

APOSTILA

Cálculo Numérico

Universidade Tecnológica Federal do Paraná

UTFPR

Lauro César Galvão, Dr. e Luiz Fernando Nunes, Dr.

Índices

1	NOÇÕES BÁSICAS SOBRE ERROS	1-1
1.1	ERROS.....	1-1
1.2	ERROS ABSOLUTOS E RELATIVOS.....	1-1
1.2.1	<i>Erro Absoluto</i>	1-1
1.2.2	<i>Erro Relativo ou Taxa de Erro</i>	1-2
1.3	ERROS DE ARREDONDAMENTO E TRUNCAMENTO.....	1-2
1.3.1	<i>Erro de Arredondamento</i>	1-2
1.3.2	<i>Erro de Truncamento</i>	1-2
1.4	ARITMÉTICA DE PONTO FLUTUANTE.....	1-3
1.5	CONVERSÃO DE BASES.....	1-3
1.5.1	<i>Conversão da Base b para a Decimal ($b \neq 10$)</i>	1-3
1.5.2	<i>Conversão da Base Decimal para a b ($10 \neq b$)</i>	1-4
1.5.3	<i>Exercícios: Conversão de Bases</i>	1-5
1.6	OPERAÇÕES DE PONTOS FLUTUANTES.....	1-7
1.6.1	<i>Representações</i>	1-7
1.6.2	<i>Exercícios</i>	1-7
1.6.3	<i>Exercícios complementares</i>	1-8
2	ZEROS REAIS DE FUNÇÕES REAIS	2-11
2.1	INTRODUÇÃO.....	2-11
2.2	FASE I: ISOLAMENTO DAS RAÍZES.....	2-11
2.3	FASE II: REFINAMENTO - CRITÉRIOS DE PARADA.....	2-15
2.3.1	<i>Método da Bisseção (ou Método da Dicotomia)</i>	2-15
2.3.2	<i>Método do Ponto Fixo (ou Método da Iteração Linear ou Método das Aproximações sucessivas)</i>	2-19
2.3.3	<i>Método de Newton, Newton-Raphson (ou Método das Tangentes)</i>	2-27
2.3.4	<i>Comparação entre os métodos</i>	2-30
3	RESOLUÇÃO DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES	3-32
3.1	INTRODUÇÃO.....	3-32
3.1.1	<i>Forma Algébrica de S_n</i>	3-32
3.1.2	<i>Forma Matricial de S_n</i>	3-32
3.1.3	<i>Matriz Aumentada ou Matriz Completa do Sistema</i>	3-32
3.1.4	<i>Solução do Sistema</i>	3-32
3.1.5	<i>Classificação de um Sistema Linear</i>	3-33
3.1.6	<i>Classificação quanto ao Determinante de A</i>	3-33
3.2	MÉTODOS DIRETOS.....	3-33
3.2.1	<i>Método de Eliminação de Gauss</i>	3-33
3.2.2	<i>Estratégia de Pivoteamento Completo</i>	3-36
3.2.3	<i>Refinamento de Soluções</i>	3-37
3.3	MÉTODOS ITERATIVOS.....	3-39
3.3.1	<i>Testes de parada</i>	3-39
3.3.2	<i>Método de Gauss-Jacobi</i>	3-39
3.3.3	<i>Método de Gauss-Seidel</i>	3-42
3.3.4	<i>Comparação entre os métodos</i>	3-43
3.3.5	<i>Critério de Sassenfeld</i>	3-44
4	INTERPOLAÇÃO.....	4-47
4.1	INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL.....	4-47
4.1.1	<i>Existência e Unicidade do Polinômio Interpolador $P_n(x)$</i>	4-47
4.1.2	<i>Forma de Lagrange</i>	4-48
4.1.3	<i>Forma de Newton</i>	4-50
4.2	ESTUDO DE ERRO NA INTERPOLAÇÃO.....	4-52
4.2.1	<i>Estimativa para o Erro</i>	4-52
4.3	INTERPOLAÇÃO INVERSA: CASOS EXISTENTES.....	4-54
4.3.1	<i>Encontrar \bar{x} tal que $P_n(\bar{x})$</i>	4-54
4.3.2	<i>Interpolação inversa</i>	4-54
4.4	FUNÇÕES SPLINE EM INTERPOLAÇÃO.....	4-56

4.4.1	<i>Função Spline</i>	4-56
4.4.2	<i>Spline linear interpolante</i>	4-57
4.4.3	<i>Spline cúbica interpolante</i>	4-58
5	AJUSTE DE CURVAS PELO MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS	5-64
5.1	INTRODUÇÃO	5-64
5.2	CASO DISCRETO.....	5-65
5.3	CASO CONTÍNUO.....	5-70
5.4	FAMÍLIA DE FUNÇÕES NÃO LINEARES NOS PARÂMETROS	5-72
6	INTEGRAÇÃO NUMÉRICA	6-74
6.1	FÓRMULAS DE NEWTON-COTES	6-74
6.1.1	<i>Regra dos Trapézios</i>	6-74
6.1.2	<i>Regra dos Trapézios repetida</i>	6-76
6.1.3	<i>Regra 1/3 de Simpson</i>	6-77
6.1.4	<i>Regra 1/3 de Simpson repetida</i>	6-80
7	SOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS	7-83
7.1	INTRODUÇÃO	7-83
7.2	PROBLEMA DE VALOR INICIAL (PVI)	7-84
7.2.1	<i>Solução numérica de um PVI de primeira ordem</i>	7-84
7.2.2	<i>Método de Euler</i>	7-84
7.2.3	<i>Métodos de Runge-Kutta</i>	7-87
7.2.4	<i>Método de Euler Aprimorado (Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem)</i>	7-88
7.2.5	<i>Fórmulas de Runge-Kutta de Quarta Ordem</i>	7-89

Índices de Figuras

[FIG. 1]:	MODELAGEM E RESOLUÇÃO DE PROBLEMAS.....	1-1
[FIG. 2]:	O GRÁFICO DE UMA FUNÇÃO $y = f(x)$ E SEUS ZEROS.....	2-11
[FIG. 3]:	EXEMPLO DE UMA FUNÇÃO ESTRITAMENTE CRESCENTE NUM INTERVALO DE a ATÉ b ..	2-12
[FIG. 4]:	O GRÁFICO DE $f(x) = x^3 - 9x + 3$	2-12
[FIG. 5]:	OS GRÁFICOS DE $g(x) = x^3$ E $h(x) = 9x - 3$	2-13
[FIG. 6]:	O GRÁFICO DE $f'(x) = 3x^2 - 9$	2-13
[FIG. 7]:	GRÁFICO DA FUNÇÃO $f(x) = x \ln x - 3,2$	2-14
[FIG. 8]:	GRÁFICO DA FUNÇÃO $f'(x) = 1 + \ln x$	2-14
[FIG. 9]:	OS GRÁFICOS DE $g(x) = 5 \log x$ E $h(x) = 2 - 0,4x$	2-15
[FIG. 10]:	OS GRÁFICOS DE $g(x) = \sqrt{x}$ E $h(x) = 5e^{-x}$	2-15
[FIG. 11]:	O MÉTODO DA BISSECÇÃO OU DICOTOMIA.....	2-16
[FIG. 12]:	O TANQUE DE COMPRIMENTO L	2-17
[FIG. 13]:	UM EXEMPLO DE UMA FUNÇÃO DE PONTO FIXO.....	2-19
[FIG. 14]:	OS GRÁFICOS DAS FUNÇÕES $y = x$ E $\phi_2(x) = \sqrt{6-x}$	2-20
[FIG. 15]:	OS GRÁFICOS DAS FUNÇÕES $y = x$ E $\phi_1(x) = 6 - x^2$	2-21
[FIG. 16]:	A SEQÜÊNCIA $\{x_k\}$ CONVERGE PARA O ZERO α (CONVERGÊNCIA DO TIPO ESCADA).....	2-22
[FIG. 17]:	A SEQÜÊNCIA $\{x_k\}$ CONVERGE PARA O ZERO α (CONVERGÊNCIA DO TIPO CARACOL).....	2-22
[FIG. 18]:	A SEQÜÊNCIA $\{x_k\}$ NÃO CONVERGE PARA O ZERO α	2-22
[FIG. 19]:	A SEQÜÊNCIA $\{x_k\}$ NÃO CONVERGE PARA O ZERO α	2-23
[FIG. 20]:	CASOS EM QUE B É O EXTREMO MAIS PRÓXIMO DE α	2-24
[FIG. 21]:	OS GRÁFICOS DE $h(x) = e^x$ E $g(x) = x^2 - 4$	2-26
[FIG. 22]:	INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA DO MÉTODO DE NEWTON.....	2-28
[FIG. 23]:	OS GRÁFICOS DAS FUNÇÕES $g(x) = x$ E $h(x) = \cos x$	2-30
[FIG. 24]:	INTERPOLAÇÃO DE $f(x)$ PELO POLINÔMIO $P(x)$	4-47
[FIG. 25]:	INTERPOLAÇÃO POR LAGRANGE.....	4-50
[FIG. 26]:	GRÁFICO DO POLINÔMIO $P_{10}(x)$ INTERPOLANDO $f(x)$	4-56
[FIG. 27]:	SPLINE LINEAR INTERPOLANDO 4 PONTOS	4-57
[FIG. 28]:	DOMÍNIO DISCRETO.....	5-64
[FIG. 29]:	DOMÍNIO CONTÍNUO.....	5-64
[FIG. 30]:	O MÉTODO DO MÍNIMOS QUADRADOS.....	5-65
[FIG. 31]:	DIAGRAMA DE DISPERSÃO.....	5-68
[FIG. 32]:	REGRA DOS TRAPÉZIO	6-74
[FIG. 33]:	REGRA DOS TRAPÉZIOS REPETIDA	6-76
[FIG. 34]:	REGRA 1/3 DE SIMPSON.....	6-78
[FIG. 35]:	REGRA 1/3 DE SIMPSON REPETIDA	6-80
[FIG. 36]:	GRÁFICO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA DE UM PVI.....	7-84
[FIG. 37]:	GRÁFICO DO MÉTODO DE EULER.....	7-85

1 Noções básicas sobre Erros

Fenômenos da natureza podem ser descritos através do uso de modelos matemáticos.



[Fig. 1]: Modelagem e resolução de problemas.

- **MODELAGEM:** é a fase de obtenção de um modelo matemático que descreve o comportamento do problema que se quer estudar.
- **RESOLUÇÃO:** é a fase de obtenção da solução do modelo matemático através da aplicação de métodos numéricos.

1.1 Erros

Para se obter a solução do problema através do modelo matemático, erros são cometidos nas fases: **MODELAGEM** e **RESOLUÇÃO**.

Exercício 1 Calcular a área da superfície terrestre usando a formulação $A = 4\pi r^2$.

Resolução: Aproximações (ERROS):

MODELAGEM:

RESOLUÇÃO:

OBS. 1: Características do planeta Terra.

- **Características Físicas:**
 Diâmetro Equatorial: 12756Km;
 Diâmetro Polar: 12713Km;
 Massa: $5,98 \times 10^{24}$ Kg;
 Perímetro de Rotação Sideral: 23h 56min 04seg;
 Inclinação do Equador Sobre a Órbita: $23^\circ 27'$.
- **Características Orbitais:**
 Raio da Órbita, isto é, 1U.A. (unidade astronômica): 149897570Km;
 Distância Máxima do Sol: 152100000Km;
 Distância Mínima do Sol: 147100000Km;
 Período de Revolução Sideral: 365dias 6h 9min 9,5seg;
 Velocidade Orbital Média: 29,79Km/seg.

1.2 Erros Absolutos e Relativos

1.2.1 Erro Absoluto

É o módulo da diferença entre um valor exato x de um número e seu valor aproximado \bar{x} .

$$(Eq.1) \quad EA_x = |x - \bar{x}|,$$

onde x é o valor exato e \bar{x} é o valor aproximado.

Geralmente não se conhece o valor exato x . Assim, o que se faz é obter um limitante superior (k_1 majorante) ou uma estimativa para o módulo do erro absoluto.

$$(Eq.2) \quad |EA_x| \leq k_1.$$

1.2.2 Erro Relativo ou Taxa de Erro

Erro relativo de x é o módulo do quociente entre o erro absoluto EA_x e o valor exato x ou o valor aproximado \bar{x} , se x ou $\bar{x} \neq 0$.

$$(Eq.3) \quad ER_x = \left| \frac{EA_x}{x} \right| = \left| \frac{x - \bar{x}}{x} \right| \quad \text{ou} \quad ER_x = \left| \frac{EA_x}{\bar{x}} \right| = \left| \frac{x - \bar{x}}{\bar{x}} \right|.$$

Exercício 2 Calcular os erros absoluto e relativo, nos itens a) e b).

a) $x=1,5$ e $\bar{x}=1,49$;

b) $y=5,4$ e $\bar{y}=5,39$.

Resolução:

1.3 Erros de Arredondamento e Truncamento

1.3.1 Erro de Arredondamento

Arredondar um número na casa d_i é desconsiderar as casas d_{i+j} ($j=1, \dots, \infty$) de tal forma que:

d_i seja a última casa se $d_{i+1} < 5$;

d_i+1 seja a última casa se $d_{i+1} \geq 5$.

Exercício 3 Arredondar π na quarta casa decimal, sendo que $\pi=3,1415926535\dots$

Resolução:

1.3.2 Erro de Truncamento

Truncar um número na casa d_i é desconsiderar as casas d_{i+j} ($j=1, \dots, \infty$).

Exercício 4 Aproximar π truncando na quarta casa decimal, sendo que $\pi=3,1415926535\dots$

Resolução:

Exercício 5 Sabendo-se que e^x pode ser escrito como $e^x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{x^i}{i!}$, faça a aproximação de e^2 através de um truncamento após quatro termos da somatória.

Resolução:

1.4 Aritmética de Ponto Flutuante

Um número é representado, internamente, na máquina de calcular ou no computador através de uma seqüência de impulsos elétricos que indicam dois estados: 0 ou 1, ou seja, os números são representados na base 2 ou binária.

De maneira geral, um número x é representado na base β por:

$$(Eq.4) \quad x = \pm \left[\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \frac{d_3}{\beta^3} + \dots + \frac{d_t}{\beta^t} \right] * \beta^{\text{exp}}.$$

Onde:

- $d_i \Rightarrow$ são números inteiros contidos no intervalo $0 \leq d_i < \beta; i=1, 2, \dots, t$;
- $\text{exp} \Rightarrow$ representa o expoente de β e assume valores entre $I \leq \text{exp} \leq S$;
- $I, S \Rightarrow$ limite inferior e limite superior, respectivamente, para a variação do expoente;
- $\left[\frac{d_1}{\beta} + \frac{d_2}{\beta^2} + \frac{d_3}{\beta^3} + \dots + \frac{d_t}{\beta^t} \right] \Rightarrow$ é chamada de mantissa e é a parte do número que representa seus dígitos significativos;
- $t \Rightarrow$ número de dígitos do sistema de representação.

