

CÁLCULO NUMÉRICO

*Apostila elaborada pelo professor Wanderson Rodrigues Bispo
com a colaboração do monitor Shander Sanches*

Centro Federal de Educação Tecnológica Celso Suckow da Fonseca - CEFET/RJ
Unidade Descentralizada de Nova Iguaçu

Julho de 2009

Sumário

1	Conceitos Gerais em Cálculo Numérico	2
1.1	Conceitos Básicos	2
1.1.1	Algoritmo	2
1.1.2	Iteração ou Aproximação Sucessiva	2
1.1.3	Aproximação Local	3
1.2	Erros	3
1.2.1	Erros de Truncamento	3
1.2.2	Erros de Aproximação	3
1.3	Sistemas de Numeração Binário e Decimal	4
1.4	Série de Taylor	5
1.5	Conclusão	6
1.6	Exercícios	7
2	Resolução Numérica de Sistemas Lineares	9
2.1	Método de Eliminação de Gauss	9
2.2	Decomposição LU	12
2.3	Métodos Iterativos	12
2.4	Exercícios	17
3	Zero de Funções	19
3.1	Método da Bissecção	20
3.2	Método da Falsa-Posição	21
3.3	Método da Iteração Linear	22
3.4	Método de Newton-Raphson	25
3.5	Exercícios	26
4	Aproximação de Funções	28
4.1	Teoria de Interpolação	28
4.2	Interpolação Polinomial	29
4.3	Fórmula de Lagrange	31
4.4	Diferenciação Numérica	31
4.5	Fórmula de Newton	34
4.6	Ajuste de Curvas	36
4.6.1	CrITÉRIOS de Ajuste	36
4.6.2	Ajuste Polinomial	38
4.7	Exercícios	40
5	Integração Numérica	42
5.1	Método dos Trapézios	42
5.2	Método de Simpson	44
5.3	Método da Quadratura Gaussiana	46
5.4	Exercícios	50

Capítulo 1

Conceitos Gerais em Cálculo Numérico

Métodos numéricos são conjuntos de procedimentos utilizados para transformar um modelo matemático num problema numérico ou conjuntos de procedimentos usados para resolver um problema numérico. A escolha de método mais eficiente para resolver um problema numérico deve envolver a precisão desejada, a capacidade do método em conduzir bons resultados e o esforço computacional despendido. Veja referêncica (1).

1.1 Conceitos Básicos

1.1.1 Algoritmo

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

1.1.2 Iteração ou Aproximação Sucessiva

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

- (i) **Tentativa inicial:** consiste em uma primeira aproximação para a solução desejada do problema numérico.
- (ii) **Equação de recorrência:** equação por meio da qual, partindo-se da tentativa inicial, são realizadas as iterações ou aproximações sucessivas para a solução desejada.
- (iii) **Teste de parada:** é o instrumento por meio do qual o procedimento iterativo é finalizado.

1.1.3 Aproximação Local

Outro conceito que aparece em cálculo numérico é o de aproximação local de uma função por outra, que seja de manuseio mais simples. Por exemplo, aproximar uma função não-linear por uma função linear num determinado intervalo do domínio das funções.

1.2 Erros

Na busca da solução do modelo matemático por meio de cálculo numérico, os erros surgem de várias formas e merecem cuidado especial. Do contrário, pode-se chegar a resultados distintos do que se esperaria ou até mesmo obter outros que não têm nenhuma relação com a solução do problema original.

As principais fontes de erros são as seguintes:

- (i) erros nos dados de entrada;
- (ii) erros no estabelecimento do modelo matemático;
- (iii) erros de arredondamento durante a computação;
- (iv) erros de truncamento, e
- (v) erros humanos e de máquinas.

1.2.1 Erros de Truncamento

É o erro inerente ao método numérico. Surge cada vez que se substitui um procedimento matemático infinito por um processo finito ou discreto.

1.2.2 Erros de Aproximação

A partir do momento que se calcula um resultado por aproximação, é preciso saber como estimar ou delimitar o erro cometido na aproximação. Sem isso, a aproximação obtida não tem significado.

Para estimar ou delimitar o erro, recorre-se a dois conceitos: *erro absoluto* e *erro relativo*. Com efeito, seja x^* um valor aproximado para uma quantidade cujo valor exato é x . Então se define:

- i) Erro absoluto - é a diferença, em módulo, entre o valor exato e o valor aproximado de um número. Notação: “ Δ ”.

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

- ii) Erro relativo - é a razão entre o erro absoluto e o valor exato de um número. Esse erro é frequentemente dado como porcentagem, por exemplo, 3% de erro relativo significa que o erro é 0.03. Notação: “ δ ”.

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x}$$

Exemplo 1.1 Se $x = 3,251408$ e $x^* = 3,2524643$, então

$$\Delta x = |x - x^*| = 0,0010554 = 1,0554 \times 10^{-3}$$

e

$$\delta x = \frac{\Delta x}{x} = \frac{1,0554 \times 10^{-3}}{3,251408} = 3,24597836 \times 10^{-4},$$

ou seja, o erro relativo é de aproximadamente 0,032%.

Proposição 1.1 *Sejam x e y valores exatos e x^* e y^* valores aproximados de dois números. Então:*

$$i) \Delta(x + y) = \Delta x + \Delta y$$

$$ii) \delta(x + y) = \delta x \frac{x^*}{x^* + y^*} + \delta y \frac{y^*}{x^* + y^*}$$

$$iii) \Delta(x - y) = \Delta x - \Delta y$$

$$iv) \delta(x - y) = \delta x \frac{x^*}{x^* - y^*} + \delta y \frac{y^*}{x^* - y^*}$$

$$v) \Delta(xy) = x^* \Delta y + y^* \Delta x$$

$$vi) \delta(xy) = \delta x + \delta y$$

$$vii) \Delta\left(\frac{x}{y}\right) \simeq \frac{y^* \Delta x - x^* \Delta y}{(y^*)^2}$$

$$viii) \delta\left(\frac{x}{y}\right) = \delta x - \delta y$$

1.3 Sistemas de Numeração Binário e Decimal

Um número na base 2 é representado utilizando os dígitos 0 e 1. Por exemplo, 10110_2 é um número binário. Para convertermos este número binário para a base decimal (base 10), procedemos da seguinte forma:

$$10110_2 = 1 \times 2^4 + 0 \times 2^3 + 1 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 0 \times 2^0 = 16 + 0 + 4 + 2 + 0 = 22.$$

Como segundo exemplo, vamos obter a representação decimal do número binário 11.01_2 . Neste caso,

$$11.01_2 = 1 \times 2^1 + 1 \times 2^0 + 0 \times 2^{-1} + 1 \times 2^{-2} = 2 + 1 + 0 + \frac{1}{4} = 3.25.$$

A conversão de números decimais para números binários é feita através de divisões sucessivas como mostrado na figura abaixo. O resultado é constituído pelos restos das divisões tomados na ordem inversa,

$$\begin{array}{r} 17 \quad \left| \begin{array}{l} 2 \\ 8 \end{array} \right. \\ 1 \quad \left| \begin{array}{l} 2 \\ 4 \end{array} \right. \\ 0 \quad \left| \begin{array}{l} 2 \\ 2 \end{array} \right. \\ 0 \quad \left| \begin{array}{l} 2 \\ 1 \end{array} \right. \\ 0 \quad \left| \begin{array}{l} 2 \\ 1 \end{array} \right. \\ 1 \quad \left| \begin{array}{l} 2 \\ 0 \end{array} \right. \end{array}$$

assim, temos que $17 = 10001_2$.

Para o caso de números fracionários, a conversão é feita utilizando as seguintes regras:

- 1- Multiplicar o número fracionário por 2;
- 2- No resultado da multiplicação, a parte inteira será um dígito binário;
- 3- Separar a parte fracionária e repetir o processo até que a parte fracionária seja igual a 0.

Por exemplo, vamos transformar o número decimal 0.1875 em um número binário, ou seja, representado na base 2:

$$\begin{array}{lll} 0.1875 \times 2 & = & 0.3750 \quad \text{parte inteira} = 0 \\ 0.3750 \times 2 & = & 0.7500 \quad \text{parte inteira} = 0 \\ 0.7500 \times 2 & = & 1.5000 \quad \text{parte inteira} = 1 \\ 0.5000 \times 2 & = & 1.0000 \quad \text{parte inteira} = 1 \end{array}$$

O processo termina porque a próxima parte fracionária a ser utilizada é igual a 0. Assim, o número 0.1875_{10} é escrito como 0.0011_2 .

1.4 Série de Taylor

Uma função $f(x)$ contínua e infinitamente derivável, pode ser representada por uma série de potências da forma:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x-a)^n, \quad (1.1)$$

onde $f^{(0)}(a) = f(a)$, e $f^{(n)}(a)$ é a derivada de ordem n de f no ponto a . A equação acima denomina-se *série de Taylor* da função f em torno do ponto $x = a$. Quando $a = 0$, a série recebe o nome de *Maclaurin*.

O emprego da série de Taylor para representar $f(x)$ está limitado aos casos em que ela é convergente. Pela teoria das séries de potências, a série de Taylor é convergente para os valores de x que satisfazem a desigualdade

$$|x - a| < r,$$

onde r é o raio de convergência da série.

Consegue se mostrar que

$$r = \lim_{n \rightarrow \infty} (n+1) \frac{|f^{(n)}(a)|}{|f^{(n+1)}(a)|}.$$

Se escrevermos $h = x - a$, a equação (1.1) fica

$$f(a+h) = \sum_{n=0}^{\infty} h^n \frac{f^{(n)}(a)}{n!}. \quad (1.2)$$

Na aplicação da série de Taylor, torna-se impossível computar todos os seus termos. O que se faz é considerar apenas um número finito deles. Se a série é truncada após o n -ésimo termo, tem-se a aproximação:

$$f(a+h) = f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2!} f''(a) + \cdots + \frac{h^{n-1}}{(n-1)!} f^{(n-1)}(a).$$

Na aproximação acima, comete-se um erro de truncamento, $R_n(x)$, que é definido como

$$R_n(x) = \frac{f^{(n)}(\xi)(x-a)^n}{n!}, \quad a < \xi < x. \quad (1.3)$$

A equação (1.3) é chamada fórmula de Lagrange para o erro de truncamento.

Como ξ não é conhecido explicitamente, a fórmula de Lagrange pode ser usada para delimitar o erro, ou seja,

$$|R_n(x)| \leq \frac{M}{n!} (x-a)^n, \quad (1.4)$$

onde $M = \max |f^{(n)}(t)|$ com $a \leq t \leq x$.

Exemplo 1.2 Desenvolver a função $f(x) = e^x$ em série de Taylor em torno do ponto $x = 0$. Calcule e^{-1} usando da série obtida, cinco termos, e delimite o erro cometido.

solução:

Nesse caso,

$$f(x) = e^x, \quad a = 0, \quad e \quad f(0) = f'(0) = f''(0) = \dots = f^{(n)}(0) = \dots = 1.$$

Portanto,

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

e o raio de convergência da série é infinito (verifique!). Então

$$e^{-1} = 1 - 1 + \frac{1}{2!} - \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} = 0,375.$$

Delimitação do erro:

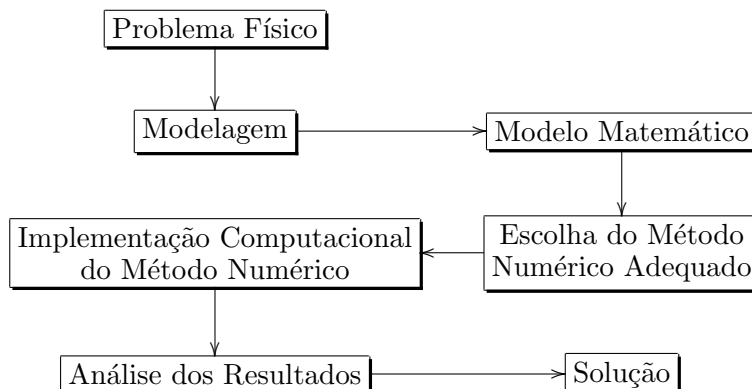
$$R_5(-1) \leq \frac{M}{5!} |(-1)^5|.$$

Como $M = \max |e^t|$, com $-1 \leq t \leq 0$, temos que $M = 1$, assim,

$$|R_5(-1)| \leq 0,008333.$$

1.5 Conclusão

Com essas idéias preliminares e que são básicas em cálculo numérico, o fluxograma apresentado no início, que indicava as fases de resolução de um problema real, pode agora ser assim reestruturado:



1.6 Exercícios

1. O que são métodos numéricos? Fale um pouco sobre algoritmos.
2. Que elementos constituem um método iterativo?
3. Quais as principais fontes de erros em métodos numéricos? Exemplifique o erro de truncamento.
4. Converta os seguintes números decimais para a base binária: $x = 47$, $y = 93$, $z = 26.35$ e $w = 0.1217$.
5. Converta os seguintes números binários para a sua correspondente forma na base decimal: $x = 110101_2$, $y = 0.1101_2$, $z = 11100.1101_2$ e $w = 0.1111101_2$.
6. Calcule a área de um círculo de raio 100 m, utilizando os seguintes valores aproximados para π : 3.14, 3.1416, 3.14159 e 3.1415926.
7. Determine os erros absoluto e relativo do exercício anterior, considerando como valor exato a área obtida através do último valor de π .
8. Determine o raio e o intervalo de convergência das séries de Taylor abaixo:

a)
$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n x^n}{2n}$$

b)
$$\sum_{n=0}^{\infty} (-2)^n x^n$$

c)
$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(x+2)^n}{2^n n^2}$$

d)
$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (x-1)^n}{n!}$$

9. Encontre a série de Maclaurin para as funções abaixo:

a) $f(x) = e^{3x}$

b) $f(x) = \sin(2x)$

c) $f(x) = \frac{1}{1+3x}$

d) $f(x) = x \sin(2x)$

10. Desenvolva as funções abaixo em série de Taylor, em torno do ponto dado:

a) $f(x) = \sin x$, $c = \pi$

b) $f(x) = \frac{1}{x}$, $c = 1$

c) $f(x) = \cos x$, $c = \pi$

d) $f(x) = e^x$, $c = 3$

11. Considere a função $f(x) = \ln x$.

- a) Desenvolva a função $f(x)$ em série de Taylor, em torno do ponto $x = e$;
- b) Encontre o raio e o intervalo de convergência da série obtida no item anterior;
- c) Expresse $f'(x)$ em termos de série de potências, e determine o seu domínio.

