculo de $\sqrt[3]{155} \Rightarrow a = 155$.

i). Estimativa inicial $x_0 = 5$:

n	x	$ x_{n+1} - x_n $
0	5	-
1	5.4	0.4
2	5.371834	0.028
3	<u>5.371685</u>	0.00014

Tabela 1.3: Exemplo de iterações do método de Newton para $x_0 = 5$.

ii). Estimativa inicial $x_0 = 10$:

n	x	$ x_{n+1} - x_n $
0	10	-
1	7.183334	2.816666
2	5.790176	1.393158
3	5.401203	0.388973
4	5.371847	0.029383
5	<u>5.371686</u>	0.000161

Tabela 1.4: Exemplo de iterações do método de Newton para $x_0 = 10$.

Exemplo 1.5

Encontre a primeira raiz positiva de $y = \tan(x) - 0.5 * x$ pelo método de Newton.

Solução:

$$y' = \frac{1}{\cos^2(x)} - 0.5 = \tan^2(x) + 0.5$$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{\tan(x_n) - 0.5 * x_n}{\tan^2(x_n) + 0.5}$$

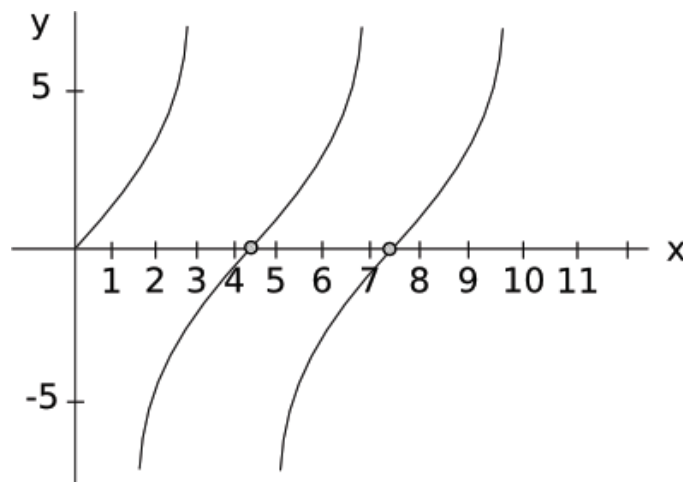


Figura 1.9: Ilustração para o método de Newton.

i). $\xi = 0.0001$

ii). $x_0 = 4$

iii). $\xi = 0.0001$

$x_0 = 3.6$

OBS:

- O método necessita de uma boa estimativa inicial, caso contrário a solução iterativa pode divergir ou convergir para uma solução iterativa irrelevante.

n	x	$ x_{n+1} - x_n $
0	4	-
1	4.458280	0.458280
2	4.352068	0.106212
3	4.288511	0.033557
4	4.275191	0.013320
5	4.274782	0.000409
6	<u>4.244782</u>	0.000000

Tabela 1.5: Iterações do método de Newton para $x_0 = 4$.

n	x	$ x_{n+1} - x_n $
0	3.6	-
1	5.358891	1.758891
2	7.131396	1.772505
3	8.494651	1.363255
4	10.92057	2.425919
5	10.87581	0.04476
6	10.83419	0.04162
7	10.81511	0.01908
8	10.81269	0.00242
9	<u>10.81267</u>	0.00002

Tabela 1.6: Iterações do método de Newton para $x_0 = 3.6$.

- A taxa de convergência elevada à medida que se aproxima da solução iterativa.

Suponha que x seja a solução.

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i) * \xi_i + \frac{1}{2} * f''(x_i) * \xi_i^2 + \dots = 0$$

$$f'(x_i) = -f'(x_i) * \xi_i - \frac{1}{2} * f''(x_i) * \xi_i^2$$

$$\text{Método de Newton} \Rightarrow x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

$$x - x_{i+1} = x - x_i + \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \xi_{i+1} = \xi_i - \frac{f'(x_i) * \xi_i}{f'(x_i)} - \frac{f''(x_i) * \xi_i^2}{2 * f'(x_i)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \xi_{i+1} = -\frac{f''(x_i)}{2 * f'(x_i)} * \xi_i^2$$

$$\xi_{i+1} = -\xi_i^2 * \frac{f''(x)}{2 * f'(x)}$$

1.5 Método da Secante

1.5.1 Características

- Necessita de duas aproximações iniciais da raiz desejada

- Usa a reta secante passando por dois valores de f consecutivos no processo iterativo.

1.5.2 Descrição

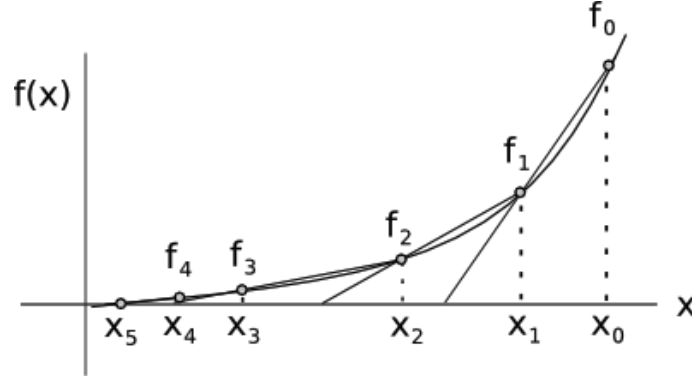


Figura 1.10: Descrição do método da secante.

Considerando-se $h = x_{n-1} - x_{n-2}$ e utilizando-se *backward* diferença finita para calcular $f'(x_{n-1})$ temos:

$$f'(x_{n-1}) = \frac{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}{x_{n-1} - x_{n-2}}$$

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})} \approx x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{\frac{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}{x_{n-1} - x_{n-2}}}$$

$$x_n = x_{n-1} - \frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{f_{n-1} - f_{n-2}} * f_{n-1}$$

$$n = 2, 3, \dots$$

1.6 Método das Substituições Sucessivas (Iteração de Ponto Fixo)

1.6.1 Descrição

Dado $f(x) \Rightarrow f(x) = 0$ rearranja-se $f(x) = 0$ na forma:

$$x = \bar{f}(x)$$

Assim, pode-se escrever um método iterativo como:

$$x_i = \bar{f}(x_{i-1})$$

1.6.2 Características

- Necessita de uma estimativa inicial.
- Tem a vantagem de ser simples.
- Flexibilidade na escolha de \bar{f} .
- Para garantir convergência $\bar{f}'(x) < 1$ deve ser satisfeita na vizinhança da raiz.
 - $0 < \bar{f}' < 1 \Rightarrow$ convergência assintótica.
 - $-1 < \bar{f}' < 0 \Rightarrow$ convergência oscilatória.

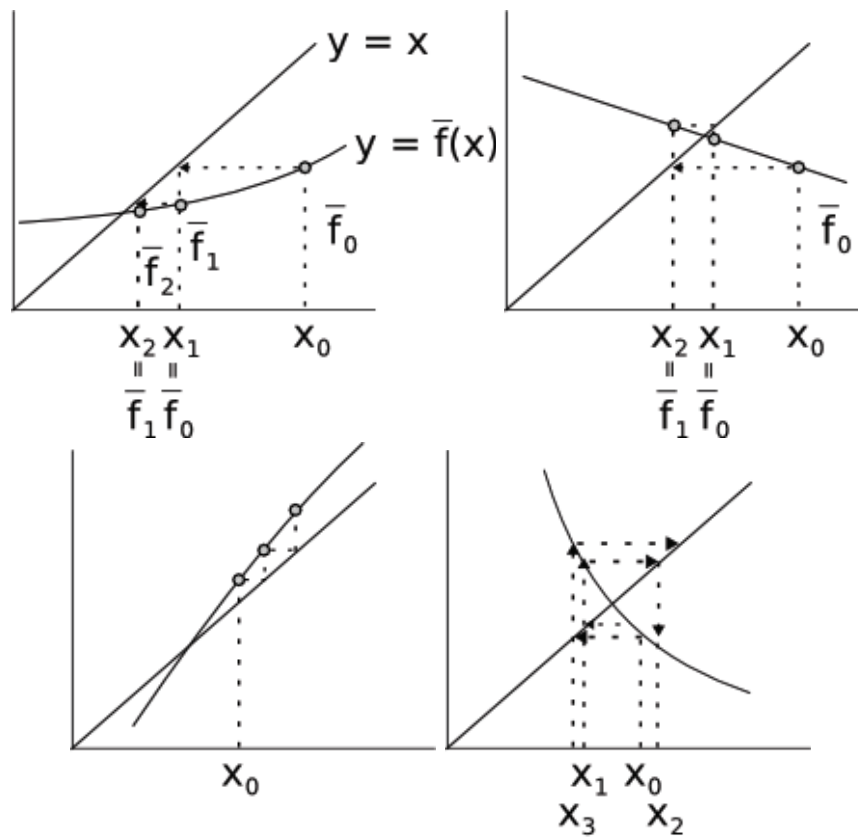


Figura 1.11: Descrição do método das substituições sucessivas.

1.6.3 Notas

- Se x_{n-2} e x_{n-1} se tornarem muito próximos, y_{n-2} e y_{n-1} também se tornam próximos e erro de arredondamento significativo ocorre na divisão $\frac{x_{n-1} - x_{n-2}}{f_{n-1} - f_{n-2}}$. Para evitar isso:
 - Quando $|f_n| < \Delta$:
 - congela-se x_{n-2} e y_{n-2}

- (b) ou x_{n-2} e f_{n-2} são trocados por $x_{n-2} + \xi$ e $f(x_{n-2} + \xi)$ onde ξ é pequeno mas suficientemente grande para evitar erro de arredondamento.
- ii). O método pode divergir ou convergir para uma solução irrelevante se as aproximações iniciais não forem boas.
- iii). O método é uma variação, computacionalmente mais eficiente, do método de Newton.

Exemplo 1.6

$f(x) = x^2 - 3 * x + e^x - 2$ tem duas raízes, uma negativa e outra positiva. Encontre a menor raiz pelo método das substituições sucessivas.

Solução:

1. Tente determinar um intervalo que contém a raiz:

- Para $x = 0 \Rightarrow f(0) = -1$.
- Para $x = -1 \Rightarrow f(-1) = 2.367$.
- Se $f(x)$ for contínua nesse intervalo a curva cortará o eixo dos x .

2. Reescreva $f(x) = 0$ na forma $x = \bar{f}(x)$:

$$x^2 - 3 * x + e^x - 2 = 0 \Rightarrow x = \frac{x^2 + e^x - 2}{3}$$

3. Método iterativo:

$$x_i = \frac{x_{i-1}^2 + e^{x_{i-1}} - 2}{3}$$

$$\text{onde } \bar{f}(x) = \frac{x^2 + e^x - 2}{3}$$

4. Verifique condição de convergência $|\bar{f}'(x)| < 1$

$$\bar{f}'(x) = \frac{1}{3} * (2 * x + e^x)$$

$$-1 < \frac{1}{3} * (2 * x + e^x) < 1$$

$$\Rightarrow -3 < \frac{1}{3} * (2 * x + e^x) < 3$$

$$\forall x \in [-1, 0] \Rightarrow -1.63 \leq 2 * x + e^x \leq 1$$

Conclusão: O critério é convergente no intervalo.

n	x_n
0	0
1	-0.333333
2	-0.390786
3	-0.390254
4	-0.390272
5	-0.390272

Tabela 1.7: Exemplo de iterações do Método das Substituições Sucessivas.

5. Aplique o método iterativo com $x_0 = 0$.

Resposta: Solução de $f(x) = 0$

$x = -0.390272$ (ver tabela 1.7)

Outras opções para $\overline{f'}(x)$:

$$x = -\sqrt{3 * x - e^x + 2}$$

e

$$x = \sqrt{3 * x - e^x + 2}$$

$$\overline{f'}(x) = \pm \frac{1}{2} * \frac{3 - e^x}{\sqrt{3 * x - e^x + 2}}$$

$$\text{Para } x = 0 \Rightarrow \overline{f'}(0) = \pm \frac{1}{2} * \frac{3-1}{\sqrt{1}} = \pm 1$$

$$x = -1 \Rightarrow \overline{f'}(-1) = \pm \frac{1}{2} * \frac{1}{2} * \frac{3 - e^{-1}}{\sqrt{-3 - e^{-1} + 2}} = \pm \frac{1.32}{\sqrt{-1.37}}$$

Critério de convergência não é satisfeito.

$\overline{f'}(x)$ é singular na vizinhança da raiz.

1.6.4 Forma sistemática de encontrar $\overline{f'}(x)$

$$\tilde{f}(x) = x - \alpha f(x) \Rightarrow \tilde{f}(x) = 1 - \alpha f'(x)$$

Assim, o esquema iterativo pode ser escrito como

$$\boxed{x_n = x_{n-1} - \alpha f(x_{n-1})} \quad (*)$$

onde $\alpha = \text{constante}$.

OBS: Se o esquema converge, x satisfaz $f(0) = 0$.

Critério de convergência:

$$-1 < 1 - \alpha f'(x) < 1$$

ou

$$\boxed{0 < \alpha f'(x) < 2} \quad (**)$$

- α deve ter o mesmo sinal de $f'(x)$
- para $\alpha \approx 0 \Rightarrow (*)$ sempre converge
- se $\alpha \approx \frac{1}{f'(x)} * \underbrace{h}_{\text{para cada iteração}}$, a convergência é ótima e o método se reduz ao método de Newton.

Exemplo 1.7

Seja $f(x) = \tan(0.1x) - 9.2e^{-x}$. Determine a menor raiz positiva sabendo-se que ela se encontra em $[3, 4]$

Solução:

- Aproximação de f' no intervalo $[3, 4]$:
$$f' = \frac{f(4) - f(3)}{4 - 3} = 0.40$$

$$= 0.40299$$
- $\alpha \approx \frac{1}{f'} = \frac{1}{0.40299} = 2.4814$
- $x_n = x_{n-1} - 2.4814 [\tan(0.1x) - 9.2e^{-x}]$

n	x_n
0	4
1	3.36899
2	3.28574
3	3.29384
4	3.28280
5	3.29293
6	3.29292
7	3.29292

Tabela 1.8: Exemplo de Forma sistemática de encontrar $\overline{f'}(x)$.

$$x = 3.29292$$

Nota: O método de Newton e o método da Secante são casos particulares do método das substituições sucessivas.

1.7 Método de Bairstow

1.7.1 Características do método

- É um método especializado para determinação das raízes de um polinômio.
- O método apresenta problemas de precisão e não funciona sempre.
- É um método iterativo para o cálculo de um fator quadrático $P(x) = (x^2 + px + q)G(x) + \underbrace{R(x)}_0$, p e q devem ser escolhidos para que o resto seja 0.
- Aplicando-se o método repetidamente o polinômio original é ?deplacionado?.

1.7.2 Descrição

Qualquer polinômio

$$P(x) = a_0 + a_1 x_0 + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n \quad (1.4)$$

Pode ser escrito na forma:

$$P(x) = (x^2 + p x + q) G(x) + R(x) \quad (1.5)$$

onde:

- p e q são arbitrários
- $G(x)$ é de ordem $n - 2$
- $R(x)$ é o resto (polinômio de ordem 1)

Se p e q são encontrados da forma que $R(x) = 0$, então $(x^2 + p x + q)$ é um fator quadrático cujas raízes são x_1, x_2 da solução de $\left. \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \end{matrix} \right\} = \frac{-p \pm \sqrt{p^2 \pm 4q}}{2}$.

$$G(x) = b_2 + b_3 x + b_4 x^2 + \dots + b_{n-1} x^{n-3} + b_n x^{n-2} \quad (1.6)$$

$$R(x) = b_0 + b_1 x \quad (1.7)$$

Como b_0 e b_1 dependem de p e q , podemos escrever:

$$\begin{aligned} b_0 &= b_0(p, q) \\ b_1 &= b_1(p, q) \end{aligned} \quad (1.8)$$

Problema: encontrar $p = \bar{p}$ e $q = \bar{q}$ tal que $R(x) = 0$. $R(x)$ só pode ser nulo se:

$$\left. \begin{aligned} b_0(p, q) &= 0 \\ b_1(p, q) &= 0 \end{aligned} \right\} \text{ Sistema de Equações}$$

Resolução do sistema:

$$\begin{cases} b_0(p, q) = 0 \\ b_1(p, q) = 0 \end{cases}$$

Pelo o método de Newton.

Solução:

Suponha que (p, q) seja uma aproximação da solução (\bar{p}, \bar{q}) . A expansão de primeira ordem em série de Taylor

$$\begin{cases} b_0(\bar{p}, \bar{q}) \approx b_0(p, q) + \frac{\partial b_0}{\partial p} \Delta p + \frac{\partial b_0}{\partial q} \Delta q = 0 \\ b_1(\bar{p}, \bar{q}) \approx b_1(p, q) + \frac{\partial b_1}{\partial p} \Delta p + \frac{\partial b_1}{\partial q} \Delta q = 0 \end{cases}$$

$$\Delta p = \bar{p} - p \quad \text{e} \quad \Delta q = \bar{q} - q$$

Assim,

$$\begin{cases} \frac{\partial b_0}{\partial p} \Delta p + \frac{\partial b_0}{\partial q} \Delta q = -b_0(p, q) \\ \frac{\partial b_1}{\partial p} \Delta p + \frac{\partial b_1}{\partial q} \Delta q = -b_1(p, q) \end{cases} \quad (1.9)$$

Derivação de uma forma explícita para o sistema

Eq. 1.6 e 1.7 \Rightarrow 1.5

$$\begin{array}{r} b_2 x^2 + b_3 x^3 + \dots + b_{n-1} x^{n-1} + b_n x^n \\ p b_2 x + p b_3 x^2 + p b_4 x^3 + \dots + p b_n x^{n-1} \\ q b_2 + q b_3 x + q b_4 x^2 + q b_5 x^3 + \dots + q b_n x^{n-2} + \\ b_0 + b_1 x \\ \hline (b_0 + q b_2) + (q b_3 + p b_2 + b_1) x + (b_2 + p b_3 + q b_4) x^2 + \dots + (b_{n-2} + p b_{n-1} + q b_n) x^{n-2} + \\ (b_{n-1} + p b_n) x^{n-1} + b_n x^n = P(x) \end{array} \quad (1.10)$$

Comparando-se 1.10 com 1.4:

$$\begin{cases} b_n = a_n \\ b_{n-1} = a_{n-1} - p b_n \\ b_{n-2} = a_{n-2} - p b_{n-1} - q b_n \\ b_{n-3} = a_{n-3} - p b_{n-2} - q b_{n-1} \\ \vdots \\ b_2 = a_2 - p b_3 - q b_4 \\ b_1 = a_1 - p b_2 - q b_3 \end{cases} \quad (1.11)$$

Derivando 1.11 com relação a p temos

$$\begin{cases} (b_n)_p = 0 \\ (b_{n-1})_p = -b_n - p(b_n)_p \\ (b_{n-2})_p = -b_{n-1} - p(b_{n-1})_p - q(b_n)_p \\ (b_{n-3})_p = -b_{n-2} - p(b_{n-2})_p - q(b_{n-1})_p \\ \vdots \\ (b_2)_p = -b_3 - p(b_3)_p - q(b_4)_p \\ (b_1)_p = -b_2 - p(b_2)_p - q(b_3)_p \\ (b_0)_p = -q(b_2)_p \end{cases} \quad (1.12)$$

Derivando 1.11 com relação a q temos:

$$\begin{cases} (b_n)_q = 0 \\ (b_{n-1})_q = 0 \\ (b_{n-2})_q = -b_n \\ (b_{n-3})_q = -p(b_{n-2})_q - b_{n-1} - q(b_{n-1})_q \\ \vdots \\ (b_2)_q = -p(b_3)_q - b_4 - q(b_4)_q \\ (b_1)_q = -p(b_2)_q - b_3 - q(b_3)_q \\ (b_0)_q = -b_2 - q(b_2)_q \end{cases} \quad (1.13)$$

Implementação:

1. Com estimativas iniciais de p e q , calcule b_0 e b_1 utilizando equação 1.11
2. Calcule $(b_0)_p$, $(b_1)_p$, $(b_0)_q$ e $(b_1)_q$ pelas equações 1.12 e 1.13. OBS: Todas as equações em 1 e 2 são calculadas recursivamente.
3. Resolva o sistema 1.9 para $\Delta p - \Delta q$.
4. Obtenha \bar{p} e \bar{q}
$$\bar{p} = p + \Delta p$$
$$\bar{q} = q + \Delta q$$

O procedimento de 1 a 4 é iterativo com novas estimativas de \bar{p} e \bar{q} a cada iteração.

1.7.3 Notas

- Com a aplicação repetida do método, o erro no cálculo dos polinômios "defacionados" e dos fatores quadráticos.
- A precisão das raízes pode ser pobre, assim a precisão deve ser melhorada por outro método.
- A iteração pode não convergir em ?

Capítulo 2

Integração Numérica

2.1 Introdução

A integral definida pode ser interpretada como a área da região limitada pelo gráfico de uma função e o plano de referência (ou eixo) das variáveis livres. Essa área tem sinal positivo se estiver acima do plano de referência, e, sinal negativo se estiver abaixo do plano de referência.

No caso de uma função de uma única variável, a integral definida no intervalo $[a, b]$ é representada por

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (2.1)$$

e indicada como a área entre o gráfico da função, $f(x)$, o eixo dos x e as retas $x = a$ e $x = b$ (Figura 6.1).

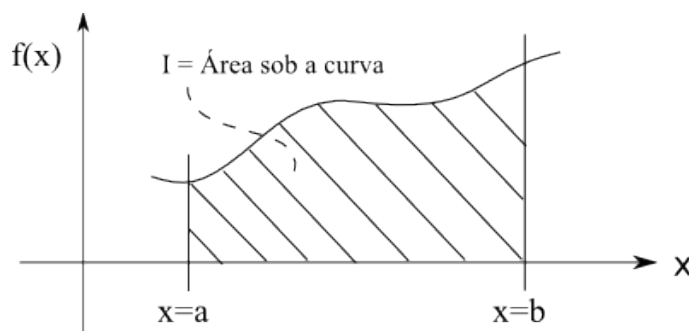


Figura 2.1: Área sob a curva representando a integral

No caso de uma função de duas variáveis, a integral definida em uma região do plano é representada por

$$I = \int_a^b \int_{u(x)}^{v(x)} f(x, y) dy dx \quad (2.2)$$

e indicada como o volume entre o gráfico da função, $f(x, y)$, o plano xy , os planos $x = a$ e $x = b$ e as superfícies $y = u(x)$ e $y = v(x)$ (Figura 6.2).

A integração numérica pode ser usada tanto para integrar funções analíticas, quanto para integrar funções apresentadas em forma tabular, quando se deseja o valor numérico da integral.

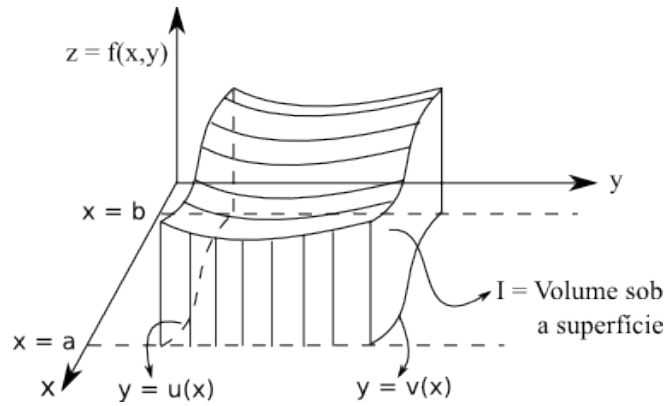


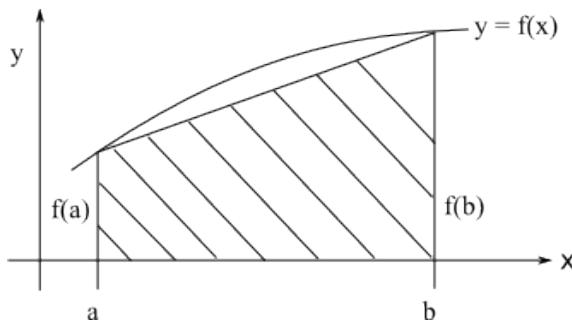
Figura 2.2: Volume sob a superfície representando a integral

Filosofia geral dos métodos de integração A filosofia geral dos métodos de integração é substituir o integrando por uma função polinomial que aproxime o gráfico da função a ser integrada. Essa idéia está representada na equação 2.3

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b g(x) dx \quad (2.3)$$

onde $g(x)$ é o polinômio de substituição de grau adequadamente escolhido.

2.2 Regra do Trapézio



$$I = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] + E \quad (2.4)$$

onde E = erro .