Exercício 6. Considerando no sistema de base 10, $\beta=10$, represente os seguintes números, em aritmética de ponto flutuante:

a) $0,345_{10}$;

b) $31,415_{10}$.

Resolução:

OBS. 2: Os números assim representados estão NORMALIZADOS, isto é, a mantissa é um número entre 0 e 1.

Exercício 7. Considerando no sistema binário, $\beta=2$, represente o número 101_2 em aritmética de ponto flutuante.

Resolução:

1.5 Conversão de Bases

1.5.1 Conversão da Base b para a Decimal ($b \neq 10$)

Um número na base β pode ser escrito, na base decimal, como:

$$(Eq.5) \quad \sum_{i=n}^m a_i \beta^i = a_m \beta^m + a_{m-1} \beta^{m-1} + \dots + a_2 \beta^2 + a_1 \beta + a_0 + a_{-1} \beta^{-1} + a_{-2} \beta^{-2} + \dots + a_{n+1} \beta^{n+1} + a_n \beta^n.$$

Onde:

- $a_i \Rightarrow 0 \leq a_i < \beta$;

- $n, m \Rightarrow$ números inteiros, com $n \leq 0$ e $m \geq 0$.

Para a conversão, faz-se a operação entre a mantissa do número normalizado e a base β^{exp} .

Nos exercícios a seguir, faça a conversão da base indicada para a decimal, determinando o valor da variável x .

Exercício 8 $1011_2 = x_{10}$.

Resolução:

Exercício 9 $11,01_2 = x_{10}$.

Resolução:

Exercício 10 $403,12_5 = x_{10}$.

Resolução:

1.5.2 Conversão da Base Decimal para a b (10P b)

Aplica-se um processo para a parte inteira e um outro para a parte fracionária.

- a) PARTE INTEIRA (N):

- a.1) $N < \beta$
 $\Rightarrow N_{10} = N_{\beta}$.

- a.2) $N \geq \beta$

$$\begin{array}{r} N \quad | \quad \beta \\ r_1 \quad q_1 \quad | \quad \beta \\ \quad r_2 \quad q_2 \end{array}$$

...

$$\begin{array}{r} q_{n-1} \quad | \quad \beta \\ r_n \quad q_n \end{array}$$

Até que $q_n < \beta$

$$\Rightarrow N_{10} = (q_n r_n r_{n-1} \dots r_3 r_2 r_1)_{\beta}$$

Exercício 11 Converta 59_{10} para a base 2.

Resolução:

Exercício 12 Converta 59_{10} para a base 3.

Resolução:

• b) PARTE FRACIONÁRIA (F):

Multiplica-se F por β e toma-se a parte inteira do produto como o primeiro dígito do número na base β . Repete-se o processo com a parte fracionária do produto tomando sua parte inteira. Continua-se até que a parte fracionária seja igual a zero.

Nos exercícios a seguir, determinar o valor de x :

Exercício 13 $0,1875_{10} = x_2$.

Resolução:

Exercício 14 $0,6_{10} = x_2$.

Resolução:

Exercício 15 $13,25_{10} = x_2$.

Resolução:

1.5.3 Exercícios: Conversão de Bases

Transforme para a base que se pede (determine o valor de x).

Exercício 16 $100101,1001_2 = x_{10}$.

Resolução:

Exercício 17 $19,38671875_{10} = x_4$.

Resolução:

Exercício 18 Transforme a medida $35\ h\ 48\ min\ 18\ seg$ para minutos.

DICA: $35:48,18_{60} = x_{10}\ min$.

Resolução:

Exercício 19 Transforme $35,805$ horas para horas, minutos e segundos.

DICA: $35,805_{10} = x_{60}$.

Resolução:

1.6 Operações de Pontos Flutuantes

1.6.1 Representações

- Precisão dupla: “dobra” a mantissa ($2 * t$);
- O zero em ponto flutuante é em geral representado com o menor expoente ($\mathbf{exp}=I$) possível na máquina;
- Ao converter um número para determinada aritmética de ponto flutuante, emprega-se sempre o arredondamento;
- Não é possível representar todos os números reais em determinada aritmética de ponto flutuante (reta furada).

OBS. 3: Um exemplo da reta furada é: Considere a aritmética de pontos flutuantes com parâmetros $\beta=10$ e $t=3$. Tome os números consecutivos 3,57 e 3,58. Existem infinitos números reais entre 3,57 e 3,58 que não podem ser representados nesta aritmética de pontos flutuantes. Por exemplo: 3,571 ou 3,57437.

1.6.2 Exercícios

Exercício 20 Preencher a tabela a seguir, com base nos parâmetros: $t=3$, $\beta=10$, $I=-5$, $S=5$ e $-5 \leq \mathbf{exp} \leq 5$.

Número	Truncamento	Arredondamento
-6,48		
0,0002175		
3498,3		
-0,00000001452		
2379441,5		

OBS. 4: Deve-se converter os valores para a aritmética de ponto flutuante com 3 algarismos significativos.

Nos exercícios seguintes, calcular o valor das expressões utilizando aritmética de ponto flutuante com 3 algarismos significativos.

Exercício 21 $(4,26 + 9,24) + 5,04$

Resolução:

Exercício 22 $4,26 + (9,24 + 5,04)$

Resolução:

Exercício 23 $(4210 - 4,99) - 0,02$

Resolução:

Exercício 24 $4210 - (4,99 + 0,02)$

Resolução:

Exercício 25 $\frac{2}{7} * (4,0237 - 6,106)$

Resolução:

Exercício 32 $0,0111111_2 = x_{10}$.

Resolução:

Exercício 33 $1,010011_2 = x_{10}$.

Resolução:

Nos exercícios seguintes, converter os números para a base binária, determinando o valor da variável x :

Exercício 34 $37_{10} = x_2$.

Resolução:

Exercício 35 $2345_{10} = x_2$.

Resolução:

Exercício 36 Determine x com 36 dígitos: $0,1217_{10} = x_2$.

Resolução:

Exercício 37 Determine x com 8 dígitos: $2,47_{10} = x_2$.

Resolução:

- Logo: $2,47_{10} = 2_{10} + 0,47_{10} = 10_2 + 0,01111000_2 = 10,01111000_2$.

2 Zeros reais de funções reais

2.1 Introdução

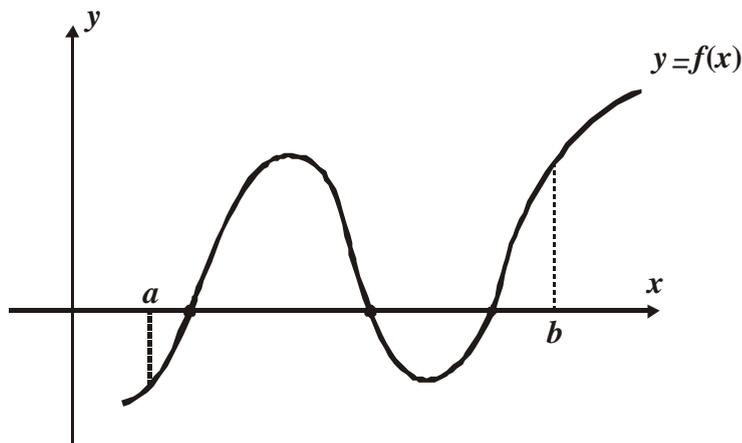
Dada uma função real f definida e contínua em um intervalo aberto I , chama-se de zero desta função em I , a todo $x \in I$, tal que $f(x) = 0$.

Neste capítulo são apresentados alguns processos iterativos para calcular de forma aproximada os zeros reais de uma função real f dada. Por um processo iterativo entende-se um processo que calcula uma seqüência de aproximações x_1, x_2, x_3, \dots da solução desejada. O cálculo de uma nova aproximação é feito utilizando aproximações anteriores. Dizemos que a seqüência x_1, x_2, x_3, \dots converge para \bar{x} , se dado $\varepsilon > 0$, $\exists N \in \mathbb{N}$ (\mathbb{N} números naturais), tal que qualquer que seja $n > N$, $|x_n - \bar{x}| < \varepsilon$. Neste caso tem-se que $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \bar{x}$, o que também poderá ser indicado por $x_n \rightarrow \bar{x}$. Nos processos iterativos que serão apresentados, a determinação dos zeros de uma função real de variável real será feita em duas etapas:

- Fase I: Isolar cada zero que se deseja determinar da função f em um intervalo $[a, b]$, sendo que cada intervalo deverá conter um e somente um zero da função f .
- Fase II: Cálculo dos zeros aproximados utilizando um método iterativo, com precisão prefixada ou não.

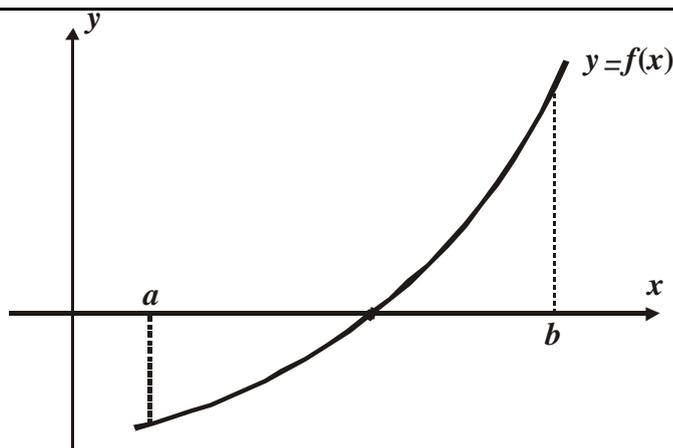
2.2 Fase I: Isolamento das raízes

Teorema 1 Seja $f(x)$ uma função contínua num intervalo $[a, b]$. Se $f(a) \cdot f(b) < 0$, então existe pelo menos um zero de $f(x)$ entre a e b .



[Fig. 2]: O gráfico de uma função $y = f(x)$ e seus zeros.

OBS. 6: Sob as hipóteses do teorema 1, o zero $x = \alpha$ será definido e único em $[a, b]$ se a derivada $f'(x)$ existir e preservar o sinal dentro do intervalo $]a, b[$, isto é se $f'(x) > 0$, $\forall x \in]a, b[$ ou $f'(x) < 0$, $\forall x \in]a, b[$. Isto significa dizer que a função $f(x)$ é estritamente crescente ou estritamente decrescente, respectivamente, no intervalo $]a, b[$.



[Fig. 3]: Exemplo de uma função estritamente crescente num intervalo de a até b .

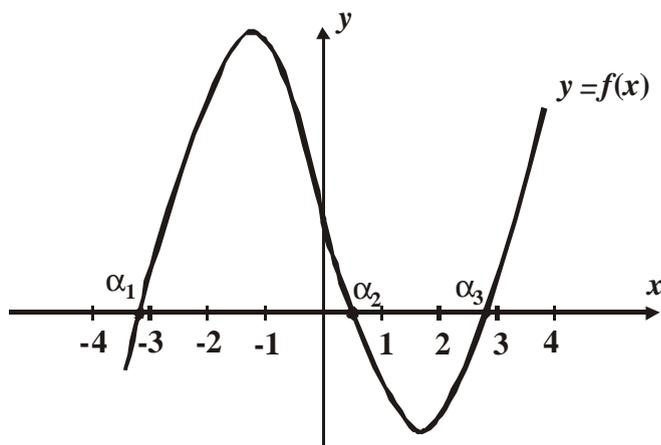
Na pesquisa dos zeros reais de funções reais é muito útil o uso do Teorema **1Erro! A origem da referência não foi encontrada.** (que fornece condições de existência de zeros em um intervalo), bem como da OBS 6. (que garante a unicidade, isto é, garante que no intervalo considerado existe um e somente um zero da função f).

Outro recurso bastante empregado é: a partir da equação $f(x)=0$, obter a equação equivalente $g(x)=h(x)$ e esboçar os gráficos destas funções obtendo os pontos onde as mesmas se intersectam, pois $f(\alpha)=0 \Leftrightarrow g(\alpha)=h(\alpha)$.

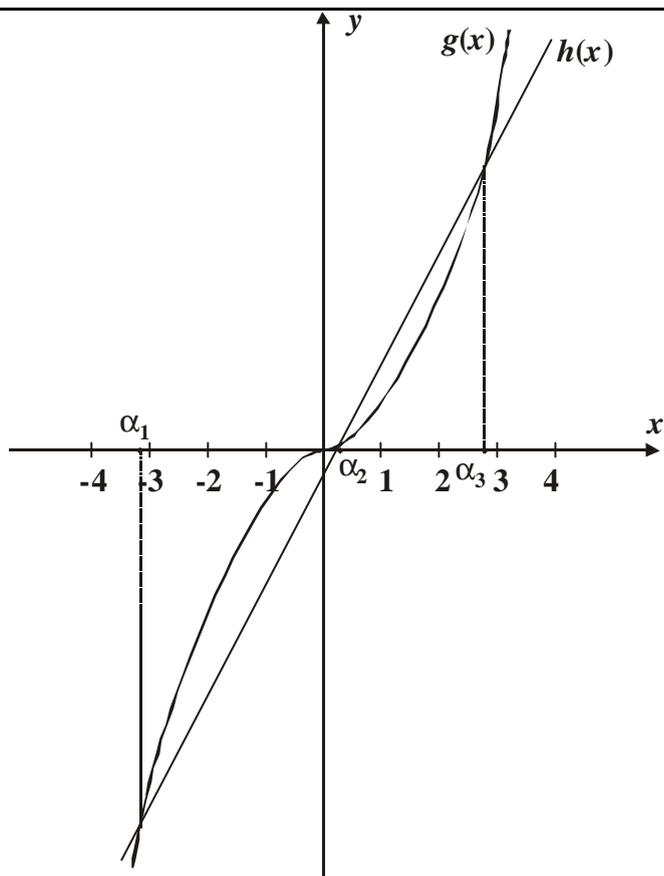
Exercício 38 Isolar os zeros da função $f(x)=x^3-9x+3$.