12. Considere a função $f(x) = \frac{1}{x}$.

- a) Desenvolva a função $f(x)$ em série de Taylor, em torno do ponto $x = 2$;
- b) Encontre o raio e o intervalo de convergência da série obtida no item anterior;
- c) Expresse $f'(x)$ e $f''(x)$ em termos de série de potências.

13. Considere a função $f(x) = e^{-2x}$.

- a) Determine a série de MacLaurin da função $f(x)$;
- b) Encontre o raio e o intervalo de convergência da série obtida no item anterior;
- c) Expresse $f'(x)$ em termos de série de potências, e determine o seu domínio.

14. Calcular o valor numérico de $\sin 2$, usando a série de Taylor da função $\sin x$ (dada abaixo) com número de termos variando de 2 a 10 termos. Calcular o erro absoluto para cada caso. Esboçar o gráfico do valor do $\sin 2$ calculado por série de Taylor versus o número de termos para verificar que ele converge para o valor exato com o aumento do número de termos da série.

$$\sin x = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!}, \quad |x| < \infty.$$

15. Calcular o valor numérico de $\ln(2, 1)$ empregando a série de Taylor

$$\ln x = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{(x-1)^k}{k}, \quad 0 < x \leq 2$$

com o número de termos variando de 1 a 20 termos e calcular o erro absoluto para cada caso. Esboçar o gráfico do valor do erro versus número de termos. Observar pelo erro absoluto que o aumento do número de termos não melhora a precisão do resultado numérico ao contrário do observado no exercício anterior. Explicar porque isto acontece.

Capítulo 2

Resolução Numérica de Sistemas Lineares

Métodos Diretos e Métodos Iterativos

O objetivo nesse capítulo é apresentarmos métodos numéricos para resolução de sistemas lineares. Dependendo do método escolhido, buscaremos uma solução exata ou uma solução aproximada, o que nos permite definir duas classes de métodos: *métodos diretos* e *métodos iterativos*. No caso dos métodos diretos, as soluções não apresentam nenhum tipo de erro de truncamento, ou seja, a solução encontrada será a solução exata. Os erros que possam vir a ocorrer serão decorrentes da máquina empregada (erros de arredondamento).

Na segunda classe temos os chamados métodos iterativos, que diferente dos métodos diretos, não produzem soluções exatas e sim, soluções aproximadas.

2.1 Método de Eliminação de Gauss

Começaremos nosso estudo com um método direto, o método da eliminação de Gauss. Considere o sistema linear abaixo:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (2.1)$$

Podemos escrever o sistema (2.1) na forma matricial $Ax = b$ $\left(\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i, i = 1, 2, \dots, n \right)$, onde $A = [a_{ij}]_{n \times n}$, $x = \{x_j\}_{n \times 1}$ e $b = \{b_i\}_{n \times 1}$.

Sabemos da álgebra linear que o sistema (2.1) admite solução se $\det A \neq 0$, ou seja, se A é invertível, e assim sua solução é $x = A^{-1}b$. Mas do ponto de vista computacional, calcular a inversa de uma matriz é muito custoso e, para evitar esse problema, utilizaremos o método de eliminação de Gauss.

Eliminação Gaussiana

A idéia do método de Gauss é transformar o sistema dado num sistema triangular inferior (ou superior), utilizando escalonamento de matrizes. Após esse processo, teremos o seguinte sistema:

- defino os multiplicadores de linha $\implies m_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}} = \frac{4}{2} = 2$
- defino as novas linhas da matriz $\implies L_3'' = L_3' - m_{32}L_2'$

e assim,

$$[A \mid b]'' = \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 7 \\ 0 & 2 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & -1 & -3 \end{array} \right) = [U \mid g]$$

Usando o algoritmo da retrossubstituição,

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{g_3 - \overbrace{\sum_{j=4}^3 u_{3j}x_j}^{=0}}{u_{33}} = \frac{-3}{-1} = 3 \\ x_2 &= \frac{g_2 - u_{23} x_3}{u_{22}} = \frac{7 - 1(3)}{2} = 2 \\ x_1 &= \frac{g_1 - u_{12} x_2 - u_{13} x_3}{u_{11}} = \frac{7 - 1(2) - 1(3)}{2} = 1 \end{aligned}$$

e a solução do sistema (2.3) fica

$$x = (1, 2, 3)^T \text{ ou } x = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

ALGORITMO DE GAUSS

Passo k: (O objetivo é eliminar x_k das equações)

- $i = k + 1, \dots, n$, com $n = \dim A$
- assumo $a_{kk}^{(k)} \neq 0 \rightarrow k^o$ pivô
- definição dos multiplicadores de linha $\implies m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, i = k + 1, \dots, n$
- definição das novas linhas da matriz $\implies \begin{cases} a_{ij}^{(k+1)} := a_{ij}^{(k)} - m_{ik}a_{kj}^{(k)} \\ b_i^{(k+1)} := b_i^{(k)} - m_{ik}b_k^{(k)} \end{cases}.$

2.2 Decomposição LU

“Toda matriz não singular admite uma decomposição em duas matrizes triangulares, uma superior e outra inferior”. Quem garante esse resultado é o próximo teorema.

Teorema 2.1 - Teorema de Gauss

Seja A uma matriz quadrada de ordem n tal que $\det A \neq 0$. Sejam U uma matriz triangular superior,

$$U = \begin{cases} u_{ij} & \text{se } i \leq j \\ 0 & \text{se } i > j \end{cases},$$

e L uma matriz triangular inferior unitária,

$$L = \begin{cases} 0 & \text{se } i < j \\ 1 & \text{se } i = j \\ l_{ij} & \text{se } i > j \end{cases}.$$

Então existe e é única a decomposição $A = LU$, onde U é a matriz resultante do processo de eliminação gaussiana e $l_{ij} = m_{ij}$ (multiplicadores de linha).

Aproveitando nosso último exemplo, podemos encontrar a decomposição LU da matriz associada ao sistema (2.3)

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 4 & 4 & 3 \\ 6 & 7 & 4 \end{pmatrix} = \overbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}}^L \overbrace{\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}^U.$$

Exercício 2.1 Resolver o sistema linear abaixo através do método de eliminação de Gauss utilizando quatro casas decimais de precisão na solução.

$$\begin{cases} x + y + z = 1 \\ 2x - y + 3z = 0 \\ -x + y - 5z = 2 \end{cases}.$$

2.3 Métodos Iterativos

Vamos agora introduzir dois novos métodos que pertencem a classe dos métodos iterativos. Estes métodos não mais resolvem o sistema exatamente, mas sim, a partir de uma estimativa inicial, constroem uma sequência de aproximações que converge para a solução exata do sistema. Devido as limitações de memória computacional, esses métodos se mostram mais interessantes que os diretos, os quais gastam grande quantidade de memória computacional (problemas de interesse da engenharia possuem aproximadamente 10^5 incógnitas).

Método de Gauss–Jacobi

Considere o sistema linear

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_i \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Podemos escrevê-lo como:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}x_j \right] \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n$$

O método de G.J. usa a maneira de escrever um sistema linear para gerar uma sequência de aproximações:

$$\underbrace{x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right]}_{\text{Formula de Gauss–Jacobi}} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, n \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Exemplo 2.2 *Resolva numericamente o sistema abaixo usando o método de Gauss-Jacobi.*

$$\begin{cases} 10x_1 + 3x_2 + x_3 = 14 \\ 2x_1 - 10x_2 + 3x_3 = -5 \\ x_1 + 3x_2 + 10x_3 = 14 \end{cases} \quad , \quad \text{chute: } x^{(0)} = (0, 0, 0)^T \quad , \quad x^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

solução:

Input: $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$

$$K = 0 \begin{cases} x_1^{(1)} = \frac{1}{a_{11}} \left[b_1 - a_{12}x_2^{(0)} - a_{13}x_3^{(0)} \right] = \frac{1}{10} (14 - 3 \times 0 - 1 \times 0) = 1,4 \\ x_2^{(1)} = \frac{1}{a_{22}} \left[b_2 - a_{21}x_1^{(0)} - a_{23}x_3^{(0)} \right] = \frac{1}{-10} (-5 - 2 \times 0 - 3 \times 0) = 0,5 \\ x_3^{(1)} = \frac{1}{a_{33}} \left[b_3 - a_{31}x_1^{(0)} - a_{32}x_2^{(0)} \right] = \frac{1}{10} (14 - 1 \times 0 - 3 \times 0) = 1,4 \end{cases}$$

Output: $x^{(1)} = (1,4, 0,5, 1,4)^T$

Input: $x^{(1)} = (1,4, 0,5, 1,4)^T$

$$K = 1 \begin{cases} x_1^{(2)} = \frac{1}{10} (14 - 3 \times 0,5 - 1 \times 1,4) = 1,11 \\ x_2^{(2)} = \frac{1}{-10} (-5 - 2 \times (1,4) - 3 \times (1,4)) = 1,20 \\ x_3^{(2)} = \frac{1}{10} (14 - 1 \times (1,4) - 3 \times (0,5)) = 1,11 \end{cases}$$

Output: $x^{(2)} = (1,11, 1,20, 1,11)^T$

Com algumas iterações do algoritmo, convergimos para $x = (1,1,1)^T$. ■

Exercício 2.2 Verifique que $x_1^{(6)} = 1,000251$, $x_2^{(6)} = 1,005795$ e $x_3^{(6)} = 1,000251$.

Método de Gauss-Seidel

Podemos construir uma variante do método de G.J. permitindo que as versões atualizadas das componentes de x entre na computação na mesma iteração K na qual são calculadas. Isto dá origem ao método de Gauss-Seidel.

Fórmula Gauss-Seidel :

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[b_i - \overbrace{\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)}}^{\text{Termo novo}} - \overbrace{\sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)}}^{\text{antigo}} \right], \quad i = 1, 2, \dots, n \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Exemplo 2.3 Refaça o exemplo anterior empregando agora o método GS:

Input: $x^{(0)} = (0, 0, 0)^T$

$$K = 0 \left\{ \begin{array}{lcl} x_1^{(1)} & = & \frac{1}{a_{11}} \left[b_1 - a_{12}x_2^{(0)} - a_{13}x_3^{(0)} \right] = \frac{1}{10} (14 - 3 \times 0 - 1 \times 0) = 1,4 \\ x_2^{(1)} & = & \frac{1}{a_{22}} \left[b_2 - a_{21}x_1^{(1)} - a_{23}x_3^{(0)} \right] = \frac{1}{-10} (-5 - 2 \times 1,4 - 3 \times 0) = 0,78 \\ x_3^{(1)} & = & \frac{1}{a_{33}} \left[b_3 - a_{31}x_1^{(1)} - a_{32}x_2^{(1)} \right] = \frac{1}{10} (14 - 1 \times 1,4 - 3 \times 0,78) = 1,026 \end{array} \right.$$

Output: $x^{(1)} = (1,4, 0,78, 1,026)^T$

Input: $x^{(1)} = (1,4, 0,78, 1,026)^T$

$$K = 1 \left\{ \begin{array}{lcl} x_1^{(2)} & = & \frac{1}{10} (14 - 3 \times (0,78) - 1 \times (1,026)) = 1,0634 \\ x_2^{(2)} & = & \frac{1}{-10} (-5 - 2 \times (1,0634) - 3 \times (1,026)) = 1,02048 \\ x_3^{(2)} & = & \frac{1}{10} (14 - 1 \times (1,0634) - 3 \times (1,02048)) = 0,98752 \end{array} \right.$$

Output: $x^{(2)} = (1,0634, 1,02048, 0,98752)^T$. ■

Exercício 2.3 Verifique que $x_1^{(5)} = 0,99979$, $x_2^{(5)} = 0,99985$ e $x_3^{(5)} = 1,00007$.

Estudo de Convergência

Por se tratar de um método iterativo, necessitamos estabelecer critérios de parada para interromper a computação.