Figura 2.3: Área sob a curva representando a integral

2.2.1 Erro da Regra do Trapézio

$$E = \int_a^b f(x) dx - \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$$

Expansão de Taylor de $f(x)$ na vizinhança de $\bar{x} = \frac{a+b}{2}$

$$f(x) = f(\bar{x}) + \frac{f'(\bar{x})}{1!} (x - \bar{x}) + \frac{f''(\bar{x})}{2!} (x - \bar{x})^2 + \dots$$

Assim,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x) dx &= f(\bar{x}) \left[x \right]_a^b + f'(\bar{x}) \left\{ \frac{x^2}{2} \right|_a^b - \bar{x} \left[x \right]_a^b \right\} + \frac{f''(\bar{x})}{2} \left\{ \frac{x^3}{3} \right|_a^b - \bar{x} \left[x^2 \right]_a^b + \bar{x}^2 \left[x \right]_a^b \right\} \\
&= f(\bar{x}) (b-a) + f'(\bar{x}) \left\{ \frac{(b-a)}{1} \underbrace{\frac{(b+a)}{2}}_{\bar{x}} - \bar{x} (b-a) \right\} + \\
&\quad + \frac{f''(\bar{x})}{2} \left\{ \frac{b^3 - a^3}{3} - \bar{x} (b^2 - a^2) + \bar{x}^2 (b-a) \right\} \\
&= f(\bar{x}) (b-a) + \frac{1}{24} f''(\bar{x}) (b-a)^3 + \dots
\end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned}
\frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)] &= \frac{b-a}{2} \left\{ f(\bar{x}) + f'(\bar{x}) \left[\underbrace{a - \frac{a+b}{2}}_{-\frac{1}{2}(b-a)} \right] + \frac{1}{2} f''(\bar{x}) \left[\underbrace{a - \frac{a+b}{2}}_{-\frac{1}{2}(b-a)} \right]^2 + \dots \right. \\
&\quad \left. + f(\bar{x}) + f'(\bar{x}) \left[\underbrace{b - \frac{a+b}{2}}_{\frac{1}{2}(b-a)} \right] + \frac{1}{2} f''(\bar{x}) \left[\underbrace{b - \frac{a+b}{2}}_{\frac{1}{2}(b-a)} \right]^2 \right\} \\
&= \frac{b-a}{2} \left\{ 2f(\bar{x}) + f''(\bar{x}) \frac{1}{4} (b-a)^2 + \dots \right\} \\
&= f(\bar{x}) (b-a) + \frac{1}{8} f''(\bar{x}) (b-a)^3 + \dots
\end{aligned} \tag{2.6}$$

$$E \approx f''(\bar{x}) (b-a)^3 \left(\frac{1}{24} - \frac{1}{8} \right) \approx -\frac{1}{12} f''(\bar{x}) (b-a)^3$$

$$(2.5) \quad \boxed{E \approx -\frac{1}{12} f''(\bar{x}) h^3}$$

Se $h = \frac{b-a}{N}$, então

$$(2.6) \quad \boxed{E \approx -\frac{1}{12} \frac{(b-a)^3}{N^3} \sum_{i=1}^N f''(\bar{x}_i)}$$

$$\boxed{E \approx -\frac{1}{12} (b-a) h^2 \bar{f}''}$$

onde

$$\bar{f}'' = \sum_{i=1}^N \frac{f''(\bar{x}_i)}{N}$$

2.2.2 Múltiplos Intervalos

- n = número de intervalos = número de trapézios
- h = altura dos trapézios = $\frac{b-a}{n}$

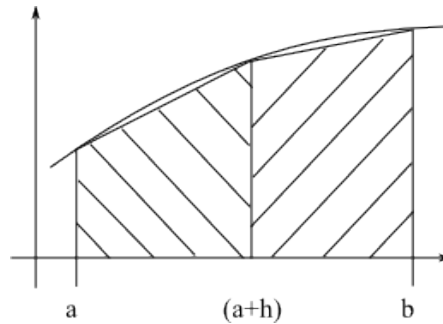


Figura 2.4: Área sob a curva representando a integral com intervalos

Suponha:

$$\begin{aligned} n = 2 \Rightarrow I &= \frac{1}{2} [f(a) + f(a+h)] h + \frac{1}{2} [f(a+h) + f(b)] h \\ &= \frac{h}{2} [f(a) + 2f(a+h) + f(b)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n = 3 \Rightarrow I &= \frac{1}{2} [f(a) + f(a+h)] h + \frac{1}{2} [f(a+h) + f(a+2h)] h + \frac{1}{2} [f(a+2h) + f(b)] h \\ &= \frac{h}{2} \{f(a) + 2[f(a+h) + f(a+2h)] + f(b)\} \end{aligned}$$

$$n = 4 \Rightarrow I = \frac{h}{2} \{f(a) + 2[f(a+h) + f(a+2h) + f(a+3h)] + f(b)\}$$

$$n = N \Rightarrow \boxed{I = \frac{h}{2} \left\{ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + f(b) \right\}} \quad (2.7)$$

Exemplo 2.8

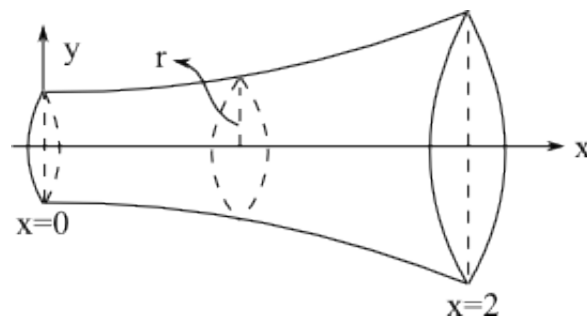


Figura 2.5: Volume de superfície curva

$$\bar{f}(x) = 1 + \left(\frac{x}{2}\right)^2, \quad 0 \leq x \leq 2$$

Calcule o volume

$$\begin{aligned} V &= \int_0^2 \pi r^2 dx = \int_0^2 \pi \left[1 + \frac{x^2}{4}\right]^2 dx = \int_0^2 \pi \left(1 + \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{16}\right) dx \\ &= \pi \left[x + \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{80}\right]_0^2 = \pi \left(2 + \frac{2^3}{6} + \frac{2^5}{80}\right) = 11.7286 \\ &? \end{aligned}$$

2.3 Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson

1. Polinômio interpolante, ?:

$$\begin{aligned} g(x_0 + sh) &= \binom{s}{0} \Delta^0 f_0 + \binom{s}{1} \Delta^1 f_1 + \binom{s}{2} \Delta^2 f_2 \\ g(x_0 + sh) &= 1 f_0 + s(f_1 - f_0) + \frac{1}{2} s(s-1)(f_2 - 2f_1 + f_0) \end{aligned}$$

$$g(x_0 + sh) = f_0 + (f_1 - f_0)s + \frac{1}{2}(f_2 - 2f_1 + f_0)(s^2 - s)$$

2. Integrando o polinômio quadrático, temos:

$$I = \int_{x_0}^{x_2} g(x) dx \quad \begin{array}{l} x = x_0 + hs \\ dx = h ds \end{array} \quad \begin{cases} x = x_0 \rightarrow s = 0 \\ x = x_2 \rightarrow s = 2 \end{cases}$$

$$\begin{aligned} I &= \int_0^2 g(x_0 + sh) h ds \\ &= h \left[f_0 s + (f_1 - f_0) \frac{s^2}{2} + \frac{1}{2} (f_2 - 2f_1 + f_0) \left(\frac{s^3}{3} - \frac{s^2}{2} \right) \right]_0^2 \\ &= h \left[2f_0 + (f_1 - f_0) \frac{4}{2} + \frac{1}{2} (f_2 - 2f_1 + f_0) \left(\frac{8}{3} - \frac{8}{4} \right) \right] \\ &= h \left[2f_0 + 2f_1 - 2f_0 + \frac{1}{3} f_2 - \frac{2}{3} f_1 + \frac{1}{3} f_0 \right] \\ &= \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + f_2] \end{aligned}$$

2.3.1 Erros das Regras de Simpson

- $\frac{1}{3}$ Simpson: $E \approx -\frac{h^5}{90} f^{(IV)}(\bar{x})$

OBS: Se $f(x)$ for polinômio de grau ≤ 3 então $f^{(IV)}(\bar{x}) = 0$ e consequentemente o erro é zero.

- Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson estendida:

$$E \approx -(b-a) \frac{h^4}{180} \bar{f}^{(IV)}$$

onde:

$$\bar{f}^{(IV)} = \sum_{i=1}^{N/2} \frac{f^{(IV)}(\bar{x}_i)}{(N/2)}$$

- $\frac{3}{8}$ Simpson: $-\frac{3}{80} h^5 f^{(IV)}(\bar{x})$
- Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson estendida: $E \approx -\frac{3}{240} (b-a) h^4 \bar{f}^{(IV)}$

2.4 Integração de Romberg

Suponha que I_n seja o resultado da integração pela regra do trapézio estendida com $k = \frac{(b-a)}{N}$

Suponha que I_{2n} seja o resultado para $\bar{h} = \frac{(b-a)}{(N/2)}$.

Assim,

$$E_h \approx -\frac{1}{12} (b-a) \bar{f}'' h^2 \approx C h^2 \quad (2.8)$$

$$E_{2h} \approx -\frac{1}{12} (b-a) \bar{f}'' (2h)^2 \approx 4 C h^2 \quad (2.9)$$

A integral exata é

$$I = I_h + E_h = I_{2h} + E_{2h} \quad (2.10)$$

Assim,

$$E_h - E_{2h} = I_{2h} - I_h \quad (2.11)$$

Eq. 2.8 e 2.9 \rightarrow 2.11 \Rightarrow

$$\begin{aligned} C h^2 - 4 C h^2 &= I_{2h} - I_h \\ \Rightarrow C &= \frac{1}{3} h^{-2} (I_h - I_{2h}) \end{aligned}$$

$$E_h \approx \frac{1}{3} (I_h - I_{2h})$$

$$I = I_h + E_h \approx I_h + \frac{1}{3} (I_h - I_{2h})$$

Exemplo 2.9

$$\begin{array}{cc} I_{0.5} = 11.9895 & I_{0.25} = 11.7940 \\ \uparrow & \uparrow \\ N = 2 & N = 4 \end{array}$$

$$h = 0.25$$

$$I = 11.7940 + \frac{1}{3} (11.7940 - 11.9895) \approx 11.7288$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ \approx I_{0.0156} \\ \uparrow \\ N = 128 \end{array}$$

2.5 Fórmulas de Newton-Cotes

Os métodos de integração derivados a partir da integração das fórmulas de interpolação de Newton são as fórmulas de integração de Newton-Cotes.

1. As fórmulas fechadas de Newton-Cotes são aquelas onde as extremidades do intervalo de integração são utilizados como pontos amostrais.

$$\int_a^b f(x) dx = \alpha h [w_0 f_0 + w_1 f_1 + w_2 f_2 + \dots + w_n f_n] + E$$

onde α e w são constantes e

$$f_i = f(x_i), \quad x_i = a + i h, \quad h = \frac{(b - a)}{N}$$

N	α	$w_i, i = 0, \dots, N$	E
1	1/2	1 1	$-\frac{1}{12} h^3 f''$
2	1/3	1 4 1	$-\frac{1}{90} h^5 f^{(iv)}$
3	3/8	1 3 3 1	$-\frac{3}{80} h^5 f^{(iv)}$
4	2/45	7 32 12 32 7	$-\frac{8}{945} h^7 f^{(vi)}$

2. As fórmulas abertas são aquelas que os limites de integração inferior e superior estão distantes h do primeiro ponto e do último ponto. Por exemplo, para $n = 1$ (trapézio).

$$\int_a^b f(x) dx = \alpha h [w_0 f_0 + w_1 f_1 + \dots + w_{n+2} f_{n+2}] + E$$

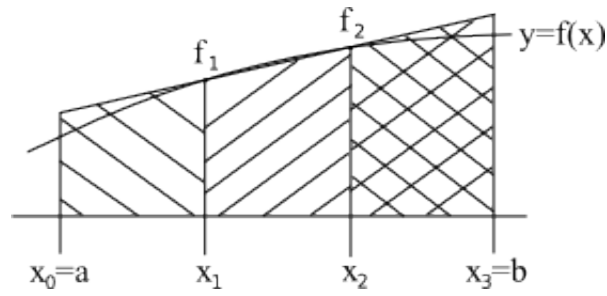


Figura 2.6: Exemplo para $N = 1$ (trapézio)

N	α	$w_i, i = 0, \dots, N+2$	E
1	3/2	0 1 1 0	$-\frac{1}{4} h^3 f''$
2	4/3	0 2 -1 2 0	$-\frac{28}{90} h^5 f^{(iv)}$
3	5/24	0 11 1 1 11 0	$-\frac{95}{144} h^5 f^{(iv)}$
4	6/20	0 11 -14 26 -14 11 0	$-\frac{41}{140} h^7 f^{(vi)}$

Tabela 2.1: Fórmulas abertas de Newton-Cotes.

Exemplo 2.10

$$N = 1$$

$$\begin{aligned}
 I = \text{área do trapézio} &= \frac{1}{2} (f_0 + f_3) 3h = \frac{1}{2} (f_1 + f_2) 3h \\
 &= \frac{3}{2} h [0 f_0 + 1 f_1 + 1 f_2 + 0 f_3]
 \end{aligned}$$

$$N = 2 \rightarrow g(x_1 + sh) = f_1 + (f_2 - f_1)s + \frac{1}{2} (f_3 - 2f_2 + f_1)(s^2 - s)$$

$$\begin{aligned}
 x = x_1 + sh \\
 x = x_0 \rightarrow s = -1 \\
 x = x_4 \rightarrow s = 3
 \end{aligned}
 \quad
 \begin{aligned}
 \int_{x_0}^{x_4} g(x) dx &= \int_{-1}^3 g(x_1 + sh) h ds \\
 &= \frac{4}{3} h \{0 f_0 + 2 f_1 - 1 f_2 + 2 f_3 + 0 f_4\}
 \end{aligned}$$

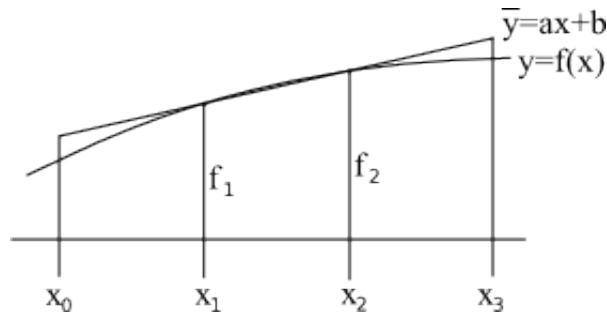


Figura 2.7: Outro exemplo para $N = 1$ (trapézio)

Exemplo 2.11

Dedução de fórmula de newton-cotes de grau 4.

Temos que:

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

De acordo com a regra de interpolação de Newton 2.4.6 (pág 37 do livro Applied Numerical methods in C, Nakamura), temos que a formula que passar pelos K+1 pontos amostrais, $f_0, f_1, f_2 \dots f_k$ é dada pela fórmula:

$$g(x) = g(x_0 + sh) = \sum_{n=0}^k \binom{s}{n} \Delta^n f_0$$

Então, podemos dizer que x está em função de s da seguinte forma:

$$x(s) = x_0 + sh$$

$$dx = h.ds$$

Substituindo e aplicando $n=4$, temos:

$$I = \int_a^b g(x)dx = \int_0^4 g(x(s))h.ds = h \int_0^4 g(x_0 + sh)ds$$

Sendo que:

$$g(x) = g(x_0 + sh) = \sum_{n=0}^k \binom{s}{n} \Delta^n f_0$$

Então desenvolvendo o somatório acima, teremos:

$$g(x_0 + sh) = g_0 + s(g_1 - g_0) + \frac{s(s-1)}{2}(g_2 - g_1 + g_0) + \frac{s^3 - 3s^2 + 2s}{6}(g_3 - 3g_2 + 3g_1 - g_0) + \frac{s(s-1)(s-2)(s-3)}{24}(g_4 - 4g_3 + 6g_2 - 4g_1 + g_0)$$

Substituindo na integral:

$$h \int_0^4 g_0 + s(g_1 - g_0) + \frac{s(s-1)}{2}(g_2 - g_1 + g_0) + \frac{s^3 - 3s^2 + 2s}{6}(g_3 - 3g_2 + 3g_1 - g_0) + \frac{s(s-1)(s-2)(s-3)}{24}(g_4 - 4g_3 + 6g_2 - 4g_1 + g_0) ds$$

Integrando e isolando $porg_k$, temos:

$$I \equiv h \left(\frac{14}{45}g_0 + \frac{64}{45}g_1 + \frac{24}{45}g_2 + \frac{64}{45}g_3 + \frac{14}{45}g_4 \right)$$

$$I \equiv \frac{2h}{45}(7g_0 + 32g_1 + 12g_2 + 32g_3 + 7g_4) \blacksquare$$

2.6 Quadraturas de Gauss

2.6.1 Quadraturas de Gauss-Legendre

1. OBS:

- (a) São métodos numéricos de integração que utilizam os pontos de Legendre (raízes dos polinômios de Legendre)
- (b) Apropriadas para funções analíticas.
- (c) Precisão muito maior do que as fórmulas de Newton-Cotes.
- (d) Os pontos de Legendre **não são regularmente espaçados**.

2. (a) Erro da Regra do Trapézio é proporcional a f'' . Assim, se $f(x)$ for polinômio até ordem 1, o erro é nulo.
- (b) Erro da Regra do Trapézio é proporcional a f^{IV} . Assim, integra exatamente polinômios de até ordem 3.
- (c) As fórmulas de Newton-Cotes com n ímpar integram exatamente polinômios de ordem n e as com n par integram exatamente polinômios de ordem $n + 1$.
- (d) Vamos tentar uma fórmula de integração com dois pontos que integre exatamente um polinômio de ordem 3 (3 pontos [N-Cotes $n = 2$] ou 4 pontos [N-Cotes $n = 3$]).

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx = w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) + E \quad (2.12)$$

Queremos $E = 0$ para $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x) = x^2$ e $f(x) = x^3$.

Assim,

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 1 dx &= 2 = w_1 + w_2 & (a) \\ \int_{-1}^1 x dx &= 0 = w_1 x_1 + w_2 x_2 & (b) \\ \int_{-1}^1 x^2 dx &= \frac{2}{3} = w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2 & (c) \\ \int_{-1}^1 x^3 dx &= 0 = w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3 & (d) \end{aligned} \quad (2.13)$$

os limites de integração são simétricos em relação a $x = 0$.

Assim, façamos x_1 e x_2 simétricos em relação a $x = 0$

$$x_2 = -x_1$$

$$(2.15.b) \Rightarrow w_1 x_1 - w_2 x_1 = x_1 (w_1 - w_2) = 0$$

$$(2.15.a) \Rightarrow w_1 + w_2 = 2 \neq 0 \Rightarrow w_1 = w_2 = 1$$

Com estes valores (2.15.d) fica automaticamente satisfeita

$$0 = 1 x_1^3 + 1 (-x_1)^3 = x_1^3 - x_1^3$$

$$(2.15.c) \Rightarrow \frac{2}{3} = x_1^2 + (-x_1)^2 = 2x_1^2 \Rightarrow x_1^2 = \frac{1}{3}$$

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$x_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$$

Para n pontos de integração x_1, x_2, \dots, x_n são as raízes do polinômio de Legendre de ordem n .

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{k=1}^N w_k f(x_k)$$

Polinômio de Legendre de ordem n .

$$P_n(x) = \frac{1}{2^N N!} \frac{d^N (x^2 - 1)^N}{dx^N}$$

$$P_0(x) = \frac{1}{2^0 0!} (x^2 - 1)^0 = 1$$

$$P_1(x) = \frac{1}{2^1 1!} \frac{d}{dx} (x^2 - 1)^1 = x$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2^2 2!} \frac{d^2}{dx^2} (x^2 - 1)^2 = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$$

	$\pm x_i$	w_i
N=2	± 0.577350269	1.0
N=3	0	$0.888888889 = 8/9$
	± 0.774596669	$0.555555556 = 5/9$
N=4	± 0.339981043	0.652145155
	± 0.861136312	0.347854845
\vdots	\vdots	\vdots

$$\begin{aligned} I &= \int_a^b f(x) dx = \\ &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 \bar{f}(\xi) d\xi \\ &= \frac{b-a}{2} \sum_{k=1}^N w_k \bar{f}(\xi_k) \end{aligned}$$

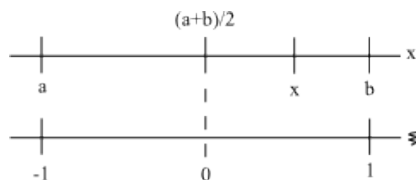


Figura 2.8: Parametrização

$$\begin{aligned} x &= \frac{a+b}{2} + \xi \left(\frac{b-a}{2} \right) \\ dx &= \frac{b-a}{2} d\xi \end{aligned}$$

Exemplo 2.12

$$I = \int_0^2 \pi [1 + (x/2)^2]^2 dx$$

$$\left. \begin{array}{l} b = 2 \\ a = 0 \end{array} \right\} \begin{array}{l} x = \frac{0+2}{2} + \frac{2-0}{2} \xi = 1 + \xi \Rightarrow x = 1 + \xi \\ dx = d\xi \end{array}$$

$n = 2$ integra exatamente $2n - 1 = 4 - 1 = 3$

$n = 3$ integra exatamente polinômio de grau ≤ 5 .

Como o integrando é polinômio de grau 4 utilizaremos $n = 3$

$$\xi_1 = -0.774596669 \rightarrow f_1 = \pi \left\{ 1 + [(1 + \xi_1)/2]^2 \right\}^2 = 3.2219064 \quad w_1 = 5/9$$

?

$$\begin{aligned} I &= \frac{5}{9} 3.2219064 + \frac{8}{9} 4.9087385 + \frac{5}{9} 10.0356146 \\ &= 11.7286 \end{aligned}$$

3. Provar que, se $f(x)$ for um polinômio de ordem $2n - 1$ ou menor, a quadratura de Gauss de ordem n é exata.

Prova: Suponha que $f(x)$ em $\int_{-1}^1 f(x) dx$ seja um polinômio de ordem $2n - 1$. Assim,

$$f(x) = c(x) P_N(x) + r(x) \quad (2.14)$$

onde $P_n(x)$ é o polinômio de Legendre de ordem $n - 1$

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(x) dx &= \underbrace{\int_{-1}^1 c(x) P_N(x) dx}_{= 0, \text{ pois o polinômio } P_N} + \int_{-1}^1 r(x) dx \quad (2.15) \\ &= 0, \text{ pois o polinômio } P_N \\ &\text{é ortogonal a todos os} \\ &\text{polinômios de ordem } < N - 1 \end{aligned}$$

$$\underbrace{\int_{-1}^1 P_m(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{para } n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & \text{para } m = n \end{cases}}_{\text{ortogonalidade dos polinômios de Legendre}} \quad (2.16)$$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^1 r(x) dx \quad (2.17)$$

Se x_i é uma das raízes do polinômio de Legendre P_n , então:

$$f(x_i) = \underbrace{c(x_i) P_n(x_i)}_0 + r(x_i) \Rightarrow f(x_i) = r(x_i) \quad (2.18)$$

O polinômio $r(x)$ de ordem $N-1$ pode ser expresso exatamente pela interpolação de Lagrange de ordem $N-1$ (precisa de N pontos amostrais)

$$r(x) = \sum_{i=1}^N \left[\prod_{j=1, j \neq i}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right] r(x_i) \quad (2.19)$$

Exemplo 2.13

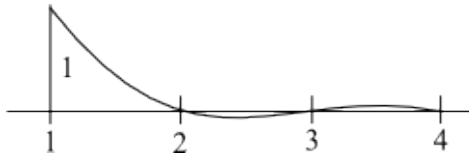


Figura 2.9: ?

$$r_1 \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} \frac{x - x_3}{x_1 - x_3} \frac{x - x_4}{x_1 - x_4}$$

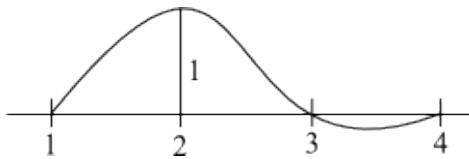


Figura 2.10: ?

$$r_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \frac{x - x_3}{x_2 - x_3} \frac{x - x_4}{x_2 - x_4}$$

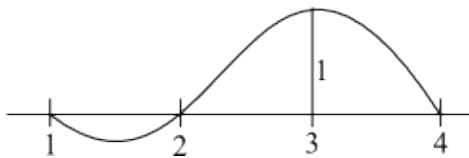


Figura 2.11: ?

$$r_3 \frac{x - x_1}{x_3 - x_1} \frac{x - x_2}{x_3 - x_2} \frac{x - x_4}{x_3 - x_4}$$

Se os pontos amostrais forem as N raízes de $P_N(x)$, então, pela equação 2.18

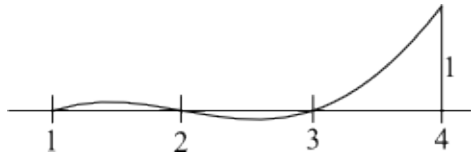


Figura 2.12: ?

$$r_4 \frac{x - x_1}{x_4 - x_1} \frac{x - x_2}{x_4 - x_2} \frac{x - x_3}{x_4 - x_3}$$

$$r(x) = \sum_{i=1}^N \left[\prod_{j=1, j \neq i}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right] f(x_i) \quad (2.20)$$

Assim 2.20 \rightarrow 2.17 \Rightarrow

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^1 r(x) dx = \sum_{i=1}^N f(x_i) \underbrace{\int_{-1}^1 \left[\prod_{j=1, j \neq i}^N \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right] dx}_{w_i}$$

Exemplo 2.14

Deducao de Quadraturas de Gauss-legendre

-
-

A quadratura de Gauss-legendre é dada pela fórmula (4.6.1, na página 135 do livro *Applied Numerical methods*, Nakamura)

Temos que:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq \sum_{k=1}^N w_k f(x_k)$$

Onde $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ é dado pelas raízes de $P_N(x) = 0$, $P_N(x)$ é o Polinomio de Legendre de ordem N . Tal polinomio é dado pela seguinte fórmula (Appendix B, página 559 do livro *Applied Numerical Methods*, Nakamura):

$$P_4(x) = \frac{1}{2^4 4!} \frac{d^4(x^2 - 1)^4}{dx^4}$$

Onde,

$$\frac{1}{2^4 4!} = \frac{1}{384}$$

logo, teremos:

$$\frac{1}{384} \frac{d^4(x^2 - 1)^4}{dx^4} = \frac{1}{384} \frac{d^4}{dx^4} (x^8 - 4x^6 + 6x^4 - 4x^2 + 1) = \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3)$$

Para tirarmos as raízes, temos que:

$$P_4(x) = 0$$

Então,

$$(35x^4 - 30x^2 + 3) = 0$$

Tirando as raízes:

$x^2 = a$, então a fórmula se tornará, $35a^2 - 30a + 3 = 0$, daqui é fácil ver que as raízes de a são: $a_1 = \frac{15+2\sqrt{30}}{35}$ e $a_2 = \frac{15-2\sqrt{30}}{35}$.

como $x^2 = a$, teremos: $x_1 = \sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}$; $x_2 = -\sqrt{\frac{15+2\sqrt{30}}{35}}$; $x_3 = \sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}$; $x_4 = -\sqrt{\frac{15-2\sqrt{30}}{35}}$;

Teremos, então, $x_1 = 0,861136312$; $x_2 = -0,861136312$; $x_3 = 0,339981043$; $x_4 = -0,339981043$;

Como os pontos devem ser localizados simetricamente, temos que: $w_1 = w_2$ e $w_3 = w_4$.

O cálculo de w é dado pela fórmula (página 138, do livro *Applied Numerical methods*, Nakamura):

$$w_i = \int_{-1}^1 \left[\prod_{j=1; j \neq i}^N \frac{x-x_j}{x_i-x_j} \right] dx$$

Para w_1 , teremos:

$$w_1 = \int_{-1}^1 \left[\prod_{j=1; j \neq 1}^N \frac{x-x_j}{x_1-x_j} \right] dx = \int_{-1}^1 \left[\frac{(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)} \right] dx$$

Integrando, temos:

$$w_1 = w_2 = 0,347854845$$

E para w_3 , teremos:

$$w_3 = \int_{-1}^1 \left[\prod_{j=1; j \neq 3}^N \frac{x-x_j}{x_3-x_j} \right] dx = \int_{-1}^1 \left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_4)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)} \right] dx$$

Após integrar, teremos:

Temos, então:

$$w_3 = w_4 = 0,652145155$$

Substituindo os resultados, na fórmula da quadratura de Gauss-legendre aplicada a $N=4$, teremos:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq 0,347854845 f(0,861136312) + 0,347854845 f(-0,861136312)$$

$$+ 0,652145155 f(0,339981043) + 0,652145155 f(-0,339981043). \blacksquare$$

2.6.2 Outras Quadraturas de Gauss

(a) **Gauss-Hermite:** apropriadas para integrais da forma

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^N w_k f(x_k)$$

N	Pontos de Hermite: $\pm x_i$	Pesos de Hermite: w_i
2	± 0.70710678	0.88622692
3	0.00000000 ± 1.22474487	1.18163590 0.29540897
4	± 0.52464762 ± 1.65068012	0.80491409 0.08131283
5	0.00000000 ± 0.95857246 ± 2.02018287	0.94530872 0.39361932 0.01995324

(b) **Gauss-Laguerre:** apropriadas para integrais da forma

$$I = \int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^N w_k f(x_k)$$

N	Pontos de Laguerre: x_i	Pesos de Laguerre: w_i
2	0.58578643 3.41421356	0.85355339 0.14644660
3	0.41577455 2.24428036 6.28994508	0.71109300 0.27851973 0.01038926
4	0.32254768 1.74576110 4.53662029 9.39507091	0.60315410 0.35741869 0.03888791 0.00053929

(c) **Gauss-Chebyshev:** apropriadas para integrais da forma

$$I = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx \approx \sum_{k=1}^N w_k f(x_k)$$

onde $x_k = \cos \frac{k-1/2}{N} \pi$, $k = 1, 2, \dots, N$

$$w_k = \frac{\pi}{N} \quad \forall k$$

Assim,

$$I = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx \approx \frac{\pi}{N} \sum_{k=1}^N f(x_k)$$

Nota: todas as três quadraturas serão exatas se $f(x)$ for um polinômio de ordem $\leq 2n - 1$

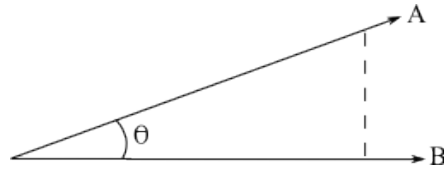


Figura 2.13: Produto escalar

2.7 Roteiro da Aula

1. Falar sobre produto escalar de dois vetores:

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = |\vec{A}| |\vec{B}| \cos \theta$$

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = \sum_{i=1}^N A_i B_i$$

Se

$$\begin{aligned} \vec{A} \cdot \vec{B} = 0 &\Rightarrow \cos \theta = 0 \\ &\Rightarrow \theta = \frac{\pi}{2} + n\pi; \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

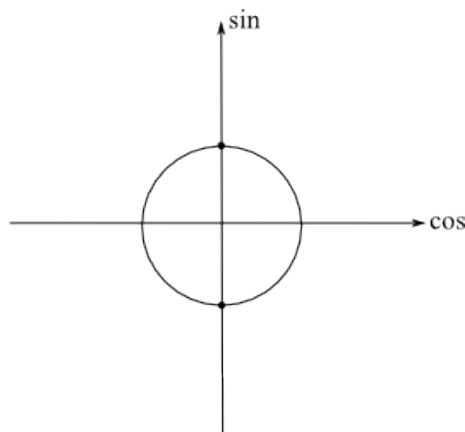


Figura 2.14: ?

dizemos que \vec{A} e \vec{B} são ortogonais.