Resolução: Pode-se construir uma tabela de valores para $f(x)$ e analisar os sinais:

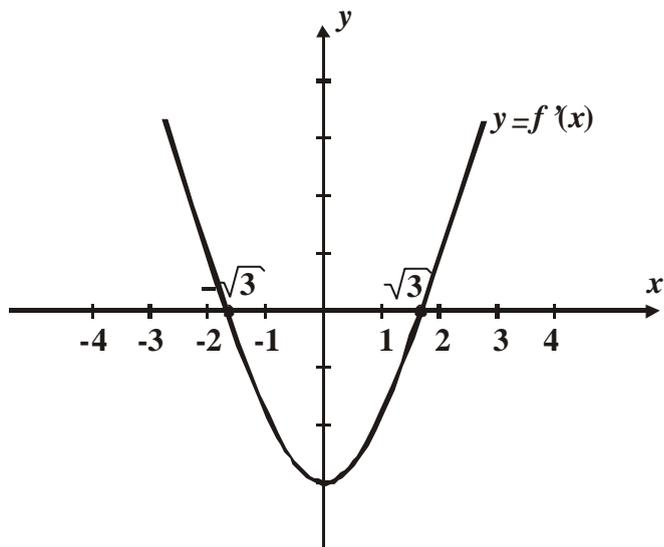
x	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3
$f(x)$								



[Fig. 4]: O gráfico de $f(x) = x^3 - 9x + 3$.



[Fig. 5]: Os gráficos de $g(x) = x^3$ e $h(x) = 9x - 3$.

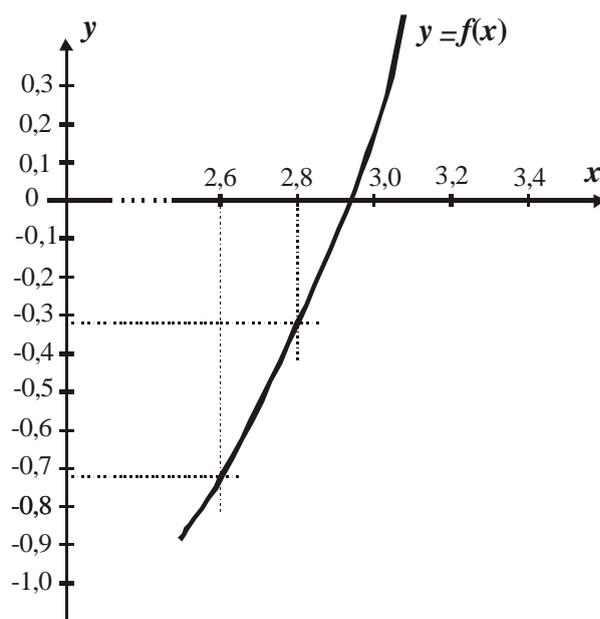


[Fig. 6]: O gráfico de $f'(x) = 3x^2 - 9$.

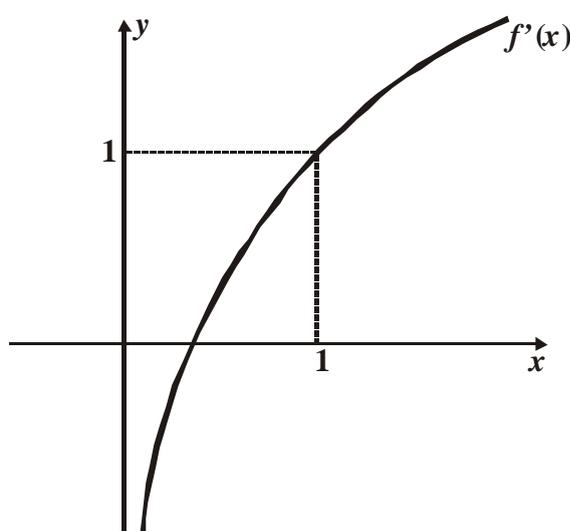
Exercício 39 Isolar os zeros da função $f(x) = x \ln x - 3,2$.

Resolução: Pode-se construir uma tabela de valores para $f(x)$ e analisar os sinais:

x	1	2	3	4
$f(x)$				



[Fig. 7]: Gráfico da função $f(x) = x \ln x - 3,2$.

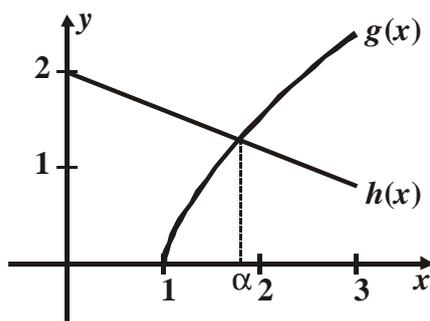


[Fig. 8]: Gráfico da função $f'(x) = 1 + \ln x$.

Exercício 40 Isolar os zeros da função $f(x) = 5 \log x - 2 + 0,4x$.

Resolução: Pode-se construir uma tabela de valores para $f(x)$ e analisar os sinais:

x	1	2	3
$f(x)$			

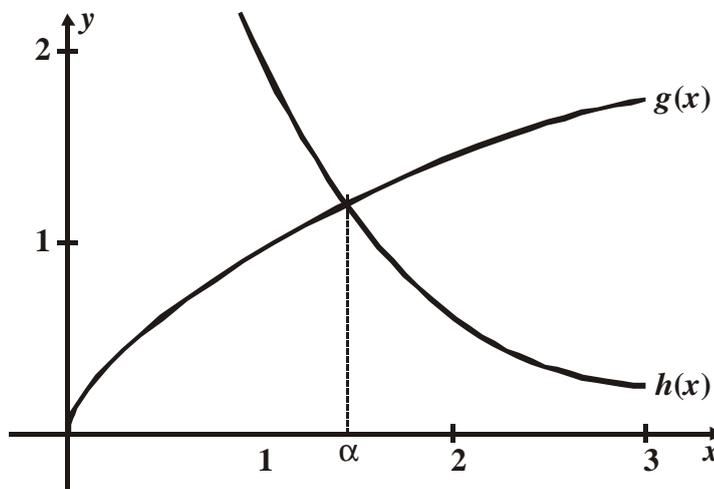


[Fig. 9]: Os gráficos de $g(x) = 5 \log x$ e $h(x) = 2 - 0,4x$.

Exercício 41 Isolar os zeros da função $f(x) = \sqrt{x} - 5e^{-x}$.

Resolução: Pode-se construir uma tabela de valores para $f(x)$ e analisar os sinais:

x	0	1	2	3
$f(x)$				



[Fig. 10]: Os gráficos de $g(x) = \sqrt{x}$ e $h(x) = 5e^{-x}$.

2.3 Fase II: Refinamento - Critérios de Parada

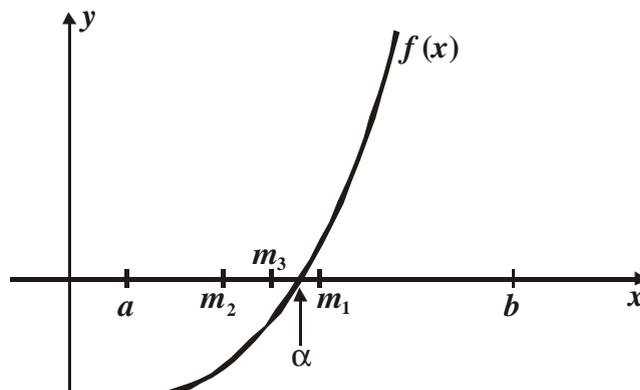
2.3.1 Método da Bisseção (ou Método da Dicotomia)

Este método é normalmente utilizado para diminuir o intervalo que contém o zero da função, para a aplicação de outro método, pois o esforço computacional cresce demasiadamente quando se aumenta a precisão exigida.

O processo consiste em dividir o intervalo que contém o zero ao meio e por aplicação do Teorema 1, aplicado aos subintervalos resultantes, determinar qual deles contém o zero.

$$\left[a, \frac{a+b}{2} \right], \left[\frac{a+b}{2}, b \right]$$

O processo é repetido para o novo subintervalo até que se obtenha uma precisão prefixada. Desta forma, em cada iteração o zero da função é aproximado pelo ponto médio de cada subintervalo que a contém.



[Fig. 11]: O método da bissecção ou dicotomia.

Assim, na figura anterior tem-se:

$$m_1 = \frac{a+b}{2}, m_2 = \frac{a+m_1}{2}, m_3 = \frac{m_2+m_1}{2}, \dots$$

Desta forma, o maior erro que se pode cometer na:

- 1ª iteração ($n=1$): é $\frac{(b-a)}{2}$
- 2ª iteração ($n=2$): é $\frac{(b-a)}{2^2}$
- 3ª iteração ($n=3$): é $\frac{(b-a)}{2^3}$
- ⋮
- n ª iteração: é $\frac{(b-a)}{2^n}$

Se o problema exige que o erro cometido seja inferior a um parâmetro ε , determina-se a quantidade n de iterações encontrando o maior inteiro que satisfaz a inequação: $\frac{(b-a)}{2^n} \leq \varepsilon$ que se resolve da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{(b-a)}{2^n} \leq \varepsilon &\Rightarrow \log \frac{(b-a)}{2^n} \leq \log \varepsilon \Rightarrow \log(b-a) - \log 2^n \leq \log \varepsilon \Rightarrow \log(b-a) - n \log 2 \leq \log \varepsilon \\ \Rightarrow n &\geq \frac{\log(b-a) - \log \varepsilon}{\log 2} \end{aligned}$$

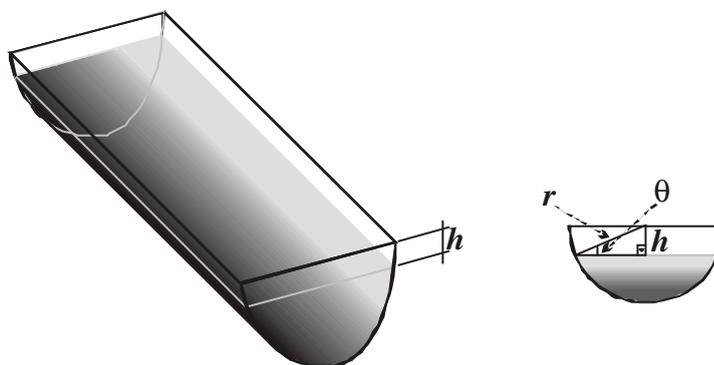
Exercício 42 Determinar um valor aproximado para $\sqrt{5}$, com erro inferior a 10^{-2} .

Resolução: Determinar $\sqrt{5}$ é equivalente a obter o zero positivo da função $f(x) = x^2 - 5$.

n	a	x	b	$f(a)$	$f(x)$	$f(b)$	$(b-a)/2$
1							
2							
3							
4							
5							
6							
7							

Portanto $\sqrt{5} \cong$

Exercício 43 Um tanque de comprimento L tem uma seção transversal no formato de um semicírculo com raio r (veja a figura). Quando cheio de água até uma distância h do topo, o volume V da água é: $V = L \cdot \left[0,5 \cdot \pi \cdot r^2 - r^2 \arccos\left(\frac{h}{r}\right) - h\sqrt{r^2 - h^2} \right]$. Supondo que $L = 10 \text{ ft}$, $r = 1 \text{ ft}$ e $V = 12,4 \text{ ft}^3$, encontre a profundidade da água no tanque com precisão de $0,01 \text{ ft}$.



[Fig. 12]: O tanque de comprimento L .

Resolução:

Pode-se construir uma tabela de valores para $f(x)$ e analisar os sinais:

h	-1	0	1
$f(h)$			

Para se confirmar a unicidade deste zero neste intervalo, pode-se utilizar a OBS. 6: , isto é, calcula-se a derivada $f'(h)$ de $f(h)$ para verificar que a mesma preserva o sinal no intervalo $]0,1[$.

n	a	h	b	$f(a)$	$f(h)$	$f(b)$	$(b-a)/2$
1							
2							
3							
4							
5							
6							
7							

Assim, $\bar{h} =$

2.3.1.1 Algoritmo do Método da Bissecção

Seja $f(x)$ uma função contínua em um intervalo $[a,b]$, com $f(a) \cdot f(b) < 0$ e a raiz de $f(x)$ isolada em $[a,b]$.

- **Dados de Entrada:** Pontos extremos a e b do intervalo; precisão ou tolerância (ϵ) e o número máximo de iterações (ITMAX).
- **Saída:** Solução aproximada x ou mensagem de "solução não encontrada" com a precisão desejada no número máximo de iterações.

PASSO 1

Faça $i=1$

$$FA = f(a)$$

PASSO 2

Enquanto $i \leq \text{ITMAX}$ execute os passos de 3 a 6

PASSO 3

$$\text{Faça } x = \frac{(a+b)}{2} \text{ e } FX = f(x)$$

PASSO 4

Se $FX = 0$ ou $\frac{(b-a)}{2} < \epsilon$, então

Saída (x) (Procedimento executado com sucesso)

FIM

PASSO 5Faça $i=i+1$ PASSO 6Se $FA \cdot FX > 0$ então faça $a = x$ e $FA = FX$ Caso contrário faça $b = x$ PASSO 7

Saída (Solução não encontrada com a precisão exigida)

FIM

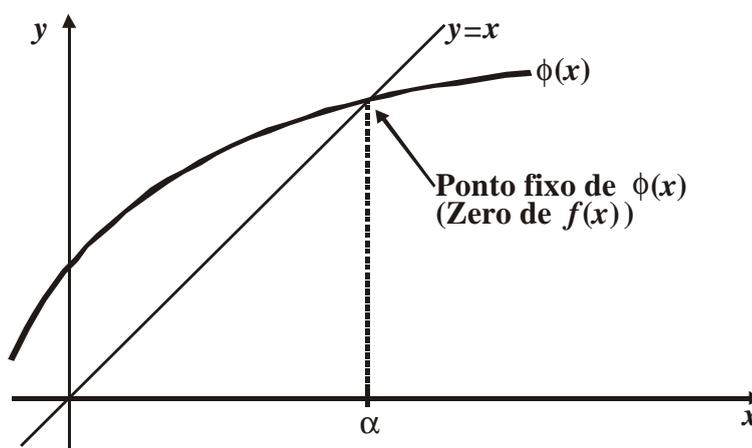
2.3.2 Método do Ponto Fixo (ou Método da Iteração Linear ou Método das Aproximações sucessivas)

Neste método a seqüência de aproximações do zero α de uma função $f(x)$ ($f(\alpha) = 0$) é obtida através de uma relação de recorrência da forma:

$$(Eq.6) \quad x_{n+1} = \phi(x_n), n=0, 1, 2, \dots$$

O ponto x_0 será considerado uma aproximação inicial do zero α da função $f(x)$ e $\phi(x)$ é uma função que tem α como ponto fixo, isto é, $\alpha = \phi(\alpha)$.