I) Controle do número de iterações :

Se a estrutura de repetição do programa exceder um dado número de iterações, interrompemos a computação.

$$\text{itera} \geq \text{itera} - \text{máx} \rightarrow \text{stop}$$

II) Controle na precisão da solução :

Se a diferença, em módulo, entre duas aproximações consecutivas for menor que um parâmetro pré-estabelecido $\varepsilon > 0$, finalize a computação .

$$\max_i \left| x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)} \right| \leq \varepsilon \rightarrow \text{stop}$$

Vantagens dos métodos iterativos :

- Em sistemas mal condicionados ($\det A \cong 0$), os erros de arredondamento normalmente destroem uma solução direta. Já as soluções iterativas propagam pouco este tipo de erro;
- Caso a matriz for esparsa, também devemos optar por soluções iterativas, pois nestas situações elas apresentam boa velocidade.

Desvantagens :

- Sua convergência não será garantida;
- Para matrizes cheias, apresentam um número maior de contas.

Comentário Importante :

Caso a solução não seja convergente, podemos tentar uma reorganização das equações antes de aplicarmos o método iterativo. Por exemplo, considere o sistema abaixo:

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

Tomando chute $x^{(0)} = (0, 0, 0, 0)^T$, a solução utilizando “GS” diverge, $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} \neq x$. Entretanto, ao reordenamento do sistema, $[L_1 \leftrightarrow L_2]$, e depois, $[L_4 \leftrightarrow L_2]$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 5 & \\ & & & 1 \end{pmatrix}^{(antes)} \rightarrow \begin{pmatrix} 5 & & & \\ & -7 & & \\ & & 5 & \\ & & & 3 \end{pmatrix}^{(depois)}$$

a solução converge para $x = (1.0000, 1.0000, 1.0000, 1.0000)^T$, com 6 iterações.

Critério de convergência:

“Toda matriz diagonal dominante é convergente, para qualquer chute inicial.”

Condição de diagonal dominante:

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.4)$$

2.4 Exercícios

1. Resolver os sistemas abaixo pelo método de eliminação de Gauss:

$$a) \quad \begin{cases} 10x_1 + 2x_2 + x_3 = 15 \\ 20x_1 - 5x_2 + 2x_3 = 32 \\ 5x_1 + 15x_2 - 2x_3 = 33 \end{cases}$$

$$b) \quad \begin{cases} 3x_1 + 10x_2 + x_3 = -16 \\ x_1 - 5x_2 + 10x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 2 \end{cases}$$

$$c) \quad \begin{cases} 5x_1 - 2x_2 = 10 \\ 10x_2 - 3x_3 = -50 \\ -2x_1 + 5x_2 - 2x_3 = 60 \end{cases}$$

$$d) \quad \begin{cases} 50x_1 - 5x_2 + 2x_3 = 300 \\ -2x_2 + 5x_3 = 10 \\ 10x_1 - 20x_3 = -950 \end{cases}$$

2. Encontre a decomposição LU das matrizes dos coeficientes associados aos sistemas do exercício anterior.
3. Considere o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - x_3 = 1 \\ 2x_1 - x_2 = 1 \\ -x_2 + 2x_3 - x_4 = 1 \\ -x_3 + 2x_4 = 1 \end{cases}$$

- a) Mostre que esse sistema não satisfaz a condição de diagonal dominante;
- b) Se permutarmos as linhas desse sistema, podemos utilizar os métodos de Gauss-Jacobi e Gauss-Seidel para resolvê-lo tendo garantia de convergência?
4. Considere o sistema linear abaixo:

$$\begin{cases} x_1 - 3x_2 + x_3 - 4x_4 = -1 \\ x_2 - 2x_3 = 3 \\ 10x_1 + x_2 + x_4 = -8 \\ x_1 - x_3 + 3x_4 = 8 \end{cases}$$

- a) Resolva o sistema utilizando o método de eliminação de Gauss;
- b) Podemos determinar a solução aproximada do sistema, usando o Método de Gauss-Seidel para qualquer aproximação inicial? Porquê?

5. Considere o sistema linear abaixo:

$$\begin{cases} ax_1 + 3x_2 + x_3 = 1 \\ ax_1 + 8x_2 + x_3 = 2 \\ x_1 + 2x_2 + 4x_3 = 3 \end{cases}$$

a) Determine para que valores de a se tem garantia de que os métodos de Gauss-Seidel e Gauss-Jacobi geram uma sequência convergente, para qualquer aproximação inicial;

b) Escolha o menor valor inteiro positivo de a e determine uma solução aproximada do sistema, usando os métodos acima, com critério de parada estabelecido pelo erro abaixo

$$\max_{i=1,\dots,3} |x_i^{k+1} - x_i^k| \leq \varepsilon = 1 \times 10^{-3}.$$

6. Considere o sistema linear abaixo:

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 - 5x_3 + 18 = 0 \\ -4x_1 + x_2 - 2x_3 + 8 = 0 \\ -x_1 + 5x_2 + 2x_3 - 15 = 0 \end{cases}.$$

Verifique que, para o sistema de equações dado, o método de Gauss-Jacobi é convergente. Utilize-o para obter uma aproximação da solução, $x^{(1)}$, partindo da aproximação $x^{(0)} = (1.05, 2.16, 3.0)^T$.

7. Considere o sistema de equações lineares $AX = B$, onde

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 2 & 4 \\ 5 & -2 & 1 \\ 2 & 3 & 0 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \text{ e } B = \begin{pmatrix} 17.0 \\ 4.8 \\ 9.3 \end{pmatrix}.$$

a) Verifique que é possível, partindo de um sistema de equações equivalente ao anterior, provar a convergência do método de Gauss-Seidel para a solução, X^* , do sistema;

b) Considerando $X^{(0)} = (0.6, -0.7, 0.2)^T$, determine $X^{(1)}$ utilizando Gauss-Seidel.

8. Explique a diferença entre métodos diretos e métodos iterativos.

9. Descreva as vantagens e as desvantagens, caso existam, do método de eliminação de Gauss.

Capítulo 3

Zero de Funções

O estudo das equações algébricas é, juntamente com a trigonometria uma das áreas mais antigas da matemática. Ainda na idade média, os matemáticos árabes solucionaram a equação do 2º grau, e na renascença foram solucionadas as equações do 3º e 4º graus.

Após muito esforço e dedicação por parte dos que pesquisam matemática, ficou provado que para equações de grau maior que 4, não é possível obter uma solução do tipo combinação dos coeficientes da equação. É justamente aí que surgem os métodos que capturam as raízes dessas equações.

Estes métodos, também conhecidos como iterativos, constroem uma sequência de aproximações que poderá convergir para a solução do problema. A seguir, serão apresentados 4 destes métodos: Bisseção, Falsa-Posição, Iteração Linear e Newton-Raphson.

raiz de uma equação

Um escalar ξ é dito um zero de uma função $f(x)$ (ou simplesmente raiz da equação $f(x) = 0$), se e somente se, $f(\xi) = 0$. Estes zeros são representados geometricamente pela interseção da função $f(x)$ com o eixo x .

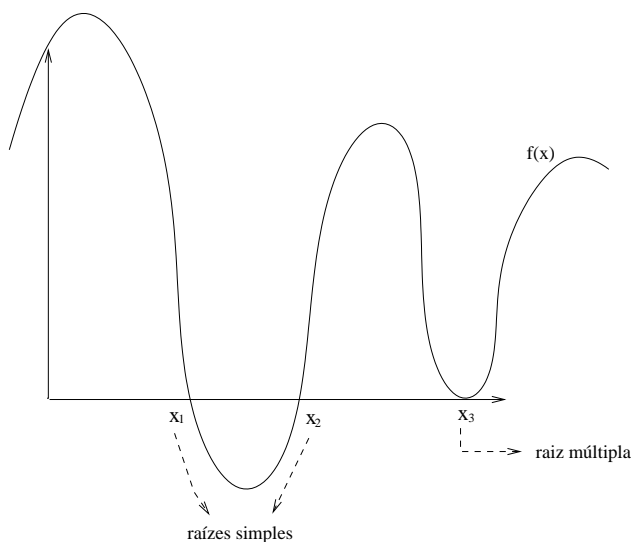


Figura 3.1: raízes simples e raiz múltipla

Conforme ilustrado na figura acima, temos dois tipos de raízes: simples ($f'(\xi) \neq 0$) e múltipla ($f'(\xi) = 0$). Os dois primeiros métodos supracitados (Bisseção e Falsa-Posição) só capturam raízes simples, enquanto que o último (Newton-Raphson) captura ambas.

3.1 Método da Bisseção

Seja $f(x)$ uma função contínua no intervalo $[a, b]$ contendo apenas 1 raiz de $f(x)$ (se $f(a) \cdot f(b) < 0$ então existe 1 raiz simples no intervalo). A idéia do método é:

1. escolher $[a, b]$ contendo ξ ;
2. calcular o ponto médio do intervalo, $c = \frac{a+b}{2}$;

3. quebrar o intervalo da seguinte forma

$$f(b) \cdot f(c) > 0 \Rightarrow b := c$$

$$f(b) \cdot f(c) < 0 \Rightarrow a := c$$

4. reinicie o algoritmo.

Exemplo 3.1 Aproxime a raiz ξ da equação $e^x - 4x = 0$, sabendo que $\xi \in [0, 0.5]$.

$$1^\circ \text{ passo } \left\{ \begin{array}{lll} a = 0 & b = 0.5 & c = 0.25 \\ f(a) = 1 & f(b) = -0.3513 & f(c) = 0.2840 \\ f(b) \cdot f(c) < 0 & \Rightarrow & a := c \end{array} \right.$$

$$2^\circ \text{ passo } \left\{ \begin{array}{lll} a = 0.25 & b = 0.5 & c = 0.3750 \\ f(a) = 0,2840 & f(b) = -0.3513 & f(c) = -0.0450 \\ f(b) \cdot f(c) > 0 & \Rightarrow & b := c \end{array} \right.$$

$$3^\circ \text{ passo } \left\{ \begin{array}{lll} a = 0.25 & b = 0.3750 & c = 0.3125 \\ f(a) = 0.2840 & f(b) = -0.0450 & f(c) = 0.1168 \\ f(b) \cdot f(c) < 0 & \Rightarrow & a := c \end{array} \right.$$

\vdots

critérios de parada

Se $\bar{\xi}$ é a aproximação da raiz ξ da equação $f(x) = 0$ pertencente ao intervalo $[a, b]$, então temos dois critérios de parada:

$$\text{I) } |f(\bar{\xi})| \leq \varepsilon$$

$$\text{II) } |b - a| \leq \varepsilon,$$

onde ε é um parâmetro pré-estabelecido.

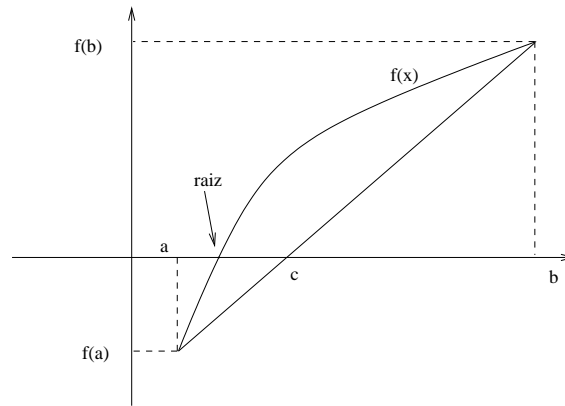


Figura 3.2: novo ponto “c” escolhido

3.2 Método da Falsa-Posição

É uma variante do método da bisseção, na medida em que utiliza o mesmo algoritmo que o método da bisseção, diferindo apenas na escolha do ponto “c”, que passa a ser a raiz da secante que liga os pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$. Veja a figura 3.2.

O novo valor de “c” será dado por

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

Exercício 3.1 Verifique que com o método da falsa-posição, após 3 iterações, o exemplo anterior nos leva ao seguinte resultado: $c = 0.3575$ e $f(c) = -0.0002$.

ALGORITMO BISSECAO

entrada: $(f(x), a, b, aux)$

```

defina c:= (a+b)/2;
se |b-c| <= aux entao raiz:= c e stop;
caso contrario,
    se f(b)f(c) < 0 entao a:=c;
    caso contrario, b:=c;
    fim-se;
fim-se;
reinice o algoritmo

```

ALGORITMO FALSA-POSICAO

entrada: $(f(x), a, b, aux)$

```

defina c:= (f(b)a-f(a)b)/(f(b)-f(a));

```

```

se |b-c| <= aux então raiz:= c e stop;
caso contrário,
    se f(b)f(c) < 0 então a:=c;
    caso contrário, b:=c;
    fim-se;
fim-se;
reinicie o algoritmo

```

Exercício 3.2 Encontre as raízes das equações abaixo:

- a) $x^3 - 9x + 3 = 0$;
- b) $x^3 - 11x^2 + 39x - 45 = 0$;
- c) $x^3 - 5x^2 + 17x + 21 = 0$;
- d) $e^{-x} - x = 0$.

3.3 Método da Iteração Linear

Vamos estudar agora os chamados métodos do ponto fixo. O mais simples deles é o método da iteração linear, o qual, mesmo não tendo boa eficiência computacional, é importante para a introdução do método de Newton-Raphson.

Inicialmente, vamos reescrever o problema “Encontrar $\xi \in \mathbb{R}$ tal que $f(\xi) = 0$ ” como “Encontrar $\xi \in \mathbb{R}$ tal que $\xi = \varphi(\xi)$ ”, onde $\varphi(x)$ é uma função de iteração da equação $f(x) = 0$.