2. Estender a noção de ortogonalidade para funções

$$\sum_i f(x_i) g(x_i) \equiv \sum_i G(x) \rightarrow \int f(x) g(x) dx = 0$$

Se $\int f(x) g(x) dx = 0$ então $f(x)$ e $g(x)$ são ortogonais.

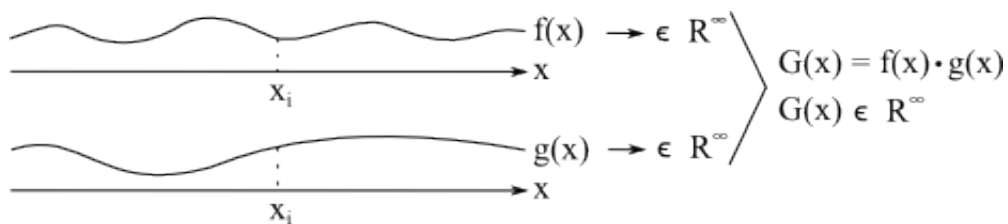


Figura 2.15: ?

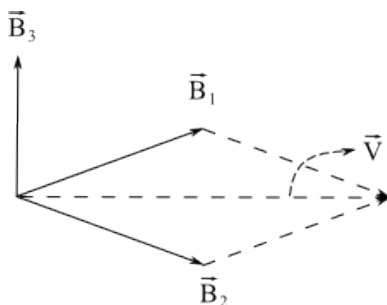


Figura 2.16: ?

3. Base de vetores ortogonais e polinômios ortogonais como base do espaço de polinômios. Mostrar que se um polinômio P_x é ortogonal aos polinômios da base, então ele é perpendicular a todos os polinômios do espaço.

$$\vec{V} = C_1 \vec{B}_1 + C_2 \vec{B}_2$$

$$\left. \begin{array}{l} \vec{B}_3 \cdot \vec{B}_1 = 0 \\ \vec{B}_3 \cdot \vec{B}_2 = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \vec{B}_3 \cdot \vec{V} = 0$$

4. Mostrar a propriedade de ortogonalidade dos polinômios de Legendre

$$\int_{-1}^1 P_m(x) P_n(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{para } n \neq m \\ \frac{2}{2n+1} & \text{para } m = n \end{cases}$$

5. Falar da interpolação de Lagrange

Grau 1

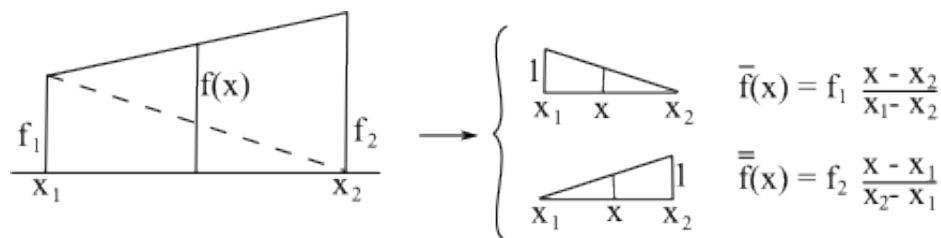


Figura 2.17: ?

Grau 2

Grau $n - 1 \Rightarrow n$ pontos.

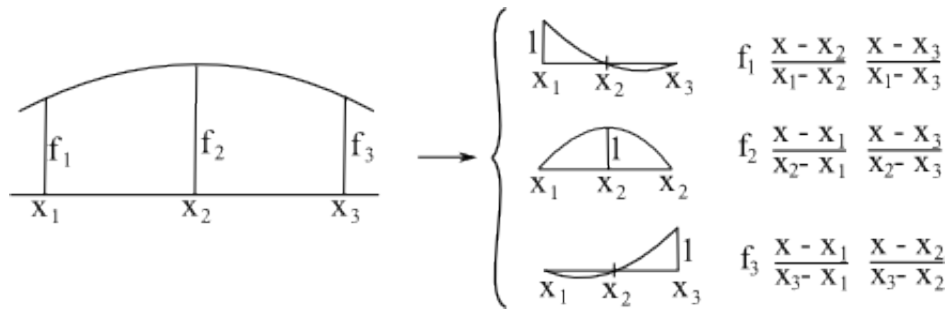


Figura 2.18: ?

2.8 Integração de Funções com Limites Infinitos ou Singularidades (Integrais Impróprias)

1. O integrando tem um limite finito nos limites de interpolação, mas não pode ser calculado nestes limites de integração. Por exemplo, $\frac{\sin x}{x}$ em $x = 0$:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1 ; \quad \frac{\sin(0)}{0} \text{ (singular)}$$

2. O limite superior é $+\infty$ ou o limite inferior é $-\infty$.
3. Tem uma singularidade integrável em qualquer um dos limites. Por exemplo, $x^{1/2}$ em $x = 0$

$$\begin{aligned} \int_0^1 x^{-1/2} dx &= \lim_{h \rightarrow 0} \int_h^1 x^{-1/2} dx = \lim_{h \rightarrow 0} \left. \frac{x^{1/2}}{1/2} \right|_h^1 = \lim_{h \rightarrow 0} (2\sqrt{1} - 2\sqrt{h}) \\ &= 2\sqrt{1} = 2 \end{aligned}$$

4. Tem uma singularidade integrável em um ponto conhecido ou desconhecido entre os limites da integração.

Integral Tipo 1:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2) dx \quad (\text{caso b}) \quad (2.21)$$

Integral Tipo 2:

$$I = \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}(e^x + 1)} dx \quad (2.22)$$

- O integrando é singular em $x = 0$ ($f(x) \rightarrow \infty$ para $x \rightarrow 0$)

Integral Tipo 3:

$$I = \int_0^1 x^{0.7} \cos(x) dx \quad (2.23)$$

- A função (integrando) não é analítica em $x = 0$.

2.8.1 Tipo 1

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx \quad \text{ou} \quad I = \int_{-\infty}^b f(x) dx \quad \text{ou} \quad I = \int_a^{\infty} f(x) dx$$

OBS1: Uma função que é integrável em um domínio infinito ou semi-infinito é aproximadamente zero exceto em uma "curta" parte do domínio. Por exemplo,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$

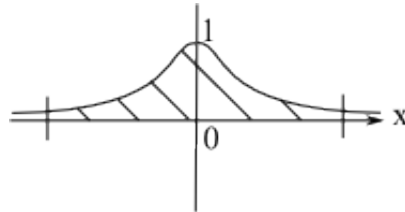


Figura 2.19: ?

OBS2: Se $f(x)$ for analítica em $[-\infty, \infty]$, o método mais eficiente para a integração numérica é a regra do trapézio estendida.

$$I = h \sum_{i=-M}^M f(x_i)$$

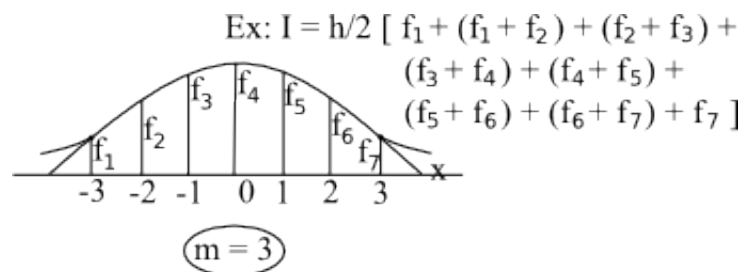


Figura 2.20: ?

onde $x_i = i * h$ e M é um inteiro tal que ∞ seja aproximado por $M * h$.

Exemplo 2.15

$$I = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \quad \text{com } 20, 40 \text{ e } 80 \text{ intervalos}$$

Solução: $I \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-10}^{10} e^{-x^2} dx$

$$N = 20 \rightarrow I = 1.000104$$

$$N = 40 \rightarrow I = 1.000001$$

$$N = 80 \rightarrow I = 1.000000$$

Valor exato: $I = 1.000000$

2.8.2 Tipo 2

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

onde a e b são finitos, mas $f(x)$ é singular em a , b ou ambos.

1. Transformar $[a, b]$ em $[+\infty, -\infty]$ através de mudança de coordenadas.
2. Aplicar regra do trapézio estendida

Mudança de coordenadas

$$\begin{aligned} \xi & \quad \xi(?) \begin{cases} \xi(a) = -\infty \\ \xi(b) = +\infty \end{cases} \\ x &= x(\xi) \end{aligned}$$

$$I = \int_a^b f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x(\xi)) \left(\frac{dx}{d\xi} \right) d\xi \quad (2.24)$$

Transformação Exponencial:

$$x(\xi) = \frac{1}{2} [a + b + (b - a) \tanh(\xi)] \quad (2.25)$$

onde

$$\tanh(\xi) = \frac{e^\xi - e^{-\xi}}{e^\xi + e^{-\xi}} \quad (2.26)$$

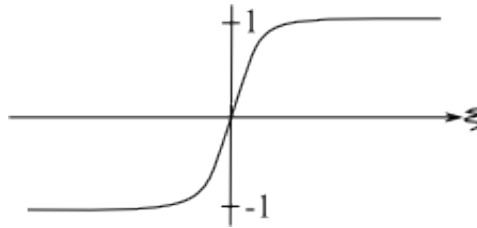


Figura 2.21: ?

Para

$$\begin{aligned} \xi = +\infty &\Rightarrow \tanh(+\infty) = 1 \Rightarrow x(+\infty) = b \\ \xi = -\infty &\Rightarrow \tanh(-\infty) = -1 \Rightarrow x(-\infty) = a \end{aligned}$$

$$\xi(x) = \tanh^{-1} \left(\frac{2x - a - b}{b - a} \right), \quad x \in [a, b] \quad (2.27)$$

OBS1: Para $\xi = 2.64665 \Rightarrow \tanh = 0.99 \Rightarrow x \approx b$

?

OBS2: A precisão da integração é função da escolha da transformação.

Dupla Exponenciação

$$\xi(x) = \frac{1}{2} \left[a + b + (b - a) \tanh \left(\frac{\pi}{2} \sinh(\xi) \right) \right] \quad (2.28)$$

$$\sinh(\xi) = \frac{e^\xi - e^{-\xi}}{2} \quad (2.29)$$

$$\cosh(\xi) = \frac{e^\xi + e^{-\xi}}{2} \quad (2.30)$$

$$\frac{dx}{d\xi} = \frac{(b - a) \frac{\pi}{4} \cosh(\xi)}{\cosh^2 \left[\frac{\pi}{2} \sinh(\xi) \right]} \quad (2.31)$$

Eq. 2.28 e 2.31 \rightarrow 2.24

$$I = h \sum_{k=-N}^N f(x_k) \left(\frac{dx}{d\xi} \right)_k \quad (2.32)$$

onde

$$\xi_k = k * h$$

(h é predefinido)

OBS: Quão grande deve ser N ?

Quando ξ_k cresce $\Rightarrow \cosh^2 \left[\frac{\pi}{2} \sinh(\xi_k) \right] \rightarrow \frac{1}{4} \exp \left[\frac{\pi}{2} \exp(\xi) \right]$, ou seja, o denominador de $\frac{dx}{d\xi}$ cresce duplo-exponencialmente podendo causar *overflow*.
Por exemplo,

$$\frac{1}{4} \exp \left[\frac{\pi}{2} \exp(\xi_k) \right] \approx \underbrace{2 \cdot 10^{38}}_{\text{máximo número}}$$

$$\Rightarrow \xi_k \approx 4 \Rightarrow N h < 4$$

$$\xi \approx 6.1 \Rightarrow f(\xi) \approx 3.6 \cdot 10^{303}$$

Outro exemplo é:

$$I = \int_0^2 \sqrt{1 + \frac{1}{x}} dx \quad \begin{matrix} a = 0 \\ b = 2 \end{matrix}$$

Em $x = 0$, $\sqrt{1 + \frac{1}{x}}$ é singular.

Transformações de Coordenadas

$$\begin{aligned}
x_k &= \frac{1}{2} \left[0 + 2 + (2 - 0) \tanh \left(\frac{\pi}{2} \sinh(\xi) \right) \right] \\
x_k &= \frac{1}{2} \left[2 + 2 \tanh \left(\frac{\pi}{2} \sinh(\xi_k) \right) \right] \\
&= 1 + \tanh \left(\frac{\pi}{2} \sinh(\xi_k) \right)
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Substituindo em (a) e adotando os limites de ξ $[-4, 4]$

N	I
10	3.600710
20	3.595706
30	3.595706

2.9 Integração Numérica em um Domínio Bidimensional

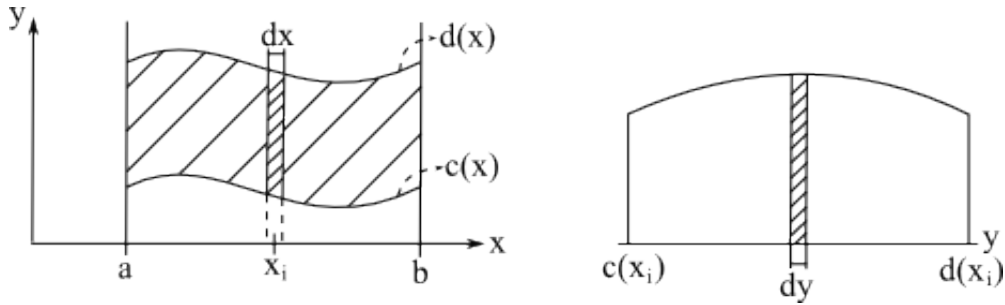


Figura 2.22: Integração Numérica em um Domínio Bidimensional

$$I = \int_a^b \left[\int_{c(x)}^{d(x)} f(x, y) dy \right] dx \tag{2.34}$$

$$G(x) = \int_{c(x)}^{d(x)} f(x, y) dy \tag{2.35}$$

$$I = \int_a^b G(x) dx \tag{2.36}$$

$$I = \sum_{i=0}^N w_i G(x_i) \tag{2.37}$$

$$G(x_i) = \sum_{j=0}^M w_j f(x_i, y_j) \tag{2.38}$$

Exemplo 2.16

Calcule a integral dupla

$$I = \int_a^b \left[\int_{c(x)}^{d(x)} \sin(x+y) dy \right] dx$$

pela regra $\frac{1}{3}$ de Simpson.

$$\begin{aligned} a &= 1 \\ b &= 3 \\ c(x) &= \ln(x) \\ d(x) &= 3 + e^{x/5} \end{aligned}$$

Solução:

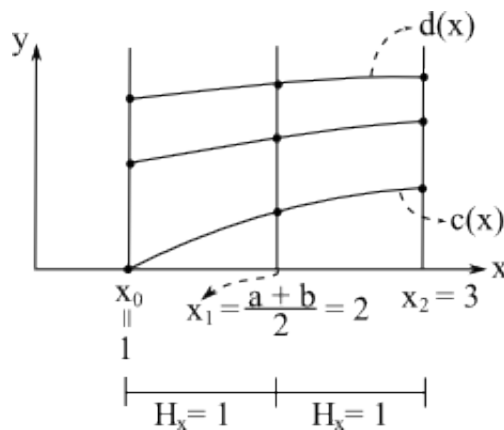


Figura 2.23: ?

$$\begin{aligned} I &= \frac{H_x}{3} [G(x_0) + 4G(x_1) + G(x_2)] \\ &\approx \frac{H_x}{3} \left[\int_{\ln(1)}^{3+e^{(1/5)}} \sin(1+y) dy + 4 \int_{\ln(2)}^{3+e^{(2/5)}} \sin(2+y) dy + \int_{\ln(3)}^{3+e^{(3/5)}} \sin(3+y) dy \right] \\ &\approx \frac{1}{3} \left[\int_0^{4.2214} \sin(1+y) dy + 4 \int_{0.6931}^{4.4918} \sin(2+y) dy + \int_{1.0986}^{4.8221} \sin(3+y) dy \right] \\ G(x_0) &\approx \frac{2.11070}{3} [\sin(1+0) + 4 \sin(1+2.11070) + \sin(1+4.2214)] \\ &= 0.064581 \\ G(x_1) &\approx \frac{1.89935}{3} [\sin(2+0.6931) + 4 \sin(2+2.59245) + \sin(2+4.4918)] \\ &= -2.1086 \\ G(x_2) &\approx \frac{1.86175}{3} [\sin(3+1.0986) + 4 \sin(3+2.96035) + \sin(3+4.8221)] \\ &= -0.67454 \\ I &\approx \frac{1}{3} [0.064581 + (4)(-2.1086) - 0.67454] = -3.0148 \end{aligned}$$

2.10 Integração

Problemas

1. Dada uma função $f(x)$, achar uma função $F(x)$ tal que

$$\underbrace{F'(x) = f(x)}$$

PROBLEMA DE INTEGRAÇÃO

2. Dada uma função $f(x) \geq 0$, dar uma definição da área sob a curva $y = f(x)$ que não apele para a intuição geométrica.

i). Integral Indefinida

Seja $f(x)$ uma função definida num curto intervalo. Se $F(x)$ é uma função definida no mesmo intervalo e tal que $F'(x) = f(x)$, então dizemos que F é uma integral indefinida de f .

ii). Funções Contínuas

$f(x)$ é contínua se $\lim_{h \rightarrow 0} f(x+h) = f(x) \quad \forall x$ para o qual a função está definida.

Toda função derivável é contínua se:

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

tem um limite, então:

$$\begin{aligned} & \lim_{h \rightarrow 0} (f(x+h) - f(x)) \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} h \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} h \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = 0 \end{aligned}$$

$$\boxed{\lim_{h \rightarrow 0} f(x+h) = f(x)}$$

Capítulo 3

Diferenciação Numérica

3.1 Expansão de Taylor

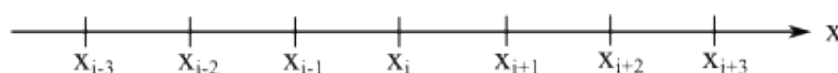


Figura 3.1: ?

$$f(x_{i+1}) = f(x_i + h) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}h^4 \dots \quad (3.1)$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i - h) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_i)h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}h^4 + \dots \quad (3.2)$$

$$f(x_{i+2}) = f(x_i + 2h) = f(x_i) + f'(x_i)2h + \frac{1}{2}f''(x_i)4h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_i)8h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}16h^4 + \dots \quad (3.3)$$

$$f(x_{i-2}) = f(x_i - 2h) = f(x_i) - f'(x_i)2h + \frac{1}{2}f''(x_i)4h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_i)8h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}16h^4 + \dots \quad (3.4)$$

$$f(x_{i+3}) = f(x_i + 3h) = f(x_i) + f'(x_i)3h + \frac{1}{2}f''(x_i)9h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_i)27h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}81h^4 + \dots \quad (3.5)$$

$$f(x_{i-3}) = f(x_i - 3h) = f(x_i) - f'(x_i)3h + \frac{1}{2}f''(x_i)9h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_i)27h^3 + \frac{1}{24}f^{(iv)}81h^4 + \dots \quad (3.6)$$

i). Derivada Primeira (mínimo 2 pontos)

(a) *Forward Difference*

2 pontos (x_i e x_{i+1})

De 3.1:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{1}{2} f''(x_i) h - \frac{1}{6} f'''(x_i) h^2 - \dots$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h)$$

onde

$$O(h) = -\frac{1}{2} f''(x_i) h$$

3 pontos (x_i, x_{i+1} e x_{i+2})

De -(3.3) + 4*(3.1):

$$4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}) = 3f(x_i) + 2hf'(x_i) - \frac{2}{3}h^3f'''(x_i)$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} + O(h^2)$$

onde

$$O(h^2) = \frac{1}{3}h^2f'''(x_i)$$

4 pontos (x_i, x_{i+1}, x_{i+2} e x_{i+3})

De (3.1) - $\frac{1}{2}$ *(3.3) + $\frac{1}{9}$ *(3.5):

$$\begin{array}{rcl} f_{i+1} & = & f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2}f''_i + \frac{h^3}{6}f'''_i + \frac{h^4}{24}f''''_i + \dots \\ -\frac{f_{i+2}}{2} & = & -\frac{f_i}{2} - hf'_i - \frac{2h^2}{2}f''_i - \frac{4h^3}{6}f'''_i - \frac{8h^4}{24}f''''_i - \dots \\ +\frac{f_{i+3}}{9} & = & \frac{f_i}{9} + \frac{h}{3}f'_i + \frac{h^2}{2}f''_i + \frac{3h^3}{6}f'''_i + \frac{9h^4}{24}f''''_i + \dots \\ \hline \frac{f_{i+3}}{9} - \frac{f_{i+2}}{2} + f_{i+1} & = & \frac{f_i}{9} - \frac{f_i}{2} + f_i + \frac{h}{3}f'_i + \frac{h^4}{12}f''''_i + \dots \end{array}$$

$$f'_i = \frac{2f_{i+3} - 9f_{i+2} + 18f_{i+1} - 11f_i}{6h} + O(h^3)$$

onde

$$O(h^3) = -\frac{1}{4}h^3f''''_i$$

(b) *Backward Difference*

2 pontos (x_i e x_{i-1})

De (3.2):

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h)$$

onde

$$O(h) = \frac{1}{2} f''(x_i) h$$

3 pontos (x_i , x_{i-1} e x_{i-2})

$$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{2h} + O(h^2)$$

onde

$$O(h^2) = \frac{1}{3} h^2 f'''(x_i)$$

4 pontos (x_i , x_{i-1} , x_{i-2} e x_{i-3})

$$f'(x_i) = \frac{11f_i - 18f_{i-1} + 9f_{i-2} - 2f_{i-3}}{6h} + O(h^3)$$

onde

$$O(h^3) = \frac{1}{4} h^3 f_i''''$$

(c) *Central Difference*

2 pontos (x_{i+1} e x_{i-1})

De (3.1) - (3.2):

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h} + O(h^2)$$

onde

$$O(h^2) = -\frac{1}{6} h^2 f'''(x_i)$$

4 pontos (x_{i+2} , x_{i+1} , x_{i-1} e x_{i-2}) (elimine f'' f''')

$$f'_i = \frac{-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}}{12h} + O(h^2)$$

onde

$$O(h^2) = \frac{1}{30} h^4 f^{(iv)}(x_i)$$

ii). Derivada Segunda (mínimo 3 pontos)

(a) *Forward Difference*

3 pontos (x_i, x_{i+1} e x_{i+2}) elimina $f'(x_i)$

$$f_i'' = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{h^2} + O(h)$$

onde

$$O(h) = -h f_i'''$$

(b) *Backward Difference*

$$f_i'' = \frac{f_i - 2f_{i+1} + f_{i-2}}{h^2} + O(h)$$

onde

$$O(h) = h f_i'''$$

(c) *Central Difference*

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2)$$

onde

$$O(h^2) = -\frac{1}{2} h^2 f_i''''$$

OBS:

- Uma aproximação para $f^{(p)}$ precisa de pelo menos $p + 1$ pontos.
- As derivadas de ordem menor do que p devem ser eliminadas.
- O erro é o termo de ordem mais baixa que for truncado.