A primeira pergunta a ser respondida é: dada uma função $f(x)$ com zero α , como encontrar uma função $\phi(x)$ que tenha α como ponto fixo? Isto pode ser feito através de uma série de manipulações algébricas sobre a equação $f(x) = 0$, transformando-a em uma equação equivalente da forma $x = \phi(x)$. Nestas transformações deve-se tomar os devidos cuidados para que $\phi(x)$ esteja definida em α e para que α pertença à imagem de ϕ . Como o zero α é desconhecido, é necessário determinar um intervalo I que contenha α e que esteja contido tanto no domínio quanto na imagem de ϕ . É necessário que o zero α de $f(x)$ seja único no intervalo I , caso contrário não será possível discernir qual o zero determinado.



[Fig. 13]: Um exemplo de uma função de ponto fixo.

Exercício 44 Obter algumas funções de ponto fixo para a função $f(x) = x^2 + x - 6$.

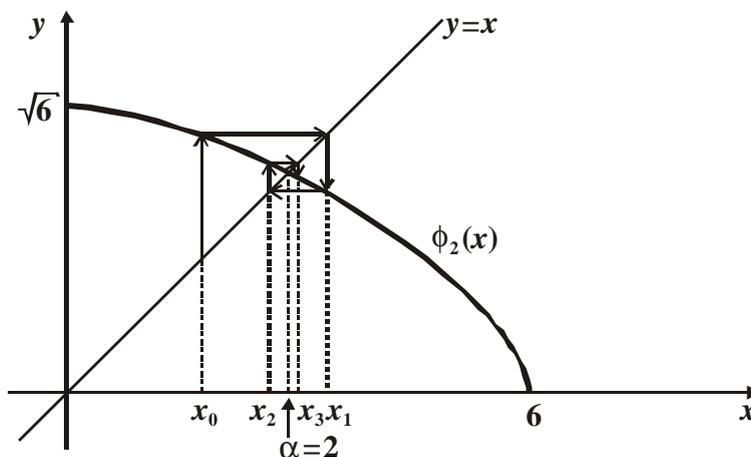
Resolução: Efetuando diferentes manipulações algébricas sobre a equação $f(x) = 0$ ou $x^2 + x - 6 = 0$, pode-se obter diferentes funções de ponto fixo, como por exemplo:

No próximo passo algumas destas funções serão utilizadas na tentativa de gerar seqüências aproximadoras dos zeros α de $f(x)$.

Exercício 45 Aproximar o maior zero da função $f(x) = x^2 + x - 6$, utilizando a função $\phi_2(x) = \sqrt{6 - x}$, e $x_0 = 1,5$.

Resolução: Neste caso a fórmula de recorrência $x_{n+1} = \phi(x_n)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ será:
 $x_{n+1} = \phi_2(x_n) = \sqrt{6 - x_n}$, e pode-se construir a seguinte tabela:

n	x_n	$x_{n+1} = \phi_2(x_n) = \sqrt{6 - x_n}$
0		
1		
2		
3		
4		
\vdots	\vdots	\vdots

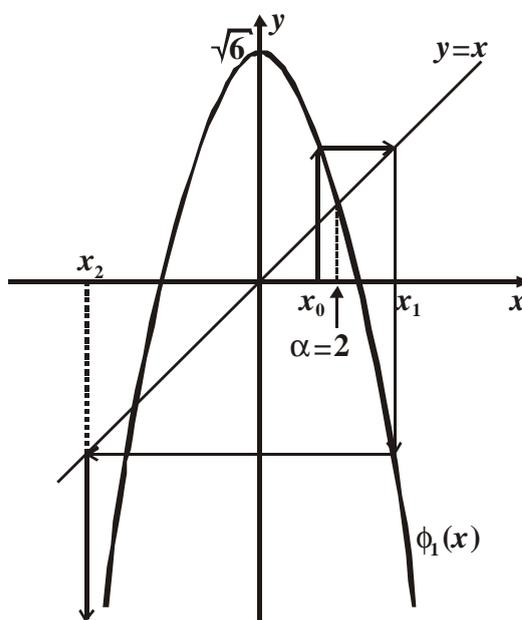


[Fig. 14]: Os gráficos das funções $y = x$ e $\phi_2(x) = \sqrt{6 - x}$.

Exercício 46 Aproximar o maior zero da função $f(x) = x^2 + x - 6$, utilizando a função $\phi_1(x) = 6 - x^2$, e $x_0 = 1,5$.

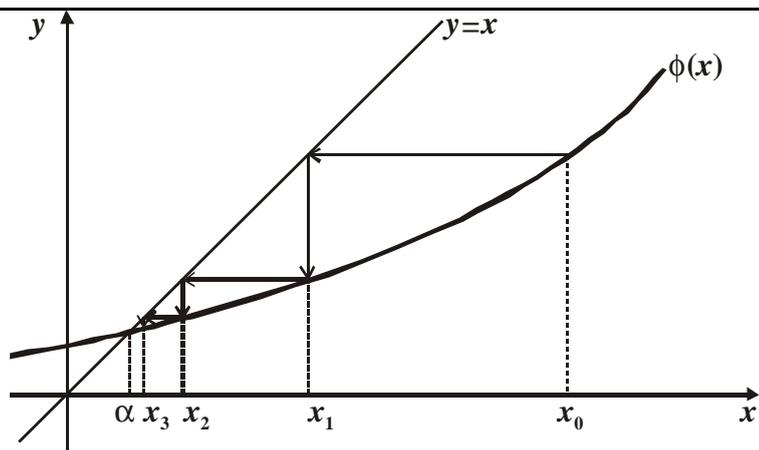
Resolução: Neste caso a fórmula de recorrência $x_{n+1} = \phi(x_n)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ será:
 $x_{n+1} = \phi_1(x_n) = 6 - x_n^2$, e pode-se construir a seguinte tabela:

n	x_n	$x_{n+1} = \phi_1(x_n) = 6 - x^2$
0		
1		
2		
3		
\vdots	\vdots	\vdots

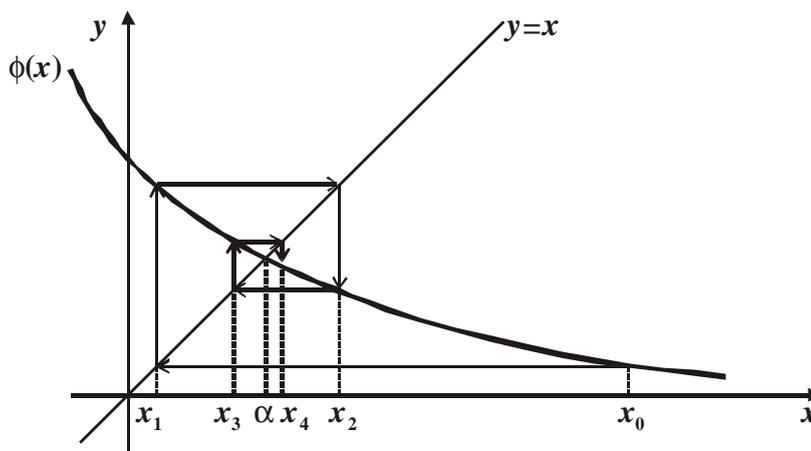


[Fig. 15]: Os gráficos das funções $y = x$ e $\phi_1(x) = 6 - x^2$.

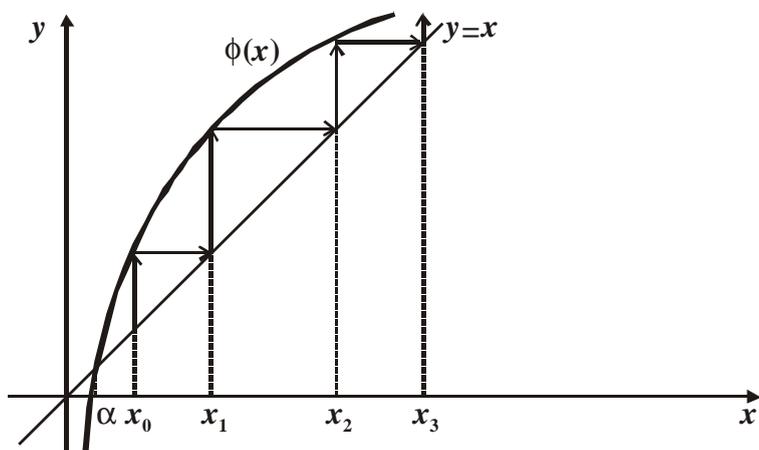
Assim, os dois exercícios anteriores mostram que dependendo da transformação $x = \phi(x)$ escolhida, a relação de recorrência $x_{n+1} = \phi(x_n)$ pode ou não fornecer uma seqüência $\{x_n\}$ convergente. Desta forma, como determinar *a priori*, quais transformações fornecerão seqüências convergentes? As figuras que seguem ilustram alguns casos onde ocorrem convergência e alguns casos onde não ocorrem convergência.



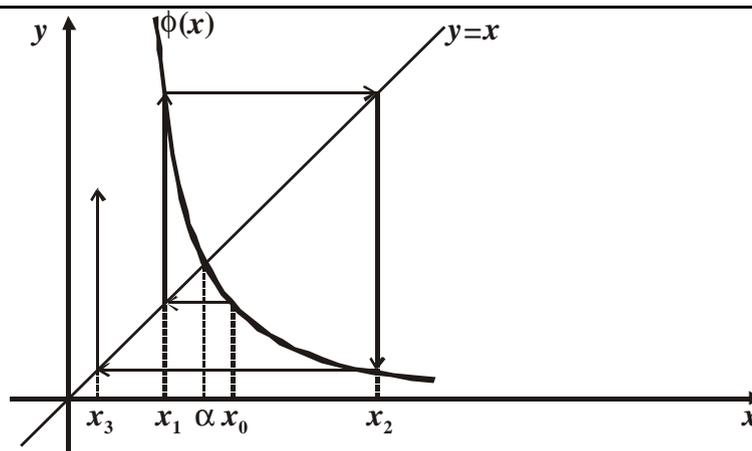
[Fig. 16]: A seqüência $\{x_k\}$ converge para o zero a (Convergência do tipo escada).



[Fig. 17]: A seqüência $\{x_k\}$ converge para o zero a (Convergência do tipo caracol).



[Fig. 18]: A seqüência $\{x_k\}$ não converge para o zero a .



[Fig. 19]: A seqüência $\{x_k\}$ não converge para o zero α .

O Teorema que segue estabelece condições suficientes para garantir a convergência do processo iterativo.

OBS. 7: Como as condições que o teorema que segue são apenas suficientes, dada uma função ϕ que não satisfaça estas condições, não se pode garantir que a seqüência gerada x_1, x_2, x_3, \dots diverge.

2.3.2.1 Convergência do Método das Aproximações Sucessivas

Teorema 2 Seja α um zero de uma função f , isolada em um intervalo $I=[a,b]$, e seja ϕ uma função tal que $\phi(\alpha) = \alpha$. Se:

- i) ϕ e ϕ' são funções contínuas em I ;
- ii) $k = \max_{x \in I} |\phi'(x)| < 1$
- iii) $x_0 \in I$ e $x_{n+1} = \phi(x_n) \in I$, para $n = 0, 1, 2, \dots$

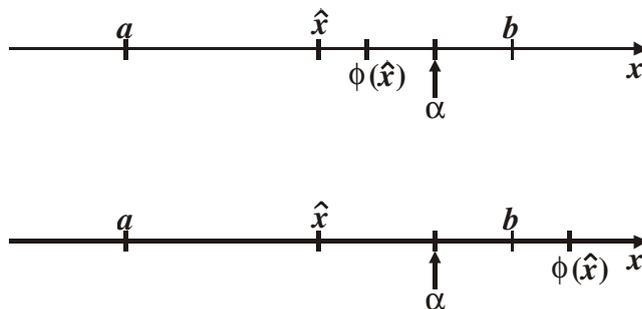
Então a seqüência $\{x_n\}$ converge para o zero α .

OBS. 8: Para se resolver um problema com o método das aproximações sucessivas, utiliza-se o teorema anterior da seguinte forma: inicialmente determina-se um intervalo I onde o zero α de $f(x)$ esteja isolado, e uma função ϕ que tenha α como ponto fixo. Analisando ϕ e ϕ' , pode-se verificar se as condições i) e ii) do Teorema 2 estão satisfeitas. Estas condições podem não estar satisfeitas pelo fato do intervalo I ter sido superdimensionado. Neste caso procura-se por um intervalo I' satisfazendo as condições do teorema. Na demonstração do Teorema 2, que pode ser vista em **HUMES**, Ana Flora C., et al. *Noções de Cálculo Numérico*. São Paulo: McGraw-Hill, p. 16, 1984, tem-se que as condições i) e ii) garantem que se $x_{n-1} \in I$ então $|\alpha - x_n| < |\alpha - x_{n-1}|$. Entretanto, isto não implica que $x_n \in I$. Uma maneira simples para garantir que $x_n \in I = [a,b] \forall n \geq 0$ é tomar como valor inicial x_0 o extremo de I mais próximo do zero α . Na seqüência, será mostrado que neste caso $x_1 = \phi(x_0) \in I$: Supondo que a seja o extremo de I mais próximo de α , tem-se: $|x_1 - \alpha| < |x_0 - \alpha| = |a - \alpha| \leq |b - \alpha|$, logo $x_1 \in I$. A demonstração é análoga para o caso em que b o extremo de I mais próximo de α .

OBS. 9: A condição iii) do Teorema 2 pode ser substituída por: iii') o zero α é o ponto médio do intervalo I . Na verdade, se para o intervalo $I = [a,b]$, estão satisfeitas as condições

i) e ii) do Teorema 2, e se a estiver mais próximo de α do que de b então, denotando $|a - \alpha|$ por r , tem-se que para qualquer $x_0 \in [a, \alpha + r]$ a hipótese iii) do teorema é verificada. Mais ainda, para todo $I = [a, b]$ nas condições do teorema 2, existe $I' \subset I$ tal que qualquer que seja $x_0 \in I'$ tem-se que $x_n \in I'$, $n \geq 1$.

OBS. 10: A determinação do extremo de $I = [a, b]$ mais próximo do zero α pode ser feito da seguinte maneira: Suponhamos satisfeitas as hipóteses i) e ii) do Teorema 2. Nestas condições, seja $\hat{x} = \frac{(a+b)}{2}$ (ponto médio do intervalo I). Sabe-se que $\phi(\hat{x})$ está mais próximo de α do que \hat{x} . Se $\hat{x} < \phi(\hat{x})$, então α está entre \hat{x} e b , ou seja, b é o extremo de I mais próximo de α . Analogamente, se $\hat{x} > \phi(\hat{x})$, então a é o extremo de I mais próximo de α . Se $\hat{x} = \phi(\hat{x})$, então \hat{x} é o zero procurado.



[Fig. 20]: Casos em que b é o extremo mais próximo de a .