Pra tornar estes problemas equivalente, façamos $f(x) = x - \varphi(x)$, assim, como $f(\xi) = 0$, temos que $\xi - \varphi(\xi) = 0$ e, portanto, $\boxed{\xi = \varphi(\xi)}$.

Exemplo 3.2 Considere a equação $x^2 + x - 6 = 0$. A sua função de iteração é a função $\varphi(x) = \sqrt{6 - x}$.

Uma vez determinada $\varphi(x)$, o M.I.L. consiste em construir uma sequência de aproximações $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ a partir de um chute inicial x_0 e gerada através da relação recursiva $\boxed{x_{i+1} := \varphi(x_i)}$, $i = 0, 1, 2, \dots$.

No exemplo acima, partindo de $x_0 = 1,5$ teríamos

1. $x_1 = \varphi(x_0) = \sqrt{6 - 1,5} = 2.1213$;
2. $x_2 = \varphi(x_1) = \sqrt{6 - 2.1213} = 1.9694$;
3. $x_3 = \varphi(x_2) = \sqrt{6 - 1.9694} = 2.0076$;
4. $x_4 = \varphi(x_3) = \sqrt{6 - 2.0076} = 1.9981$;
5. $x_5 = \varphi(x_4) = \sqrt{6 - 1.9981} = 2.0005$;

e, portanto podemos perceber que o processo converge para $\xi = 2$.

Entretanto, o M.I.L. não é incondicionalmente convergente como os métodos da bissecção e falsa-posição. Ao tomarmos como função de iteração $\varphi(x) = 6 - x^2$ (note que $\varphi(x)$ não é única), geramos um processo iterativo divergente, *verifique!*

estudo da convergência

Como vimos, $\varphi(x)$ não é única. Na verdade, sua forma geral é dada pela relação

$$\varphi(x) = x + A(x)f(x),$$

com $A(\xi) \neq 0$. Podemos mostrar a equivalência entre os problemas $f(\xi) = 0$ e $\xi = \varphi(\xi)$ da seguinte maneira

I) Seja ξ tal que $f(\xi) = 0$, então

$$\varphi(\xi) = \xi + A(\xi) \underbrace{f(\xi)}_{=0} \therefore \xi = \varphi(\xi).$$

II) Seja ξ tal que $\xi = \varphi(\xi)$, então

$$\varphi(\xi) = \xi + A(\xi)f(\xi) \therefore 0 = \varphi(\xi) - \xi = A(\xi)f(\xi),$$

e como $A(\xi) \neq 0$, temos que $f(\xi) = 0$. ■

A interpretação gráfica do problema de ponto fixo é a interseção da curva $y = \varphi(x)$ com a reta $y = x$, conforme ilustra a figura 3.3:

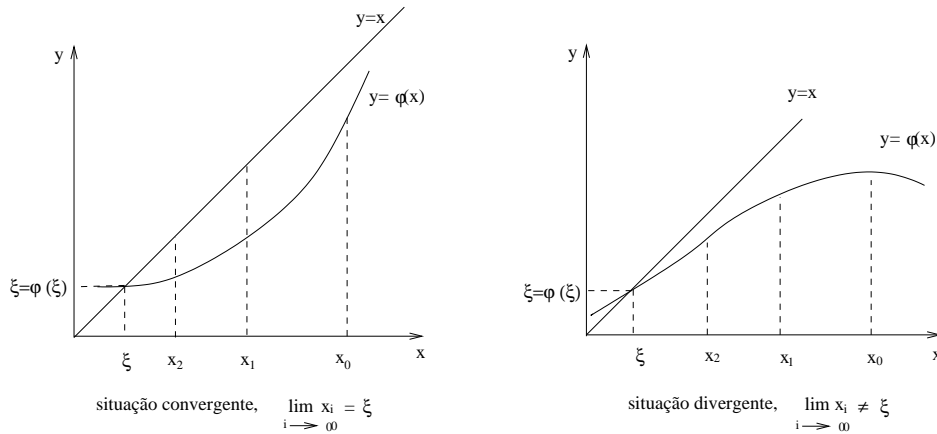


Figura 3.3: interpretação gráfica do MIL

Estas figuras sugerem que, para gerarmos um processo convergente, devemos ter *baixas derivadas* de $\varphi(x)$ na vizinhança de ξ . Esta sugestão é confirmada pelo teorema de convergência do M.I.L.

Teorema 3.1 Teorema de Convergência do M.I.L. - *Seja ξ uma raiz de $f(x) = 0$ isolada no intervalo $[a, b]$ centrado em ξ . Seja $\varphi(x)$ uma função de iteração de $f(x) = 0$. Se:*

- I) $\varphi(x)$ é tal que $\varphi'(x) \in C^0[a, b]$;
- II) $|\varphi'(x)| \leq M < 1, \forall x \in [a, b]$;
- III) $x_0 \in [a, b]$,

então a sequência $\{x_i\}$ gerada pelo processo $x_{i+1} := \varphi(x_i)$ converge para ξ .

critérios de parada

O M.I.L utiliza os seguintes critérios de parada:

I) $|x_{i+1} - x_i| \leq \varepsilon;$

II) $|f(\xi)| \leq \varepsilon,$

onde ε é um parâmetro pré-estabelecido.

Observação 3.1 Devemos ser cuidadosos com o 1º critério, pois em algumas situações ele não corresponde à $|x_i - \xi| \leq \varepsilon$, conforme ilustra a figura abaixo.

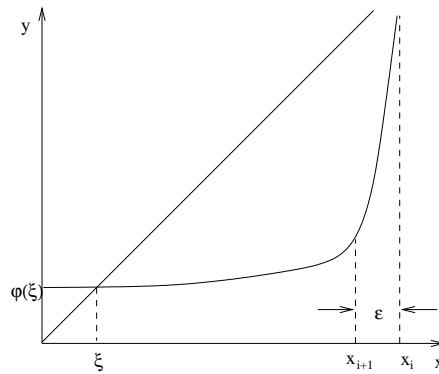


Figura 3.4: critério de parada do MIL

ALGORITMO MIL

entrada($f(x)$, $\Phi(x)$, raiz, x_0 , aux)

```

1.      se  $|f(x_0)| \leq \text{aux}$  entao raiz:=  $x_0$  e stop;
2.      caso contrario
3.          defina  $k=1$ ;
4.           $x_k := \Phi(k-1)$ ;
5.          se  $(|f(x_k)| \leq \text{aux} \text{ .ou. } |x_k - x_0| \leq \text{aux})$  entao
6.              raiz:=  $x_k$  e stop;
7.              caso contrario
8.                   $k := k+1$ ;
9.                  ir para o passo 4;
10.         fim-se;
11.     fim-se;
12.     fim-se.
```

3.4 Método de Newton-Raphson

Vimos que o M.I.L. tem convergência lenta e não garantida. A idéia do método de Newton é construir um método de ponto fixo que garanta e acelere a convergência do processo iterativo linear. Isto será feito impondo que a derivada da função de iteração seja nula em $x = \xi$, ou seja, $\varphi'(\xi) = 0$.

Já sabemos que $\varphi(x) = x + A(x)f(x)$, portanto,
 $\varphi'(x) = 1 + A'(x)f(x) + A(x)f'(x)$

$$\therefore \underbrace{\varphi'(\xi)}_{=0} = 1 + A'(\xi) \underbrace{f(\xi)}_{=0} + A(\xi)f'(\xi)$$

$$\therefore A(\xi)f'(\xi) = -1$$

$$\therefore \boxed{A(\xi) = \frac{-1}{f'(\xi)}}.$$

Logo, a função de iteração do método de Newton será dada por

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

e a sequência de aproximações $\{x_i\}_{i \in \mathbb{N}}$ de Newton será gerada pela relação recursiva

$$x_{i+1} = \varphi_N(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots,$$

e assim, temos a fórmula de Newton-Raphson

$$\boxed{x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}}. \quad (3.1)$$

Exercício 3.3 Utilize expansão em série de Taylor para deduzir a fórmula de Newton-Raphson.

interpretação geométrica

As aproximações futuras geradas pela fórmula de Newton serão as raízes das tangentes à curva $y = f(x)$ avaliadas nas aproximações atuais x_i , conforme mostra a figura a seguir,

Calculando a derivada de $f(x)$ e avaliando em x_i , temos

$$f'(x_i) = \tan \theta = \frac{\overbrace{f(x_{i+1}) - f(x_i)}^{=0}}{x_{i+1} - x_i}$$

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

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

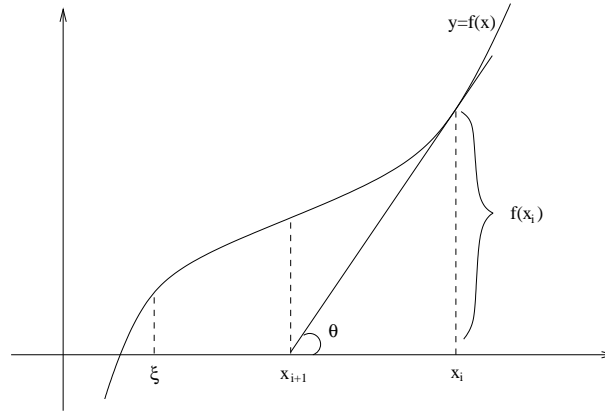


Figura 3.5: critério de parada do MIL

Exemplo 3.3 Considere ainda o exemplo 3.2, no qual a partir de uma estimativa inicial $x_0 = 1.5$, desejamos obter numericamente a raiz $\xi = 2$ da equação $x^2 + x - 6 = 0$. Aplicando o método de Newton-Raphson, temos

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

$$\Rightarrow x_{i+1} = x_i - \frac{x_i^2 + x_i - 6}{2x_i + 1} = \frac{x_i^2 + 6}{2x_i + 1},$$

e assim, teremos a seguinte sequência

$$x_1 = \varphi(x_0) = 2.06250;$$

$$x_2 = \varphi(x_1) = 2.00076;$$

$$x_3 = \varphi(x_2) = 2.00000.$$

Observe que, com apenas 3 iterações, obtemos $\xi = 2$ com precisão de 5 casas decimais!

Para uma pequena análise de convergência, apresentamos o teorema abaixo, que descreve as condições para que o método de Newton-Raphson seja convergente.

Teorema 3.2 Sejam $f(x)$, $f'(x)$, $f''(x) \in C^0[a, b]$ e seja $\xi \in [a, b]$ raiz da equação $f(x) = 0$. Suponha que $f'(x) \neq 0$. Então existe um intervalo $I \subset [a, b]$ tal que $\xi \in I$ e se $x_0 \in I$, a sequência $\{x_i\}$ gerada pela fórmula recursiva $x_{i+1} := \varphi(x_i)$, $\forall i$, irá convergir para a raiz ξ .

3.5 Exercícios

1. Dê um exemplo de uma função $f(x)$ que tenha pelo menos uma raiz, mas que não pode ser determinada usando o método da bisseção.
2. A equação $x^2 - 7x + 12 = 0$ tem 3 e 4 como raízes. Considere a função de iteração dada por $\varphi(x) = x^2 - 6x + 12$. Determine o intervalo (a, b) onde, para qualquer que seja x_0 escolhido, a sequência $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ converge para a raiz $x = 3$.

3. Seja $f(x) = e^x + x - 3$.
 - a) Prove, analiticamente, que a equação $f(x) = 0$ tem, no intervalo $[0, 1]$, apenas uma raiz, α ;
 - b) Aproxime α utilizando o método da bisseção com 6 iterações.
4. Considere a equação $x^3 + 3x + 3 = 0$.
 - a) Justifique analiticamente que a equação tem uma única raiz real, α , pertencente ao intervalo $[-1, -0.1]$.
 - b) Utilize o método de Newton-Raphson para aproximar a raiz α calculando apenas duas iterações, x_1 e x_2 . Escolha o chute inicial x_0 .
5. Considere a equação $e^{-x} - x = 0$.
 - a) Justifique analiticamente que a equação tem uma única raiz real, α , pertencente ao intervalo $[0.3, 0.6]$.
 - b) Quantas iterações teria de calcular pelo método da bisseção de modo a obter uma aproximação de α com 3 casas decimais significativas, sabendo que, com 4 casas decimais significativas uma aproximação para α é 0,5672.
6. Determine um intervalo (a, b) e uma função de iteração $\varphi(x)$ associada, de tal forma que, $\forall x_0 \in (a, b)$, a função de iteração gere uma sequência convergente para a(s) raiz(es) de cada uma das funções abaixo, usando o método iterativo linear (MIL) com tolerância $\varepsilon \leq 1 \times 10^{-3}$:
 - a) $f_1(x) = \sqrt{x} - e^{-x}$;
 - b) $f_2(x) = \ln(x) - x + 2$;
 - c) $f_3(x) = e^{\frac{x}{2}} - x^3$;
 - d) $f_4(x) = \sin(x) - x^2$;
 - e) $f_5(x) = \frac{x}{4} - \cos(x)$.
7. Determine a(s) raiz(es) da função $f_1(x)$, usando o método da bisseção e o método da falsa posição com tolerância $\varepsilon \leq 1 \times 10^{-3}$. Quantas iterações foram necessárias para cada um dos métodos?
8. Determine as raízes do exercício (6), usando o método de Newton-Raphson.
9. Determine o ponto de interseção entre as funções $f_1(x)$ e $f_2(x)$, $f_2(x)$ e $f_3(x)$ e entre $f_1(x)$, $f_2(x)$ e $f_3(x)$.
10. Defina raiz simples e raiz múltipla em termos de multiplicidade algébrica. Interprete geometricamente cada uma delas.