3.2 Diferenças Finitas

i). Operadores de primeira ordem

(a) *Forward Difference*: $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$

(b) *Backward Difference*: $\nabla f_i = f_i - f_{i-1}$

(c) Centrada:

$$\begin{aligned}\delta f_i &= f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}} \\ \delta f_{i+\frac{1}{2}} &= f_{i+1} - f_i\end{aligned}$$

onde

$$f_{i+\frac{1}{2}} = f\left(x_i + \frac{h}{2}\right)$$

ii). Operadores de segunda ordem

(a)

$$\begin{aligned}\Delta^2 f_i &= \Delta(\Delta f_i) = \Delta(f_{i+1} - f_i) = \Delta f_{i+1} - \Delta f_i \\ &= f_{i+2} - f_{i+1} - (f_{i+1} - f_i) = f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i\end{aligned}$$

$$\boxed{\Delta^2 f_i = f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}$$

(b)

$$\begin{aligned}\nabla^2 f_i &= \nabla(\nabla f_i) = \nabla(f_i - f_{i-1}) = \nabla f_i - \nabla f_{i-1} \\ &= f_i - f_{i-1} - (f_{i-1} - f_{i-2}) = f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}\end{aligned}$$

$$\boxed{\nabla^2 f_i = f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}}$$

(c)

$$\begin{aligned}\delta^2 f_i &= \delta(\delta f_i) = \delta(f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}) = \delta f_{i+\frac{1}{2}} - \delta f_{i-\frac{1}{2}} \\ &= f_{i+1} - f_i - (f_i - f_{i-1}) = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}\end{aligned}$$

$$\boxed{\delta^2 f_i = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}$$

(d)

$$\begin{aligned}\Delta \nabla f_i &= \Delta(\nabla f_i) = \Delta(f_i - f_{i-1}) = \Delta f_i - \Delta f_{i-1} \\ &= f_{i+1} - f_i - f_i + f_{i-1} = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}\end{aligned}$$

$$\boxed{\Delta \nabla f_i = \delta^2 f_i = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}$$

(e)

$$\begin{aligned}\nabla \Delta f_i &= \nabla(\Delta f_i) = \nabla(f_{i+1} - f_i) = \nabla f_{i+1} - \nabla f_i \\ &= f_{i+1} - f_i - f_i + f_{i+1} = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}\end{aligned}$$

$$\boxed{\nabla \Delta f_i = \delta^2 f_i = f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}$$

OBS:

1. $\delta^2 = \Delta \nabla = \nabla \Delta$
2. Operadores de ordem mais elevada pode ser obtidos aplicando os operadores de primeira ordem repetidamente.
3. Se n for par e $m = \frac{n}{2}$, então:

$$\nabla^m \Delta^m = \delta^n$$

4. Operadores diferenciais podem ser aproximados por operadores de diferenças finitas.

$$\left. \begin{array}{l} \frac{d}{dx} \approx \frac{\Delta}{\Delta x} \\ \frac{d}{dx} \approx \frac{\nabla}{\nabla x} \\ \frac{d}{dx} \approx \frac{\delta}{\delta x} \end{array} \right| \begin{array}{l} \frac{d^2}{dx^2} \approx \frac{\Delta^2}{\Delta x^2} \\ \frac{d^2}{dx^2} \approx \frac{\nabla^2}{\nabla x^2} \\ \frac{d^2}{dx^2} \approx \frac{\nabla}{\nabla x} \left(\frac{\Delta}{\Delta x} \right) = \frac{\Delta}{\Delta x} \left(\frac{\nabla}{\nabla x} \right) \\ \frac{d^2}{dx^2} \approx \frac{\delta^2}{\delta x^2} \end{array}$$

3.3 Método da Diferenciação dos Polinômios de Interpolação de Newton

i). O polinômio de interpolação *forward* de *Newton* é:

$$g(x) = g(x_k + sh) = \sum_{n=0}^N \binom{s}{n} \Delta^n f_k \quad (3.7)$$

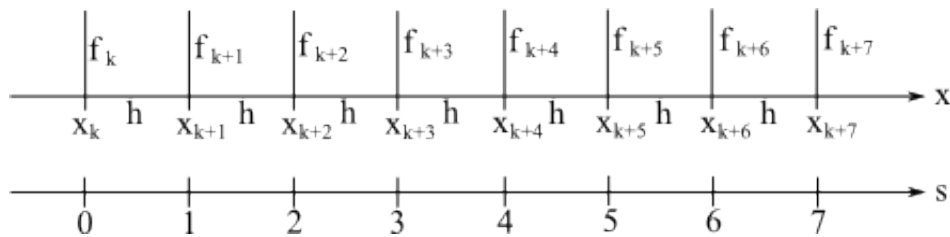


Figura 3.2: ?

$$s = \frac{x - x_k}{h} \quad (3.8)$$

$$\binom{s}{n} = \frac{s!}{n! (s-n)!} \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} g(x) &= g(x_k + sh) \\ &= f_k + s \Delta f_k + \frac{1}{2} s(s-1) \Delta^2 f_k + \frac{1}{6} s(s-1)(s-2) \Delta^3 f_k \\ &\quad + \frac{1}{24} s(s-1)(s-2)(s-3) \Delta^4 f_k + \dots + \binom{s}{N} \Delta^N f_k \end{aligned} \quad (3.10)$$

OBS:

O polinômio $g(x) = g(x_k + sh) = \sum_{n=0}^N \binom{s}{n} \Delta^n f_k$ tem ordem n e passa por $n+1$ pontos amostrais.

ii). Para $n = 2 \Rightarrow 3$ pontos

$$g(x) = f_k + s \Delta f_k + \frac{1}{2} s(s-1) \Delta^2 f_k \quad (3.11)$$

$$g'(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta f_k + \frac{1}{2} (2s-1) \Delta^2 f_k \right] \quad (3.12)$$

Para $s = 0, 1$ e 2 :

$$g'(x_k) = \frac{1}{2h} [2 \Delta f_k - \Delta^2 f_k] = \frac{1}{2h} [-f_{k+2} + 4f_{k+1} - 3f_k] \quad (3.13)$$

$$g'(x_{k+1}) = \frac{1}{2h} [2 \Delta f_k + \Delta^2 f_k] = \frac{1}{2h} [f_{k+2} - f_k] \quad (3.14)$$

$$g'(x_{k+2}) = \frac{1}{2h} [2 \Delta f_k + 3 \Delta^2 f_k] = \frac{1}{2h} [3f_{k+2} - 4f_{k+1} + f_k] \quad (3.15)$$

$k = i$ (*Forward 3 pontos*)

$$g'(x_i) = \frac{1}{2h} [2 \Delta f_i - \Delta^2 f_i] = \frac{1}{2h} [-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i] \quad (3.16)$$

$k + 1 = i$ (*Centrada 3 pontos*)

$$g'(x_i) = \frac{1}{2h} [2 \Delta f_{i-1} + \Delta^2 f_{i-1}] = \frac{1}{2h} [f_{i+1} - f_{i-1}] \quad (3.17)$$

$k + 2 = i$ (*Backward 3 pontos*)

$$g'(x_i) = \frac{1}{2h} [2 \Delta f_{i-2} + 3 \Delta^2 f_{i-2}] = \frac{1}{2h} [3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}] \quad (3.18)$$

iii). Erro

Se tivermos mais um ponto amostral, o polinômio interpolante representa melhor a função interpolada. Assim, o erro do polinômio de *Newton* é representado pelo termo que seria adicionado caso um ponto amostral a mais seja introduzido.

Se, por exemplo, aumentarmos de $n = 2$ para $n = 3$, o termo:

$$\frac{1}{6} s(s-1)(s-2) \Delta^3 f_k \quad (3.19)$$

seria acrescido à equação (3.11), e sua derivada seria

$$\frac{1}{6h} [3s^2 - 6s + 2] \Delta^3 f_k \quad (3.20)$$

Para

$$s = 0 \rightarrow \frac{1}{3h} \Delta^3 f_k \quad \text{Forward} \quad (3.21)$$

$$s = 1 \rightarrow \frac{1}{6h} \Delta^3 f_k \quad \text{Centrada} \quad (3.22)$$

$$s = 2 \rightarrow \frac{1}{3h} \Delta^3 f_k \quad \text{Backward} \quad (3.23)$$

OBS:

A e-enésima derivada de $g(x)$ de ordem n é:

$$\frac{d^n}{dx^n} g(x) = \frac{1}{h^n} \Delta^n f_i \quad (3.24)$$

Assim,

$$\Delta^n f_i \approx h^n f^{(n)}(x) \quad (3.25)$$

Portanto, as expressões (3.21) a (3.23) ficam:

$$\frac{1}{3} h^2 f_k''', \text{ para } s = 0$$

$$-\frac{1}{6} h^2 f_k''', \text{ para } s = 1$$

$$\frac{1}{3} h^2 f_k''', \text{ para } s = 2$$

3.4 Aproximação de Derivadas Parciais por Diferenças Finitas

A derivada parcial

$$f_{,x} = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} \quad \text{em } (x, y) = (x_0, y_0)$$

pode ser deduzida fixando-se $y = y_0$ e considerando-se $f(x, y_0)$ como uma função de uma variável. Assim, as aproximações de $f_{,x}$ por diferenças finitas são:

$$f_{,x} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - f(x_0, y_0)}{\Delta x} \quad \text{Forward}$$

$$f_{,x} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - f(x_0 - \Delta x, y_0)}{2 \Delta x} \quad \text{Central}$$

$$f_{,x} \approx \frac{f(x_0, y_0) - f(x_0 - \Delta x, y_0)}{\Delta x} \quad \text{Backward}$$

Diferenças centradas das derivadas parciais $f_{,xx}$, $f_{,yy}$ e $f_{,xy}$:

$$f_{,xx} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} f \approx \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - 2f(x_0, y_0) + f(x_0 - \Delta x, y_0)}{\Delta x^2}$$

$$f_{,yy} = \frac{\partial^2}{\partial y^2} f \approx \frac{f(x_0, y_0 + \Delta y) - 2f(x_0, y_0) + f(x_0, y_0 - \Delta y))}{\Delta y^2}$$

$$f_{,xy} = \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} f \approx \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) - f(x_0 + \Delta x, y_0 - \Delta y) - f(x_0 - \Delta x, y_0 + \Delta y) + f(x_0 - \Delta x, y_0 - \Delta y))}{4 \Delta x \Delta y}$$

3.4.1 Solução do Problema de Dirichlet

Deformação de uma membrana

$$\text{EDP: } \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \text{ em } x \in (0, 1) \text{ e } y \in (0, 1)$$

C.C.:

$$u = 0 \text{ em } \begin{cases} y = 1 \\ x = 0 \\ x = 1 \end{cases}$$

$$u(x, 0) = \sin(\pi x) \text{ com } x \in [0, 1]$$

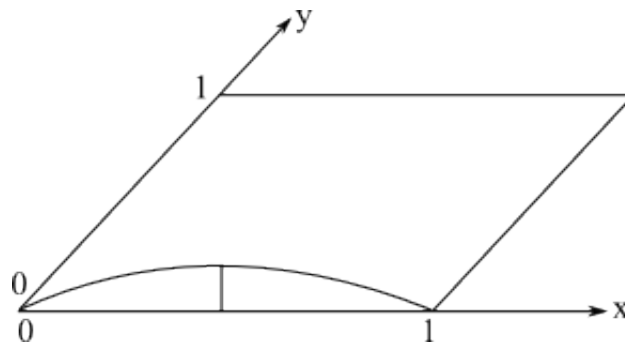


Figura 3.3: ?

Solução:

1. Discretizar o domínio numa grade de pontos:
2. Escreva a E.D.P. utilizando operadores diferenciais centrados no ponto (i, j) :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{h_x^2} (u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}) \tag{3.26}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{1}{h_y^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \tag{3.27}$$

Se $h_x = h_y = h$

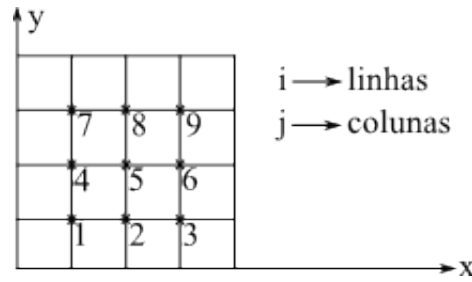
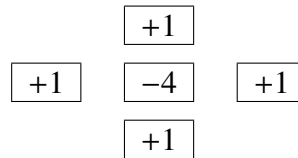


Figura 3.4: ?

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \approx \frac{1}{h^2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}) = 0 \quad (3.28)$$

3. Definir a célula diferencial



4. Aplicar a célula a cada ponto interior (P1 a P9):

$$\begin{matrix} P1 : \\ P2 : \\ P3 : \\ P4 : \\ P5 : \\ P6 : \\ P7 : \\ P8 : \\ P9 : \end{matrix} \begin{bmatrix} -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} \sin\left(\frac{\pi}{4}\right) \\ \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{3\pi}{4}\right) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \{0\}$$

Capítulo 4

Solução de Sistemas de Equações Algébricas Lineares

4.1 Métodos de Eliminação de Gauss e Gauss-Jordan

i). Gauss

$$\begin{array}{rrcr} 2x_1 & + & 1x_2 & - & 3x_3 & = & -1 \\ -1x_1 & + & 3x_2 & + & 2x_3 & = & 12 \\ 3x_1 & + & 1x_2 & - & 3x_3 & = & 0 \end{array}$$

Passo 1: Tornar os termos da primeira coluna abaixo da diagonal zero, utilizando combinação linear das linhas correspondentes com a primeira linha:

$$a'_{ij} = a_{ij} - a_{ij}/a_{11} \times a_{1j} \quad \begin{cases} i = 2, N \\ j = 1, N \end{cases}$$

$$-\frac{1}{2} \left\{ \begin{array}{rrcr} 2x_1 & + & 1x_2 & - & 3x_3 & = & -1 \\ -1x_1 & + & 3x_2 & + & 2x_3 & = & 12 \\ 3x_1 & + & 1x_2 & - & 3x_3 & = & 0 \\ 0x_1 & + & \frac{7}{2}x_2 & + & \frac{1}{2}x_3 & = & \frac{23}{2} \end{array} \right. \quad L'_2 = L_2 - \left(-\frac{1}{2}\right) L_1$$

$$\begin{array}{rrcr} 3x_1 & + & 1x_2 & - & 3x_3 & = & 0 \\ \frac{3}{2}2x_1 & + & \frac{3}{2}1x_2 & + & \frac{3}{2}(-3)x_3 & = & \frac{3}{2}(-1) \\ 0x_1 & - & \frac{1}{2}x_2 & ? & \frac{3}{2}x_3 & = & \frac{3}{2} \end{array} \quad L'_3 = L_3 - \left(-\frac{3}{2}\right) L_1$$

4.2 Método de Eliminação de Gauss Padrão com Pivotação

Notas: O método da eliminação de Gauss não funciona se o primeiro coeficiente da primeira linha for zero ou um coeficiente da diagonal se tornar zero durante o processo.

- Pivotação é usada para mudar a ordem seqüencial das linhas para:

- Evitar que o coeficiente da diagonal se torne zero.
- Trazer o maior coeficiente abaixo da diagonal para a diagonal.
- A mudança da ordem das linhas (equações) não afetam a solução do sistema.
- Mesmo que o termo da diagonal não seja zero, colocar um coeficiente dominante na diagonal melhora a precisão.

Exemplo 4.17

$$\begin{bmatrix} 0 & 10 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \\ 2 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 6 \\ 5 \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} L'_2 = L_2 - \frac{1}{0} L_1 \quad (\text{impossível}) \\ L'_3 = L_3 - \frac{2}{0} L_1 \quad (\text{impossível}) \end{array} \quad (4.1)$$

Troca linha 1 com linha 3:

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \\ 0 & 10 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 6 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} L_1 \\ L'_2 = L_2 - \frac{1}{2} L_1 \\ L'_3 = L_3 - \frac{0}{2} L_1 \end{array} \quad (4.2)$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & -3/2 \\ 0 & 10 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 7/2 \\ 2 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Troca linha 2 com linha 3:

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 \\ 0 & 10 & 1 \\ 0 & 1 & -3/2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 7/2 \end{bmatrix} \quad L'_3 = L_3 - \frac{1}{10} L_2 \quad (4.4)$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 \\ 0 & 10 & 1 \\ 0 & 0 & -16/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \\ 33/5 \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

Retro-substituição:

$$x_3 = \frac{33}{5} : \frac{-16}{5} = -\frac{33}{5} \frac{5}{16} = -2.0625$$

$$x_2 = \frac{1}{10} [2 - 1(-2.0625)] = 0.40625$$

$$x_1 = \frac{1}{2} [5 - (4 \cdot 0.40625 + 1(-2.0625))] = 2.7187$$

Gauss-Jordan

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 3/5 \\ 0 & 10 & 1 \\ 0 & 0 & -16/5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21/5 \\ 2 \\ 33/5 \end{bmatrix} \quad L'_1 = L_1 - \frac{2}{5} L_2$$

Divisão de $L_3 : (-16/5)$

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 3/5 \\ 0 & 10 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 21/5 \\ 2 \\ -2.0625 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} L'_1 &= L_1 - \frac{3/5}{1} L_3 \\ L'_2 &= L_2 - \frac{1}{1} L_3 \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5.4375 \\ 4.0625 \\ -2.0625 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.71875 \\ 0.40625 \\ -2.06250 \end{bmatrix}$$

Nota: Se a pivotação não impedir que apareça zero na diagonal, o problema é não resolví-vel.

Exemplo 4.18

Exemplo real:

$$\begin{bmatrix} 1.334 \cdot 10^{-4} & 4.123 \cdot 10^1 & 7.912 \cdot 10^2 & -1.544 \cdot 10^3 \\ 1.777 & 2.367 \cdot 10^{-5} & 2.070 \cdot 10^1 & -9.035 \cdot 10^1 \\ 9.188 & 0 & -1.0150 \cdot 10^1 & 1.988 \cdot 10^{-4} \\ 1.002 \cdot 10^2 & 1.442 \cdot 10^4 & -7.014 \cdot 10^2 & 5.321 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -711.5698662 \\ -67.87297633 \\ -0.961801200 \\ 13824.12100 \end{bmatrix}$$

Solução:

i). *Precisão simples*

i	x_i (s/pivotação)	x_i (c/pivotação)
1	0.95506	0.99998
2	1.00816	1.
3	0.96741	1.
4	0.98352	1.

ii). *Precisão dupla*

i	x_i (s/pivotação)	x_i (c/pivotação)
1	0.9999 9999 9801 473	1.0000 0000 0000 002
2	1.0000 0000 0000 784	1.0000 0000 0000 000
3	0.9999 9999 9984 678	1.0000 0000 0000 000
4	0.9999 9999 9921 696	1.0000 0000 0000 000

4.3 Problemas não resolvíveis

OBS: Nem sempre um sistema de equações é resolvível:

- i).
- ii).
- iii).

$$\begin{aligned} -x + y &= 1 \\ -2x + 2y &= 2 \end{aligned}$$

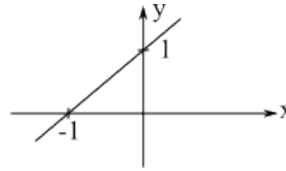


Figura 4.1: ?

$$\begin{aligned} -x + y &= 1 \\ -x + y &= 0 \end{aligned}$$

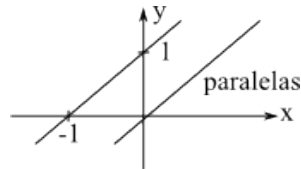


Figura 4.2: ?

No conjunto:

- i). As duas equações são idênticas. Qualquer ponto satisfazendo uma equação satisfaz outra. Assim, o sistema tem infinitas soluções (linearmente independentes).
- ii). Inconsistente se lado esquerdo de uma das equações for eliminado por combinação linear das outras equações, enquanto o lado direito permanece diferente de zero.
- iii). Duas incógnitas e três equações nunca são satisfeitas simultaneamente.

Solução única (condições necessárias):

- Número de equações igual ao número de incógnitas.
- Equações são L.I. (linearmente independentes)

4.4 Matrizes, Vetores e Inversão de Matrizes

- Matrizes quadradas e retangulares.
- Operações: adição, subtração, multiplicação e divisão
 - Divisão $B^{-1}A = C$ só existe se B for quadrada.
- Vetores
- Produto de matriz por vetor

$$\begin{aligned} -x + y &= 1 \\ x + 2y &= -2 \\ 2x - y &= 0 \end{aligned}$$

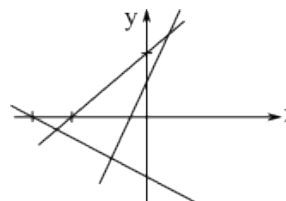


Figura 4.3: ?

4.4.1 Matriz Nula

$$A_{ij} = 0$$

4.4.2 Matriz Identidade

$$I = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases}$$

4.4.3 Matriz Transposta de A

$$A^T \Rightarrow a_{ij}^T = a_{ji}$$

4.4.4 Matriz Inversa

A^{-1} de uma matriz quadrada

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

Se $BA = I$ ou $AB = I$ então $B = A^{-1}$

4.4.5 Matriz Ortogonal

Matrizes cujas colunas são ortogonais entre si:

$$Q^T Q = I; Q Q^T = I; Q^T = Q^{-1}$$

4.4.6 Vetor Nulo

$$a_i = 0$$

4.4.7 Vetor Unitário

$$u = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; v = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} w = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$u = \frac{\vec{u}}{|\vec{u}|}$$

4.4.8 Vetor Transposto

$$v = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} v^T = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{bmatrix}$$

4.4.9 Inversão de uma Matriz

$$Ax = y$$

Suponha que o processo de eliminação de Gauss-Jordan seja resumido na operação matricial.

$$GAx = Gy$$

Fazendo $GA = I$, temos:

$$Ix = Gy$$

Assim

$$G = A^{-1} \text{ ou } GI = A^{-1}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Aplicar Gauss-Jordan ou Gauss “padrão” (pivotação pode ser utilizada).

$$[A][X] = [I]$$

Exemplo 4.19

Calcule a inversa de

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

Resposta:

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0.27272 & 0.27272 & -0.09090 \\ -0.90909 & 0.09090 & 0.63636 \end{bmatrix}$$

4.5 Decomposição LU

$$A = LU$$

L = matriz triangular inferior com diagonal 1

U = matriz triangular superior com diagonal $\neq 1$

$$Ax = y \Rightarrow L U x = y \text{ ou } \begin{matrix} Lz = y \\ Ux = z \end{matrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1j} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2j} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ij} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nj} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kj} = \begin{cases} \sum_{k=1}^i l_{ik} u_{kj}, & \text{se } i \leq j \\ \sum_{k=1}^j l_{ik} u_{kj}, & \text{se } i > j \end{cases}$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ii} u_{ij} \Rightarrow u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ij} u_{jj} \Rightarrow l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}}{u_{jj}}$$

Resumo:

- i). Qualquer matriz não singular pode ser decomposta na forma $A = LU$.
- ii). Se um sistema de equações lineares tiver de ser resolvido repetidamente para múltiplos lados ?direitos?, a decomposição LU é recomendada.
- iii). A matriz U é idêntica a obtida no processo de eliminação de Gauss.
- iv). LU é útil no cálculo do determinante.

4.6 Cálculo de Determinante

A toda matriz quadrada $A = [a_{ij}]$ de ordem n cujos elementos são números complexos, associa-se um único número denominado determinante de A .

$$\det A \text{ ou } |A|$$

Se E for o conjunto de matrizes quadradas de ordem n e C for o conjunto dos números complexos, podemos construir $f : E \rightarrow C$ de modo que

1. Se $n = 1$, $A = [a_{11}]$ e $\det A = a_{11}$

2. Se $n \geq 2$, $\det A = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+1} a_{i1} D_{i1}$

onde D_{i1} é o menor complementar do elemento a_{i1} de A (determinante da matriz obtida eliminando-se a linha i e a coluna 1 de A)

Chamando-se $A_{ij} = (-1)^{i+j} D_{ij}$ de cofator do elemento a_{ij} , podemos escrever

$$\det A = \sum_{i=1}^n a_{i1} A_{i1}$$

O teorema de Laplace generaliza esta definição para

$$\det A = \sum_{i=1}^n a_{ij} A_{ij} \text{ fixando-se } j, 1 \leq j \leq n$$

ou

$$\det A = \sum_{j=1}^n a_{ij} A_{ij} \text{ fixando-se } i, 1 \leq i \leq n$$

4.6.1 Propriedades dos Determinantes

P1: $\det M^T = \det M$.

P2: Se os elementos de uma linha (coluna) de uma matriz quadrada $M = [a_{ij}]$, de ordem n , forem todos iguais a zero, então $\det M = 0$.

P3: Multiplicando-se uma linha (ou coluna) de uma matriz quadrada $M = [a_{ij}]$ por um número k , o determinante da nova matriz $N = [b_{ij}]$ que se obtém será:

$$\det N = k \det M$$

P4: Se a coluna q de uma matriz quadrada $M = [a_{ij}]$ de ordem n puder ser escrita como:

$$a_{iq} = b_{iq} + c_{iq}$$

então $\det M = \det M' + \det M''$ onde M' é igual a M trocando-se a coluna q por b_{iq} e M'' é a matriz obtida procurando-se a coluna q de M por c_{iq} .

P5: Se $[N]_{n \times m}$ é obtida de $[M]_{n \times m}$ trocando-se duas linhas (ou colunas) então:

$$\det N = -\det M$$

P6: Se duas linhas ou colunas de M forem iguais, então:

$$\det N = 0$$

P7: (Teorema de *Cauchy*) O produto escalar de uma linha (ou coluna) pelo vetor de cofatores de uma outra linha (ou coluna) é zero.

P8: Se duas linhas (ou colunas) de $[M]_{n \times n}$ forem proporcionais, então:

$$\det M = 0$$

P9: Se a matriz quadrada $[M]_{n \times n}$ tem uma linha (ou coluna) que é combinação linear das outras linhas (ou colunas), então:

$$\det M = 0$$

P10: Se adicionarmos a uma linha (ou coluna) de $[M]_{n \times n}$ uma combinação linear das outras formando uma matriz $[N]_{n \times n}$, então:

$$\det N = \det M$$

P11: Se $[M]_{n \times n}$ for triangular, $\det M$ é o produto dos elementos da diagonal:

$$\det M = a_{11} a_{22} a_{33} \dots a_{nn}$$

P12: Se $[M]_{n \times n}$ for triangular com relação à diagonal secundária, então:

$$\det M = (-1)^{\frac{n(n-1)}{2}} \times (\text{Produto dos termos da diagonal secundária})$$

P13: Se $[N]_{n \times n} = k [M]_{n \times n}$ então:

$$\det [N] = k^n (\det [M])$$

P14: (Teorema de Binet) Se $[C]_{n \times n} = [A]_{n \times n} [B]_{n \times n}$, então

$$\det [C] = (\det [A]) (\det [B])$$

4.6.2 Cálculo Numérico do Determinante de $[A]_{n \times n}$

$$[A] = [L][U]$$

$$\text{Por P14} \Rightarrow \det [A] = \det [L] \det [U]$$

$$\text{Por P11} \Rightarrow \det [L] = 1 \text{ e } \det [U] = \prod_{i=1}^n u_{ii}$$

OBS: Como $[U]$ pode ser obtida por eliminação de Gauss padrão podemos utilizar “forward ? ?”

4.7 Problemas Mal Condicionados

São problemas resolvíveis cujas soluções podem ser bastante imprecisas devido a erros de arredondamento.

Por exemplo,

$$\begin{cases} 0.12065x + 0.98775y = 2.01045 & (A) \\ 0.12032x + 0.98755y = 2.00555 & (B) \end{cases}$$

OBS: (A) e (B) são bem parecidas

$$x_1 = 14.7403$$

$$y_1 = 0.23942$$

Simulando um erro nos coeficientes da equação (A)

$$2.01045 \rightarrow 2.01045 + 0.001 = 2.01145$$

$$\begin{cases} 0.12065x + 0.98775y = 2.01145 & (A') \\ 0.12032x + 0.98755y = 2.00555 & (B) \end{cases}$$

$$x_2 = 17.9756$$

$$y_2 = -0.15928$$

OBS:

- Pequenas mudanças em outros coeficientes causam mesmo tipo de comportamento.
- Erros de arredondamento nos coeficientes podem ocorrer durante o próprio processo de solução.

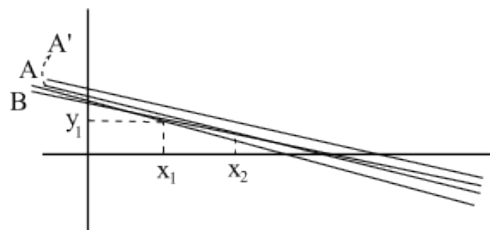


Figura 4.4: ?

Notas:

1. A matriz dos coeficientes de um problema mal condicionado apresenta os seguintes sintomas:

(a) $a_{ij} + \delta^{\text{PEQUENO}} \rightarrow x_k + \Delta^{\text{GRANDE}}$

(b) $a_{ii} < a_{kj}, k \neq j$ (geralmente)

(c) $\det[A] \det[A]^{-1} \neq 1 \quad (1 \pm \Delta)$

(d) $[A^{-1}]^{-1} \neq A$

(e) $AA^{-1} \neq I$

(f) $A^{-1}(A^{-1})^{-1}$ mais diferente de I do que AA^{-1}

2. Pivotação melhora a precisão se o problema for “moderadamente” mal condicionado.

3. O melhor procedimento é tentar aumentar ao máximo a precisão (*double*)

Cray → Precisão simples 8 bytes (64 bits)
→ Precisão dupla 16 bytes (128 bits)

OBS: *Singular Value Decomposition of a Matrix*

$$[A_{m \times n}] = [U_{m \times n}] [W_{n \times n}] [V_{n \times n}]^T$$

U e V são matrizes cujas colunas são ortonormais:

$$\sum_{i=1}^m U_{ik} U_{ij} = \delta_{kj} \begin{cases} 1 \leq k \leq n \\ 1 \leq j \leq n \end{cases}$$

$$\sum_{i=1}^n V_{ik} V_{ij} = \delta_{kj} \begin{cases} 1 \leq k \leq n \\ 1 \leq j \leq n \end{cases}$$

$$[A_{n \times n}]^{-1} = [V] \begin{bmatrix} \ddots & & \\ & 1/w & \\ & & \ddots \end{bmatrix} [U]^T$$

$$c = \text{condition number} = \frac{\text{Max}(w_i)}{\text{Min}(w_i)}$$

- Se c for infinito $\Rightarrow A$ é singular.
- Se c muito grande $\Rightarrow A$ é mal condicionada.

$$\text{– muito grande} \Rightarrow \frac{1}{c} \approx \begin{cases} 10^{-6} & \text{Precisão simples} \\ 10^{-12} & \text{Precisão dupla} \end{cases}$$

4.8 Soluções de Sistemas de Equações com M equações e N incógnitas

Seja

$$Ax = y$$

Se $\det A = 0$, a solução do sistema não é única.
Por exemplo,

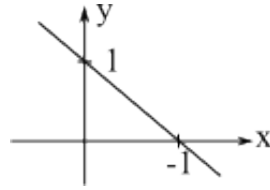


Figura 4.5: ?