OBS. 11: Sejam dados $\phi(x)$, α e $k = \max_{x \in I} |\phi'(x)|$ satisfazendo as hipóteses do teorema anterior. Se $x_n = \phi(x_{n-1})$, então $|\alpha - x_n| \leq \frac{k}{1-k} |x_n - x_{n-1}|$. Desta forma, obtém-se um limitante superior para o erro cometido na n -ésima iteração (x_n).

Exercício 47 Verificar as condições i) e ii) do teorema anterior quando do uso da função $\phi_2(x) = \sqrt{6-x}$ no exercício anterior.

Resolução:

Verificação da condição i):

Verificação da condição ii):

Logo,

Exercício 48 Verificar as condições i) e ii) do teorema anterior quando do uso da função $\phi_1(x) = 6 - x^2$.

Resolução:

Verificação da condição i):

Verificação da condição ii):

Logo,

2.3.2.2 Algoritmo do Método das aproximações sucessivas

Para encontrar uma solução para $p = \phi(p)$ dada um aproximação inicial p_0 .

- **Dados de Entrada:** Aproximação inicial p_0 , precisão ou tolerância (ϵ) e o número máximo de iterações (ITMAX).
- **Saída:** Solução aproximada p ou mensagem de “solução não encontrada”.

PASSO 1

Faça $i = 1$

PASSO 2

Enquanto $i \leq \text{ITMAX}$, execute os passos 3 – 6

PASSO 3

Faça $p = \phi(p)$ (calcular p_i)

PASSO 4

Se $|p - p_0| < \epsilon$ então

Saída (p) (procedimento efetuado com sucesso)

FIM

PASSO 5

Faça $i = i + 1$

PASSO 6

Faça $p_0 = p$ (atualize p_0)

PASSO 7

Saída (solução não encontrada após ITMAX iterações)

FIM

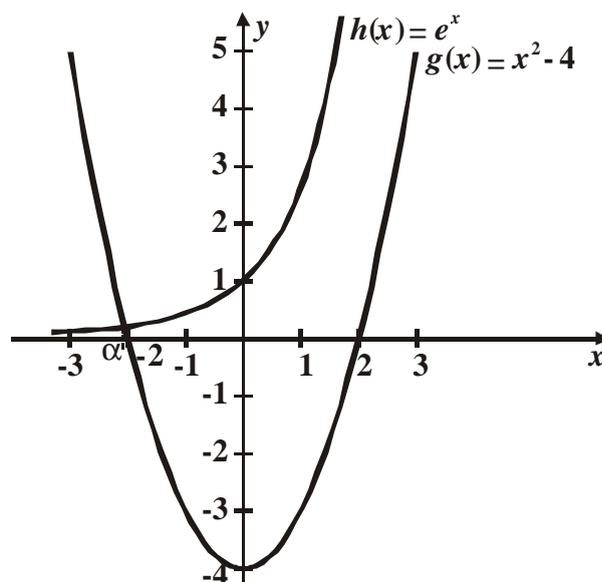
OBS. 12: Outros critérios de parada podem ser utilizados:

- $|p_n - p_{n-1}| < \epsilon$
- $\frac{|p_n - p_{n-1}|}{|p_n|} < \epsilon$
- $|f(p_n)| < \epsilon$

Exercício 49 Encontrar o zero de $f(x) = e^x - x^2 + 4$ com precisão $\epsilon = 10^{-6}$, utilizando o método do ponto fixo.

Resolução: Pode-se construir uma tabela de valores para $f(x)$ e analisar os sinais:

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



[Fig. 21]: Os gráficos de $h(x) = e^x$ e $g(x) = x^2 - 4$.

Procurando uma função de ponto fixo adequada pode-se fazer:

Verificando as hipóteses i) e ii) do Teorema 2:

n	x_n	x_{n+1}	$ x_{n+1} - x_n $
0			
1			
2			
3			

Portanto, $\bar{x} =$

2.3.3 Método de Newton, Newton-Raphson (ou Método das Tangentes)

Este método é uma particularidade do método das aproximações sucessivas. A idéia é construir uma função $\phi(x)$ para a qual exista um intervalo contendo o zero α , onde $|\phi'(x)| < 1$. Esta construção é feita impondo $\phi'(\alpha) = 0$. Como $\phi'(x)$ deve ser uma função contínua, existe sempre uma vizinhança I de α onde $\max_{x \in I} |\phi'(x)| < 1$.

Obtenção da função $\phi(x)$: A forma mais geral de $x = \phi(x)$ equivalente a $f(x) = 0$ é dada por:

$$(Eq.7) \quad x = x + A(x)f(x) = \phi(x)$$

onde $A(x)$ é uma função contínua tal que $A(\alpha) \neq 0$. Escolhe-se $A(x)$ de forma que $\phi'(\alpha) = 0$. Derivando-se a (Eq.7), obtém-se $\phi'(x) = 1 + A(x)f'(x) + A'(x)f(x)$. Calculando esta derivada no ponto α , obtém-se: $\phi'(\alpha) = 1 + A(\alpha)f'(\alpha)$. Supondo que $f'(\alpha) \neq 0$, para que $\phi'(\alpha) = 0$, deve-se ter $A(\alpha) = -\frac{1}{f'(\alpha)}$. Assim, uma escolha satisfatória para $A(x)$ será portanto:

$$(Eq.8) \quad A(x) = -\frac{1}{f'(x)}, \text{ uma vez que } x \cong \alpha.$$

Substituindo (Eq.8) em (Eq.7), tem-se:

$$(Eq.9) \quad \phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

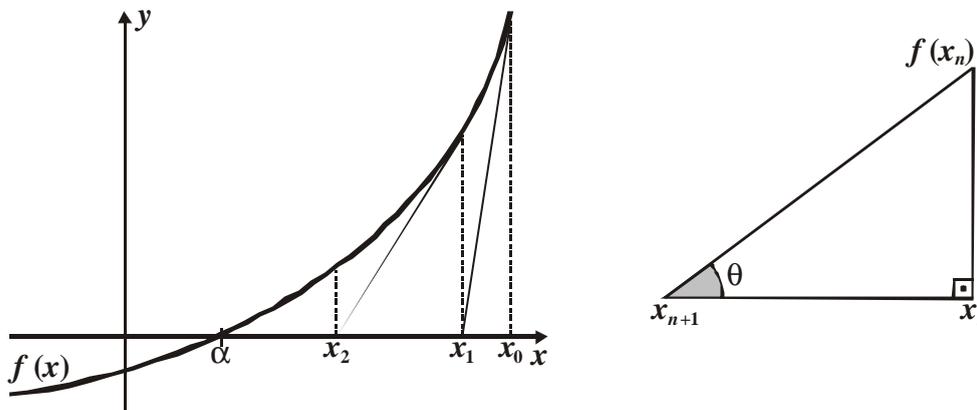
Assim, o processo iterativo de Newton é definido por:

$$(Eq.10) \quad x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

OBS. 13: A (Eq. 10) é válida mesmo que $f'(\alpha) = 0$, uma vez que $x_n \neq \alpha$.

2.3.3.1 Interpretação Geométrica do Método de Newton

O ponto x_{n+1} é obtido traçando-se a tangente ao gráfico da função $f(x)$ no ponto $(x_n, f(x_n))$. A intersecção da reta tangente com o eixo das abscissas fornece a nova aproximação x_{n+1} . Esta interpretação justifica o nome de método das tangentes.



[Fig. 22]: Interpretação Geométrica do Método de Newton.

$$\operatorname{tg}\theta = f'(x_n) = \frac{f(x_n)}{x_n - x_{n+1}} \Rightarrow x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

2.3.3.2 Convergência do Método de Newton

Teorema 3 Seja $f : [a, b] \rightarrow \mathfrak{R}$, duas vezes diferenciável, com $f''(x)$ contínua. Suponha que:

- i) $f(a) \cdot f(b) < 0$
- ii) $f'(x) \neq 0, \forall x \in [a, b]$
- iii) $f''(x)$ não troca de sinal em $[a, b]$

Então, a seqüência gerada pelas iterações do método de Newton-Raphson utilizando a função $\phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ que equivale a $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ converge para o único zero α de f , isolado em $[a, b]$, se $x_0 \in [a, b]$ for escolhido convenientemente.

OBS. 14: Para se escolher o ponto inicial x_0 , pode-se, por exemplo, fazer $x_0 = a$ se $\phi(a) \in [a, b]$ ou $x_0 = b$ caso contrário.

2.3.3.3 Algoritmo do Método de Newton

Para encontrar uma solução para $f(x) = 0$, dada a derivada de $f(x)$ e uma aproximação inicial p_0 .

- **Dados de Entrada:** Aproximação inicial p_0 , precisão ou tolerância (ϵ) e o número máximo de iterações (ITMAX).
- **Saída:** Solução aproximada p ou mensagem de “solução não encontrada”.

PASSO 1

Faça $i = 1$

PASSO 2:

Enquanto $i \leq \text{ITMAX}$, execute os passos 3 – 6

PASSO 3

Faça $p = p_0 - f(p_0) / f'(p_0)$ (calcular p_i)

PASSO 4

Se $|p - p_0| < \varepsilon$ então

Saída (p) (procedimento efetuado com sucesso)

FIM

PASSO 5

Faça $i = i + 1$

PASSO 5

Faça $p_0 = p$ (atualize p_0)

Passo 7:

Saída (solução não encontrada após ITMAX iterações)

FIM

OBS. 15: Outros critérios de parada podem ser utilizados:

- $|p_n - p_{n-1}| < \varepsilon$
- $\frac{|p_n - p_{n-1}|}{|p_n|} < \varepsilon$
- $|f(p_n)| < \varepsilon$

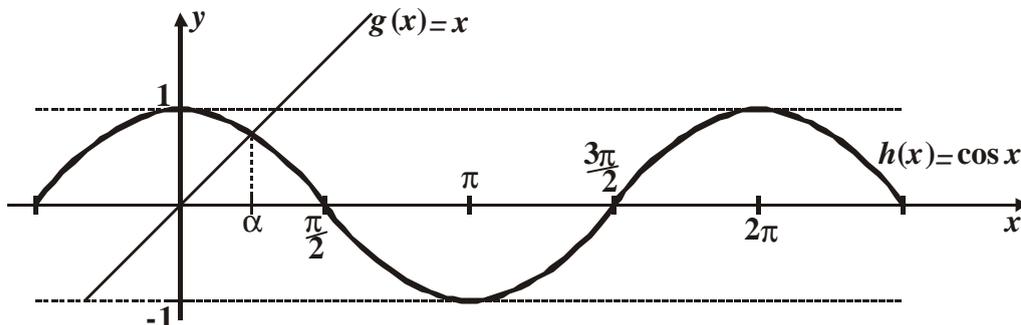
OBS. 16: O Método de Newton irá falhar se para algum n , $f'(p_{n-1}) = 0$.

Exercício 50 Encontrar a solução para a equação $x = \cos x$ com precisão $\varepsilon = 10^{-6}$.

Resolução:

Pode-se construir uma tabela de valores para $f(x)$ e analisar os sinais:

x	0	$\frac{\pi}{2}$
$f(x)$		



[Fig. 23]: Os gráficos das funções $g(x) = x$ e $h(x) = \cos x$.

n	x_n	x_{n+1}	$ x_{n+1} - x_n $
0			
1			
2			

Portanto, $\bar{x} =$

2.3.4 Comparação entre os métodos

Nos exercícios seguintes, considerando cada método especificado, determine uma aproximação para o zero da função.

Exercício 51 Pelo método da Bisseção, determine uma aproximação para $\bar{x} \in (1,2)$ da função $f(x) = e^{-x^2} - \cos x$ com aproximação $\epsilon_1 = 10^{-4}$ tal que $(b - a)/2 < \epsilon_1$.

Resolução:

n	a	x	b	$f(a)$	$f(x)$	$f(b)$	$(b - a)/2$
1							
2							
3							
4							
5							
6							
7							
8							
9							

10							
11							
12							
13							
14							

Logo, $\bar{x} =$

Exercício 52 Pelo método da Ponto Fixo ou Aproximações Sucessivas, determine uma aproximação para $\bar{x} \in (1,2)$ da função $f(x) = e^{-x^2} - \cos x$ com aproximação $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-4}$ tal que $|f(x_n)| < \varepsilon_1$ ou $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon_2$. Utilize $x_0 = 1,5$.

Resolução:

n	x_n	x_{n+1}	$ x_{n+1} - x_n $	$ f(x_{n+1}) $	Parada
0					
1					
2					
3					
4					
5					

Logo, $\bar{x} =$

Exercício 53 Pelo método de Newton-Raphson, determine uma aproximação para $\bar{x} \in (1,2)$ da função $f(x) = e^{-x^2} - \cos x$ com aproximação $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 10^{-4}$ tal que $|f(x_n)| < \varepsilon_1$ ou $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon_2$. Utilize $x_0 = 1,5$.

Resolução:

n	x_n	x_{n+1}	$ x_{n+1} - x_n $	$ f(x_n) $	Parada
0					
1					

Logo, $\bar{x} =$

3.1.5 Classificação de um Sistema Linear

- COMPATÍVEL: apresenta soluções;
- INCOMPATÍVEL: caso contrário.

3.1.6 Classificação quanto ao Determinante de A

- $\det A \neq 0$ (SPD) \Rightarrow sistema linear possível e determinado (SOLUÇÃO ÚNICA);
- $\det A = 0$ (SPI) ou (SI): a matriz A é SINGULAR.
(SPI) \Rightarrow Sistema possível e indeterminado,
(SI) \Rightarrow Sistema impossível.

OBS. 17: Se $b_i = 0, i = 1, 2, \dots, n$, isto é, se $b = 0$, o sistema é dito HOMOGÊNEO. Todo sistema homogêneo é compatível, pois admite sempre a solução $x = 0$. A solução é chamada TRIVIAL.

3.2 Métodos diretos

São métodos que determinam a solução de um sistema linear com um número finito de operações.

Definição: Dois sistemas lineares são equivalentes quando possuem a mesma solução.

3.2.1 Método de Eliminação de Gauss

Com $(n-1)$ passos, o sistema linear $A \cdot x = b$ é transformado num sistema triangular superior equivalente. Tome $\det A \neq 0$ como hipótese.

$A \cdot x = b \approx U \cdot x = c$, o que se resolve por substituição.

$$[A : b] \approx [U : c]$$

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right] \approx \left[\begin{array}{cccc|c} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} & c_1 \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} & c_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} & c_n \end{array} \right].$$

Exercício 54 Resolver o sistema S_3 , com $S_3 = \begin{cases} 2x_1 + 3x_2 - x_3 = 5 \\ 4x_1 + 4x_2 - 3x_3 = 3 \\ 2x_1 - 3x_2 + x_3 = -1 \end{cases}$.