Capítulo 4

Aproximação de Funções

A teoria de interpolação tem importantes aplicações nas ciências exatas. Uma delas é fornecer ferramentas matemáticas para o desenvolvimento de métodos numéricos, nas áreas de integração numérica, teoria de aproximação e solução de equações diferenciais.

Um 2º uso importante é desenvolver maneiras de trabalhar com funções tabeladas, por exemplo, interpolar linearmente uma tabela de logaritmos. Entretanto, esta aplicação cai cada vez mais em desuso com a popularização das máquinas de calcular.

4.1 Teoria de Interpolação

Definição 4.1 (Interpolação) - Dado um conjunto de pontos suporte (x_i, y_i) , $i = 0, 1, 2, \dots, n$, de uma certa função $y = f(x)$, deseja-se calcular uma aproximação para $f(\bar{x})$, $\bar{x} \neq x$, empregando os pontos dados. Para tal, construímos uma função $\varphi(x)$ que interpola $f(x)$ da seguinte maneira

i) $\varphi(x_i) = f(x_i)$, $\forall x_i$, $i = 0, 1, \dots, n$;

ii) $\varphi(\bar{x}) \cong f(\bar{x})$, $\forall \bar{x} \neq x_i$, $i = 0, 1, \dots, n$.

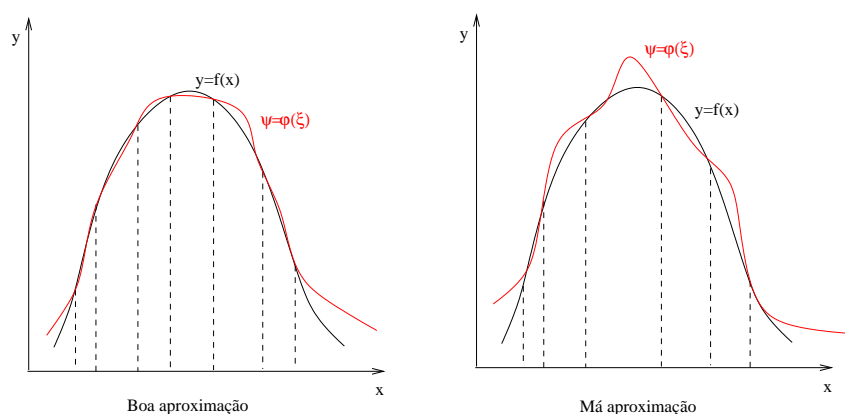


Figura 4.1: exemplos de interpolação

A função interpolante pode pertencer a várias famílias:

a) $\varphi(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$

b) $\varphi(x) = a_0 + a_1e^x + a_2e^{2x} + \cdots + a_ne^{nx}$

c) Splines: colagem de polinômios.

problema de interpolação geral

A partir de uma tabela com $n+1$ pontos de suporte, deseja-se escolher $n+1$ funções de base $\varphi_j(x)$, cuja combinação linear será usada para aproximar a função $f(x)$,

$$\varphi(x) = \sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x) = a_0 \varphi_0(x) + a_1 \varphi_1(x) + \cdots + a_n \varphi_n(x),$$

$\varphi_j(x)$ - funções de base “dadas” (conhecidas);

a_j - coeficientes incógnitos.

4.2 Interpolação Polinomial

A escolha mais frequente para as chamadas funções de base, $\varphi_j(x)$, são os monômios $\varphi_j(x) = x^j$, $j = 0, 1, \cdots, n$, assim, o problema de interpolação passa a ser expresso por

$$\varphi(x) = \sum_{j=0}^n a_j x^j = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n.$$

O problema é determinarmos os coeficientes a_j !

Para encontrarmos esses coeficientes, usamos a definição de interpolação, que diz que $\varphi(x)$ passa por todos os pontos suporte, ou seja,

$$\varphi(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, \cdots, n,$$

portanto,

$$\sum_{j=0}^n a_j (x_i^j) = y_i, \quad i = 0, 1, \cdots, n,$$

e assim, temos o seguinte sistema linear

$$\left\{ \begin{array}{lcl} a_0 x_0^0 + a_1 x_0^1 + \cdots + a_n x_0^n & = & y_0 \\ a_0 x_1^0 + a_1 x_1^1 + \cdots + a_n x_1^n & = & y_1 \\ a_0 x_2^0 + a_1 x_2^1 + \cdots + a_n x_2^n & = & y_2 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_0 x_n^0 + a_1 x_n^1 + \cdots + a_n x_n^n & = & y_n \end{array} \right. \quad (4.1)$$

que também pode ser escrito na forma matricial abaixo

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0^1 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1^1 & \cdots & x_1^n \\ 1 & x_2^1 & \cdots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n^1 & \cdots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

A primeira matriz que aparece acima é denominada *Matriz de Vander-Monde*.

Exemplo 4.1 Polinômio Linear

Encontre o polinômio linear que interpola a função $y = e^x$ no intervalo $[0, 2]$.

solução:

polinômio linear: 2 pontos suporte apenas

x_i	y_i
$x_0 = 0$	$y_0 = e^0 = 1$
$x_1 = 2$	$y_1 = e^2 = 7,3891$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 7,3891 \end{pmatrix}$$

$\therefore a_0 = 1$ e $a_1 = 3,1946$, e portanto, o polinômio interpolante será

$$\varphi(x) = 1 + 3,1946x.$$

■

unicidade do polinômio interpolador

Elevando o grau n de $\varphi(x)$ esbarramos em dois problemas. O primeiro consiste em gerar sistemas lineares muito grandes que deverão ser resolvidos, o que pode acontecer se utilizarmos um bom código de resolução de sistemas. O segundo problema está intimamente ligado a estrutura da matriz dos coeficientes, que para n muito grande, torna a matriz mal-condicionada limitando o cálculo de $\varphi(x)$ somente para n pequenos.

Antes, porém, de apresentarmos outras fórmulas para $\varphi(x)$, vamos enunciar o **teorema da unicidade do polinômio interpolador**, que vai garantir a existência de um único $\varphi(x)$ para um mesmo conjunto de pontos suporte.

Teorema 4.1 Existência e Unicidade do Polinômio Interpolador

Para $n + 1$ pontos suporte (x_i, y_i) , $i = 0, 1, \dots, n$, $x_i \neq x_j$, existe e é único o interpolante $\varphi(x) \in P_k(x)$, $k \leq n$, tal que $\varphi(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \dots, n$.

4.3 Fórmula de Lagrange

A fórmula de Lagrange para o cálculo de $\varphi(x)$ utiliza os chamados polinômios de Lagrange,

$$L_j(x) = \prod_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^n \frac{x - x_k}{x_j - x_k}.$$

A expressão do polinômio interpolador será dado por

$$\varphi(x) = \sum_{j=0}^n y_j L_j(x).$$

Observação 4.1 *O polinômio de Lagrange tem a propriedade do delta de Kroenecker*

$$L_j(x_i) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & , \quad i = j \\ 0 & , \quad i \neq j \end{cases}$$

Verifique! Em seguida, mostre que a fórmula de Lagrange passa por todos os pontos suporte, ou seja, $\varphi(x_i) = y_i$, $\forall i$.

Exemplo 4.2 *Interpolar a função $\log_{10} x$ no intervalo $[2, 3]$ usando apenas dois pontos suporte:*

solução:

x_i	y_i
$x_0 = 2$	$y_0 = \log_{10} 2 = 0.301$
$x_1 = 3$	$y_1 = \log_{10} 3 = 0.477$

Portanto, $\varphi(x) = 0.301L_0(x) + 0.477L_1(x)$.

Calculando os polinômios de Lagrange $L_0(x)$ e $L_1(x)$,

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} = \frac{x - 3}{2 - 3} = -(x - 3),$$

$$L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = \frac{x - 2}{3 - 2} = x - 2,$$

e portanto, $\varphi(x) = -0.301(x - 3) + 0.477(x - 2)$.

4.4 Diferenciação Numérica

Começemos esse capítulo lembrando a definição de derivada de uma função real $f(x)$

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

o que nos motiva a aproximar essa derivada da seguinte maneira:

$$\Delta^1 \equiv \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad (4.2)$$

desde que $h > 0$ seja um parâmetro muito pequeno. Mas será que essa aproximação é boa? Vamos responder essa pergunta utilizando expansão em série de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (x, x+h)$$

$$\Rightarrow f(x+h) - f(x) = hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(\xi),$$

dividindo tudo por h temos

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi),$$

o que nos motiva a definir o erro da aproximação 4.2 como

$$e = \frac{h}{2}f''(\xi).$$

Isto significa que se desejamos obter um erro, por exemplo, 10 vezes menor, temos que reduzir h na mesma proporção, o que, de certa forma, empobrece a aproximação 4.2. Mas, e se conseguirmos uma aproximação cujo erro seja proporcional a h^2 ? Com certeza o erro diminuiria muito mais rápido comparado a diminuição do parâmetro h .

Vamos considerar uma função real $f(x)$ e a reta r que liga os pontos $(x-h, f(x-h))$ e $(x+h, f(x+h))$, onde h é um parâmetro positivo suficientemente pequeno.

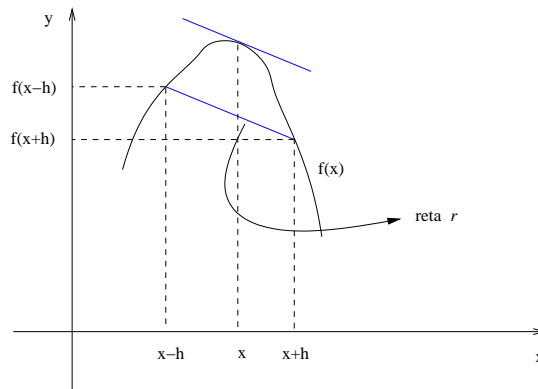


Figura 4.2: interpretação geométrica da fórmula de diferenças centradas

Qual é a inclinação da reta r ? E o que acontece quando $h \rightarrow 0$? Podemos observar no gráfico acima que a reta r tem como coeficiente angular

$$m = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},$$

e assim, r tende para a reta tangente a curva no ponto x , ou seja, $m \rightarrow f'(x)$, o que significa que podemos aproximar a derivada de $f(x)$ da seguinte maneira:

$$\Delta^2 = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \quad (4.3)$$

Vamos agora verificar a ordem do erro da aproximação 4.3. Considerando o intervalo $(x-h, x+h)$ e assumindo $f(x)$ uma função suficientemente regular, podemos novamente utilizar expansão em série de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi),$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi),$$

onde $\xi \in (x-h, x+h)$.

Subtraindo a segunda da primeira equação, temos

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + 2\frac{h^3}{6}f'''(\xi),$$

e dividindo tudo por $2h$ obtemos

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{6}f'''(\xi),$$

e portanto, o erro é da ordem de h^2 .

Os operadores (aproximações) Δ^1 e Δ^2 são denominados **operadores de diferenças finitas de 1ª e 2ª ordem**, respectivamente.

operador de diferenças finitas de ordem n

Se considerarmos um conjunto de pontos suporte $(x_i, f(x_i))$, e aplicarmos o operador Δ^1 teremos

$$\Delta^1(f(x_i)) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i},$$

ou ainda,

$$\Delta^1 f_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i}.$$

Podemos generalizar o operador Δ através da tabela abaixo:

$$\begin{aligned} \Delta^0 f_i &\triangleq f_i \\ \Delta^1 f_i &= \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} \\ \Delta^2 f_i &= \Delta^1[\Delta^1 f_i] = \frac{\Delta^1 f_{i+1} - \Delta^1 f_i}{x_{i+2} - x_i} \\ &\vdots \\ \Delta^n f_i &= \Delta^1[\Delta^{n-1} f_i] = \frac{\Delta^{n-1} f_{i+1} - \Delta^{n-1} f_i}{x_{i+n} - x_i}. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Usando ainda a notação $\Delta^n f_i = f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}]$, podemos reescrever a tabela 4.4 como:

$$\begin{aligned}
\Delta^0 f_i &= f[x_i] \\
\Delta^1 f_i &= f[x_i, x_{i+1}] \\
\Delta^2 f_i &= f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i} \\
&\vdots \\
\Delta^n f_i &= f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_{i+n}] - f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+(n-1)}]}{x_{i+n} - x_i}.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Podemos representar as diferentes ordens do operador Δ através da seguinte tabela:

i	x_i	f_i	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$	\dots	$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+n}]$
0	x_0	f_0	$f[x_0, x_1]$	$f[x_0, x_1, x_2]$	\dots	$f[x_0, x_1, \dots, x_{i+n}]$
1	x_1	f_1	$f[x_1, x_2]$	$f[x_1, x_2, x_3]$	\dots	
2	x_2	f_2	$f[x_2, x_3]$	$f[x_2, x_3, x_4]$	\dots	
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots		
$n-1$	x_{n-1}	f_{n-1}	$f[x_{n-1}, x_n]$			
n	x_n	f_n				

Exercício 4.1 Dados os pontos de suporte abaixo, monte sua tabela de diferenças finitas:

i	x_i	f_i
0	0.2	1.22
1	0.4	1.49
2	0.6	1.82
3	0.8	2.23
4	1.0	2.72

4.5 Fórmula de Newton

Newton teve a idéia de usar o conceito de diferenças finitas escrevendo o polinômio interpolador como sendo a seguinte combinação linear

$$\varphi(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}),$$

com os coeficientes a_j calculados a partir do operador Δ .