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} (A) \\ (B) \end{matrix}$$

Solução de (B): $S_B = \{ \forall (x, y) \mid (x, y) \in \mathbb{R}^2 \}$

Solução de (A): $S_A = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid y = 1 - x \}$

$$S_B \cap S_A = S_A$$

$S_A = \text{reta } (y = 1 - x)$

Por exemplo,

$$\begin{cases} -1u + 2v + 2w + x - 2y = 2 \\ 3u - 6v - w + 5x - 4y = 1 \\ 2u - 4v - 1.5w + 2x - y = -0.5 \end{cases}$$

u	v	w	x	y	l.d.
-1	2	2	1	-2	2
3	-6	-1	5	-4	1
2	-4	-1.5	2	-1	-0.5

i) Pivotação

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} 3 & -6 & -1 & 5 & -4 & 1 \\ -1 & 2 & 2 & 1 & -2 & 2 \\ 2 & -4 & -1.5 & 2 & -1 & -0.5 \end{bmatrix} & \begin{matrix} L'_2 = L_2 + \frac{1}{3}L_1 \\ L'_3 = L_3 - \frac{2}{3}L_1 \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} 3^{(\text{PIVÔ})} & -6 & -1 & 5 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 5/3^{(\text{PIVÔ})} & 8/3 & -10/3 & -7/3 \\ 0 & 0 & -5/6 & -4/3 & 5/3 & -7/6 \end{bmatrix} & L'_3 = L_3 - \frac{1}{2}L_2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & -6 & -1 & 5 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 5/3 & 8/3 & -10/3 & -7/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 0 & 5/3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u = 0.8 + 2v - 2.2x + 2y \\ w = 1.4 - 1.6x + 2y \end{bmatrix}$$

Exemplo 2: Gauss-Jordan

u	v	w	x	y	l.d.
2	3	1	4	1	6
2	3	1	1	-1	1
4	6	-1	1	2	5

i) Pivotação

$$\left\{ \begin{array}{cccccc|l} 4 & 6 & -1 & 1 & 2 & 5 & (: 4) \\ 2 & 3 & 1 & 1 & -1 & 1 & L'_2 = L_2 - 2 L_1 \\ 2 & 3 & 1 & 4 & 1 & 6 & L'_3 = L_3 - 2 L_1 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{cccccc|l} 1 & 1.5 & -0.25 & 0.25 & 0.5 & 1.25 & L'_1 = L_1 + 0.25 L_2 \\ 0 & 0 & 1.5 & 0.5 & -2 & -1.5 & (: 1.5) \\ 0 & 0 & 1.5 & 3.5 & 0 & 3.5 & L'_3 = L_3 - 1.5 L_2 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{cccccc|l} 1 & 1.5 & 0 & 0.3333 & 0.1667 & 1 & \\ 0 & 0 & 1 & 0.3333 & -1.3333 & -1 & \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 2 & 5 & (: 3) \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{cccccc|l} 1 & 1.5 & 0 & 1/3 & 1/6 & 1 & L'_1 = L_1 - \frac{1}{3} L_3 \\ 0 & 0 & 1 & 1/3 & -4/3 & -1 & L'_2 = L_2 - \frac{1}{3} L_3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2/3 & 5/3 & \end{array} \right.$$

OBS: As variáveis básicas são aquelas cujos coeficientes são unitários e os únicos não nulos na coluna.

$$u = \frac{4}{9} - \frac{3}{2}v + \frac{1}{18}y$$

$$w = -\frac{14}{9} + \frac{14}{9}y$$

$$x = \frac{5}{3} + \frac{2}{3}y$$

Capítulo 5

Autovetores e Autovalores

5.1 Introdução

Considere a matriz

$$A = \begin{bmatrix} 16 & -24 & 18 \\ 3 & -2 & 0 \\ -9 & 18 & -17 \end{bmatrix} \quad (5.1)$$

Em geral, para vetores $\{x\} \in \mathbb{R}^3$

$$[A] \{x\} = \{y\} \quad (5.2)$$

onde $\{y\} \neq \{x\}$ e $\{y\} \in \mathbb{R}^3$.

De todos os vetores $\{x\} \in \mathbb{R}^3$ existem vetores $\{x^*\}$ tal que

$$[A] \{x^*\} = \lambda \{x^*\} \quad (5.3)$$

ou seja, $\{y\}$ é proporcional a $\{x^*\}$.

Definição 5.1: Os vetores $\{x\}$ que satisfazem 5.3 são chamadas **auto-vetores** de $[A]$.

Definição 5.2: As constantes de proporcionalidade, λ , são chamadas de **auto-valores**.

Por exemplo,

$$\begin{bmatrix} 16 & -24 & 18 \\ 3 & -2 & 0 \\ -9 & -18 & -17 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} = 4 \begin{Bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (5.4)$$

OBS: Para que $\{x\}$ e $\{y\}$ pertençam ao mesmo espaço vetorial, a matriz A tem que ser quadrada. Assim, só matrizes quadradas possuem auto-valores e auto-vetores.

Como encontrar os auto-valores e auto-vetores de A ?

$$\begin{aligned} A x &= \lambda x \\ \Rightarrow A x &= \lambda I x \\ \Rightarrow [A - \lambda I] \{x\} &= \{0\} \quad (\text{Sist. de Eq. Homogêneas}) \end{aligned} \quad (5.5)$$

onde $[A - \lambda I]$ é a matriz característica.

$$\begin{bmatrix} 16 - \lambda & -24 & 18 \\ 3 & -2 - \lambda & 0 \\ -9 & 18 & -17 - \lambda \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (5.6)$$

Se $\det [A - \lambda I] \neq 0$ a solução do sistema é $\{x\} = \{0\}$. Para que $\{x\} \neq \{0\}$, então:

$$\det [A - \lambda I] = 0 \quad (5.7)$$

Para a matriz $[A - \lambda I]$ na equação 5.6, $\det [A - \lambda I] = 0$ leva

$$\begin{aligned} \lambda^3 + 3\lambda^2 - 36\lambda + 32 &= 0 \\ \Downarrow \\ (\lambda - 4)(\lambda - 1)(\lambda + 8) &= 0 \end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned} \lambda &= 4 \\ \lambda &= 1 \\ \lambda &= -8 \end{aligned}$$

são auto-valores de $[A]$.

Forma geral para matrizes de ordem n :

$$\begin{aligned} (A - \lambda I) q &= 0 \\ \det (A - \lambda I) &= 0 \Leftrightarrow \lambda^n + c_{n-1} \lambda^{n-1} + \dots + c_1 \lambda + c_0 = 0 \end{aligned}$$

5.1.1 Propriedades dos Auto-Valores

i). a equação característica pode ser fatorada na forma

$$(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2) \dots (\lambda - \lambda_n) = 0$$

Assim, uma matriz de ordem n tem n auto-valores não necessariamente distintos.

ii). A soma dos termos da diagonal de A é chamada de traço de A . Assim,

$$\text{tr}(A) = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn} = -c_{n-1} = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n$$

iii). $\det(A) = (-1)^n c_0 = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n$

Assim uma matriz singular deve ter pelo menos um auto-valor nulo.

iv). Sabendo-se que $\det A = \det A^T$, então os auto-valores de A e de A^T são idênticos.

v). A equação característica com coeficientes reais deve ter auto-valores reais ou um par de auto-valores conjugados complexos. $(a \pm bi)$

vi). Os auto-valores de uma matriz simétrica com coeficientes reais são reais.

vii). Se A for triangular

$$\det(A - \lambda I) = (a_{11} - \lambda)(a_{22} - \lambda) \dots (a_{nn} - \lambda) = 0$$

Assim, os termos da diagonal são auto-valores.

viii). Trocas de linhas e colunas correspondentes não afetam os auto-valores da matriz.

ix). Se a linha i de A é multiplicada por f e a coluna i de A é dividida por f , os auto-valores não mudam.

5.2 Método de Interpolação

1. Transforma o polinômio característico em um polinômio de interpolação *forward* de Newton.
 2. Converte o polinômio *forward* de Newton em uma série de potências.
 3. Calcula as raízes da função pelo método de Bairstow.
- Matriz de ordem $N \Rightarrow$ polinômio característico de grau N .
 - Se construirmos uma tabela $\lambda \times f(\lambda)$ para $n + 1$ valores uniformemente espaçados de λ , então $f(\lambda)$ pode ser expresso por um polinômio de interpolação *forward* de Newton.

$$f(\lambda) = g(s) = \sum_{n=0}^N \binom{s}{n} \Delta^n f_0$$

com

$$f_i = f(\lambda_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, N$$

$$s = \frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta \lambda}$$

$$\lambda_i = \lambda_{i-1} + \Delta \lambda$$

- Como são calculados os f_i 's ?

$$f_i = f(\lambda_i) = \det(A - \lambda_i I)$$

- Como escolhemos λ_0 e λ_N ?

Teorema de Gerschgorin (discos de *Gerschgorin*)

Considere que os autovetores estão normalizados de forma que o maior elemento fique igual a 1. Assim, se o maior elemento do autovetor q é o k -ésimo,

$$\lambda - a_{kk} = \sum_{j \neq k} a_{kj} q_j$$

como

$$|q_j| \leq 1 \Rightarrow |\lambda - a_{kk}| \leq \sum_{j \neq k} |a_{kj}|$$

Antes de calcularmos os autovetores, não podemos saber qual a linha k do termo máximo. Assim, os autovalores λ estão na união dos discos centrados em cada um dos termos a_{kk} da matriz A com raio igual a

$$\sum_{j \neq k} |a_{kj}|$$

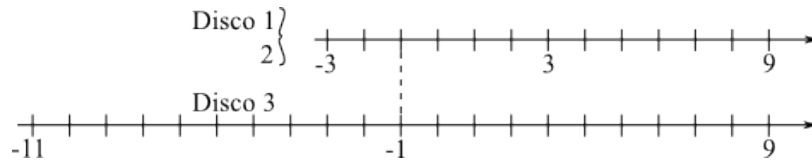


Figura 5.1: ?

Por exemplo, o determinante de λ_0 e λ_N para a matriz

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & 5 \\ 1 & 3 & 5 \\ 5 & 5 & -1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{array}{l} r = 1 + 5 = 6 \\ r = 1 + 5 = 6 \\ r = 5 + 5 = 10 \end{array}$$

$$\boxed{\lambda_0 = -11} \quad \text{e} \quad \boxed{\lambda_N = 9}$$

– Como transformar $g(s) = \sum_{n=0}^N \binom{s}{n} \Delta^n f_0$ em $g(s) = f_0 + \sum_{i=1}^N b_i s^i$

$$\binom{s}{n} = \frac{s(s-1)(s-2)\dots(s-n+1)}{n!} = \sum_{i=1}^n c_{n,i} s^i \quad n \geq 1$$

$$\begin{aligned} g(s) &= f_0 + \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^n c_{n,i} s^i \Delta^n f_0 = f_0 + \sum_{i=1}^N \left(\sum_{n=1}^N c_{n,i} \Delta^n f_0 \right) s^i \\ &= f_0 + \sum_{i=1}^N b_i s^i \end{aligned}$$

onde

$$b_i = \sum_{n=i}^N c_{n,i} \Delta^n f_0$$

$$c_{n,i} = \frac{(-1)^{n+i}}{n} \left[\sum_{k=1}^{\frac{(n-1)!}{(i-1)!(n-i)!}} \frac{1}{\alpha_k} \right]$$

onde α_k são as combinações $(i-1)$ a $(i-1)$ dos $(n-1)$ primeiros números naturais.

– Coeficientes de Markov, $c_{n,i}$

$$\sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^n c_{n,i} s^i \Delta^n f_0$$

$n \setminus i$	1	2	3	4	5	6
1	1					
2	-1/2	1/2				
3	1/3	-1/2	1/6			
4	-1/4	11/24	-1/4	0.04167		
5	1/5	-5/12	0.29167	-0.08333	0.00833	
6	-1/6	137/360	-0.31250	0.11806	-0.02083	0.00039

Tabela 5.1: Coeficientes de Markov.

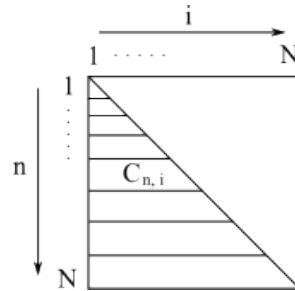


Figura 5.2: ?

$$\sum_{i=1}^N \left(\sum_{n=i}^N c_{n,i} \Delta^n f_0 \right) s^i$$

$$c_{6,5} = \frac{(-1)^{6+5}}{6} \left[\sum_{k=1}^{\frac{(6-1)!}{(5-1)!(6-5)!}} \frac{1}{\alpha_k} \right] = \frac{-1}{6} \left[\sum_{k=1}^{\frac{5!}{4!1!}} \frac{1}{\alpha_k} \right] = \frac{-1}{6} \sum_{k=1}^5 \frac{1}{\alpha_k}$$

$\{1\ 2\ 3\ 4\ 5\} \equiv (n-1)$ primeiros números naturais

Combinações 4 a 4

$$\begin{aligned} 1\ 2\ 3\ 4 &\Rightarrow 1 \times 2 \times 3 \times 4 = 24 = \alpha_1 \\ 1\ 2\ 3\ 5 &\Rightarrow 1 \times 2 \times 3 \times 5 = 30 = \alpha_2 \\ 2\ 3\ 4\ 5 &\Rightarrow 2 \times 3 \times 4 \times 5 = 120 = \alpha_3 \\ 1\ 3\ 4\ 5 &\Rightarrow 1 \times 3 \times 4 \times 5 = 60 = \alpha_4 \\ 1\ 2\ 4\ 5 &\Rightarrow 1 \times 2 \times 4 \times 5 = 40 = \alpha_5 \end{aligned}$$

$$c_{6,5} = \frac{-1}{6} \left[\frac{1}{24} + \frac{1}{30} + \frac{1}{40} + \frac{1}{60} + \frac{1}{120} \right] = -\frac{1}{48} = -0.02083$$

Exemplo 5.20

Encontre a série de potências da equação característica

$$f(\lambda) = \det \begin{bmatrix} 3-\lambda & 4 & -2 \\ 3 & -1-\lambda & 1 \\ 2 & 0 & 5-\lambda \end{bmatrix}$$

Solução: $g(\lambda) = -71 + \lambda + 7\lambda^2 - \lambda^3$

$$\begin{aligned} & (3-\lambda)(-1-\lambda)(5-\lambda) + 8 - (2)(-2)(-1-\lambda) - 12(5-\lambda) \\ = & (-3-2\lambda+\lambda^2)(5-\lambda) + 8 + 4(-1-\lambda) - 60 + 12\lambda \\ = & -15 - 10\lambda + 5\lambda^2 + 3\lambda + 2\lambda^2 - \lambda^3 + 8 - 4 - 4\lambda - 60 + 12\lambda \\ g(\lambda) = & -71 + \lambda + 7\lambda^2 - \lambda^3 \end{aligned}$$

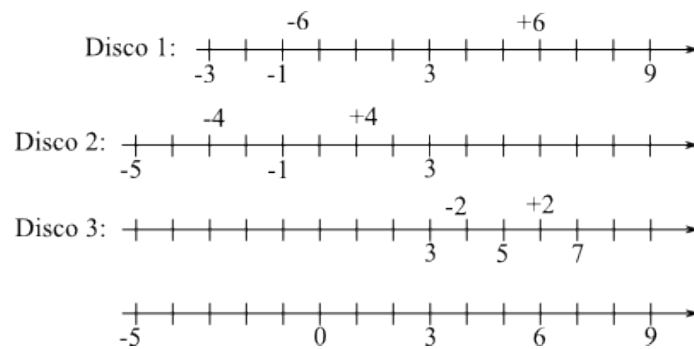


Figura 5.3: ?

$$f(0) = \det \begin{bmatrix} 3 & 4 & -2 \\ 3 & -1 & 1 \\ 2 & 0 & 5 \end{bmatrix} = -15 + 8 - 4 - 60 = -71$$

$$f(3) = \det \begin{bmatrix} 0 & 4 & -2 \\ 3 & -4 & 1 \\ 2 & 0 & 2 \end{bmatrix} = 8 - 16 - 24 = -32$$

$$f(6) = \det \begin{bmatrix} -3 & 4 & -2 \\ 3 & -7 & 1 \\ 2 & 0 & -1 \end{bmatrix} = -21 + 8 - 28 + 12 = -29$$

$$f(9) = \det \begin{bmatrix} -6 & 4 & -2 \\ 3 & -10 & 1 \\ 2 & 0 & -4 \end{bmatrix} = -240 + 8 - 40 + 48 = -224$$

$$g(s) = f(?) + b_1 s + b_2 s^2 + b_3 s^3$$

$$b_1 = c_{1,1} \Delta^1 f_0 + c_{2,1} \Delta^2 f_0 + c_{3,1} \Delta^3 f_0 = 1 \times (-32 + 71) - \frac{1}{2} ($$

$$b_2 = c_{2,2} \Delta^2 f_0 + c_{3,2} \Delta^3 f_0$$

$$b_3 = c_{3,3} \Delta^3 f_0$$

Exemplo 5.21

Testar os métodos de autovalores e autovetores considerando a matriz simétrica M :

$$M = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 5 \end{bmatrix}$$

Achando a equação característica do problema de autovalores e autovetores associado à matriz M dada:

$$f(\lambda) \equiv \det [M - \lambda I] = 0$$

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

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

Logo:

$$\lambda^3 - 12\lambda^2 + 38\lambda - 29 = 0$$

Sabendo que uma matriz simétrica com coeficientes reais tem apenas autovalores reais, vamos utilizar o teorema dos discos de Gerschgorin para determinar um intervalo no eixo dos números reais que contém os autovalores de M .

$$M = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 5 \end{bmatrix}$$

Os autovalores λ estão na união dos discos centrados em cada um dos termos a_{kk} da matriz M com raio igual a:

$$\sum_{j \neq k} |a_{kj}|$$

Ou seja, para a_{11} temos:

$$\text{raio} = |a_{12}| + |a_{13}| = 3, \text{ centro em: } (4,0)$$

Para a_{22} temos:

$$\text{raio} = |a_{21}| + |a_{23}| = 4, \text{ centro em: } (3,0)$$

Para a_{33} temos:

$$\text{raio} = |a_{31}| + |a_{32}| = 3, \text{ centro em: } (5,0)$$

Para definirmos o λ_0 e o λ_n , basta pegarmos o menor e o maior valor alcançado pelos círculos de Gerschgorin com as características acima.

$$\lambda_0 = -1$$

$$\lambda_n = 8$$

Exemplo 5.22

Iremos calcular uma das raízes do polinômio característico, desenvolvido no exemplo anterior, pelo método de Newton-Raphson com precisão de 4 casas decimais. Deflacionaremos o polinômio característico e acharemos as outras raízes resolvendo o polinômio de segundo grau resultante do processo de deflação.

Temos a seguinte equação como equação característica encontrada da matriz M :

$$\lambda^3 - 12\lambda^2 + 38\lambda - 29 = 0$$

Usando o método e newton-raphson:

$$f(x) = \lambda^3 - 12\lambda^2 + 38\lambda - 29$$

$$f'(x) = 3\lambda^2 - 24\lambda + 38$$

$$\varepsilon = 0,0001$$

Usaremos como estimativa inicial $x_0 = 1$, então teremos:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

substituindo:

$$x_1 = 1 - \frac{-2}{17} = 1,117647059$$

testando critérios de parada, temos $|f(x_0)| = 2$ e $|x_1 - x_0| = 0,1176$, devemos continuar:

$$x_2 = 1,117647059 - \frac{-0,122939138}{14,923875429} = 1,125884808$$

testando critérios de parada, temos $|f(x_1)| = 0,122939138$ e $|x_2 - x_1| = 0,008237749$, devemos continuar:

$$x_3 = 1,125884808 - \frac{-0,000586233}{14,781614411} = 1,125923468$$

testando critérios de parada, temos $|f(x_2)| = 0,000586233$ e $|x_3 - x_2| = 0,00003866$, temos agora que $|x_3 - x_2| < \varepsilon$, então devemos parar. Logo, temos como primeira raiz aproximada de $f(x)$ o valor 1,125923468. Devemos agora achar as outras raízes.

Como temos que uma das raízes é aproximadamente 1,125923468 podemos usar a regra de Ruffini para deflacionar $f(x)$ com o r sendo igual à raiz encontrada anteriormente. Teremos então,

\emptyset		+1	-12	+38		-29
-	-	-	-	-	-	-
+1,125923468		\emptyset	1,125923468	-12,24337796		+28,999985211
-	-	-	-	-	-	-
\emptyset		+1	-10,874076532	+25,75662204		-0,000014789

Temos então a equação: $x^2 + -10,874076532x + 25,75662204$ e como resto $-0,000014789$. Tirando as outras raízes:

$$x^2 + -10,874076532x + 25,75662204 = 0$$

$$\Delta = (-10,874076532)^2 - 4 * 1 * 25,75662204 = 15,219052264$$

$$\sqrt{\Delta} = 3,901160374$$

$$x = \frac{-(-10,874076532) \pm 3,901160374}{2 * 1}$$

$$x_1 = 3,486458079$$

$$x_2 = 7,387618453$$

Logo, temos como raízes para a função $f(x) = \lambda^3 - 12\lambda^2 + 38\lambda - 29$ os valores $x_1 = 3,486458079$, $x_2 = 7,387618453$ e $x_3 = 1,125923468$.

Exemplo 5.23

Calcularemos os autovetores correspondentes aos autovalores encontrados no exemplo anterior, resolvendo os três sistemas de equações lineares homogêneas pelo método de eliminação de Gauss.

Para encontrarmos os autovetores da matriz M em questão temos que encontrar o vetor de x que satisfaça a seguinte equação (7.1.5b página 259): $\bar{M}x = 0$ onde $\bar{M} = [M - \lambda]$ e x é um vetor da forma

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

Temos então, teremos:

$$\begin{bmatrix} (4 - \lambda) & 2 & 1 \\ 2 & (3 - \lambda) & 2 \\ 1 & 2 & (5 - \lambda) \end{bmatrix} * \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Iremos então usar eliminação de Gauss com o $\lambda \approx 1,1259$, temos então:

$$\begin{bmatrix} 2,8741 & 2 & 1 \\ 2 & 1,8741 & 2 \\ 1 & 2 & 3,8741 \end{bmatrix}$$

No primeiro passo temos como pivô $a_{11} = 2,8741$:

$$m_{21} = a_{21}/\text{pivô} = 2/2,8741 = 0,6958$$

$$m_{31} = a_{31}/\text{pivô} = 1/2,8741 = 0,3479$$

Teremos então que transformar a linha 2 usando a seguinte fórmula: $L_2 = L_2 - m_{21} * L_1$. E a linha 3 usando a fórmula: $L_3 = L_3 - m_{31} * L_1$. Teremos a matriz seguinte como resultado:

$$\begin{bmatrix} 2,8741 & 2 & 1 \\ 0 & 0,4825 & 1,3042 \\ 0 & 1,3041 & 3,5261 \end{bmatrix}$$

No segundo passo, escolhemos como pivô $a_{22} = 0,4825$:

$$m_{32} = a_{32}/\text{pivô} = 1,3041/0,4825 = 2,7036$$

Teremos então que transformar a linha 3 da matriz usando a seguinte fórmula: $L_3 = L_3 - m_{32} * L_2$. Teremos a matriz seguinte como resultado:

$$M_2 = \begin{bmatrix} 2,8741 & 2 & 1 \\ 0 & 0,4825 & 1,3042 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Temos então que:

$$M_2 * x = 0$$

$$\begin{bmatrix} 2,8741 & 2 & 1 \\ 0 & 0,4825 & 1,3042 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} * \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$2,8741x_1 + 2x_2 + x_3 = 0$$

$$0,4825x_2 + 1,3042x_3 = 0$$

Teremos para escolhido $x_3 = 1$ que o auto-vetor é:

$$V = \begin{pmatrix} 1 \\ -2,703 \\ 1,533 \end{pmatrix}$$

5.3 Método de Householder para Matrizes Simétricas

Considere o operador de *Householder* dado por:

$$[P] = [I] - 2\{e\}\{e\}^T \quad (5.8)$$

onde $\{e\}$ é um vetor unitário, isto é, $\{e\} \cdot \{e\} = 1$.

Considere o produto $[P][P]^T = [M]$. Assim,

$$M_{ij} = P_{ik} P_{kj}^T = P_{ik} P_{jk} = (I_{ik} - 2e_i e_k)(I_{jk} - 2e_j e_k) \quad (5.9)$$

OBS: Assumimos que índices repetidos no monômio implicam \sum_1^n .

$$\begin{aligned} M_{ij} &= I_{ik} I_{jk} - 2I_{ik} e_j e_k - 2e_i e_k I_{jk} + 4e_i e_j \underbrace{e_k e_k}_1 \\ &= I_{ij} - 2e_j e_i - 2e_i e_j + 4e_i e_j \\ &= \delta_{ij} - 4e_i e_j + 4e_i e_j = I_{ij} \\ [M] &= [I] \Rightarrow [P][P]^T = [I] \end{aligned} \quad (5.10)$$

Logo $[P]^T = [P]^{-1} \Rightarrow [P]$ é ortogonal (ortonormal).
 $[P]$ é simétrica?

$$P_{ij} = \delta_{ij} - 2e_i e_j = \delta_{ji} - 2e_j e_i = P_{ji} \quad (5.11)$$

Assim, $[P] = [P]^T \Rightarrow [P]$ é simétrica.

Considere a transformação de um vetor $\{a\}$ pelo operador de *Householder*:

$$[P]\{a\} = \{b\} \quad (5.12)$$

Vamos criar o vetor $\{e\}$ em 5.8 a partir do vetor $\{a\}$ como se segue:

i). Defina s como o comprimento de $\{a\}$. Assim,

$$s = \sqrt{\{a\} \cdot \{a\}} = \sqrt{\{a\}^T \{a\}} \quad (5.13)$$

ii). Defina um vetor $\{c\}$ tal que

$$\{c\} = \{a_1 + s(\text{sinal de } a_1), a_2, a_3, \dots, a_n\} \quad (5.14)$$

iii). Defina $\{e\}$ como o vetor unitário na direção de $\{c\}$:

$$\{e\} = \frac{\{c\}}{\sqrt{\{c\}^T \{c\}}} = \frac{\{c\}}{\|\{c\}\|} \quad (5.15)$$

Verifiquemos o que ocorre com a transformação 5.12:

$$[P] \{a\} = \left[I - 2 \frac{c c^T}{c^T c} \right] \{a\} = \{a\} - \frac{2 \{c\} (\{c\}^T \{a\})}{\{c\}^T \{c\}} \quad (5.16)$$

Mas

$$\begin{aligned} c^T a &= [a_1 + s(S^{a_1})] a_1 + \sum_{j=2}^n a_j^2 = \sum_{j=1}^n a_j^2 + a_1 s(S^{a_1}) \\ &= s^2 + a_1 s(S^{a_1}) \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} c^T c &= (a_1 + s(S^{a_1}))^2 + \sum_{j=2}^n a_j^2 = \sum_{j=1}^n a_j^2 + s^2 + 2 a_1 s(S^{a_1}) \\ &= 2 (s^2 + a_1 s(S^{a_1})) \end{aligned} \quad (5.18)$$

Substituindo-se 5.17 e 5.18 em , obtemos:

$$[P] \{a\} = \{a\} - \frac{2 \{c\} (s^2 + a_1 s(S^{a_1}))}{2 (s^2 + a_1 s(S^{a_1}))} = \{a\} - \{c\} \quad (5.19)$$

$$\{b\} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a_1 + s(S^{a_1}) \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -s(S^{a_1}) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.20)$$

Se quisermos zerar os últimos $(n - 2)$ termos da primeira coluna de $[A]_{n \times n}$, podemos construir um operador de *Householder* do seguinte modo:

i). Defina s como o comprimento do vetor $\{a\}_{n-1}$ formado pelos últimos $(n - 1)$ termos da coluna 1 de $[A]$:

$$s_1 = \sqrt{\sum_{j=2}^n A_{j1}^2} \quad (5.21)$$

ii). Defina um vetor $\{c\}_1$ tal que:

$$\{c\}_1 = \{0, A_{21} + s(S^{A_{21}}), A_{31}, \dots, A_{n1}\} \quad (5.22)$$

iii). Defina

$$\{e\}_1 = \frac{\{c\}_1}{\{c\}} = \frac{\{c\}_1}{\sqrt{\{c\}_1^T \{c\}_1}} \quad (5.23)$$

iv).

$$\underline{\underline{P}}_1 = \underline{\underline{I}} - 2 \underline{\underline{e}}_1 \underline{\underline{e}}_1^T \quad (5.24)$$

$$P_1 A_1 = \begin{bmatrix} x & x & x & \dots & x \\ s_1 & x & x & \dots & x \\ 0 & x & x & \dots & x \\ 0 & x & x & \dots & x \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & x & x & \dots & x \end{bmatrix} \quad (5.25)$$

Se multiplicarmos $[P_1 A_1]$ por $[P_1]^T$ teremos:

$$A_2 = P_1 A_1 P_1^T = \begin{bmatrix} x & s_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ s_1 & x & x & x & \dots & x \\ 0 & x & x & x & \dots & x \\ 0 & x & x & x & \dots & x \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & x & x & x & \dots & x \end{bmatrix} \quad (5.26)$$

Se a matriz P_1 do primeiro passo zera os últimos $[n - (1 + 1)]$ termos da coluna 1 e da linha 1 da matriz $A_1 = A$ gerando a matriz A_2 , a matriz P_2 do segundo passo zera os últimos $[n - (2 + 1)]$ termos das colunas 2 e da linha 2 da matriz A_2 , gerando a matriz A_3 . Assim, no passo k a matriz P_k zera os últimos $[n - (k + 1)]$ termos da coluna k e da linha k da matriz A_k , gerando a matriz A_{k+1} .