Resolução:

- Etapa 1: em B_0 , tome $L_i^{(0)}$, com $i=1,2,3$, como as linhas de B_0 e $a_{11}^{(0)}$ como pivô e calculam-se os multiplicadores $m_{i1}^{(0)}$ ($i=2,3$).

- Etapa 2: Repete-se o processo para o próximo pivô, situado na diagonal da matriz B_1 .
Em B_1 , tome $L_i^{(1)}$, com $i=2,3$ e $a_{22}^{(1)}$ como pivô.

- Método compacto para a TRIANGULAÇÃO $U \cdot x = c$:

Linha	Multiplicador	m	Matriz Aumentada	Transformação
(1)	$B_0 \Rightarrow$		2 3 -1 5	
(2)	$m_{21}^{(0)} =$		4 4 -3 3	
(3)	$m_{31}^{(0)} =$		2 -3 1 -1	
(2)	$B_1 \Rightarrow$			
(3)	$m_{32}^{(1)} =$			
(3)	$B_2 \Rightarrow$			

As linhas contendo os pivôs formam o sistema $U \cdot x = c$.

Exercício 55 Resolver o sistema S_4 com arredondamento em duas casas decimais, na matriz aumentada.

$$S_4 \Rightarrow A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 8,7x_1 + 3,0x_2 + 9,3x_3 + 11,0x_4 = 16,4 \\ 24,5x_1 - 8,8x_2 + 11,5x_3 - 45,1x_4 = -49,7 \\ 52,3x_1 - 84,0x_2 - 23,5x_3 + 11,4x_4 = -80,8 \\ 21,0x_1 - 81,0x_2 - 13,2x_3 + 21,5x_4 = -106,3 \end{cases}$$

Resolução:

Linha	Multiplicador m	Matriz Aumentada
(1)	$B_0 \Rightarrow$	8,70 3,00 9,30 11,00 16,40
(2)	$m_{21}^{(0)} =$	24,50 -8,80 11,50 -45,10 -49,70
(3)	$m_{31}^{(0)} =$	52,30 -84,00 -23,50 11,40 -80,80
(4)	$m_{41}^{(0)} =$	21,00 -81,00 -13,20 21,50 -106,30
(2)	$B_1 \Rightarrow$	
(3)	$m_{32}^{(1)} =$	
(4)	$m_{42}^{(1)} =$	
(3)	$B_2 \Rightarrow$	
(4)	$m_{43}^{(2)} =$	
(4)	$B_3 \Rightarrow$	

Então $A \cdot x = b \approx U \cdot x = c \Rightarrow [A:b] \approx [U:c]$.

$$U \cdot x = c \Rightarrow$$

Logo: $\bar{x} =$

3.2.1.1 Cálculo do Resíduo

Uma medida para avaliar a precisão dos cálculos é o resíduo, que é dado por:

(Eq.14) $r = b - A\bar{x}$.

Exercício 56 Com base no exercício anterior, calcular o resíduo r do sistema $A \cdot x = b$.**Resolução:** $r = b - A\bar{x}$.

$$r =$$

3.2.1.2 Algoritmo de Eliminação de Gauss

Seja o sistema $A \cdot x = b$, com $A_{n \times n}$, $x_{n \times 1}$ e $b_{n \times 1}$.Sempre supor que $a_{kk} \neq 0$ na etapa k .TRIANGULARIZAÇÃO: $A \cdot x = b \approx U \cdot x = c$.

Para $k=1, 2, \dots, (n-1)$

Para $i=(k+1), \dots, n$

$$m = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$$

$$a_{ik} = 0$$

Para $j=(k+1), \dots, n$

$$a_{ij} = a_{ij} - m * a_{kj}$$

$$b_i = b_i - m * b_k$$

FIM

FIM

FIM

RESOLUÇÃO DO SISTEMA $U \cdot x = c$.

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$

Para $k=(n-1), \dots, 2, 1$

$$s = 0$$

Para $j=(k+1), \dots, n$

$$s = s + a_{kj} * x_j$$

FIM

$$x_k = \frac{b_k - s}{a_{kk}}$$

FIM

3.2.2 Estratégia de Pivoteamento Completo

No momento de se calcular o multiplicador m_{ik} , se o pivô estiver próximo de zero, o método pode ampliar os erros de arredondamento. Para se contornar estes problemas, escolhe-se como pivô $\text{MAX}|a_{ij}|$, com $i, j=1, 2, \dots, n$.

Dado $A \cdot x = b$, tome $B = [A : b]$.

$$B = \left[\begin{array}{cccc|ccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1q} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2q} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{p1} & a_{p2} & \cdots & a_{pq} & \cdots & a_{pn} & b_p \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nq} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right].$$

Seja $a_{pq} = \text{MAX}|a_{ij}|$, $(i, j=1, 2, \dots, n)$ o pivô da linha p . Então, calcula-se o multiplicador $m_{iq}^{(0)} = -\frac{a_{iq}^{(0)}}{a_{pq}^{(0)}}$, em cada linha, $\forall i \neq p$ com $i=1, 2, \dots, n$. Assim, anulam-se os elementos a_{ij} da coluna q através da operação:

$$L_i^{(1)} \leftarrow m_{iq}^{(0)} * L_p^{(0)} + L_i^{(0)}.$$

Eliminando-se a linha pivotal p , repete-se o processo até que se obtenha $L_i^{(k)}$ com k conjuntos de operações elementares aplicadas sobre B , onde $k=1, 2, \dots, (n-1)$.

Exercício 57 Resolva S_4 com arredondamento em duas casas decimais, utilizando eliminação de Gauss com pivoteamento completo.

$$S_4 \Rightarrow A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 8,7x_1 + 3,0x_2 + 9,3x_3 + 11,0x_4 = 16,4 \\ 24,5x_1 - 8,8x_2 + 11,5x_3 - 45,1x_4 = -49,7 \\ 52,3x_1 - 84,0x_2 - 23,5x_3 + 11,4x_4 = -80,8 \\ 21,0x_1 - 81,0x_2 - 13,2x_3 + 21,5x_4 = -106,3 \end{cases}$$

Resolução:

Linha	Multiplicador m	Matriz Aumentada
(1)	$m_{12}^{(0)} =$	8,70 3,00 9,30 11,00 16,40
(2)	$m_{22}^{(0)} =$	24,50 -8,80 11,50 -45,10 -49,70
(3)	$B_0 \Rightarrow$	52,30 -84,00 -23,50 11,40 -80,80
(4)	$m_{42}^{(0)} =$	21,00 -81,00 -13,20 21,50 -106,30
(1)	$m_{14}^{(1)} =$	
(2)	$B_1 \Rightarrow$	
(4)	$m_{44}^{(1)} =$	
(1)	$m_{11}^{(2)} =$	
(4)	$B_2 \Rightarrow$	
(1)	$B_3 \Rightarrow$	

$$\text{Então } A \cdot x = b \approx U \cdot x = c \Rightarrow [A:b] \approx [U:c].$$

$$U \cdot x = c \Rightarrow$$

3.2.3 Refinamento de Soluções

Seja $\bar{x}^{(0)}$ a solução aproximada para $A \cdot x = b$. Obtém-se a solução melhorada $\bar{x}^{(1)}$ aplicando-se a correção $\delta^{(0)}$ em $\bar{x}^{(0)}$.

$$\bar{x}^{(1)} = \bar{x}^{(0)} + \delta^{(0)}$$

Se $A \cdot \bar{x}^{(1)} = b$, então

$$A \cdot (\bar{x}^{(0)} + \delta^{(0)}) = b$$

$$A \cdot \bar{x}^{(0)} + A \cdot \delta^{(0)} = b$$

$$\Rightarrow A \cdot \delta^{(0)} = b - A \cdot \bar{x}^{(0)}$$

$$\Rightarrow A \cdot \delta^{(0)} = r^{(0)}. \text{ Assim, } \delta^{(0)} \text{ vem de } [A : r^{(0)}].$$

Obtido o $\delta^{(0)}$, calcula-se $\bar{x}^{(1)} = \bar{x}^{(0)} + \delta^{(0)}$.

Repete-se o processo para se obter $\bar{x}^{(2)}$, $\bar{x}^{(3)}$, ..., $\bar{x}^{(k)}$, até que se tenha a precisão desejada. Logo, obtém-se o refinamento de forma iterativa pela seguinte equação:

(Eq.15) $\bar{x}^{(i)} = \bar{x}^{(i-1)} + \delta^{(i-1)}$, com $i=1, 2, \dots, k$.

Exercício 58 Considerando a resposta \bar{x} do Exercício 55, faça o refinamento de \bar{x} até que se obtenha o resíduo $r^{(k)}=0$, considerando precisão dupla ($10^{-4}=0,0001$), quatro casas decimais.

$$A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 8,7x_1 + 3,0x_2 + 9,3x_3 + 11,0x_4 = 16,4 \\ 24,5x_1 - 8,8x_2 + 11,5x_3 - 45,1x_4 = -49,7 \\ 52,3x_1 - 84,0x_2 - 23,5x_3 + 11,4x_4 = -80,8 \\ 21,0x_1 - 81,0x_2 - 13,2x_3 + 21,5x_4 = -106,3 \end{cases}$$

$$\bar{x}^{(0)} = [1,01 \quad 2,01 \quad -1,01 \quad 1,00]^T$$

$$r^{(0)} = b - A \cdot \bar{x}^{(0)} \Rightarrow r^{(0)} = [-0,024 \quad -0,042 \quad 0,082 \quad 0,468]^T$$

REFINAMENTO:

$$\bar{x}^{(k)} = \bar{x}^{(k-1)} + \delta^{(k-1)}$$

$$A \cdot \delta^{(k-1)} = r^{(k-1)} \Rightarrow [A : r^{(k-1)}] \Rightarrow \delta^{(k-1)}$$

Resolução:

• $k=1 \quad [A : r^{(0)}] \Rightarrow \delta^{(0)} \Rightarrow \bar{x}^{(1)} = \bar{x}^{(0)} + \delta^{(0)}$

Linha	Multiplicador m	Matriz Aumentada
(1)	$B_0 \Rightarrow$	8,7000 3,0000 9,3000 11,0000 -0,0240
(2)	$m_{21}^{(0)} =$	24,5000 -8,8000 11,5000 -45,1000 -0,0420
(3)	$m_{31}^{(0)} =$	52,3000 -84,0000 -23,5000 11,4000 0,0820
(4)	$m_{41}^{(0)} =$	21,0000 -81,0000 -13,2000 21,5000 0,4680
(2)	$B_1 \Rightarrow$	
(3)	$m_{32}^{(1)} =$	
(4)	$m_{42}^{(1)} =$	
(3)	$B_2 \Rightarrow$	
(4)	$m_{43}^{(2)} =$	
(4)	$B_3 \Rightarrow$	

Considerando 4 casas decimais:

$$[A:r^{(0)}] \approx$$

Então:

$$[A:r^{(0)}] \Rightarrow \delta^{(0)} \Rightarrow$$

Como:

$$\bar{x}^{(1)} = \bar{x}^{(0)} + \delta^{(0)} \Rightarrow$$

$$r^{(1)} = b - A \cdot \bar{x}^{(1)} \Rightarrow$$

- Logo,

3.3 Métodos iterativos

A solução \bar{x} de um sistema de equações lineares $A \cdot x = b$ pode ser obtido resolvendo, de forma iterativa, o sistema equivalente da forma $x = F \cdot x + d$, onde F é uma matriz $n \times n$, x e d vetores $n \times 1$. Isto pode ser feito tomando $\phi(x) = F \cdot x + d$, $x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}) = F \cdot x^{(k)} + d$, onde $k=0, 1, \dots, M$, e M é o número máximo de iterações e $x^{(0)}$ é o vetor inicial.

3.3.1 Testes de parada

O processo iterativo $x^{(k+1)}$ gera aproximações até que:

- $\max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| \leq \varepsilon$, sendo ε a tolerância; ou
- $k > M$, sendo M o número máximo de iterações.

3.3.2 Método de Gauss-Jacobi.

Adaptação de $A \cdot x = b$ para $x = F \cdot x + d$:

$$A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$x = F \cdot x + d \Rightarrow \begin{cases} x_1 = \frac{b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 + \dots + a_{1n}x_n)}{a_{11}} \\ x_2 = \frac{b_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 + \dots + a_{2n}x_n)}{a_{22}} \\ \vdots \\ x_n = \frac{b_n - (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{n(n-1)}x_{(n-1)})}{a_{nn}} \end{cases}$$

OBS. 18: Para o sistema $x = F \cdot x + d$, é necessário que $a_{ii} \neq 0, \forall i$. Caso isto não ocorra, o sistema $A \cdot x = b$ deve ser reagrupado.

Assim, a fórmula recursiva $x = F \cdot x + d$ é dada na forma matricial por:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \dots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \dots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 & \dots & -\frac{a_{3n}}{a_{33}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \dots & 0 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \frac{b_3}{a_{33}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{bmatrix}$$

ou ainda $x^{(k+1)} = F \cdot x^{(k)} + d$ o que é equivalente a:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{b_1 - (a_{12}x_2^{(k)} + a_{13}x_3^{(k)} + a_{14}x_4^{(k)} + \dots + a_{1n}x_n^{(k)})}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{b_2 - (a_{21}x_1^{(k)} + a_{23}x_3^{(k)} + a_{24}x_4^{(k)} + \dots + a_{2n}x_n^{(k)})}{a_{22}} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{b_n - (a_{n1}x_1^{(k)} + a_{n2}x_2^{(k)} + a_{n3}x_3^{(k)} + \dots + a_{n(n-1)}x_{(n-1)}^{(k)})}{a_{nn}} \end{cases}$$

Exercício 59 Resolva o sistema a seguir, utilizando o método de Gauss-Jacobi, com $x^{(0)} = 0_{n \times 1}$ e $\varepsilon = 10^{-2} = 0,01$.

$$A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 10x_1 + 2x_2 + x_3 = 7 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 = -8 \\ 2x_1 + 3x_2 + 10x_3 = 6 \end{cases} \Rightarrow x = F \cdot x + d$$

Resolução:

$F =$

e $d =$

Neste caso a fórmula de recorrência fica:

$$x^{(k+1)} = F \cdot x^{(k)} + d \Rightarrow$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\max_{1 \leq i \leq 3} x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} $
0	0	0	0	-
1				
2				
3				
4				
5				
6				

Com $x^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T$ e $\varepsilon = 0,01$, o processo convergiu com iterações para:

$$\bar{x} =$$

3.3.2.1 Critério das linhas

Uma condição suficiente (mas não necessária) para garantir a convergência do método de Gauss-Jacobi aplicado ao sistema $A \cdot x = b$, com $a_{ii} \neq 0, \forall i$, é

$$\text{(Eq.16)} \quad \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Neste caso, a matriz dos coeficientes das incógnitas A é dita **estritamente diagonal dominante**.