Nós faremos a construção de $\varphi(x)$ de maneira indutiva. Inicialmente, construímos $\varphi_0(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0 e em x_1 , e assim sucessivamente construímos $\varphi_k(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0, x_1, \dots, x_k , $k = 0, 1, \dots, n$.

Antes de iniciarmos, é útil observar que Δ é invariante à ordenação dos pontos suporte x_i , por exemplo:

$$\Delta f_i = f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f_{i+1} - f_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{(-1)(f_i - f_{i+1})}{(-1)(x_i - x_{i+1})} = f[x_{i+1}, x_i].$$

construção do polinômio interpolador

I) Seja $\varphi_0(x)$ o interpolante de $f(x)$ em $x = 0$. Sabemos que

$$f[x_0, x] = \frac{f(x) - f(0)}{x - x_0}$$

e portanto,

$$f(x) = f_0 + f[x_0, x](x - x_0),$$

assim, podemos afirmar que $\varphi_0(x) = f_0 = f[x_0]$ e que $e_0(x) = f[x_0, x](x - x_0)$ (função erro que se anula em $x = x_0$).

II) Seja, agora, $\varphi_1(x)$ o interpolante para $f(x)$ em x_0 e em x_1 . Sabemos que

$$\begin{aligned} f[x_0, x_1, x] = f[x_1, x_0, x] &= \frac{f[x_0, x] - f[x_1, x_0]}{x - x_1} \\ &= \frac{\frac{f(x) - f(0)}{x - x_0} - f[x_0, x_1]}{x - x_1} \\ &= \frac{f(x) - f_0 - f[x_0, x_1](x - x_0)}{(x - x_1)(x - x_0)}, \end{aligned}$$

portanto,

$$f[x_0, x_1, x](x - x_0)(x - x_1) = f(x) - f_0 - f[x_0, x_1](x - x_0),$$

e assim,

$$f(x) = f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x](x - x_0)(x - x_1).$$

Concluimos que $\varphi_1(x) = f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0)$ e que $e_1(x) = f[x_0, x_1, x](x - x_0)(x - x_1)$ (função erro que se anula em $x = x_0$ e $x = x_1$).

III) Generalizando, temos

$$\varphi_n(x) = f_0 + f[x_0, x_1](x - x_0) + \cdots + f[x_0, x_1, \dots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}),$$

ou ainda

$$\overbrace{\varphi_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})}^{\text{Polinômio de Newton}}, \quad (4.6)$$

onde $a_0 = f[x_0]$, $a_1 = f[x_0, x_1]$, $a_2 = f[x_0, x_1, x_2]$, \dots , $a_n = f[x_0, x_1, x_2, \dots, x_n]$.

Exercício 4.2 Construa um interpolante para a tabela abaixo usando polinômio de Newton:

x_i	f_i
6	0.70
7	0.63
8	0.57
9	0.50

4.6 Ajuste de Curvas

Nas primeiras seções desse capítulo, estudamos como interpolar uma função $f(x)$ a partir de um conjunto de pontos suporte. Nas próximas seções, aprenderemos como ajustar uma curva por entre estes pontos, sem necessariamente passar por todos eles.

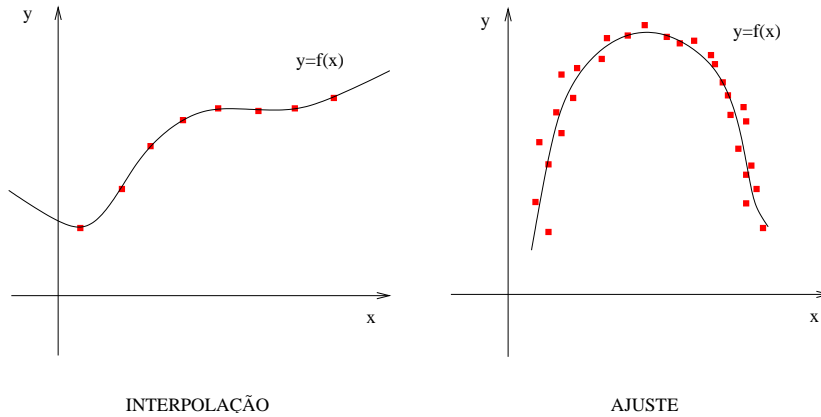
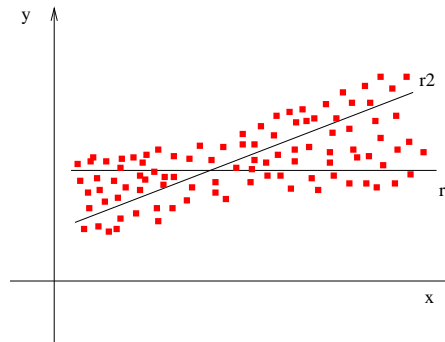


Figura 4.3: diferença entre interpolação e ajuste

Em geral, esta técnica se aplica a um conjunto de dados experimentais (x_i, y_i) , $i = 0, 1, \dots, n$ os quais desejamos aproximar sua lei de comportamento $y = f(x)$ e a partir daí, calcular $f(x)$ para qualquer valor de x .

Considere, agora, a figura 4.6. Sabemos que a função $f(x)$ é linear, mas qual das retas r_1 ou r_2 melhor a aproxima.



Para solucionarmos este problema, temos que definir este tipo de conceito: “o de melhor aproximação”.

4.6.1 Critérios de Ajuste

Vamos estabelecer alguns critérios de “melhor” ajuste de uma curva $y = \varphi(x)$ a um conjunto de pontos suporte. Será útil definirmos o conceito de resíduo, ou erro, em cada ponto:

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

I) resíduos nulos (interpolação)

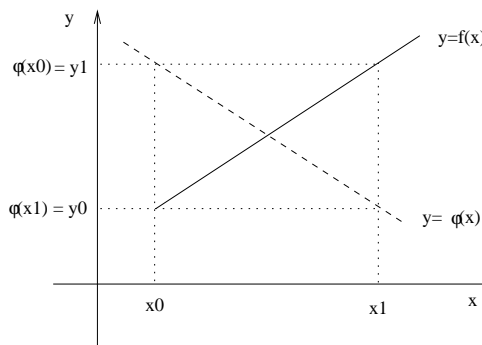
$$\begin{cases} R_k = 0 \\ \text{ou} \\ \varphi(x_k) - y_k = 0 \end{cases}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Este critério não deve ser utilizado, pois nos leva a um problema de interpolação.

II) soma dos resíduos mínima

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^n R_k = \text{mín} \\ \text{ou} \\ \sum_{k=0}^n (\varphi(x_k) - y_k) = \text{mín} \end{cases}$$

Este critério é simples, porém é sensível ao sinal dos resíduos, conforme ilustra a situação abaixo:



$$\sum_{k=0}^{n=1} R_k = (\varphi(x_0) - y_0) + (\varphi(x_1) - y_1) = (\varphi(x_0) - y_1) + (\varphi(x_1) - y_0) = 0$$

Resíduo global pequeno, porém, péssimo ajuste!

III) soma dos quadrados dos resíduos mínima

$$\begin{cases} \sum_{k=0}^m R_k^2 = \text{mín} \\ \text{ou} \\ \sum_{k=0}^m (\varphi(x_k) - y_k)^2 = \text{mín} \end{cases}$$

Este critério dá origem ao método conhecido como *método dos mínimos quadrados*. Este método surge em várias áreas da ciências exatas com nomes diferentes: regressão linear, suavização de dados, otimização, etc...

Ele se baseia em aproximar uma função $f(x)$ pela combinação linear

$$\varphi(x) = \sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x),$$

onde os coeficientes a_j são as incógnitas do problema de ajuste e $\varphi_j(x)$ são funções de base conhecidas (escolhidas de acordo com o fenômeno estudado).

Para determinarmos os coeficientes a_j 's, usamos o critério de mínimos quadrados:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{k=0}^m R_k^2 = \text{mín} \\ \text{ou} \\ \sum_{k=0}^m \left(\sum_{j=0}^n (a_j \varphi_j(x_k) - y_k)^2 \right) = \text{mín} \end{array} \right.$$

O último somatório acima também pode ser escrito da seguinte forma (veja o Apêndice A):

$$\sum_{k=0}^m \sum_{j=0}^n a_j \varphi_j(x_k) \varphi_i(x_k) = \sum_{k=0}^m y_k \varphi_i(x_k), \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

assim,

$$\sum_{j=0}^n \left[\sum_{k=0}^m \varphi_i(x_k) \varphi_j(x_k) \right] \{a_j\} = \left\{ \sum_{k=0}^m \varphi_i(x_k) y_k \right\}, \quad i = 0, 1, \dots, n,$$

que na sua forma matricial pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=0}^m \varphi_0(x_k) \varphi_0(x_k) & \sum_{k=0}^m \varphi_0(x_k) \varphi_1(x_k) & \cdots & \sum_{k=0}^m \varphi_0(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \sum_{k=0}^m \varphi_1(x_k) \varphi_0(x_k) & \sum_{k=0}^m \varphi_1(x_k) \varphi_1(x_k) & \cdots & \sum_{k=0}^m \varphi_1(x_k) \varphi_n(x_k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=0}^m \varphi_n(x_k) \varphi_0(x_k) & \sum_{k=0}^m \varphi_n(x_k) \varphi_1(x_k) & \cdots & \sum_{k=0}^m \varphi_n(x_k) \varphi_n(x_k) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^m \varphi_0(x_k) y_k \\ \sum_{k=0}^m \varphi_1(x_k) y_k \\ \vdots \\ \sum_{k=0}^m \varphi_n(x_k) y_k \end{bmatrix}.$$

PROBLEMA DE AJUSTE GERAL

4.6.2 Ajuste Polinomial

Afim de construir uma aproximação $\varphi(x)$ polinomial, particularizaremos o problema geral de ajuste considerando as funções de base monômios da forma x^j :

$$\varphi_j(x) = x^j, \quad j = 0, 1, \dots, n,$$

obtendo o seguinte problema polinomial de ajuste

$$\begin{bmatrix} m+1 & \sum_{k=0}^m x_k & \sum_{k=0}^m x_k^2 & \cdots & \sum_{k=0}^m x_k^n \\ \sum_{k=0}^m x_k & \sum_{k=0}^m x_k x_k & \sum_{k=0}^m x_k x_k^2 & \cdots & \sum_{k=0}^m x_k x_k^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{k=0}^m x_k^n & \sum_{k=0}^m x_k^n x_k & \sum_{k=0}^m x_k^n x_k^2 & \cdots & \sum_{k=0}^m x_k^n x_k^n \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum_{k=0}^m y_k \\ \sum_{k=0}^m x_k y_k \\ \vdots \\ \sum_{k=0}^m x_k^n y_k \end{Bmatrix}.$$

Observação 4.2 I) Tanto o problema geral como o polinomial, geram matrizes simétricas, o que facilita bastante a solução numérica do sistema linear.

II) Podemos estimar o grau do polinômio a ser ajustado através do gráfico dos pontos de suporte.

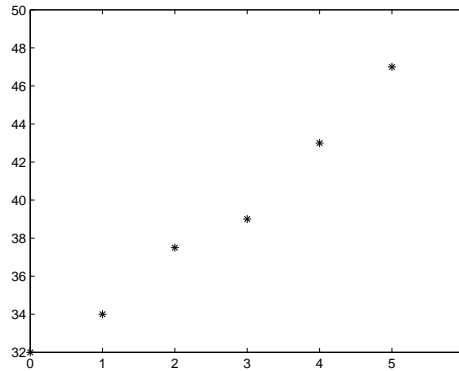
Exemplo 4.3 O número de bactérias, por unidade de volume, existentes em uma cultura após x horas é dado na tabela abaixo:

número de horas	0	1	2	3	4	5	6
número de bactérias	32	34	37.5	39	43	47	50

Estime o número de bactérias (por unidade de volume) existentes na cultura após um período de 24 horas.

solução:

Podemos ver através do gráfico abaixo, que um ajuste polinomial linear, $\varphi(x) = a_0 + a_1x$, é uma escolha razoável:



Determinando os coeficientes:

$$\begin{bmatrix} m+1 & \sum_{k=0}^m x_k \\ \sum_{k=0}^m x_k & \sum_{k=0}^m x_k^2 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \sum_{k=0}^m y_k \\ \sum_{k=0}^m x_k y_k \end{Bmatrix}$$

onde

$$m+1=7, \sum_{k=0}^6 x_k = 21, \sum_{k=0}^6 x_k^2 = 91, \sum_{k=0}^6 y_k = 282.5 \text{ e } \sum_{k=0}^6 x_k y_k = 933,$$

portanto,

$$\begin{bmatrix} 7 & 21 \\ 21 & 91 \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 282.5 \\ 933 \end{Bmatrix},$$

cujas soluções são $a_0 = 31.1964$ e $a_1 = 3.0536$. Concluímos que o conjunto de pontos será ajustado pelo polinômio

$$\varphi(x) = 31.1964 + 3.0536x,$$

e portanto, a estimativa do número de bactérias após um período de 24 horas será de $\varphi(24)$ bactérias, onde

$$\varphi(24) = 31.1964 + 3.0536(24) = 104.4829.$$

4.7 Exercícios

1. Considere os seguintes pontos suporte $x_0 = 0$, $x_1 = 0.6$ e $x_2 = 0.9$. Encontre polinômios de grau 1 e de grau 2 para aproximar $f(0.45)$, onde f é uma função dada abaixo. Encontre, também, o valor do erro absoluto:

a) $f(x) = \cos x$

b) $f(x) = \sqrt{1+x}$

c) $f(x) = \ln(x+1)$

2. Sabendo-se que $f(0.81) = 16.94410$, $f(0.83) = 17.56492$, $f(0.86) = 18.50515$ e $f(0.87) = 18.82091$, calcule um valor aproximado de $f(0.84)$, usando:

a) Polinômios de Lagrange de graus 1, 2 e 3

b) Polinômios de Newton de graus 1, 2 e 3

3. Considere a tabela abaixo:

altura(cm)	183	173	188	163	178
peso(kg)	79	69	82	63	73

Usando um interpolador polinomial de grau 2, calcule a altura aproximada de uma pessoa com peso de 70kg.