Após $n - 2$ passos de *Householder*, chegamos a uma matriz tridiagonal T .

$$[T] = [H]^T [A] [H] \quad (5.27)$$

onde a matriz de *Householder* H é:

$$[H] = P_1^T P_2^T \dots P_{n-2}^T \quad (5.28)$$

As equações 5.27 e 5.28 necessitam de $\frac{2n^3}{3}$ multiplicações, aproximadamente.

Mostraremos que as transformações de *Householder* não afetam os auto-valores do problema original.

$$\det(A_1 - \lambda I) \quad (5.29)$$

$$\det(P_1 A_1 P_1^T - \lambda^* I) = \det(A_2 - \lambda^* I) \quad (5.30)$$

De 5.30 e 5.10 temos

$$\begin{aligned}
& \det(P_1 A P_1^T - \lambda^* P_1 P_1^T) \\
&= \det(P_1 A P_1^T - \lambda^* P_1 I P_1^T) \\
&= \det(P_1 A P_1^T - P_1 \lambda^* I P_1^T) \\
&= \det[P_1 (A - \lambda^* I) P_1^T] \\
&= \det P_1 \det(A - \lambda^* I) \det P_1^T \\
&= \det P_1 \det P_1^{-1} \det(A - \lambda^* I) \\
&= \det(A - \lambda^* I)
\end{aligned}$$

Assim, o polinômio característico 5.29 é idêntico ao polinômio característico 5.30.

Exemplo 5.24

Tridiagonalize a matriz simétrica:

$$A = \begin{bmatrix} 1.36 & -0.48 & -1.00 & 0.00 \\ -0.48 & 1.64 & 0.00 & 0.00 \\ -1.00 & 0.00 & 1.36 & 0.48 \\ 0.00 & 0.00 & 0.48 & 1.64 \end{bmatrix}$$

Solução:

Passo 1:

$$i). \quad s_1 = \sqrt{\sum_{j=2}^4 A_{j1}^2} = \sqrt{(-0.48)^2 + (-1.00)^2 + 0^2} = 1.109$$

$$s_1^2 = 1.230$$

$$ii). \quad \underline{c}_1 = \{0, -0.48 - 1.109, -1, 0\} = \{0, -1.589, -1.0, 0\}$$

$$iii). \quad \underline{e}_1 = \frac{\underline{c}_1}{1.878} = \{0^{(Z)}, -0.8464^{(X)}, -0.5326^{(Y)}, 0^{(W)}\}$$

$$iv). \quad \underline{P}_1 = \underline{I} - 2 \underline{e}_1 \underline{e}_1^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.4327 & -0.9015 & 0 \\ 0 & -0.9015 & 0.4327 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$v). \quad \underline{A}_2 = \underline{P}_1 \underline{A}_1 \underline{P}_1^T = \begin{bmatrix} 1.360 & 1.109 & 0 & 0 \\ 1.109 & 1.412 & 0.1092 & -0.4327 \\ 0 & 0.1092 & 1.588 & 0.2077 \\ 0 & -0.4327 & 0.2077 & 1.640 \end{bmatrix}$$

Passo 2:

$$i). \quad s_2 = \sqrt{\sum_{j=3}^4 A_{j2}^2} = \sqrt{(0.1092)^2 + (-0.4327)^2} = 0.4463$$

$$s_2^2 = 0.1992$$

$$\begin{aligned} \text{ii). } \tilde{c}_2 &= \{0, 0, 0.1092 + 0.4463i, -0.4327\} \\ &= \{0, 0, 0.5555, -0.4327\} \end{aligned}$$

$$\text{iii). } e_2 = \{0, 0, 0.7889, -0.6145\}$$

$$\text{iv). } \tilde{P}_2 = \tilde{I} - 2 \tilde{e}_2 \tilde{e}_2^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0.2447 & 0.9696 \\ 0 & 0 & 0.9696 & 0.2447 \end{bmatrix}$$

$$\text{v). } \tilde{A}_3 = \tilde{P}_2 \tilde{A}_2 \tilde{P}_2^T = \begin{bmatrix} 1.360 & 1.109 & 0 & 0 \\ 1.109 & 1.412 & -0.4463 & 0 \\ 0 & -0.4463 & 1.538 & 0.1953 \\ 0 & 0 & 0.1953 & 1.689 \end{bmatrix}$$

OBS: Esta matriz poderia ter sido obtida por

$$T = A_3 = H^T A H$$

onde

$$H = P_1^T P_2^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0.4327 & 0.2206 & -0.8741 \\ 0 & -0.9015 & -0.1059 & 0.4196 \\ 0 & 0 & 0.9696 & 0.2447 \end{bmatrix}$$

5.3.1 Autovalores de uma Matriz Tridiagonal

Como calcularemos os autovalores de uma matriz tridiagonal?

$$T = \begin{array}{c|cccccccc|c} a_1 & b_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_3 & b_3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & a_4 & b_4 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-4} & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-3} & b_{n-3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-3} & a_{n-2} & b_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & b_{n-1} & a_n \end{array}$$

Chamemos $T_n \equiv T - \lambda I$. Assim, o polinômio característico de T pode ser escrito como:

$$\det(T_n) = \det(T - \lambda I) \quad (5.31)$$

Como calcularemos $\det(T_n)$?

$$\det(T_n) = [a_n - \lambda] \cdot \det(T_{n-1}) - b_{n-1} \cdot D_{n,(n-1)} \quad (5.32)$$

onde T_{n-1} é a matriz obtida eliminando-se a linha e a coluna n da matriz T_n e $D_{n,(n-1)}$ é o menor complementar do elemento $T_{n,(n-1)}$ da matriz T_n , ou seja, o determinante da matriz obtida após a eliminação da linha n e da coluna $(n-1)$ (vide figura abaixo).

$$T = \begin{array}{c|cccccccc|c|c} a_1 - \lambda & b_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_2 - \lambda & b_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_3 - \lambda & b_3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & a_4 - \lambda & b_4 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-4} & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-3} - \lambda & b_{n-3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-3} & a_{n-2} - \lambda & b_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b_{n-2} & a_{n-1} - \lambda & b_{n-1} \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & b_{n-1} & a_n - \lambda \end{array}$$

$$D_{n,(n-1)} = \begin{array}{c|cccccccc|c} a_1 - \lambda & b_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_2 - \lambda & b_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_3 - \lambda & b_3 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_3 & a_4 - \lambda & b_4 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-4} & & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-3} - \lambda & b_{n-3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-3} & a_{n-2} - \lambda & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & b_{n-2} & b_{n-1} \end{array}$$

O determinante $D_{n,(n-1)}$ pode ser determinado por

$$D_{n,(n-1)} = b_{n-1} \cdot \det(T_{n-2}) \quad (5.33)$$

Substituindo-se 5.33 em 5.32, obtemos

$$\det(T_n) = [a_n - \lambda] \cdot \det(T_{n-1}) - [b_{n-1}]^2 \cdot \det(T_{n-2}) \quad (5.34)$$

Chamando-se $p_i = \det(T_i)$ o polinômio característico associado a sub-matriz T_i formada pelas i primeiras linhas e colunas da matriz T_n e em vista da expressão 5.34 podemos escrever

$$p_i(\lambda) = [a_i - \lambda] \cdot p_{i-1}(\lambda) - [b_{i-1}]^2 \cdot p_{i-2}(\lambda) \quad (5.35)$$

Observe que a equação característica, para a qual desejamos obter as raízes, é

$$p_n(\lambda) = [a_n - \lambda] \cdot p_{n-1}(\lambda) - [b_{n-1}]^2 \cdot p_{n-2}(\lambda) = 0 \quad (5.36)$$

que recorre a polinômios característicos das submatrizes principais de ordens 1 a $n-1$ recursivamente. Assim, $p_n(\lambda)$ pode ser calculado pela seguinte *seqüência de Sturn*

$$\begin{aligned}
p_0(\lambda) &= 1 \\
p_1(\lambda) &= [a_1 - \lambda] \cdot p_0(\lambda) \\
p_2(\lambda) &= [a_2 - \lambda] \cdot p_1(\lambda) - [b_1]^2 \cdot p_0(\lambda) \\
p_3(\lambda) &= [a_3 - \lambda] \cdot p_2(\lambda) - [b_2]^2 \cdot p_1(\lambda) \\
&\vdots \\
&\vdots \\
&\vdots \\
p_i(\lambda) &= [a_i - \lambda] \cdot p_{i-1}(\lambda) - [b_{i-1}]^2 \cdot p_{i-2}(\lambda) \\
&\vdots \\
&\vdots \\
&\vdots \\
p_n(\lambda) &= [a_n - \lambda] \cdot p_{n-1}(\lambda) - [b_{n-1}]^2 \cdot p_{n-2}(\lambda) = 0
\end{aligned} \tag{5.37}$$

Obs: A seqüência de Sturm tem a seguinte propriedade: cada raiz de um polinômio $p_i(\lambda)$ fica entre duas raízes consecutivas do polinômio de ordem inferior $p_{i-1}(\lambda)$, exceto a primeira e a última raiz de $p_i(\lambda)$. Assim, podemos utilizar o método da bisseção para calcularmos os autovalores da matriz tridiagonalizada.

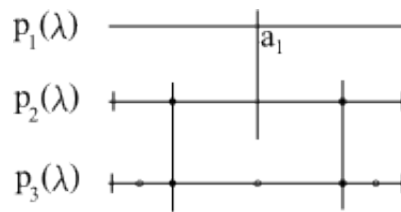


Figura 5.4: ?

5.4 Método da Potência

Três versões:

- i). Regular → calcula o maior autovalor.
- ii). Inverso → calcula o menor autovalor.
- iii). Deslocado (*shifted*) → calcula qualquer autovalor.

5.4.1 Regular

Suponha que $\underset{\approx}{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$ é diagonalizável, isto é,

$$\underset{\approx}{X}^{-1} \underset{\approx}{A} \underset{\approx}{X} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix} \tag{5.38}$$

onde

$$\underline{\tilde{X}} = [\underline{\tilde{x}}_1 , \underline{\tilde{x}}_2 , \dots , \underline{\tilde{x}}_n] \quad (5.39)$$

$\underline{\tilde{x}}_i$ é o i -ésimo autovetor.

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_n| \quad (5.40)$$

Dada a norma Euclideana e um vetor $\underline{q}^{(0)} \in \mathbb{C}^N$, o método da potência produz uma sequência de vetores $\underline{q}^{(k)}$ como se segue (assume-se $\lambda_1 \in \mathbb{R}$):

for $k = 1, 2, \dots$

$$\underline{\tilde{Z}}^{(k)} = \underline{\tilde{A}} \underline{q}^{(k-1)} \quad (5.41)$$

$$\underline{q}^{(k)} = \underline{\tilde{Z}}^{(k)} / \| \underline{\tilde{Z}}^{(k)} \|_2 \quad (5.42)$$

$$\lambda^{(k)} = [\underline{q}^{(k)}]^H \underline{\tilde{A}} \underline{q}^{(k)} \quad (5.43)$$

end

onde

$$\| \underline{\tilde{Z}}^{(k)} \|_2 = [(Z_1^{(k)})^2 + (Z_2^{(k)})^2 + \dots + (Z_n^{(k)})^2]^{1/2} \quad (5.44)$$

$$[\underline{q}^{(k)}]^H \text{ Transposta Hermitiana de } \underline{q}^{(k)} \quad (5.45)$$

Convergência do Método

Se

$$\underline{q}^{(0)} = a_1 \underline{\tilde{x}}_1 + a_2 \underline{\tilde{x}}_2 + \dots + a_n \underline{\tilde{x}}_n \quad (5.46)$$

e $a_1 \neq 0$, então

$$\begin{aligned} \underline{\tilde{A}} \underline{q}^{(0)} &= a_1 \underline{\tilde{A}} \underline{\tilde{x}}_1 + a_2 \underline{\tilde{A}} \underline{\tilde{x}}_2 + \dots + a_n \underline{\tilde{A}} \underline{\tilde{x}}_n = \\ &= a_1 \lambda_1 \underline{\tilde{x}}_1 + a_2 \lambda_2 \underline{\tilde{x}}_2 + \dots + a_n \lambda_n \underline{\tilde{x}}_n \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$\underline{\tilde{A}}^2 \underline{q}^{(0)} = a_1 \lambda_1^2 \underline{\tilde{x}}_1 + a_2 \lambda_2^2 \underline{\tilde{x}}_2 + \dots + a_n \lambda_n^2 \underline{\tilde{x}}_n \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} \underline{\tilde{A}}^k \underline{q}^{(0)} &= a_1 \lambda_1^k \underline{\tilde{x}}_1 + a_2 \lambda_2^k \underline{\tilde{x}}_2 + \dots + a_n \lambda_n^k \underline{\tilde{x}}_n = \\ &= a_1 \lambda_1^k \left[\underline{\tilde{x}}_1 + \sum_{j=2}^n \frac{a_j}{a_1} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right)^k \underline{\tilde{x}}_j \right] \end{aligned} \quad (5.49)$$

Mas

$$\underline{q}^{(k)} = \frac{1}{\prod_{i=0}^{k-1} \| \underline{\tilde{A}} \underline{q}^{(i)} \|} \underline{\tilde{A}}^k \underline{q}^{(0)} \stackrel{(6)}{=} \frac{a_1 \lambda_1^k}{\prod_{i=0}^{k-1} |\lambda^{(?)|}} \left[\underline{\tilde{x}}_1 + \sum_{j=2}^n \frac{a_j}{a_1} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right) ??? \right] \quad (5.50)$$

Assim, à medida que $k \rightarrow \infty$, $\tilde{q}^{(k)}$ se aproxima de \tilde{x}_1 e a cada iteração a diferença entre $\tilde{q}^{(k)}$ e \tilde{x}_1 é da ordem de $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k$.

Quando a ordem 5.40 ocorre, dizemos que λ_1 é o autovalor dominante.

OBS: O método da potência converge se λ_1 é dominante e se $\tilde{q}^{(0)}$ tiver uma componente na direção de \tilde{x}_1 (autovetor dominante).

5.4.2 Inverso

Considere o problema de auto-valores

$$\tilde{A} \tilde{x} = \lambda \tilde{x} \quad (5.51)$$

Assim, pre-multiplicando 5.51 por \tilde{A}^{-1} e dividindo por λ

$$\frac{1}{\lambda} \tilde{A}^{-1} \tilde{A} \tilde{x} = \tilde{A}^{-1} \tilde{x} \Rightarrow \tilde{A}^{-1} \tilde{x} = \frac{1}{\lambda} \tilde{x} \quad (5.52)$$

Equação 5.52 é o problema de autovalores

$$\tilde{A}^{-1} \tilde{x} = \bar{\lambda} \tilde{x} \quad (5.53)$$

onde

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\lambda} \quad (5.54)$$

Observa-se que os autovalores do problema 5.53 são recíprocos dos autovalores do problema 5.51. Se aplicarmos o método regular ao problema 5.53 encontraremos o autovalor dominante de \tilde{A}^{-1} que corresponde a $1/\lambda_n$.

Dada a norma Euclideana e um vetor $\tilde{q}^{(0)} \in \mathbb{C}^N$, o método da potência produz uma sequência de vetores $\tilde{q}^{(k)}$ como se segue:

for $k = 1, 2, \dots$

$$\tilde{Z}^{(k)} = \tilde{A}^{-1} \tilde{q}^{(k-1)} \text{ ou resolva o sistema } \tilde{A} \tilde{Z}^{(k)} = \tilde{q}^{(k-1)} \quad (5.55)$$

$$\tilde{q}^{(k)} = \tilde{Z}^{(k)} / \|\tilde{Z}^{(k)}\|_2 \quad (5.56)$$

$$\bar{\lambda}^{(k)} = [\tilde{q}^{(k)}]^H \tilde{A}^{-1} \tilde{q}^{(k)} \text{ ou } \frac{1}{\bar{\lambda}^{(k)}} = [\tilde{q}^{(k)}]^H \tilde{A} \tilde{q}^{(k)} \Rightarrow$$

$$\lambda_N^{(k)} = [\tilde{q}^{(k)}]^H \tilde{A} \tilde{q}^{(k)} \quad (5.57)$$

end

5.4.3 Deslocado (*Shifted*) ou *Wielandt*

Encontra qualquer autovalor desde que seja real e separado.
Considere

$$\underline{\underline{A}} \underline{\underline{q}}_i = \lambda_i \underline{\underline{q}}_i \quad (5.58)$$

subtraindo-se $\mu \underline{\underline{I}} \underline{\underline{q}}_i$ dos dois lados de 5.58, temos

$$(\underline{\underline{A}} - \mu \underline{\underline{I}}) \underline{\underline{q}}_i = (\lambda_i - \mu) \underline{\underline{q}}_i \quad (5.59)$$

chamando-se $\bar{A} = A - \mu I$, a equação 5.59 fica

$$\bar{A} \underline{\underline{q}}_i = \bar{\lambda}_i \underline{\underline{q}}_i \quad (5.60)$$

onde

$$\bar{\lambda}_i = \lambda_i - \mu \quad (5.61)$$

Considere agora o método inverso aplicado sobre o problema 5.60

$$\bar{A}^{-1} \underline{\underline{q}}_i = \frac{\lambda_i^*}{\underline{\underline{q}}_i} \quad (5.62)$$

onde

$$\lambda_i^* = \frac{1}{\bar{\lambda}_i} = \frac{1}{\lambda_i - \mu} \quad (5.63)$$

O problema 5.62 encontrará o autovalor dominante de \bar{A}^{-1} (ou o $\bar{\lambda}_n$ de \bar{A} , em 5.60).

Se escolhermos $\bar{\mu}$ próximo a λ_i e tal que $\lambda_i - \bar{\mu} > 0$, então $\lambda_i^* = \frac{1}{\lambda_i - \mu}$ será o autovalor dominante de \bar{A}^{-1} e $\bar{\lambda}_i = \lambda_i - \bar{\mu}$ será o menor autovalor de \bar{A} . Assim

$$\lambda_i = \bar{\lambda}_i + \bar{\mu} \quad (5.64)$$

5.5 Método da Iteração QR

- É um método de transformação.
- Os métodos de transformação utilizam as propriedades básicas dos autovalores na matriz

$$\underline{\underline{X}} = [\underline{\underline{x}}_1 \quad \underline{\underline{x}}_2 \quad \dots \quad \underline{\underline{x}}_n] \quad (5.65)$$

cujas colunas são os N autovetores da matriz $\underline{\underline{A}}$ do problema de autovalores

$$\underline{\underline{A}} \underline{\underline{x}}_i = \lambda_i \underline{\underline{x}}_i \quad (5.66)$$

A matriz \tilde{X} diagonaliza a matriz \tilde{A} , ou seja,

$$\tilde{X}^T \tilde{A} \tilde{X} = \tilde{\Lambda} \quad (5.67)$$

onde

$$\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) \quad (5.68)$$

O princípio básico dos métodos de transformação é construir \tilde{X} de forma iterativa aplicando transformações de similaridade com o objetivo de diagonalizar \tilde{A} .

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &= \tilde{A} \\ \tilde{A}_2 &= \tilde{P}_1^T \tilde{A}_1 \tilde{P}_1 \\ \tilde{A}_3 &= \tilde{P}_2^T \tilde{A}_2 \tilde{P}_2 = \tilde{P}_2^T \tilde{P}_1^T \tilde{A}_1 \tilde{P}_1 \tilde{P}_2 \\ &\vdots \\ \tilde{A}_{k+1} &= \tilde{P}_k^T \tilde{A}_k \tilde{P}_k = \tilde{P}_k^T \tilde{P}_{k-1}^T \dots \tilde{P}_2^T \tilde{P}_1^T \tilde{A} \tilde{P}_1 \tilde{P}_2 \dots \tilde{P}_{k-1} \tilde{P}_k \end{aligned} \quad (5.69)$$

Quando $k \rightarrow \infty$,

$$\tilde{A}_{k+1} \rightarrow \tilde{\Lambda} \quad (5.70)$$

5.5.1 Método de Jacobi

$$\tilde{A}_{k+1} = \tilde{P}_k^T \tilde{A}_k \tilde{P}_k \quad (5.71)$$

onde \tilde{P}_k é uma matriz ortonormal

$$\tilde{P}_k^T \tilde{P}_k = \tilde{I} \quad (5.72)$$

No método de Jacobi a matriz \tilde{P}_k é uma matriz de rotação selecionada de forma a zerar um elemento fora da diagonal de \tilde{A}_k .

Para zerar o elemento (i, j) .

$$\tilde{P}_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & \cos \theta & & -\sin \theta & & \\ & & & 1 & & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & \sin \theta & & & 1 & \cos \theta \\ & & & & & & 1 \\ & & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \\ \\ \\ i \\ \\ j \\ \\ \\ \end{matrix} \quad (5.73)$$

onde θ é o ângulo tal que

$$\begin{cases} \tan(2\theta) = \frac{2a_{ij}^{(k)}}{a_{ii}^{(k)} - a_{jj}^{(k)}} & \text{p/ } a_{ii}^{(k)} \neq a_{jj}^{(k)} \\ \theta = \frac{\pi}{4}, & \text{p/ } a_{ii}^{(k)} = a_{jj}^{(k)} \end{cases} \quad (5.74)$$

- Varreduras por linha ou por coluna $n(n-1)$ matrizes $P \approx$.
- Elementos que foram zerados podem deixar de ser zero durante o processo.
- Várias varreduras são necessárias.

$$\begin{aligned} A_{ij} = A_{ji} = 0 &= P_{ik}^T A_{kl} P_{lj} = P_{ji} A_{kl} P_{lj} \Rightarrow \\ 0 &= \sum_{l=1}^n \left[\sum_{k=1}^n P_{ki} A_{kl} \right] P_{lj} = \sum_{l=1}^n [P_{ii} A_{il} + P_{ji} A_{jl}] P_{lj} = \\ &= P_{ii} A_{ii} P_{ij} + P_{ii} A_{ij} P_{jj} + P_{ji} A_{ji} P_{ij} + P_{ji} A_{jj} P_{jj} \\ &= \cos \theta A_{ii} (-\sin \theta) + \cos \theta A_{ij} \cos \theta + \sin \theta A_{ji} (-\sin \theta) + \sin \theta A_{jj} \cos \theta \\ &= -\sin \theta \cos \theta (A_{ii} - A_{jj}) + (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) A_{ij} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \sin \theta \cos \theta (A_{ii} - A_{jj}) = (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) A_{ij} \\ \frac{\sin 2\theta}{\cos 2\theta} &= \frac{2A_{ij}}{A_{ii} - A_{jj}} \\ \boxed{\tan(2\theta) = \frac{2A_{ij}}{A_{ii} - A_{jj}}} \end{aligned}$$

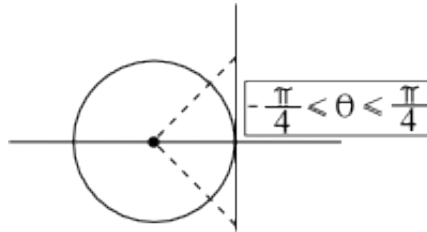


Figura 5.5: ?

A multiplicação em 5.71 afeta apenas os termos da matriz A_k nas linhas i e j e nas colunas i e j . Assim,

$$\begin{aligned} (A_{ii})_{k+1} &= (A_{ii} \cos^2 \theta + 2A_{ij} \cos \theta \sin \theta + A_{jj} \sin^2 \theta)_k \\ (A_{jj})_{k+1} &= (A_{ii} \sin^2 \theta - 2A_{ij} \cos \theta \sin \theta + A_{jj} \cos^2 \theta)_k \\ (A_{ij})_{k+1} &= (A_{ji})_{k+1} = 0 \\ (A_{li})_{k+1} &= (A_{il})_{k+1} = (A_{li} \cos \theta + A_{lj} \sin \theta)_k \\ (A_{lj})_{k+1} &= (A_{jl})_{k+1} = (-A_{li} \sin \theta + A_{lj} \cos \theta)_k \end{aligned} \quad (5.75)$$

5.5.2 Método QR

O passo básico do método é decompor a matriz $\underline{\underline{A}}$ na forma

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{R}} \quad (5.76)$$

onde $\underline{\underline{Q}}$ é uma matriz ortogonal e $\underline{\underline{R}}$ é uma matriz triangular superior.

Depois, formamos a matriz $\underline{\underline{R}} \underline{\underline{Q}}$

$$\underline{\underline{R}} \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{Q}}^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{Q}} \quad (5.77)$$

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{Q}} \underline{\underline{R}} \Rightarrow \underline{\underline{Q}}^T \underline{\underline{A}} \underline{\underline{Q}} = \underbrace{\underline{\underline{Q}}^T \underline{\underline{Q}}}_{\underline{\underline{I}}} \underline{\underline{R}} \underline{\underline{Q}} = \underline{\underline{R}} \underline{\underline{Q}}$$

OBS: O produto $\underline{\underline{R}} \underline{\underline{Q}}$ corresponde a uma transformação de similaridade em $\underline{\underline{A}}$.

Como obtemos a decomposição $\underline{\underline{Q}} \underline{\underline{R}}$?