Exercício 60 Verificar se o critério das linhas é satisfeito no sistema de equações $A \cdot x = b$,

$$\text{que segue: } A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 10x_1 + 2x_2 + x_3 = 7 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 = -8 \\ 2x_1 + 3x_2 + 10x_3 = 6 \end{cases}$$

Resolução: $A = \begin{bmatrix} 10 & 2 & 1 \\ 1 & 5 & 1 \\ 2 & 3 & 10 \end{bmatrix} \Rightarrow$

Logo, a matriz dos coeficientes A é **estritamente diagonal dominante**, o que garante a convergência do método de Gauss-Jacobi aplicado a este sistema com esta ordem de equações e incógnitas.

Exercício 61 Verificar se o critério das linhas é satisfeito no sistema de equações $A \cdot x = b$,

$$\text{que segue: } A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} x_1 + 3x_2 + x_3 = -2 \\ 5x_1 + 2x_2 + 2x_3 = 3 \\ 6x_2 + 8x_3 = -6 \end{cases}$$

Resolução: $A = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 1 \\ 5 & 2 & 2 \\ 0 & 6 & 8 \end{bmatrix} \Rightarrow$

Logo a matriz dos coeficientes A **não é estritamente diagonal dominante**. Isto significa que não é garantida a convergência do método de Gauss-Jacobi aplicado a este sistema com esta ordem de equações e incógnitas.

Mas permutando adequadamente as equações do sistema, obtém-se o sistema equivalente:

$A =$

Logo, esta nova matriz dos coeficientes A é **estritamente diagonal dominante**, o que garante a convergência do método de Gauss-Jacobi aplicado a este sistema com esta nova ordem de equações e incógnitas.

3.3.3 Método de Gauss-Seidel.

É semelhante ao método de Gauss-Jacobi, com a diferença de utilizar $x_i^{(k+1)}$, $1 \leq i < p$, para o cálculo de $x_p^{(k+1)}$. Desta forma, as equações recursivas ficam:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{b_1 - (a_{12}x_2^{(k)} + a_{13}x_3^{(k)} + a_{14}x_4^{(k)} + \dots + a_{1n}x_n^{(k)})}{a_{11}} \\ x_2^{(k+1)} = \frac{b_2 - (a_{21}x_1^{(k+1)} + a_{23}x_3^{(k)} + a_{24}x_4^{(k)} + \dots + a_{2n}x_n^{(k)})}{a_{22}} \\ x_3^{(k+1)} = \frac{b_3 - (a_{31}x_1^{(k+1)} + a_{32}x_2^{(k+1)} + a_{34}x_4^{(k)} + \dots + a_{3n}x_n^{(k)})}{a_{33}} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{b_n - (a_{n1}x_1^{(k+1)} + a_{n2}x_2^{(k+1)} + a_{n3}x_3^{(k+1)} + \dots + a_{n(n-1)}x_{(n-1)}^{(k+1)})}{a_{nn}} \end{cases}$$

Exercício 62 Resolva o sistema a seguir, utilizando o método de Gauss-Seidel, com $x^{(0)} = 0_{n \times 1}$ e $\varepsilon = 10^{-2} = 0,01$.

$$A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 10x_1 + 2x_2 + x_3 = 7 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 = -8 \\ 2x_1 + 3x_2 + 10x_3 = 6 \end{cases}$$

Resolução:

Neste caso a fórmula de recorrência fica:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \\ x_2^{(k+1)} = \\ x_3^{(k+1)} = \end{cases}$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\max_{1 \leq i \leq 3} x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} $
0	0	0	0	-
1				
2				
3				
4				

Com $x^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T$ e $\epsilon = 0,01$, o processo convergiu com iterações para:

$\bar{x} =$

3.3.4 Comparação entre os métodos

Exercício 63 Resolva o sistema $A \cdot x = b$, utilizando o método de Gauss-Jacobi, com $x^{(0)} = 0_{n \times 1}$ e $\epsilon = 0,05$.

$$A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 5x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ 3x_1 + 4x_2 + x_3 = 6 \\ 3x_1 + 3x_2 + 6x_3 = 0 \end{cases}$$

Resolução:

$F =$

e $d =$

Neste caso a fórmula de recorrência fica:

$$x^{(k+1)} = F \cdot x^{(k)} + d \Rightarrow \begin{cases} x_1^{(k+1)} = \\ x_2^{(k+1)} = \\ x_3^{(k+1)} = \end{cases}$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\max_{1 \leq i \leq 3} x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} $
0	0	0	0	-
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				
11				

Com $x^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T$ e $\epsilon = 0,05$, o processo convergiu com iterações para:

$\bar{x} =$

Exercício 64 Resolva o sistema $A \cdot x = b$, utilizando o método de Gauss-Seidel, com $x^{(0)} = 0_{n \times 1}$ e $\epsilon = 0,05$.

$$A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 5x_1 + x_2 + x_3 = 5 \\ 3x_1 + 4x_2 + x_3 = 6 \\ 3x_1 + 3x_2 + 6x_3 = 0 \end{cases}$$

Resolução:

Neste caso a fórmula de recorrência fica:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \\ x_2^{(k+1)} = \\ x_3^{(k+1)} = \end{cases}$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\max_{1 \leq i \leq 3} x_i^{(k)} - x_i^{(k-1)} $
0	0	0	0	-
1				
2				
3				

Com $x^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T$ e $\epsilon = 0,05$, o processo convergiu com iterações para:

$\bar{x} =$

3.3.5 Critério de Sassenfeld

Uma condição suficiente para garantir a convergência do método de Gauss-Seidel aplicado ao sistema $A \cdot x = b$, com $a_{ii} \neq 0, \forall i$, é $M < 1$, sendo $M = \max_{1 \leq i \leq n} \beta_i$, onde:

$$\beta_1 = \left| \frac{1}{a_{11}} \right| \cdot \sum_{j=2}^n |a_{1j}|$$

$$\beta_i = \left| \frac{1}{a_{ii}} \right| \cdot \left[\sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| \cdot \beta_j + \sum_{j=i+1}^n |a_{ij}| \right], \quad i = 2, 3, \dots, n.$$

OBS. 19: Se o critério das linhas é satisfeito, então o critério de Sassenfeld também será satisfeito.

Exercício 65 Verificar se o critério de Sassenfeld é satisfeito no sistema de equações

$$A \cdot x = b, \text{ que segue: } A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} x_1 + 0,5x_2 - 0,1x_3 + 0,1x_4 = 0,2 \\ 0,2x_1 + x_2 - 0,2x_3 - 0,1x_4 = -2,6 \\ -0,1x_1 - 0,7x_2 + x_3 + 0,2x_4 = 1,0 \\ 0,1x_1 + 0,3x_2 + 0,2x_3 + x_4 = -2,5 \end{cases}$$

Resolução: $A = \begin{bmatrix} 1 & 0,5 & -0,1 & 0,1 \\ 0,2 & 1 & -0,2 & -0,1 \\ -0,1 & -0,7 & 1 & 0,2 \\ 0,1 & 0,3 & 0,2 & 1 \end{bmatrix}$

$$\beta_1 = \frac{1}{|a_{11}|} \cdot [|a_{12}| + |a_{13}| + |a_{14}|] =$$

$$\beta_2 = \frac{1}{|a_{22}|} \cdot [|a_{21}| \cdot \beta_1 + |a_{23}| + |a_{24}|] =$$

$$\beta_3 = \frac{1}{|a_{33}|} \cdot [|a_{31}| \cdot \beta_1 + |a_{32}| \cdot \beta_2 + |a_{34}|] =$$

$$\beta_4 = \frac{1}{|a_{44}|} \cdot [|a_{41}| \cdot \beta_1 + |a_{42}| \cdot \beta_2 + |a_{43}| \cdot \beta_3] =$$

Então, $M = \max_{1 \leq i \leq 4} \beta_i = \max \{ \dots ; \dots ; \dots ; \dots \} = \dots$ Logo o critério de

Sassenfeld está satisfeito, o que garante a convergência do método de Gauss-Seidel aplicado a este sistema.

Exercício 66 Verificar se o critério de Sassenfeld é satisfeito no sistema de equações

$$A \cdot x = b, \text{ que segue: } A \cdot x = b \Rightarrow \begin{cases} 2x_1 + x_2 + 3x_3 = 9 \\ -x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 3x_3 = 3 \end{cases}$$

Resolução: Com esta disposição de linhas e colunas, tem-se que:

$$\beta_1 = \frac{1}{|a_{11}|} \cdot [|a_{12}| + |a_{13}|] =$$

$$\beta_1 = \frac{1}{|a_{11}|} \cdot [|a_{12}| + |a_{13}|] =$$

$$\beta_2 = \frac{1}{|a_{22}|} \cdot [|a_{21}| \cdot \beta_1 + |a_{23}|] =$$

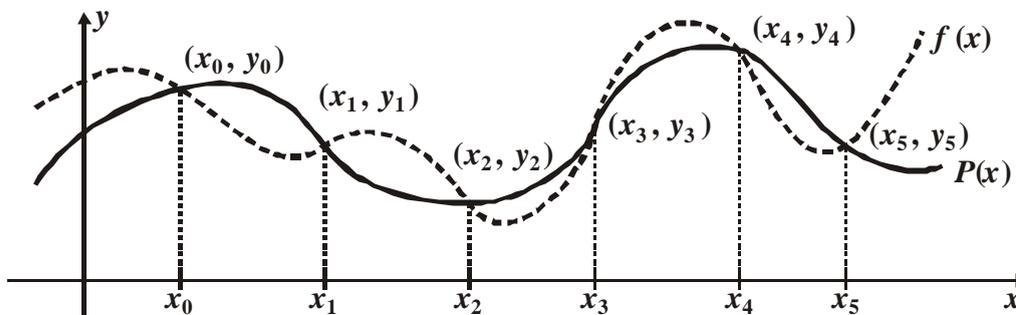
$$\beta_3 = \frac{1}{|a_{33}|} \cdot [|a_{31}| \cdot \beta_1 + |a_{32}| \cdot \beta_2] =$$

$$\text{Então, } M = \max_{1 \leq i \leq 3} \beta_i =$$

4 Interpolação

4.1 Interpolação polinomial

Uma função $f(x)$ pode ser conhecida por um conjunto finito e discreto de $n+1$ pontos.



[Fig. 24]: Interpolação de $f(x)$ pelo polinômio $P(x)$.

x_i	y_i
x_0	y_0
x_1	y_1
x_2	y_2
x_3	y_3
x_4	y_4
x_5	y_5

Para se INTERPOLAR os $n+1$ pontos obtidos da tabela, é utilizado um polinômio $P_n(x)$ de tal forma que:

(Eq.17) $P_n(x_i) = f(x_i)$ para $i=0, 1, \dots, n$.

4.1.1 Existência e Unicidade do Polinômio Interpolador $P_n(x)$

Teorema 4 Existe um único polinômio $P_n(x)$, de grau $\leq n$, tal que: $P_n(x_i) = f(x_i)$, com $i=0,1,\dots,n$, desde que $x_i \neq x_j, i \neq j$.

Tome $P_n(x_i) = \sum_{k=0}^n a_k x_i^k = f(x_i)$ para $i=0,1,\dots,n$. Desenvolvendo o sistema

$f(x_i) = \sum_{k=0}^n a_k x_i^k$ ($i=0,1,\dots,n$), obtém-se:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \dots + a_n x_0^n = f(x_0) & (i=0) \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots + a_n x_1^n = f(x_1) & (i=1) \\ \vdots & \vdots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \dots + a_n x_n^n = f(x_n) & (i=n) \end{cases}$$

Daí, retira-se a matriz dos coeficientes A para se calcular as incógnitas a_0, a_1, \dots, a_n .

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

A é uma matriz de VANDERMONDE e, sendo x_i com $i=0,1,\dots,n$, pontos distintos, o $\det A \neq 0$. Assim o sistema admite solução única.

OBS. 20:

$$\begin{aligned} \det A &= (x_n - x_{n-1}) * (x_n - x_{n-2}) * \dots * (x_n - x_0) * (x_{n-1} - x_{n-2}) * (x_{n-1} - x_{n-3}) * \dots * (x_{n-1} - x_0) \\ & * \dots * \\ & * (x_3 - x_2) * (x_3 - x_1) * (x_3 - x_0) * (x_2 - x_1) * (x_2 - x_0) * (x_1 - x_0) \Rightarrow \det A = \prod_{i>j} (x_i - x_j). \end{aligned}$$

ENTÃO: O polinômio $P_n(x)$ existe e é único.

4.1.2 Forma de Lagrange

Seja f uma função tabelada em $(n+1)$ pontos distintos x_0, x_1, \dots, x_n e seja $L_i(x)$ polinômios de Lagrange de grau n , onde L_i é dado por:

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} \text{ de tal forma que } L_i(x_k) = \begin{cases} 1 & , \text{ se } i = k \\ 0 & , \text{ se } i \neq k \end{cases}$$

Exercício 67 Determine $L_i(x_k)$ para $i=0,1,2$, $k=0,1,2$ e $n=2$.