4. Qual é a diferença entre interpolação polinomial e o ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados? É possível obter um mesmo polinômio que interpola e faz o ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados?
5. Dada a tabela abaixo, faça o gráfico de dispersão dos dados e ajuste uma curva da melhor maneira possível:

x	0.5	0.75	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0
y	-2.8	-0.6	1.0	3.2	4.8	6.0	7.0

6. Ajuste os dados da tabela abaixo através de um polinômio de grau 2:

i	1	2	3	4	5
x_i	12	16	20	30	40
y_i	1.64	2.72	3.96	7.60	11.96

7. Monte o “Problema Matricial de Ajuste” utilizando funções base do tipo:

a) $\varphi_j(x) = x^j$

b) $\varphi_j(x) = e^{jx}$

8. Ajuste os pontos da tabela abaixo à uma curva de equação $y = a_0 + a_1 e^x$:

x_i	-0.8	-0.4	0.0	0.4	0.8
y_i	5.67	5.92	8.31	9.91	14.21

9. Os valores funcionais mostrados na tabela a seguir são medidas de uma quantidade $A(t)$ em metros que varia no tempo. Escolha convenientemente um conjunto de funções $\varphi_j(x)$ para encontrar uma aproximação para $A(t)$ que ajuste, por mínimos quadrados, os seguintes dados:

t	0	2	4	6	8	10
$A(t)$	1.0	1.6	1.4	0.6	0.2	0.8

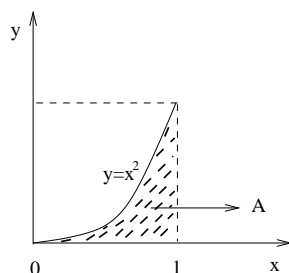
10. Aproximar a função $y = \sqrt[3]{x}$ no intervalo $[0, 1]$ por um polinômio de terceiro grau, usando os valores de x com incremento de 0.1. Resolva este mesmo problema com um polinômio de segundo grau e compare os resultados.

Capítulo 5

Integração Numérica

Neste capítulo veremos como calcular numericamente uma integral definida. Muitas integrais não tem solução exata, ou tem solução exata muito complexa, por esse motivo, os métodos numéricos surgem como uma ferramenta super importante para o cálculo de tais integrais.

Sabemos que a integral definida de uma função $f(x)$ pode ser vista como a área sob a curva $y = f(x)$, por exemplo, se $f(x) = x^2$ então, como vemos na figura a seguir, sua área (no intervalo $[0, 1]$) será dada pela seguinte integral



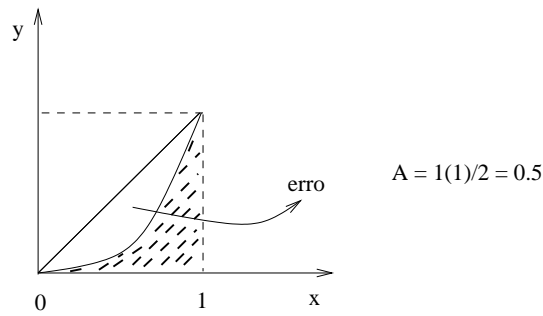
$$A = \int_0^1 x^2 dx = \frac{x^3}{3} \Big|_0^1 = \frac{1}{3} \text{ u.a.}$$

A seguir, apresentaremos três métodos numéricos que aproximam a área acima.

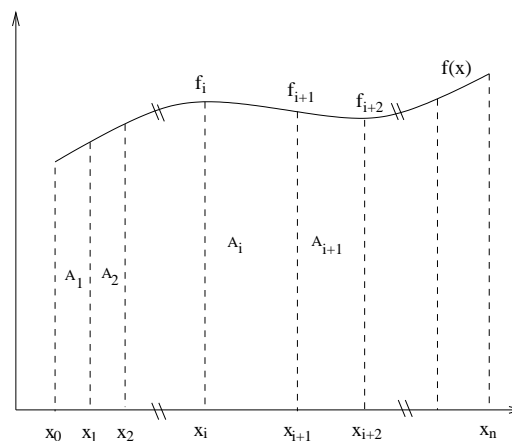
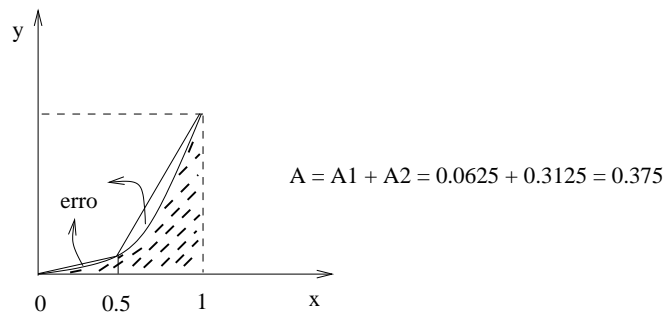
5.1 Método dos Trapézios

O método dos trapézios substitui o integrando $f(x)$ da integral por uma função linear por partes. Considere a figura 5.1. Primeiro, aproximamos a integral do exemplo anterior pela área do triângulo definido ligando os pontos $(0, f(0))$ e $(1, f(1))$, em seguida, acrescentamos o ponto $(0.5, f(0.5))$ e aproximamos a integral pela soma das áreas das duas figuras planas definidas.

A idéia do método é particionar o intervalo de integração, de modo a aproximar ao máximo o valor da integral definida. Vamos generalizar um pouco mais o problema então. Considere a figura abaixo:



Podemos minimizar o erro, particionando o intervalo (0,1):



Ao particionarmos o intervalo de integração $[x_0, x_n]$, definimos vários trapézios, e assim, aproximamos a integral pela soma das áreas desses trapézios. Portanto, temos as seguintes fórmulas:

1. Método dos Trapézios Elementar (2 pontos de integração):

$$I = \frac{h}{2} (f_i + f_{i+1})$$

2. Método dos Trapézios Composto ($n + 1$ pontos de integração):

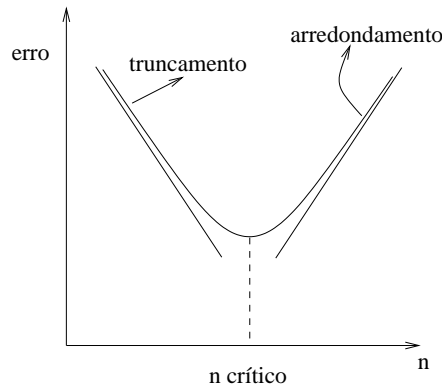
$$I = \frac{h}{2} (f_0 + 2f_1 + \cdots + 2f_{n-2} + 2f_{n-1} + f_n),$$

onde $h = x_{i+1} - x_i$ é constante e $f_i = f(x_i)$.

Observação 5.1 1. A precisão do método é inversamente proporcional ao passo:

$$prec \uparrow \downarrow \Leftrightarrow h \downarrow \uparrow.$$

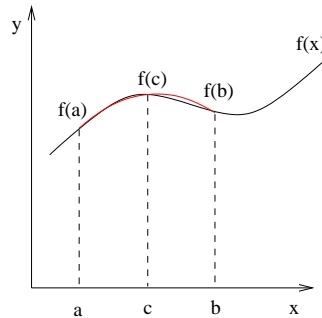
2. A medida que refinamos nossa partição, diminuimos o erro. Porém, a partir de um valor crítico, isto deixa de ocorrer, conforme ilustra a figura abaixo:



A partir de n crítico, os erros de arredondamento destroem a solução aproximada.

5.2 Método de Simpson

No método de Simpson, ao invés de substituírmos o integrando $f(x)$ por uma poligonal, empregaremos uma aproximação parabólica, necessitando, portanto, agrupar os pontos 3 a 3.



Para calcularmos a integral $\int_a^b f(x)dx$ (veja figura acima) com o método dos trapézios, utilizaríamos 2 pontos de integração e aproximaríamos a integral pelo valor da área $A = c_1 f(a) + c_2 f(b)$, com $c_1 = c_2 = \frac{b-a}{2}$.

No método de Simpson teremos três coeficientes, aproximando a integral pela seguinte expressão:

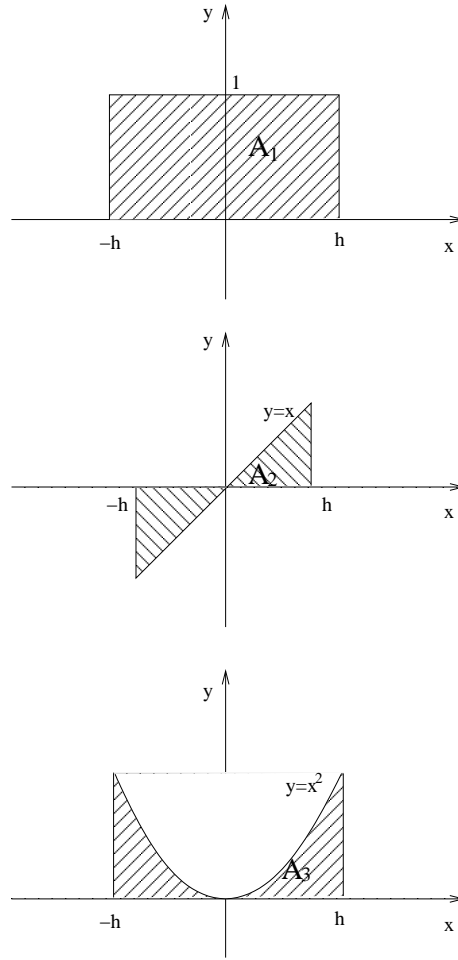
$$A = c_1 f(a) + c_2 f(c) + c_3 f(b).$$

O problema é determinarmos esses coeficientes, para isso, aplicaremos a fórmula geral acima a três situações nas quais ela fornecerá a solução exata da integral.

$$A_1 = \int_{-h}^h (1)dx = 2h$$

$$A_2 = \int_{-h}^h xdx = 0$$

$$A_3 = \int_{-h}^h x^2 dx = \frac{2h^3}{3}$$



Montamos, então, o seguinte sistema:

$$\begin{cases} c_1 f_1(-h) + c_2 f_1(0) + c_3 f_1(h) = 2h \\ c_1 f_2(-h) + c_2 f_2(0) + c_3 f_2(h) = 0 \\ c_1 f_3(-h) + c_2 f_3(0) + c_3 f_3(h) = \frac{2h^3}{3} \end{cases}$$

onde $f_1(x) = 1$, $f_2(x) = x$ e $f_3(x) = x^2$.

Resolvendo esse sistema encontramos,

$$c_1 = c_3 = \frac{h}{3} \text{ e } c_2 = \frac{4h}{3}$$

e assim, a fórmula de Simpson elementar (3 pontos de integração) será dada por

$$A_i = \frac{h}{3} (f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$$

onde $f_i = f(x_i)$ e $h = x_{i+1} - x_i$ é constante.

A generalização do método de Simpson, ou seja, a fórmula composta de Simpson com $n + 1$ pontos de integração, sendo n um número par, será dada por

$$A = \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

onde $f_i = f(x_i)$ e $h = x_{i+1} - x_i$ também é constante.

Exemplo 5.1 Calcule a integral abaixo utilizando o método dos trapézios e o método de Simpson, ambos com 5 pontos de integração

$$I(f) = \int_2^6 x^2 dx.$$

x_i	f_i
2	4
3	9
4	16
5	25
6	36

$$h = x_{i+1} - x_i = 1, \forall i.$$

a) Método dos Trapézios

$$\begin{aligned} A &= \frac{h}{2} (f_0 + 2f_1 + 2f_2 + 2f_3 + f_4) \\ &= \frac{1}{2} (4 + 2(9) + 2(16) + 2(25) + 36) \\ &= \frac{140}{2} = 70 \text{ u.a. (solução aproximada).} \end{aligned}$$

b) Método de Simpson

$$\begin{aligned} A &= \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + f_4) \\ &= \frac{1}{3} (4 + 4(9) + 2(16) + 4(25) + 36) \\ &= \frac{208}{3} = 69.33 \text{ u.a. (solução exata).} \end{aligned}$$

5.3 Método da Quadratura Gaussiana

A principal diferença entre o método de Gauss e os métodos apresentados anteriormente, é que, em Gauss, os pontos de integração deixam de ser constantes e passam a ser incógnitas.

Considere a figura 5.1, na qual empregaremos o método dos Trapézios para aproximar a integral.