Aplicamos matrizes de rotação de Jacobi para transformar $\underline{\underline{A}}$ em $\underline{\underline{R}}$. Assim

$$\underbrace{P_{n,n-1}^T \cdots P_{3,1}^T P_{2,1}^T}_{\underline{\underline{Q}}^T} \underline{\underline{A}} = \underline{\underline{R}} \quad (5.78)$$

Processo iterativo $\underline{\underline{A}}_1 = \underline{\underline{A}}$

(5.78)

$$\underline{\underline{A}}_k = \underline{\underline{Q}}_k \underline{\underline{R}}_k \quad (5.79)$$

$$\underline{\underline{A}}_{k+1} = \underline{\underline{R}}_k' \underline{\underline{Q}}_k' \quad (5.80)$$

$$\left. \begin{array}{l} \underline{\underline{A}}_{k+1} \rightarrow \underline{\underline{\Lambda}} \\ \underline{\underline{Q}}_1 \cdots \underline{\underline{Q}}_{k-1} \underline{\underline{Q}}_k \rightarrow \underline{\underline{X}} \end{array} \right\} k \rightarrow \infty$$

Se aplicarmos matrizes de rotação de Jacobi para transformar $\underline{\underline{A}}$ em $\underline{\underline{R}}$ (triangular superior).

Com $i > j$:

$$\begin{aligned} R_{ij} &= 0 = P_{ik}^T A_{kj} = P_{ki} A_{kj} \\ &= P_{ji} A_{jj} + P_{ii} A_{ij} \\ &= -\sin \theta A_{jj} + \cos \theta A_{ij} \Rightarrow \boxed{\tan \theta = \frac{A_{ij}}{A_{jj}}} \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} \sin \theta A_{jj} &= \cos \theta A_{ij} \Rightarrow \sin^2 \theta A_{ji}^2 - \cos^2 \theta A_{ij}^2 = 0 \\ \Rightarrow \sin^2 \theta A_{jj}^2 - (1 - \sin^2 \theta) A_{ij}^2 &= 0 \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \sin^2 \theta (A_{jj}^2 + A_{ij}^2) = A_{ij}^2 \Rightarrow \boxed{\sin \theta = \frac{A_{ij}}{\sqrt{A_{ij}^2 + A_{jj}^2}}}$$

$$\boxed{\cos \theta = \frac{A_{jj}}{\sqrt{A_{ij}^2 + A_{jj}^2}}}$$

Capítulo 6

Solução de Problemas de Valores Iniciais de Equações Diferenciais Ordinárias

6.1 Introdução

6.1.1 Problema da Queda Livre

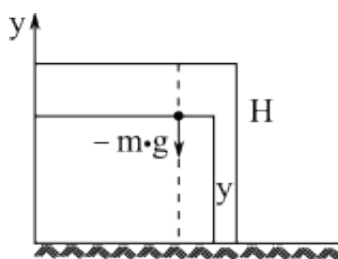


Figura 6.1: Problema de queda livre

Segunda Lei de Newton

$$-m g = m \frac{d^2 y}{dt^2} \Rightarrow \frac{d^2 y}{dt^2} = -g \quad (6.1)$$

Chamando-se $v = \frac{dy}{dt}$ reescrevemos 6.1 como

$$\frac{dv}{dt} = -g \quad (6.2)$$

Integrando-se 6.2, obtemos

$$v = - \int g dt = -g t + c_1 \Rightarrow v = -g t + c_1 \quad (6.3)$$

Assim

$$\frac{dy}{dt} = -g t + c_1 \quad (6.4)$$

Integrando-se 6.4, obtemos

$$y(t) = -\frac{1}{2} g t^2 + c_1 t + c_2 \quad (6.5)$$

Para determinarmos c_1 e c_2 , precisamos de duas condições iniciais. Em

$$t = 0 \Rightarrow \begin{cases} v = v_0 & (a) \\ y = y_0 & (b) \end{cases} \quad (6.6)$$

De 6.6.a e 6.3 temos

$$v_0 = -g \cdot 0 + c_1 \Rightarrow c_1 = v_0 \quad (6.7)$$

De 6.7, 6.6.b e 6.5 temos

$$y_0 = -\frac{1}{2} g \cdot 0^2 + v_0 \cdot 0 + c_2 \Rightarrow c_2 = y_0 \quad (6.8)$$

Assim, substituindo-se 6.7 e 6.8 em 6.5, temos

$$y(t) = y_0 + v_0 t - \frac{1}{2} g t^2 \quad (6.9)$$

$$v(t) = v_0 - g t \quad (6.10)$$

Suponha que o corpo é solto da altura H , isto é, as condições iniciais do problema são

$$\begin{aligned} v_0 &= 0 & (a) \\ y_0 &= H & (b) \end{aligned} \quad (6.11)$$

Assim a solução do problema $\frac{d^2 y}{dt^2} = -g$ é

$$\begin{aligned} y(t) &= H - \frac{1}{2} g t^2 & (a) \\ v(t) &= -g t & (b) \end{aligned} \quad (6.12)$$

6.1.2 Problema da Queda Livre com Resistência do Ar

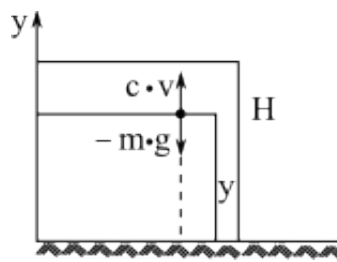


Figura 6.2: Problema de queda livre com resistência do ar

Segunda Lei de Newton

$$c v - m g = m \frac{d^2 y}{dt^2} \quad (6.13)$$

$$\frac{d^2 y}{dt^2} - \frac{c}{m} \frac{dy}{dt} + g = 0 \quad (6.14)$$

ou

$$\frac{dv}{dt} - \frac{c}{m} v + g = 0 \quad (6.15)$$

ou

$$\begin{cases} \frac{dv}{dt} = f(v, t) \\ \text{com } v(0) = v_0 \end{cases} \quad (6.16)$$

Estudaremos problemas do tipo 6.16 onde $f(v, t)$ pode, inclusive, ser uma função não-linear de v .

Como resolver o problema 6.15 ?

Método analítico

$$\begin{cases} v' - a v = b & (a) \\ v(0) = v_0 & (b) \end{cases} \quad (6.17)$$

Multiplicando-se 6.17.a por e^{-at} temos

$$e^{-at} (v' - a v) = e^{-at} b \quad (6.18)$$

Mas

$$\frac{d}{dt} (v e^{-at}) = v' e^{-at} - a v e^{-at} = e^{-at} (v' - a v) \quad (6.19)$$

Assim 6.18 fica

$$\frac{d}{dt} (v e^{-at}) = e^{-at} b \quad (6.20)$$

Integrando-se 6.20, temos

$$e^{-at} = -\frac{b}{a} e^{-at} + c_1 \quad (6.21)$$

Aplicando-se a condição inicial 6.17.b a 6.21, temos

$$e^0 v_0 = -\frac{b}{a} e^0 + c_1 - c_1 = v_0 + \frac{b}{a} \quad (6.22)$$

Substituindo-se 6.23 em 6.21 e multiplicando-se por e^{-at} , temos

$$\boxed{v(t) = v_0 e^{at} + \frac{b}{a} (e^{at} - 1)} \quad (6.23)$$

OBS: Exemplos de equações diferenciais ordinárias:

$$1^a \text{ ordem: } v' - a v = f(t)$$

$$2^a \text{ ordem: } v'' + p v + q v = f(t)$$

Exemplo 6.25

Resolveremos o problema de valor inicial dado nas equação abaixo de forma exata, usando a técnica mostrada em sala de aula para as seguintes condições iniciais: $y_0 = 2000m$ e $v_0 = -2m/s$. Considere $g = 10m/s^2$, $M = 50kg$ e o coeficiente de empuxo $k = 50N \cdot s/m$.

Dados:

$$M * \frac{d^2y(t)}{dt^2} = -M * g - k * v(t) \quad (1) \quad (6.24)$$

$$y(0) = y_0 \quad (2) \quad (6.25)$$

$$\frac{dy}{dt}(0) = v_0 \quad (3) \quad (6.26)$$

Temos que:

$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} = \frac{dv(t)}{dt} \quad (4)$$

Substituindo (4) em (1):

$$M * \frac{dv(t)}{dt} = -M * g - k * v(t)$$

Desenvolvendo:

$$\frac{dv(t)}{dt} = -g - \frac{k}{M} * v(t)$$

$$\frac{dv}{dt} = f(v, t)$$

$$v(0) = v_0$$

Usando o artifício mostrado na demonstração 6.18 da apostila, teremos:

$$a = \frac{k}{M}$$

$$e^{at}(v' + av) = -ge^{at}$$

$$e^{at} * \frac{dv(t)}{dt} = -g * e^{at} - a * v(t) * e^{at}$$

Integrando:

$$\int d(e^{at} * v(t)) = -g \int e^{at} dt$$

Teremos:

$$e^{at}v(t) = -g * \frac{e^{at}}{a} + c1$$

$$v(t) = \left(\frac{-g}{a}\right) + \frac{c1}{e^{at}}$$

Com $\frac{dy}{dt}(0) = v_0 = v(0)$, temos para $t = 0$:

$$v(0) = \left(\frac{-g}{a}\right) + \frac{c1}{e^{a*0}}$$

$$c1 = v_0 + \frac{g}{a}$$

Então:

$$v(t) = \left(\frac{-g}{a}\right) + \frac{v_0 + \frac{g}{a}}{e^{at}}$$

Desenvolvendo 3 em funcao de t:

$$\frac{dy}{dt}(t) = v(t)$$

$$dy(t) = v(t)dt$$

Integrando os 2 lados:

$$\int dy(t) = \int v(t)dt$$

$$y(t) = \int \left(\frac{-g}{a}\right)dt + \int \frac{v_0 + \frac{g}{a}}{e^{at}}dt$$

$$y(t) = \left(\frac{-g}{a}\right)t + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \int e^{-at}dt$$

$$y(t) = \left(\frac{-g}{a}\right)t + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \frac{e^{-at}}{-a} + c2$$

Para $y(0) = y_0$, temos:

$$y(0) = 0 + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \frac{1}{-a} + c2$$

$$c2 = y_0 + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \frac{1}{a}$$

Então,

$$y(t) = \left(\frac{-g}{a}\right)t + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \frac{e^{-at}}{-a} + y_0 + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \frac{1}{a}$$

$$y(t) = \left(\frac{-g}{a}\right)t + y_0 + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \left(\frac{1}{a}\right) * (1 - e^{-at})$$

Usando os valores dados como condições iniciais: $y_0 = 2000m$ e $v_0 = -2m/s$. Considere $g = 10m/s^2$, $M = 50kg$ e o coeficiente de empuxo $k = 50N * s/m$, teremos:

$$a = \frac{k}{M} = 1$$

Velocidade:

$$v(t) = \left(\frac{-g}{a}\right) + \frac{v_0 + \frac{g}{a}}{e^{at}} = \left(\frac{-10}{1}\right) + \frac{(-2) + \frac{10}{1}}{e^{1t}}$$

$$v(t) = -10 + \frac{8}{e^t}$$

Espaço:

$$y(t) = \left(\frac{-g}{a}\right)t + y_0 + \left(v_0 + \frac{g}{a}\right) * \left(\frac{1}{a}\right) * (1 - e^{-at})$$

$$y(t) = \left(\frac{-10}{1}\right)t + 2000 + \left(-2 + \frac{10}{1}\right) * \left(\frac{1}{1}\right) * (1 - e^{-1t})$$

$$y(t) = -10t + 2008 + -8 * e^{-t}$$

6.1.3 Métodos Numéricos para Problemas de Valor-Inicial

A solução exata do problema

$$\begin{cases} u' = f(t, u) & \text{E.D.O} \\ u(0) = u_0 & \text{I.C.} \end{cases}$$

É contínua no tempo. Nos métodos numéricos tentamos acompanhar a solução de forma discreta do tempo. Assim, começando de $u(0) = u_0$, damos um passo finito Δt de cada vez e esperamos que depois de n passos a solução numérica $u_n \approx u(n \Delta t)$.

Devemos nos preocupar com:

1. **Precisão:** o erro $u(n \Delta t) - u_n$ tem a seguinte forma $E = C(\Delta t)^p$. Para reduzir o erro podemos aumentar a ordem de precisão, p , ou diminuir Δt .
2. **Simplicidade:** o passo de u_n para u_{n+1} pode ser rápido ou vagaroso, dependendo da quantidade de vezes que calculamos $f(t, u)$.
3. **Estabilidade:** em cada passo, pequenos erros são introduzidos. Se o erro acumulado crescer de forma descontrolada o resultado é inútil.

Procedimento numérico (método da variável discreta): constrói valores aproximados

$$u_0, u_1, u_2, \dots, u_n, \dots$$

da solução exata nos tempos

$$t_0, t_1, t_2, \dots, t_n, \dots$$

dada por

$$u(t_0), u(t_1), u(t_2), \dots, u(t_n), \dots$$

Como determinar u_1 a partir de u_0 e $f(t_0, u_0)$?

Métodos

- *One-step* (passo-simples)
- *Stepwise* (passo-a-passo)
- *Starting methods* (de inicialização)

Precisam do conhecimento de u_n para determinar u_{n+1} .

Métodos

- *Multistep* (passo-múltiplo)
- *Continuing Methods* (de continuação)

Precisam do conhecimento de u_n, u_{n-1}, \dots para determinar u_{n+1}

OBS: Todo método de passo-múltiplo precisa de um método de inicialização (passo-simples) para obter os valores iniciais do método.

Qual a sensibilidade da solução com relação às condições iniciais ou a outros parâmetros do problema?

Convergência: $\Delta t \rightarrow 0 \Rightarrow y_i \rightarrow u(t_i)$?

Erros:

- Fórmula (ou truncamento, ou discretização)
- Erro de arredondamento

6.2 Métodos de Euler

6.2.1 Forward Euler

Dado o problema

$$\begin{cases} u' = f(u, t) \\ u(?) = u_0 \end{cases} \quad (6.27)$$

Substituindo-se a derivada u' pelo operador diferencial Δ

$$\frac{du}{dt} \approx \frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} \quad (6.28)$$

Assim

$$\begin{aligned} \frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} &= f(u_n, t_n) \\ \Rightarrow \boxed{u_{n+1} &= u_n + \Delta t f(u_n, t_n)} \end{aligned} \quad (6.29)$$

Começando da condição inicial temos

$$\begin{aligned}
u_1 &= u_0 + \Delta t f(u_0, t_0) \\
u_2 &= u_1 + \Delta t f(u_1, t_1) \\
&\vdots \\
u_{n+1} &= u_n + \Delta t f(u_n, t_n)
\end{aligned} \tag{6.30}$$

OBS:

1. Precisão aumenta para Δt pequeno mas não pode usar Δt muito pequeno por causa do erro de arredondamento. Erros de truncamento também ocorrem.
2. O método é simples e explícito, isto é, calcula u_{n+1} diretamente a partir dos valores em t_n .
3. Instabilidade pode ocorrer.

6.2.2 Backward Euler

Substituímos u' em 6.27 por $\frac{\nabla u}{\nabla t}$

$$u'_{n+1} \approx \frac{u_{n+1} - u_n}{t_{n+1} - t_n} = \frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} \tag{6.31}$$

Assim

$$\begin{aligned}
\frac{u_{n+1} - u_n}{\Delta t} &= f(u_{n+1}, t_{n+1}) \\
\boxed{u_{n+1} &= u_n + \Delta t f(u_{n+1}, t_{n+1})}
\end{aligned} \tag{6.32}$$

OBS:

1. Precisão é a mesma do *Forward Euler*.
2. Método implícito, isto é, u_{n+1} não é calculado diretamente a partir dos valores no tempo t_n .
3. Mais estável.

6.2.3 Método de Euler Modificado

Dados

$$\begin{aligned}
u' &= f(u, t) \\
u_n, f(u_n, t_n), \Delta t
\end{aligned}$$

escrevemos

$$u_{n+1} = u_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} u' dt = u_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(u, t) dt \tag{6.33}$$

Aplicando regra do trapézio para integração, temos

$$u_{n+1} = u_n + \frac{\Delta t}{2} [f(u_{n+1}, t_{n+1}) + f(u_n, t_n)] \tag{6.34}$$

6.3 Métodos de Runge-Kutta

6.3.1 Introdução

Problema

$$\begin{aligned} u' &= f(u, t) \\ u(0) &= u_0 \end{aligned} \quad (6.35)$$

no intervalo $[t_n, t_{n+1}]$

$$u_{n+1} = u_n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(v, t) dt \quad (6.36)$$

Os métodos de Runge-Kutta são derivados aplicando-se integração numérica para aproximar a integral em 6.36.

$$I = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(v, t) dt \quad (6.37)$$

Regra do Trapézio ($\Delta t = h$)

$$I \approx \frac{h}{2} [f(v_n, t_n) + f(v_{n+1}, t_{n+1})] \quad (6.38)$$

Regra 1/3 de Simpson ($\bar{h} = h/2$)

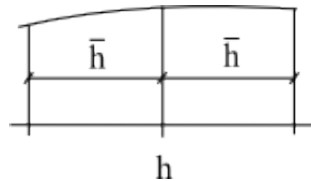


Figura 6.3: Regra de 1/3 de Simpson

$$I \approx \underbrace{\frac{\bar{h}}{3}}_{h/6} [f(v_n, t_n) + 4f(v_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}) + f(v_{n+1}, t_{n+1})] \quad (6.39)$$

Regra 3/8 de Simpson ($\bar{h} = h/3$)

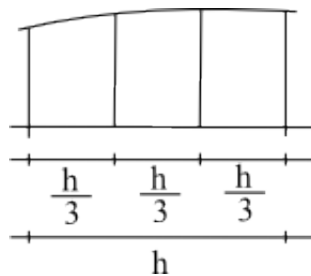


Figura 6.4: Regra de 3/8 de Simpson

$$I \approx \underbrace{\frac{3\bar{h}}{8}}_{h/9} [f(v_n, t_n) + 3f(v_{n+\frac{1}{3}}, t_{n+\frac{1}{3}}) + 3f(v_{n+\frac{2}{3}}, t_{n+\frac{2}{3}}) + f(v_{n+1}, t_{n+1})] \quad (6.40)$$

Para obtermos os valores de $f(v, t)$ nos pontos intermediários do intervalo basta obtermos os valores de v e t nos pontos intermediários. Isto é feito obtendo-se uma estimativa aplicando-se “*Forward Euler*”.

Assim,

$$\bar{v}_{n+\frac{1}{2}} = v_n + \frac{h}{2} f(v_n, t_n) \quad (6.41)$$

$$\bar{v}_{n+\frac{1}{3}} = v_n + \frac{h}{3} f(v_n, t_n) \quad (6.42)$$

$$\bar{v}_{n+\frac{2}{3}} = v_n + \frac{2h}{3} f(v_n, t_n) \quad (6.43)$$

$$\bar{v}_{n+1} = v_n + h f(v_n, t_n) \quad (6.44)$$

6.3.2 Runge-Kutta de Segunda Ordem

Baseado na Regra do Trapézio

$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{2} [f(v_n, t_n) + f(\bar{v}_{n+1}, t_{n+1})] \quad (6.45)$$

onde $\bar{v}_{n+1} = v_n + h f(v_n, t_n)$
chamando-se

$$k_1 = h f(v_n, t_n) \quad (6.46)$$

$$\bar{v}_{n+1} = v_n + k_1 \quad (6.47)$$

$$k_2 = h f(v_n + k_1, t_{n+1}) \quad (6.48)$$

temos

$$\boxed{v_{n+1} = v_n + \frac{1}{2} [k_1 + k_2]} \quad (6.49)$$

6.3.3 Runge-Kutta de Terceira Ordem

Baseado na Regra 1/3 de Simpson

$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{6} [f(v_n, t_n) + 4f(\bar{v}_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}) + f(\bar{v}_{n+1}, t_{n+1})] \quad (6.50)$$

$$\bar{v}_{n+\frac{1}{2}} = v_n + \frac{h}{2} f(v_n, t_n) \quad (6.51)$$

A estimativa \bar{v}_{n+1} pode ser obtida de várias maneiras

i).

$$\bar{v}_{n+1} = v_n + h f(v_n, t_n) \quad (6.52)$$

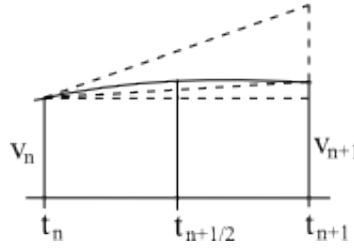


Figura 6.5: ?

ii).

$$\bar{v}_{n+1} = v_n + h f(\bar{v}_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}}) \quad (6.53)$$

iii). Combinação linear de i) e ii)

$$\bar{v}_{n+1} = v_n + h [\theta f(v_n, t_n) + (1 - \theta) f(\bar{v}_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}})] \quad (6.54)$$

O valor ótimo de θ é $\theta = -1$. Assim

$$\bar{v}_{n+1} = v_n + h [-f(v_n, t_n) + 2 f(\bar{v}_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}})] \quad (6.55)$$

Chamando-se

$$k_1 = h f(v_n, t_n) \quad (6.56)$$

$$\bar{v}_{n+\frac{1}{2}} = v_n + \frac{1}{2} k_1 \quad (6.57)$$

$$k_2 = h f(v_n + \frac{1}{2} k_1, t_n + \frac{h}{2}) \quad (6.58)$$

$$k_3 = h f(v_n - k_1 + 2 k_2, t_n + h) \quad (6.59)$$

$$v_{n+1} = v_n + \frac{1}{6} (k_1 + 4 k_2 + k_3) \quad (6.60)$$

6.3.4 Runge-Kutta de Quarta Ordem

Baseado na Regra 3/8 de Simpson

$$v_{n+1} = v_n + \frac{h}{8} [f(v_n, t_n) + 3 f(\bar{v}_{n+\frac{1}{3}}, t_{n+\frac{1}{3}}) + 3 f(\bar{v}_{n+\frac{2}{3}}, t_{n+\frac{2}{3}}) + f(\bar{v}_{n+1}, t_{n+1})]$$

Chamando-se

$$k_1 = h f(v_n, t_n)$$

$$k_2 = h f\left(v_n + \frac{1}{3} k_1, t_n + \frac{h}{3}\right)$$

$$\begin{aligned}
\bar{v}_{n+\frac{1}{3}} &= v_n + \frac{1}{3} k_1 \\
\bar{v}_{n+\frac{2}{3}} &= v_{n+\frac{1}{3}} + \frac{h}{3} f(\bar{v}_{n+\frac{1}{3}}, t_{n+\frac{1}{3}}) \\
&= v_n + \frac{1}{3} k_1 + \frac{1}{3} k_2 \\
k_3 &= h f\left(v_n + \frac{k_1}{3} + \frac{k_2}{3}, t_n + \frac{2h}{3}\right) \\
\bar{v}_{n+1} &= v_n + h f(v_n) - h f(\bar{v}_{n+\frac{1}{3}}) + h f(\bar{v}_{n+\frac{2}{3}}) \\
k_4 &= h f(v_n + k_1 - k_2 + k_3, t_n + h) \\
\boxed{v_{n+1} &= v_n + \frac{1}{8} [k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4]}
\end{aligned}$$

Derivem em casa a eq. 9.3.17 da página 330.

6.4 Métodos Preditores-Corretores

Consistem de dois passos:

1. Preditor: estima a solução para um novo ponto.
2. Corretor: melhora a precisão da estimativa.

6.4.1 Introdução

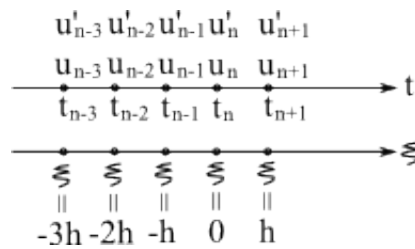


Figura 6.6: ?

$$\xi = t - t_n \quad (6.61)$$

Problema:

$$\begin{cases} u' = f(u, t) \\ u(0) = u_0 \end{cases} \quad (6.62)$$

$$u_{n+1} = u_n + \int_0^h u'(\xi) d\xi \quad (6.63)$$

Idéia do método:

- desenvolver uma função de interpolação para $u'(\xi)$ baseada em valores de u'_i , em pontos $t_i, i \leq n$, conhecidos.
- integrar 6.63 analiticamente, obtendo uma extrapolação para \bar{u}_{n+1} (preditor).
- calcular $\bar{u}'_{n+1} = f(\bar{u}_{n+1}, t_{n+1})$
- desenvolver uma nova função de interpolação para $\bar{u}(\xi)$ baseada em $u'^i, i \leq n$ e \bar{u}'_{n+1}
- ??? analiticamente obtendo u_{n+1} (corretor).

6.4.2 Método Preditor-Corretor de Adams de Terceira Ordem

i). Cálculo da função de extrapolação $u'(\xi)$ baseada nos pontos t_{n-2}, t_{n-1} e t_n

$$\begin{aligned}
 u'(\xi) &= \frac{(\xi - \xi_{n-2})(\xi - \xi_{n-1})}{(\xi_n - \xi_{n-2})(\xi_n - \xi_{n-1})} u'_n \\
 &+ \frac{(\xi - \xi_n)(\xi - \xi_{n-2})}{(\xi_{n-1} - \xi_n)(\xi_{n-1} - \xi_{n-2})} u'_{n-1} \\
 &+ \frac{(\xi - \xi_{n-1})(\xi - \xi_n)}{(\xi_{n-2} - \xi_{n-1})(\xi_{n-2} - \xi_n)} u'_{n-2} = \\
 &= \frac{[\xi - (-2h)][\xi - (-h)]}{[0 - (-2h)][0 - (-h)]} u'_n \\
 &+ \frac{[\xi - 0][\xi - (-2h)]}{[-h - 0][-h - (-2h)]} u'_{n-1} \\
 &+ \frac{[\xi - (-h)][\xi - 0]}{[-2h - (-h)][-2h - 0]} u'_{n-2}
 \end{aligned}$$

$$u'(\xi) = \frac{1}{2h^2} [(\xi + 2h)(\xi + h)u'_n - 2\xi(\xi + 2h)u'_{n-1} + (\xi + h)(\xi)u'_{n-2}] + E(\xi) \quad (6.64)$$

O erro da interpolação de Lagrange é

$$E(x) \approx \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)}{(n + 1)!} f^{(N+1)}(x_m) \quad (6.65)$$

onde, $N + 1$ é o número de pontos de interpolação e x_m é o ponto médio do intervalo de interpolação. Assim

$$E(\xi) \approx \frac{(\xi - 0)(\xi + h)(\xi + 2h)}{3!} \frac{d^3(u')}{d\xi^3}(\eta) = \frac{1}{6} \xi(\xi + h)(\xi + 2h) u^{iv}(\eta) \quad (6.66)$$

???

ii). Cálculo da integral em 6.63

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^h u'(\xi) d\xi \\
 &= \frac{1}{2h^2} \left[\int_0^h (\xi^2 + 3h\xi + 2h^2) u'_n d\xi - \int_0^h (2\xi^2 + 4h\xi) d\xi u'_{n-1} + \int_0^h (\xi^2 + h\xi) d\xi u'_{n-2} \right] \\
 &\quad + O(h^4) \\
 &= \frac{h}{12} (23 u'_n - 16 u'_{n-1} + 5 u'_{n-2}) + O(h^4)
 \end{aligned} \tag{6.67}$$

iii). Fórmula preditora de terceira ordem de Adams-Bashforth

$$\bar{u}'_{n+1} = u_n + \frac{h}{12} (23 u'_n - 16 u'_{n-1} + 5 u'_{n-2}) + O(h^4) \tag{6.68}$$

onde $O(h^4) = \frac{3}{8} h^4 u^{iv}(\eta)$ e $t_{n-2} < \eta < t_{n+1}$ é obtido integrando-se a equação 6.66.

iv). Cálculo de \bar{u}'_{n+1}

$$\bar{u}'_{n+1} = f(\bar{u}_{n+1}, t_{n+1}) \tag{6.69}$$

v). Cálculo da função de interpolação $\bar{u}'(\xi)$ baseada nos valores $\bar{u}'_{n+1}, \bar{u}'_n, \bar{u}'_{n-1}$

$$\bar{u}'(\xi) = \frac{1}{2h^2} [\xi(\xi+h)\bar{u}'_{n+1} - 2(\xi-h)(\xi+h)u'_n + \xi(\xi-h)u'_{n-1}] + \bar{E}(\xi) \tag{6.70}$$

$$\bar{E}(\xi) = \frac{1}{6} (\xi-h)\xi(\xi+h)u^{iv}(\eta), \quad t_{n-1} < \eta < t_{n+1} \tag{6.71}$$

vi). Cálculo da fórmula corretora de terceira ordem de Adams-Moulton.

Integrando-se 6.70 e substituindo-se o resultado em 6.63, temos

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{12} (5 \bar{u}'_{n+1} + 8 u'_n - u'_{n-1}) + O(h^4) \tag{6.72}$$

onde

$$O(h^4) = -\frac{1}{24} h^4 u^{iv}(\eta), \quad t_{n-1} < \eta < t_{n+1} \tag{6.73}$$

As expressões 6.68, 6.69 e 6.72 constituem o método preditor-corretor de terceira ordem de Adams.

vii). Como iniciamos o método?

- Para iniciarmos o método, precisamos de valores conhecidos em t_0, t_1, \dots, t_2 .
- Em t_0 temos a condição inicial do problema.
- Em t_1 e t_2 podemos estimar os valores pelo método de Runge-Kutta ou algum outro método.

6.4.3 Método Preditor-Corretor de Adams de Quarta Ordem

- i). Cálculo da função de extrapolação $u'(\xi)$ baseada nos pontos t_{n-3} , t_{n-2} , t_{n-1} e t_n
Utilizando a interpolação de Lagrange, temos

$$\begin{aligned} u'(\xi) &= \frac{1}{6h^3} [\xi^3 + 6h\xi^2 + 11h^2\xi + 6h^3] u'_n \\ &\quad - \frac{1}{2h^3} [\xi^3 + 5h\xi^2 + 6h^2\xi] u'_{n-1} \\ &\quad + \frac{1}{2h^3} [\xi^3 + 4h\xi^2 + 3h^2\xi] u'_{n-2} \\ &\quad - \frac{1}{6h^3} [\xi^3 + 3h\xi^2 + 2h^2\xi] u'_{n-3} + E(\xi) \end{aligned} \quad (6.74)$$

onde

$$\begin{aligned} E(\xi) &= \frac{(\xi - 0)(\xi + h)(\xi + 2h)(\xi + 3h)}{4!} \frac{d^4(u')}{dt^4}(\eta) \\ &= \frac{1}{24} \xi(\xi + h)(\xi + 2h)(\xi + 3h) u^{(4)}(\eta) \end{aligned} \quad (6.75)$$

$$t_{n-3} < \eta < t_{n+1}$$

- ii). Fórmula preditora de quarta ordem

Integrando-se 6.74 e substituindo-se em 6.63, temos

$$\bar{u}_{n+1} = u_n + \frac{h}{24} (55 u'_n - 59 u'_{n-1} + 37 u'_{n-2} - 9 u'_{n-3}) + O(h^5) \quad (6.76)$$

onde

$$O(h^5) = \frac{251}{720} h^5 u^{(5)}(\eta), \quad t_{n-3} < \eta < t_{n+1} \quad (6.77)$$

É obtida integrando-se a equação 6.75.

- iii). Cálculo de \bar{u}'_{n+1}

$$\bar{u}'_{n+1} = f(\bar{u}_{n+1}, t_{n+1}) \quad (6.78)$$

- iv). Cálculos da fórmula corretora de quarta ordem de Adams-Moulton

- Determina-se a função de interpolação $u'(\xi)$ baseada nos valores \bar{u}'_{n+1} , u'_n , u'_{n-1} , u'_{n+2} .

- Integra-se $\int_0^h u'(\xi)$ analiticamente e substitui-se na equação 6.63, obtendo-se

$$u_{n+1} = u_n + \frac{h}{24} (9 \bar{u}'_{n+1} + 19 u'_n - 5 u'_{n-1} + u'_{n-2}) + O(h^5) \quad (6.79)$$

onde

$$O(h^5) = -\frac{19}{720} h^5 u''(\eta), \quad t_{n-2} < \eta < t_{n+1} \quad (6.80)$$

As expressões 6.76, 6.78 e 6.79 constituem o método preditor-corretor de quarta ordem de Adams.

6.4.4 Vantagens e Desvantagens

- Vantagens
 - Eficiente: necessita calcular $f(u, t)$ apenas duas vezes em cada passo. O método de Runge-Kutta de quarta ordem calcula $f(u, t)$ quatro vezes em cada passo.
 - Erro local pode ser estimado em cada passo.
- Desvantagens
 - Precisa de outro método para iniciar o processo, obtendo valores em t_1 , t_2 e t_3 , além da condição inicial em t_0 .
 - Não é fácil mudar o tamanho de h durante o processo.
 - Não pode ser utilizado se u' se tornar descontínua no meio do intervalo.

Exemplo 6.26

Resolva o problema

$$\begin{cases} \frac{d^2 x}{dt^2} + t^2 \frac{dx}{dt} + 3x = t \\ x(0) = 1 \\ \frac{dx}{dt}(0) = 2 \end{cases}$$

Utilize

1. Forward Euler: $u_{n+1} = u_n + h f(u_n, t_n)$
2. Backward Euler: $u_{n+1} = u_n + h f(u_{n+1}, t_{n+1})$
3. Método de Euler modificado: $u_{n+1} = u_n + \frac{h}{2} [f(u_{n+1}, t_{n+1}) + f(u_n, t_n)]$

4. Runge-Kutta de terceira ordem:

$$\begin{cases} k_1 = h f(u_n, t_n) \\ k_2 = h f(u_n + \frac{1}{2} k_1, t_n + \frac{h}{2}) \\ k_3 = h f(u_n - k_1 - 2k_2, t_n + h) \\ u_{n+1} = u_n + \frac{1}{6} (k_1 + 4k_2 + k_3) \end{cases}$$

5. Preditor-corretor de Adams de terceira ordem

$$\begin{aligned} \bar{u}_{n+1} &= u_n + \frac{h}{12} (23 u'_n - 16 u'_{n-1} + 5 u'_{n-2}) \\ \bar{u}'_{n+1} &= f(\bar{u}_{n+1}, t_{n+1}) \\ u_{n+1} &= u_n + \frac{h}{12} (5 \bar{u}'_{n+1} + 8 u'_n - u'_{n-1}) \end{aligned}$$

Use $h = 0.1 s$

6.5 Equações Diferenciais Ordinárias Rígidas

Definição: Equações Diferenciais Ordinárias são ditas rígidas quando a solução é uma função suave, mas requer um Δt muito pequeno no método numérico para manter estabilidade. Por exemplo,

$$\begin{cases} y' &= -\alpha y + s(t) \\ y(0) &= y_0 \end{cases} \quad (6.81)$$

$\frac{1}{|\alpha|}$ denominada “constante de tempo”.

Solução exata de 6.81 :

- Se

$$\begin{aligned} s(t) &= 0 \quad \forall t \\ y(t) &= y_0 e^{-\alpha t} \end{aligned} \quad (6.82)$$

- Se

$$\begin{aligned} s(t) &\neq 0 \\ y(t) &= y_0 e^{-\alpha t} + e^{-\alpha t} \int_0^t s(\xi) e^{\alpha \xi} d\xi \end{aligned} \quad (6.83)$$

OBS: A solução de problemas de E.D.O. rígidas pelos métodos de Runge-Kutta ou Preditor-Corretor são difíceis ou, às vezes, impossível.

Se aplicarmos o método de Runge-Kutta de quarta-ordem ao problema 6.81 a solução se torna instável para $h > 2.785 \frac{1}{|\alpha|}$. Assim, quando $\frac{1}{|\alpha|} \rightarrow 0$ o método tem de utilizar $h \rightarrow 0$ para manter a estabilidade. Por exemplo, para

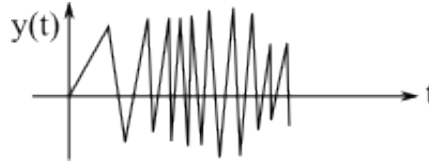


Figura 6.7: ?

$$\alpha = -100000 \Rightarrow h < \frac{2.785}{100000} = 0.000002785 \times 10$$

só para manter a estabilidade.

OBS: Se em um sistema de E.D.O.'s uma E.D.O. é rígida, Δt tem de ser pequeno para manter estabilidade da solução do sistema.

$$\begin{cases} y' = -1y + 1z + 3 \\ z' = -10^7 z + 1y \end{cases} \Rightarrow \frac{1}{|\alpha|} = \frac{1}{10^7} \quad (\text{muito pequeno}) \quad (6.84)$$

Alguns métodos para solução de E.D.O.'s rígidas utilizando Δt grande, foram propostos.

6.5.1 Métodos Implícitos

$$\begin{cases} y' = f(y, z, t) \\ z' = g(y, z, t) \end{cases} \quad \text{com} \quad \begin{cases} y(0) = y_0 \\ z(0) = z_0 \end{cases} \quad (6.85)$$

Usando *Backward Euler*

$$\begin{cases} y_{n+1} - y_n = h f(y_{n+1}, z_{n+1}, t_{n+1}) \equiv h f_{n+1} \\ z_{n+1} - z_n = h g(y_{n+1}, z_{n+1}, t_{n+1}) \equiv h g_{n+1} \end{cases} \quad (6.86)$$

Se f e g forem funções não-lineares, 6.86 não pode ser resolvida de forma fechada (exata) e métodos iterativos, tais como o das substituições sucessivas, podem ser usados mas não são eficientes. Uma opção mais eficiente é linearizar as equações 6.86 por expansão de Taylor.

$$\begin{cases} f_{n+1} = f_n + \frac{\partial f}{\partial y} \Delta y + \frac{\partial f}{\partial z} \Delta z + \frac{\partial f}{\partial t} \Delta t \\ g_{n+1} = g_n + \frac{\partial g}{\partial y} \Delta y + \frac{\partial g}{\partial z} \Delta z + \frac{\partial g}{\partial t} \underbrace{\Delta t}_h \end{cases} \quad (6.87)$$

6.87 \rightarrow 6.86 \Rightarrow

$$\underbrace{\left[\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} - h \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial y} & \frac{\partial f}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial y} & \frac{\partial g}{\partial z} \end{bmatrix} \right]}_{(\text{resolve por eliminação de Gauss})} \begin{bmatrix} \Delta y \\ \Delta z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h f_n + h^2 \frac{\partial f}{\partial t} \\ h g_n + h^2 \frac{\partial g}{\partial t} \end{bmatrix} \quad (6.88)$$

ou

$$\underbrace{(I - h J) \Delta \bar{y} = \text{Lado direito}}_{(\text{resolve por eliminação de Gauss})} \quad (6.89)$$

onde

- $I =$ Identidade
- $J =$ Matriz Jacobiana
- $\Delta \bar{y} = \begin{Bmatrix} \Delta y \\ \Delta z \end{Bmatrix}$

OBS: Incondicionalmente estável.

6.5.2 Método Exponencial

Idéias Básicas

Suponha

$$y' = f(y, t) \quad (6.90)$$

onde $f(y, t)$ não inclui t explicitamente. Adicionando-se $c y$ aos dois lados de 6.90, temos:

$$y' + c y = f(y, t) + c y \quad (6.91)$$

onde c é constante.

Multiplicando-se 6.91 por $e^{c t}$, temos

$$y' e^{c t} + c y e^{c t} = [f(y, t) + c y] e^{c t} \quad (6.92)$$

$$\frac{d}{dt} (y e^{c t}) = [f(y, t) + c y] e^{c t} \quad (6.93)$$

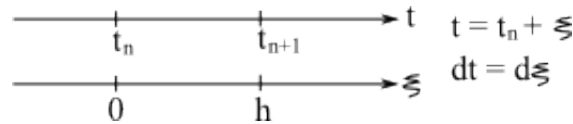


Figura 6.8: Parametrização

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\frac{d}{d\eta} (y e^{c \eta}) \right] d\eta = \int_{t_n}^{t_{n+1}} [f(y, \eta) + c y] e^{c \eta} d\eta \quad (6.94)$$

$$y(t_{n+1}) e^{c t_{n+1}} - y(t_n) e^{c t_n} = \int_0^h [f(y(t_n + \xi), t_n + \xi) + c y(t_n + \xi)] e^{c(t_n + \xi)} d\xi \quad (6.95)$$

multiplicando-se por $e^{-c t_{n+1}}$, temos

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) e^{-c(t_{n+1}-t_n)} + \int_0^h [f(y(t_n + \xi), t_n + \xi) + c y(t_n + \xi)] e^{c(\xi-(t_{n+1}-t_n))} d\xi \quad (6.96)$$

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) e^{-ch} + \int_0^h [f(y(t_n + \xi), t_n + \xi) + c y(t_n + \xi)] e^{c(\xi-h)} d\xi \quad (6.97)$$

Vários métodos podem ser deduzidos utilizando-se aproximações para $f + c y$ no integrando de 6.97. No entanto, a precisão da aproximação vai depender do valor de c .

Uma aproximação de c comumente utilizada é

$$c = \frac{\partial f}{\partial y}(t_n) = - \left(\frac{\partial f}{\partial y} \right)_n \quad (6.98)$$

OBS: Quando $f(y, t)$ não tem dependência explícita de

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f'}{f} \left(\frac{\partial f}{\partial t} ? \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial y} f \right) \quad (6.99)$$

Assim

$$c = - \left(\frac{f'}{f} \right)_n \quad (6.100)$$

6.5.3 Método de Ajuste Exponencial

Aproximação:

$$[f(y, t_n + \xi) + c y(t_n + \xi)] \approx f_n + c y_n \quad (6.101)$$

Equação 6.97 reduz-se a

$$\underbrace{y_{n+1} = y_n + h f_n}_{\text{Forward Euler}} \left[\frac{1 - e^{-ch}}{ch} \right] \quad (6.102)$$

OBS: O método 6.102 é incondicionalmente estável

$$\begin{aligned} \text{Se } h \rightarrow 0 &\Rightarrow y_{n+1} \rightarrow y_n, \text{ pois } 1 - e^{-ch} \rightarrow 0 \\ \text{Se } h \rightarrow \infty &\Rightarrow \left[1 - \frac{1}{e^{ch}} \right] \rightarrow 1 \end{aligned}$$

Modificação do método 6.102 para melhorar a solução

1. Utilizar 6.102 como um preditor

$$\bar{y}_{n+1} = y_n + f_n \left[\frac{1 - e^{-ch}}{c} \right] \quad (6.103)$$

ou no intervalo $t_n < t < t_{n+1}$

$$\xi = t - t_n$$

$$\bar{y}(t) = y_n + \left[\frac{1 - e^{-c\xi}}{c} \right] f_n \quad (6.104)$$

2. Reescrevemos 6.97 como corretor

$$y_{n+1} = \bar{y}_{n+1} + \int_0^h [f(\bar{y}(t_n + \xi), t_n + \xi) - f_n + c\bar{y}(t_n + \xi) - cy_n] e^{c(\xi-h)} d\xi \quad (6.105)$$

A integral pode ser resolvida

- (a) Analiticamente (se f for simples)
- (b) Interpolação linear de [1]
- (c) Regra do Trapézio

interpolação linear

$$[f(\bar{y}(t_n + \xi)) - f_n + c\bar{y}(t_n + \xi) - cy_n] \approx B\xi \quad (6.106)$$

onde

$$B = \frac{f_{n+1} - f_n + c(y_{n+1} - y_n)}{h} \quad (6.107)$$

b)

$$y_{n+1} = \bar{y}_{n+1} + \frac{Bh^2}{ch} \left(\frac{1 - e^{-ch}}{ch - 1} \right) \quad (6.108)$$

c)

$$y_{n+1} = \bar{y}_{n+1} + \frac{Bh^2}{2} \quad (6.109)$$

6.6 Condições de Contorno

Em

$$x = 0 \Rightarrow u(0) = 0 \begin{cases} c \text{ c essencial} \\ c \text{ c cinemática} \\ c \text{ c Dirichlet} \end{cases} \quad (6.110)$$

Em

$$x = L \Rightarrow F(L) = cL \frac{du}{dx}(L) = 0 \begin{cases} c \text{ c natural} \\ c \text{ c dinâmica} \\ c \text{ c de Neuman} \end{cases} \quad (6.111)$$

Problemas de Sturm-Liouville

$$\boxed{-\frac{d}{dx} \left(c \frac{du}{dx} \right) + qu = f} \quad (6.112)$$

Exemplo 6.27

Suponha a equação:

$$\left\{ \begin{array}{l} -2y''(x) + y(x) = e^{-0.2x} \\ \text{B.c.} \\ y(0) = 1 \\ y'(10) = -y(10) \end{array} \right. \quad (6.113)$$

Resolva por diferenças finitas

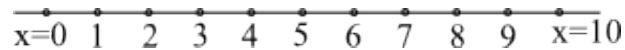


Figura 6.9: ?

Em

$$x = x_i \Rightarrow -2 \left[\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} \right] + y_i = e^{-0.2x_i}$$

$$\begin{aligned} h = 1 &\Rightarrow -2y_{i-1} + 4y_i - 2y_{i+1} + y_i = e^{-0.2x_i} \\ &\Rightarrow \underbrace{\boxed{-2}}_{i-1} - \underbrace{\boxed{+5}}_i - \underbrace{\boxed{-2}}_{i+1} \end{aligned}$$

Aplique nos pontos $1, 2, \dots, 9$

$$\begin{array}{llllll} \text{Em } x = 1 & \Rightarrow & -2y_0 & +5y_1 & -2y_2 & = e^{-0.2} \\ \text{Em } x = 2 & \Rightarrow & & -2y_1 & +5y_2 & -2y_3 = e^{-0.4} \\ & & \vdots & & \vdots & \\ \text{Em } x = 9 & \Rightarrow & & & -2y_8 & +5y_9 -2y_{10} = e^{-1.8} \end{array}$$

Capítulo 7

Solução de Problemas de Valores de Contorno de Equações Diferenciais Ordinárias

7.1 Problemas de Valores de Contorno para Barras e Placas

Suponha uma barra presa a uma extremidade sujeita à atração gravitacional.

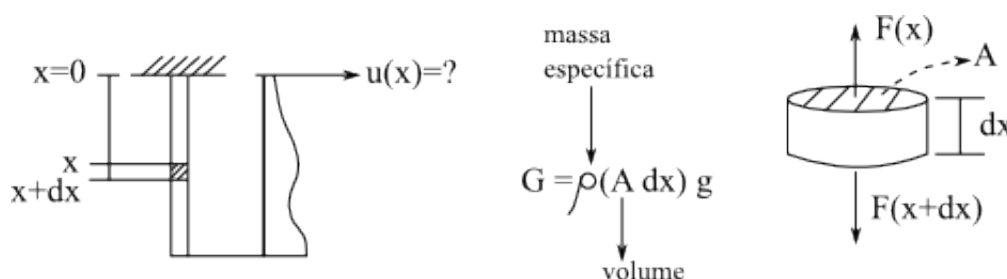


Figura 7.1: Problemas de Valores de Contorno para Barras e Placas

$$\text{Alongamento} = \Delta u = \frac{du}{dx} dx$$

$$F \text{ é proporcional a } \frac{\partial u}{\partial x}(x) \Rightarrow F(x) = c \left. \frac{du}{dx}(x) \right|_x$$

$$F(x+dx) = c \left. \frac{du}{dx} \right|_{x+dx}$$

$$\left(c \frac{du}{dx} \right)_{x+\Delta x} - \left(c \frac{du}{dx} \right)_x + G = 0$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\left(c \frac{du}{dx} \right)_{x+\Delta x} - \left(c \frac{du}{dx} \right)_x}{\Delta x} = -\rho A g$$

$$\frac{d}{dx} \left(c \frac{du}{dx} \right) = -\rho A g$$

$$\boxed{-\frac{d}{dx} \left(c \frac{du}{dx} \right) = \rho A g} \quad (7.1)$$

- Se c for constante, a integração é fácil.
- Se $c = c(u(x))$, a integração é não trivial.

7.2 Algoritmo de Solução para Sistemas Tridiagonais

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & \\ & A_3 & B_3 & C_3 & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & & A_i & B_i & C_i \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & A_n & B_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_i \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \vdots \\ D_i \\ \vdots \\ D_n \end{bmatrix}$$

- (a) $B'_1 = B_1$
 $D'_1 = D_1$
- (b) $\left. \begin{aligned} R &= A_i / B'_{i-1} \\ B'_i &= B_i - R C_{i-1} \\ D'_i &= D_i - R D'_{i-1} \end{aligned} \right\} \text{ para } i = 2, \dots, n$
- (c) $x_n = D'_n / B'_n$
- (d) $x_i = (D'_i - C_i x_{i+1}) / B'_i \quad i = n-1, \dots, 1$

Em $x = 10$

$$y'(10) = -y_{10} \Rightarrow \begin{array}{c} | \quad | \quad | \\ 9 \quad 9.5 \quad 10 \end{array}$$

$$y''(10) = \frac{y'(10) - y'(9.5)}{0.5} \quad (\text{Backward Difference})$$

$$y'(9.5) = \frac{y(10) - y(9)}{1}$$

$$y''(10) = \frac{1}{0.5} [-y_{10} - y_{10} + y_9] \quad (7.2)$$

Assim

$$-2 \frac{1}{0.5} [-y_{10} - y_{10} + y_9] + y_{10} = e^{-2}$$

$$-2 y_9 + 4.5 y_{10} = 0.5 e^{-2} \quad (7.3)$$

Assim

$$\begin{bmatrix} 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 5 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 5 & -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 5 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 5 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 5 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 4.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \\ y_9 \\ y_{10} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{-0.2} + 2 \\ e^{-0.4} \\ e^{-0.6} \\ e^{-0.8} \\ e^{-1.0} \\ e^{-1.2} \\ e^{-1.4} \\ e^{-1.6} \\ e^{-1.8} \\ e^{-2.0} \cdot 0.5 \end{bmatrix}$$

Exemplo 7.28

Solução pelo método dos elementos finitos.

1. **Descrição do problema de valor de contorno:** Encontrar $y(x)$ tal que a E.D.O. abaixo seja satisfeita em todos os pontos do domínio $D = \{x \in \mathbb{R} \mid 0 \leq x \leq 10\}$

$$\begin{cases} -2y''(x) + y(x) = e^{-0.2x} \\ \text{Condições de contorno} \\ y(0) = 1 \\ y'(10) = -y(10) \end{cases}$$

2. **Discretização do domínio:** 10 elementos conectados aos 11 nós

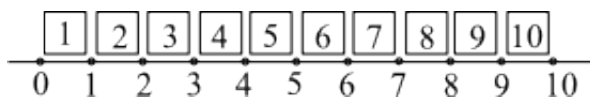


Figura 7.2: Discretização do domínio

3. **Resíduo:**

$$R(x) = -2y''(x) + y(x) - e^{-0.2x} = 0$$

4. **Formulação Fraca e o Método de Galerkin**

Encontrar $y(x)$ tal que

$$\int_D v(x) R(x) dx = 0, \quad \forall v(x) \quad (7.4)$$

Considerar $v(x)$ no espaço de funções com assentamento local

Assim, $y(x)$ no intervalo $[1, 2]$ é escrito como uma combinação linear de $v_1(x)$ e $v_2(x)$ ou das restrições $N_1(x)$ e $N_2(x)$ de $v_1(x)$ e $v_2(x)$, respectivamente, no domínio do elemento 2.

$$y(x) = N_1(x)y_1 + N_2(x)y_2$$

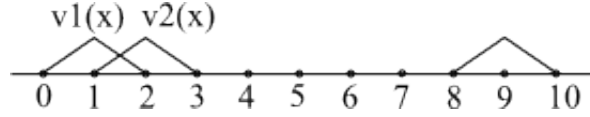


Figura 7.3: ?

Também as funções $v(x)$ no intervalo podem ser escritas como

$$v(x) = N1(x) v1 + N2(x) v2$$

Substituindo-se o resíduo $R(x)$ no integrando da equação 7.4, temos

$$\int_D v(x) [-2y''(x) + y(x) - e^{-0.2x}] dx = 0, \quad \forall v(x)$$

$$-2 \int_D v(x) y''(x) dx + \int_D v(x) y(x) dx - \int_D v(x) e^{-0.2x} dx = 0, \quad \forall v(x)$$

Integrando-se a primeira integral por partes, temos

$$-2 \left[v(x) y'(x) \Big|_{x=0}^{x=10} - \int_D v'(x) y'(x) dx \right] + \int_D v(x) y(x) dx - \int_D v(x) e^{-0.2x} dx = 0, \quad \forall v(x)$$

Utilizando-se a condição de contorno $y'(10) = -y(10)$ e restringindo o espaço de funções $v(x)$ de forma que $v(0) = 0$, temos

$$-2 \left[-v_{10} y_{10} - \int_D v'(x) y'(x) dx \right] + \int_D v(x) y(x) dx - \int_D v(x) e^{-0.2x} dx = 0, \quad \forall v(x)$$

Podemos discretizar o domínio D em 10 elementos e as integrais podem ser escritas como

$$\int_D g(x) dx = \int_0^{10} g(x) dx = \int_0^1 g(x) dx + \int_1^2 g(x) dx + \dots + \int_9^{10} g(x) dx$$

Para calcularmos as três integrais restantes, precisamos definir as $N_i(x)$ e $N_f(x)$ e calcularmos as derivadas de $v(x)$ e $y(x)$. Assim, com uma parametrização local para cada elemento temos

$$y(x) = [N_i \ N_f] \begin{Bmatrix} y_i \\ y_f \end{Bmatrix}$$

$$v(x) = [N_i \ N_f] \begin{Bmatrix} v_i \\ v_f \end{Bmatrix}$$

$$y'(x) = \left[-\frac{1}{h} \ \frac{1}{h}\right] \begin{Bmatrix} y_i \\ y_f \end{Bmatrix}$$

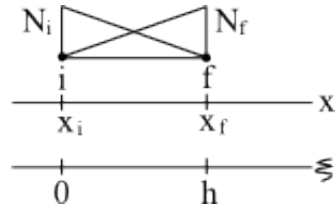
$$v'(x) = \left[-\frac{1}{h} \ \frac{1}{h}\right] \begin{Bmatrix} v_i \\ v_f \end{Bmatrix}$$

$$N_i(\xi) = \frac{1-\xi}{h}$$

$$N_f(\xi) = \frac{\xi}{h}$$

$$x = x_i + \xi$$

$$\xi = x - x_i$$



Calculando-se as três integrais elemento a elemento, temos

$$\int_{x_i}^{x_f} v'(x) y'(x) dx = \int_0^h v'(\xi) y'(\xi) d\xi = [v_i \ v_f] \int_0^h \begin{bmatrix} \frac{1}{h^2} & -\frac{1}{h^2} \\ -\frac{1}{h^2} & \frac{1}{h^2} \end{bmatrix} d\xi \begin{Bmatrix} y_i \\ y_f \end{Bmatrix}$$

$$\int_{x_i}^{x_f} v(x) y(x) dx = \int_0^h v(\xi) y(\xi) d\xi = [v_i \ v_f] \int_0^h \begin{bmatrix} N_i^2 & N_i N_f \\ N_f N_i & N_f^2 \end{bmatrix} d\xi \begin{Bmatrix} y_i \\ y_f \end{Bmatrix}$$

$$\int_{x_i}^{x_f} v(x) e^{-0.2x} dx = [v_i \ v_f] \int_0^h \begin{bmatrix} N_i e^{-0.2(x_i+\xi)} \\ N_f e^{-0.2(x_i+\xi)} \end{bmatrix} d\xi$$