Como podemos ver, o erro envolvido é muito grande. A idéia que Gauss teve foi de , através da localização ótima dos pontos de integração, calcular a integral com erro nulo.

dedução da fórmula da quadratura de Gauss

Por se tratar de uma aproximação linear, podemos escrever

$$A = c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2),$$

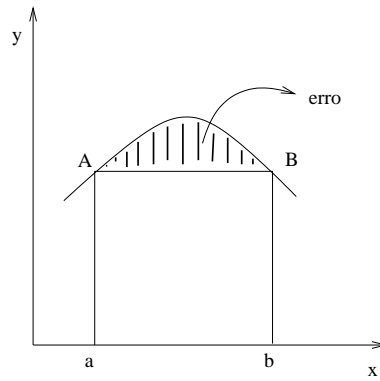
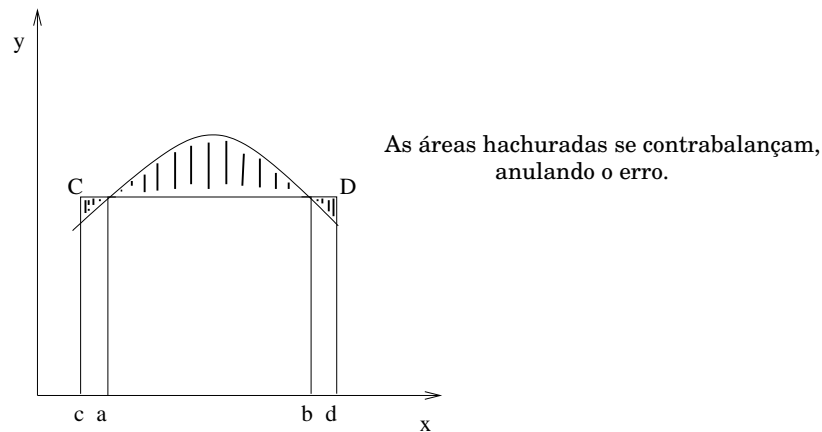


Figura 5.1: erro no método dos trapézios



onde, não só os coeficientes c_1 e c_2 são incógnitas, mas também os pontos de integração x_1 e x_2 devem ser calculados. Para determiná-los, montaremos 4 situações nos quais a fórmula nos dá a solução exata.

$$A_1 = \int_{-1}^1 (1)dx = 2$$

$$A_2 = \int_{-1}^1 xdx = 0$$

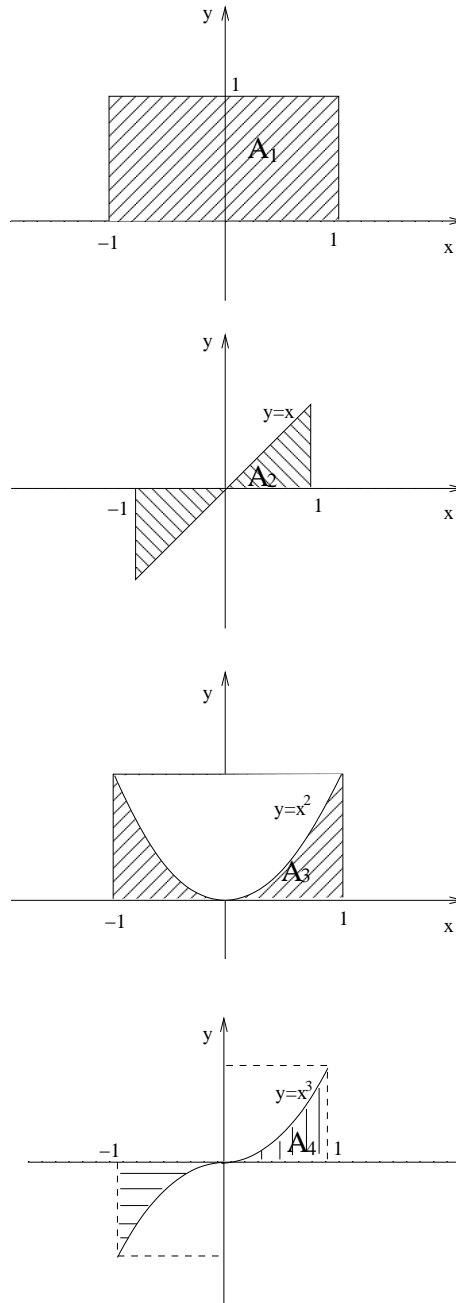
$$A_3 = \int_{-1}^1 x^2dx = \frac{2}{3}$$

$$A_4 = \int_{-1}^1 x^3dx = 0$$

Montamos, então, o seguinte sistema:

$$\begin{cases} c_1 f_1(x_1) + c_2 f_1(x_2) = 2 \\ c_1 f_2(x_1) + c_2 f_2(x_2) = 0 \\ c_1 f_3(x_1) + c_2 f_3(x_2) = \frac{2}{3} \\ c_1 f_4(x_1) + c_2 f_4(x_2) = 0 \end{cases}$$

onde $f_1(x) = 1$, $f_2(x) = x$, $f_3(x) = x^2$ e $f_4(x) = x^3$.



O sistema fica, então, da seguinte forma

$$\begin{cases} c_1(1) + c_2(1) = 2 \\ c_1(x_1) + c_2(x_2) = 0 \\ c_1(x_1^2) + c_2(x_2^2) = \frac{2}{3} \\ c_1(x_1^3) + c_2(x_2^3) = 0 \end{cases}$$

assim, assumindo $c_1 = c_2 = 1$, teremos a seguinte solução

$$x_1 = -\sqrt{\frac{1}{3}} \text{ e } x_2 = \sqrt{\frac{1}{3}}.$$

Logo a fórmula da Quadratura de Gauss com 2 pontos de integração será dada por

$$A = f\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) + f\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right)$$

O raciocínio anterior pode ser estendido a n pontos de integração. Abaixo mostramos uma tabela com os valores dos c'_i s e dos x'_i s avaliados para $n = 2, 3$ e 4 pontos de integração.

n	c_i	x_i
2	$c_1 = c_2 = 1$	$-x_1 = x_2 = 0.5773$
3	$c_1 = c_3 = 0.5555$ $c_2 = 0.8889$	$-x_1 = x_3 = 0.7746$ $x_2 = 0$
4	$c_1 = c_4 = 0.3479$ $c_2 = c_3 = 0.6522$	$-x_1 = x_4 = 0.8611$ $-x_2 = x_3 = 0.33998$

troca de variáveis

Como a fórmula de Gauss foi deduzida para $x \in [-1, 1]$, devemos realizar uma troca das variáveis de integração para um domínio genérico $x \in [a, b]$, de modo a podermos calcular a integral

$$I(f) = \int_a^b f(t) dt.$$

Com a troca de variáveis, criamos a função $t(x) = Ax + B$ tal que

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_a^b f(t) dt \\ &= \int_{-1}^1 f(t(x)) t'(x) dx \\ &= \int_{-1}^1 \underbrace{[Af(t(x))]}_{F(x)} dx \end{aligned}$$

e esta nova função $F(x)$ será o integrando usado na fórmula de Gauss, conforme ilustra o exemplo a seguir.

Exemplo 5.2 Resolver a integral abaixo utilizando o método da quadratura de Gauss com 2 pontos de integração

$$I(f) = \int_2^6 t^2 dt.$$

O domínio de t é $[2, 6]$. Vamos, então, trocá-lo para $x \in [-1, 1]$ segundo a função $t(x) = Ax + B$:

$$\begin{aligned} t = 2 \leftrightarrow x = -1 &\Rightarrow A(-1) + B = 2 \\ t = 6 \leftrightarrow x = 1 &\Rightarrow A(1) + B = 6, \end{aligned}$$

portanto, $A = 2$ e $B = 4$, assim, $t(x) = 2x + 4$. Temos então,

$$\begin{aligned} I(f) &= \int_2^6 t^2 dt \\ &= \int_{-1}^1 2f(2x + 4) dx \\ &= \int_{-1}^1 2(2x + 4)^2 dx, \end{aligned}$$

e assim, $F(x) = 2(2x + 4)^2$. Empregando a fórmula de Gauss para 2 pontos de integração

$$\begin{aligned} I(f) &= F\left(-\sqrt{\frac{1}{3}}\right) + F\left(\sqrt{\frac{1}{3}}\right) \\ &= 2\left(-\sqrt{\frac{1}{3}} + 4\right)^2 + 2\left(\sqrt{\frac{1}{3}} + 4\right)^2 \\ &= 69.33 \text{ u.a. (solução exata)} \end{aligned}$$

5.4 Exercícios

1. a) Aproxime o valor da integral $\int_{-2}^0 x^2 e^x dx$ utilizando o método dos trapézios e o método de Simpson com 5 pontos de integração (utilize 6 casas decimais);
 b) Sabendo que o valor exato da integral acima, com 6 casas decimais, é $I = 0.646647$, encontre o erro absoluto para cada método.

2. a) Utilize o método de Simpson para aproximar a integral abaixo com 5 pontos de integração (utilize 5 casas decimais):

$$\int_0^1 (x^5 - x^3 - x - 1) dx.$$

- b) O método de Simpson fornece solução exata nesse caso? Porque?

3. Calcule as integrais abaixo pelo método dos trapézios e pelo método de Simpson, usando 4 e 6 divisões do intervalo dado:

- a) $\int_1^2 e^{-x} dx$

- c) $\int_1^4 \sqrt{x} dx$

- b) $\int_2^5 \frac{1}{\sqrt{x}} dx$

- d) $\int_0^{0.6} \frac{1}{1+x} dx.$

4. Dê um exemplo de uma função, onde o método dos trapézios calcula o valor exato da integral.
5. Dê um exemplo de uma função, onde o método de Simpson calcula o valor exato da integral.
6. Calcule a área definida por $f(x)$ pelo método de Simpson:

x	2	4	6	8	10	12	14	16	18
$f(x)$	0.5	0.9	1.1	1.3	1.7	2.1	1.5	1.1	0.6

7. Considere a integral abaixo

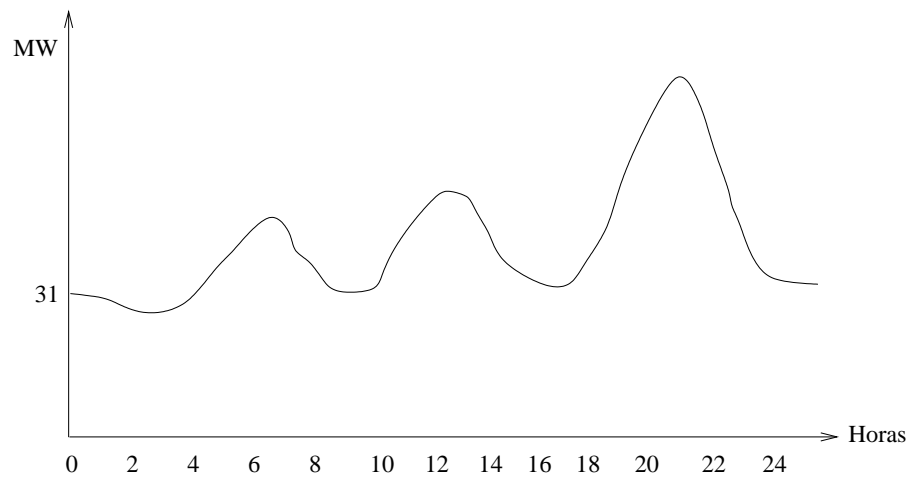
$$\int_0^1 x^3 e^x dx.$$

Sabe-se que o valor exato da integral é $I = 0.5634363$. Denotemos por $I_t(h)$ e $I_s(h)$, o resultado da integral obtido, respectivamente, pelos métodos dos trapézios e de Simpson. Seja $h = 0.5$.

- a) Calcule $I_t(h)$ e $I_t(h/2)$;
- b) Calcule $I_s(h)$ e $I_s(h/2)$;
- c) Calcule $R_1(h) = \frac{4I_t(h/2) - I_t(h)}{3}$ (Método de Romberg);
- d) Compare com o valor exato e conclua qual é o melhor resultado.

8. A curva de carga típica de uma cidade é dada pela figura abaixo:

Considere as medidas de potência a cada hora:



<i>Hora</i>	<i>MW</i>	<i>Hora</i>	<i>MW</i>	<i>Hora</i>	<i>MW</i>	<i>Hora</i>	<i>MW</i>
1	30	7	40	13	42	19	39
2	28	8	39	14	38	20	45
3	29,8	9	33	15	34	21	50
4	32	10	32,5	16	30	22	44
5	33	11	31	17	29	23	40
6	38	12	39	18	31	24	30

Estime o consumo de energia diário dessa cidade utilizando os métodos abaixo e, em seguida, compare os resultados:

- a) Método dos trapézios composto;
- b) Método de Simpson composto.

Referências Bibliográficas

- [1] Sperandio, D., Mendes, J. T., Monken e Silva, L. H., *Cálculo Numérico: Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos*. Editora Pearson Prentice Hall, São Paulo, 2003.
- [2] Lay, D. C., *Álgebra Linear e suas Aplicações*. Editora LTC, Rio de Janeiro, 2^a edição, 1999.
- [3] Leon, S. J., *Álgebra Linear com Aplicações*. Editora LTC, Rio de Janeiro, 4^a edição, 1999.
- [4] Golub, G. H., Van Loan, C. F., *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, 2nd ed., 1989.