Resolução:

$$\bullet \quad i=0 \Rightarrow L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$k=0 \Rightarrow L_0(x_0) = \dots\dots\dots$$

$$k=1 \Rightarrow L_0(x_1) = \dots\dots\dots$$

$$k=2 \Rightarrow L_0(x_2) = \dots\dots\dots$$

$$\bullet \quad i=1 \Rightarrow L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$k=0 \Rightarrow L_1(x_0) = \dots\dots\dots$$

$$k=1 \Rightarrow L_1(x_1) = \dots\dots\dots$$

$$k=2 \Rightarrow L_1(x_2) = \dots\dots\dots$$

$$\bullet \quad i=2 \Rightarrow L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

$$k=0 \Rightarrow L_2(x_0) = \dots\dots\dots$$

$$k=1 \Rightarrow L_2(x_1) = \dots\dots\dots$$

$$k=2 \Rightarrow L_2(x_2) = \dots\dots\dots$$

Para $x = x_k$, com $k=0,1,2,\dots,n$, temos:

$$P_n(x_k) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x_k)$$

$$\Rightarrow i \neq k \Rightarrow y_i \underbrace{L_i(x_k)}_{=0} = 0$$

$$\Rightarrow i = k \Rightarrow y_i \underbrace{L_i(x_i)}_{=1} = y_i$$

A forma de Lagrange para o polinômio interpolador é:

$$(Eq.18) \quad P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x) \quad \text{ou} \quad P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$

Exercício 68 Interpolar o ponto $x=1,5$ na tabela abaixo, empregando o polinômio interpolador de Lagrange.

i	0	1	2	3
x_i	-1	0	1	2
y_i	1	3	1	1

Resolução: $n=3$ é o grau máximo de $P_3(x)$.

$$P_3(x) = \sum_{i=0}^3 y_i L_i(x) \Rightarrow P_3(x) = \dots \cdot L_0(x) + \dots \cdot L_1(x) + \dots \cdot L_2(x) + \dots \cdot L_3(x)$$

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^3 \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3)} =$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)} =$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_3)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)(x_2 - x_3)} =$$

$$L_3(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{(x_3 - x_0)(x_3 - x_1)(x_3 - x_2)} =$$

Logo:

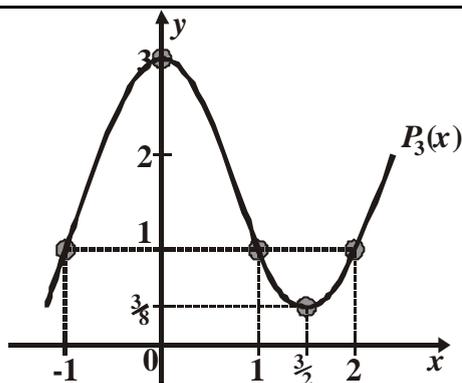
$$P_3(x) =$$

$$\Rightarrow P_3(x) =$$

$$P_3(1,5) = P_3\left(\frac{3}{2}\right) =$$

$$P_3(1,5) =$$

$$P_3(1,5) =$$



[Fig. 25]: Interpolação por Lagrange.

4.1.3 Forma de Newton

A forma de Newton para o polinômio $P_n(x)$ que interpola $f(x)$ em x_0, x_1, \dots, x_n , $(n+1)$ pontos distintos é a seguinte:

(Eq.19)
$$P_n(x) = f[x_0] + (x-x_0) \cdot f[x_0, x_1] + (x-x_0) \cdot (x-x_1) \cdot f[x_0, x_1, x_2] + \dots$$

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

Onde

	ORDEM
$f[x_0] = f(x_0) = y_0$	0
$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$	1
$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$	2
$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0}$	3
\vdots	\vdots
$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$	n

$f[x_0, x_1, \dots, x_n]$ é a DIFERENÇA DIVIDIDA de ordem n da função $f(x)$ sobre os $n+1$ pontos x_0, x_1, \dots, x_n .

4.1.3.1 Tabela Prática (DIFERENÇAS DIVIDIDAS)

x	ordem 0	ordem 1	ordem 2	ordem 3	... ordem n
x_0	$f[x_0]$				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$		\ddots
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$	
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4]$		\ddots
		$f[x_3, x_4]$		\vdots	$f[x_0, \dots, x_n]$
x_4	$f[x_4]$		\vdots		\ddots
		\vdots		$f[x_{n-3}, x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$	
\vdots	\vdots		$f[x_{n-2}, x_{n-1}, x_n]$		
x_n	$f[x_n]$	$f[x_{n-1}, x_n]$			

Exercício 69 Interpolar o ponto $x=1,5$ na tabela abaixo, empregando a forma de Newton.

i	0	1	2	3
x_i	-1	0	1	2
y_i	1	3	1	1

Resolução: $n=3$ é o grau máximo de $P_3(x)$. Tabela de diferenças divididas:

x	ordem 0	ordem 1	ordem 2	ordem 3
-1				
0				
1				
2				

$$P_3(x) = f[x_0] + (x-x_0) \cdot f[x_0, x_1] + (x-x_0)(x-x_1) \cdot f[x_0, x_1, x_2] + (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \cdot f[x_0, x_1, x_2, x_3]$$

$$P_3(x) =$$

$$P_3(x) =$$

$$P_3(x) =$$

4.2 Estudo de erro na interpolação

Sejam $x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n$, $(n+1)$ pontos. Seja $f(x)$ com derivadas até ordem $(n+1)$ para x pertencente ao intervalo $[x_0, x_n]$.

Seja $P_n(x)$ o polinômio interpolador de $f(x)$ nos pontos $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$.

Então, em qualquer ponto x pertencente ao intervalo $[x_0, x_n]$, o erro é dado por:

$$E_n(x) = f(x) - P_n(x)$$

$$\text{(Eq.20)} \quad E_n(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) \cdot \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$$

onde $\xi_x \in (x_0, x_n)$.

Esta fórmula tem uso limitado, pois são raras as situações em que $f^{(n+1)}(x)$ é conhecida e o ponto ξ_x nunca é conhecido.

4.2.1 Estimativa para o Erro

Utilizando a (Eq.20), sendo $f^{(n+1)}(x)$ contínua em $I = [x_0, x_n]$, pode-se escrever:

$$|E_n(x)| = |f(x) - P_n(x)|$$

$$|E_n(x)| \leq \left| \prod_{i=0}^n (x-x_i) \right| \cdot \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}, \text{ onde } M_{n+1} = \max_{x \in I} |f^{(n+1)}(x)|.$$

Ao se construir a tabela de diferenças divididas até ordem $n+1$, pode-se usar o maior valor em módulo desta ordem como aproximação para $\frac{M_{n+1}}{(n+1)!}$ no intervalo $I = [x_0, x_n]$.

Então:

$$\text{(Eq.21)} \quad |E_n(x)| \approx \left| \prod_{i=0}^n (x-x_i) \right| \cdot \max(|Dd|)$$

sendo Dd os valores da tabela de diferenças divididas de ordem $(n+1)$.

Exercício 70 Seja $f(x)$ dada em forma de tabela de valores, como segue:

x	0,2	0,34	0,4	0,52	0,6	0,72
$f(x)$	0,16	0,22	0,27	0,29	0,32	0,37

a) Obter $f(0,47)$ usando um polinômio de grau 2;

b) Dar uma estimativa para o erro.

Resolução: Tabela de diferenças divididas:

x	ordem 0	ordem 1	ordem 2	ordem 3
0,2				
0,34				
0,4				
0,52				
0,6				
0,72				

Deve-se escolher 3 pontos próximos de 0,47 para a obtenção de $P_2(x)$.

$$P_2(x) = f[x_0] + (x - x_0) \cdot f[x_0, x_1] + (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot f[x_0, x_1, x_2]$$

$$P_2(x) =$$

$$P_2(x) =$$

a) $P_2(0,47) = \dots \approx f(0,47)$

b) $|E_n(0,47)| \approx$

$$|E_n(0,47)| \approx \dots$$

Exercício 71 Prove a igualdade seguinte.

$$P_1(x) = f(x_0) \cdot \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1) \cdot \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} = f[x_0] + (x - x_0) \cdot f[x_0, x_1]$$

Resolução:

x	ordem 0	ordem 1
x_0	$f[x_0] = \dots$	$f[x_0, x_1] = \dots$
x_1	$f[x_1] = \dots$	

$$\Rightarrow P_1(x) = f[x_0] + (x - x_0) \cdot f[x_0, x_1]$$

$$P_1(x) =$$

$$\Leftrightarrow P_1(x) = f(x_0) \cdot \frac{x-x_1}{x_0-x_1} + f(x_1) \cdot \frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

4.3 Interpolação inversa: casos existentes

O problema da interpolação inversa consiste em: dado $\bar{y} \in (f(x_0), f(x_n))$, obter \bar{x} , tal que $f(\bar{x}) = \bar{y}$.

São duas, as formas de se obter \bar{x} . A primeira é encontrar \bar{x} tal que $P_n(\bar{x}) = \bar{y}$; A segunda é fazer a própria interpolação inversa, utilizando para isso, os valores de y .

4.3.1 Encontrar \bar{x} tal que $P_n(\bar{x})$

Obter $P_n(x)$ que interpola $f(x)$ em $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$ e em seguida encontrar \bar{x} , tal que $f(\bar{x}) = \bar{y}$.

OBS. 21: \bar{x} obtido desta forma não permite se estimar o erro.

Exercício 72 Encontre \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = 2$ pela tabela abaixo:

x	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
$f(x)$	1,65	1,82	2,01	2,23	2,46	2,72

Resolução:

Fazendo interpolação linear por $x_0 = 0,6$ e $x_1 = 0,7$:

$$P_1(x) = f(x_0) \cdot \frac{x-x_1}{x_0-x_1} + f(x_1) \cdot \frac{x-x_0}{x_1-x_0}$$

$$P_1(x) =$$

$$P_1(x) =$$

$$P_1(x) =$$

$$P_1(\bar{x}) = 2$$

$$\bar{x} = \dots\dots\dots$$

4.3.2 Interpolação inversa

Se $f(x)$ for inversível num intervalo contendo \bar{y} , então $x = f^{-1}(y) = g(y)$.

Condição para a inversão de $f(x)$: f é contínua e monótona crescente (decrecente) num intervalo $[a, b]$.

Dado $f(x)$ contínua em (x_0, x_n) , então $f(x)$ será admitida monótona crescente se $f(x_0) < f(x_1) < \dots < f(x_n)$ e monótona decrescente se $f(x_0) > f(x_1) > \dots > f(x_n)$.

Respeitadas as condições dadas acima, será obtido o polinômio $P_n(y)$ que interpola $g(y) = f^{-1}(y)$ sobre $[y_0, y_n]$.

Exercício 73 Considere a tabela a seguir:

x	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
$y = e^x$	1	1,1052	1,2214	1,3499	1,4918	1,6487

Obter x , tal que $e^x = 1,3165$, usando um processo de interpolação quadrática. Usar a forma de Newton para obter $P_2(y)$. Construir a tabela de diferenças divididas.

Resolução:

y	ordem 0	ordem 1	ordem 2	ordem 3
1				
1,1052				
1,2214				
1,3499				
1,4918				
1,6487				

$$P_2(y) = g[y_0] + (y - y_0) \cdot g[y_0, y_1] + (y - y_0)(y - y_1) \cdot g[y_0, y_1, y_2]$$

$$P_2(y) =$$

$$P_2(1,3165) =$$

Assim, $e^{\dots} \approx 1,3165$

Na calculadora = 1,316359.

Erro cometido:

$$|E_2(y)| \leq |(y - y_0)(y - y_1)(y - y_2)| \cdot \frac{M_3}{3!}$$

$$|E_2(1,3165)| \leq$$

$$|E_2(1,3165)| \leq \Rightarrow M_3 = \max |g'''(y)|, y \in [y_0, y_2].$$

1º Caso: $\frac{M_3}{3!}$ pode ser aproximado por (tabela de diferenças divididas de ordem 3).

$$|E_2(1,3165)| \approx \dots \Rightarrow |E_2(y)| \approx \dots$$

2º Caso: $f(x) = e^x \Rightarrow g(y) = f^{-1}(y) = \ln y$

⇒

Logo: $M_3 =$

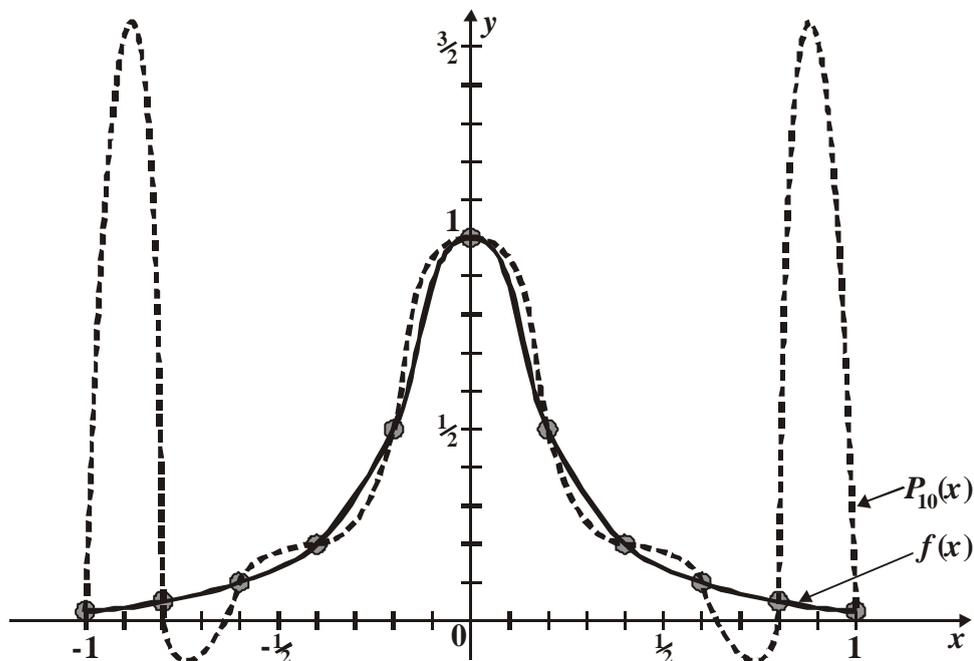
$$|E_2(1,3165)| \leq$$

4.4 Funções spline em interpolação

Considere $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$ tabelada no intervalo $[-1,1]$ nos pontos $x_i = -1 + \frac{2i}{n}$, com $i=0,1,\dots,n$.

No gráfico abaixo, pode ser observada a função $f(x)$ e o polinômio $P_{10}(x)$ que interpola o conjunto discreto de pontos para $n=10$.

x	-1,0	-0,8	-0,6	-0,4	-0,2	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
$f(x)$	0,038	0,059	0,1	0,2	0,5	1,0	0,5	0,2	0,1	0,059	0,038



[Fig. 26]: Gráfico do polinômio $P_{10}(x)$ interpolando $f(x)$.

Em certos casos, a aproximação por $P_n(x)$ pode ser desastrosa. Uma alternativa é interpolar $f(x)$ em grupos de poucos pontos, obtendo-se polinômios de graus menores, e impor condições para que a função de aproximação seja contínua e tenha derivadas contínuas até uma certa ordem.

4.4.1 Função Spline

Considere a função $f(x)$ tabelada nos pontos $x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n$.

Uma função $S_p(x)$ é denominada SPLINE DE GRAU p com nós nos pontos x_i , com $i=0,1,\dots,n$, se satisfaz as 3 seguintes condições:

- 1) Em cada subintervalo $[x_i, x_{i+1}]$, com $i=0,1,\dots,(n-1)$, $S_p(x)$ é um polinômio de grau p representado por $s_i(x)$.
- 2) $S_p(x)$ é contínua e tem derivada contínua até ordem $(p-1)$ em $[a, b]$.
- 3) $S_p(x_i) = f(x_i)$, com $i=0,1,\dots,n$.

Nestes termos, $S_p(x)$ é denominada SPLINE INTERPOLANTE.

4.4.2 Spline linear interpolante

É representada por $S_1(x)$.

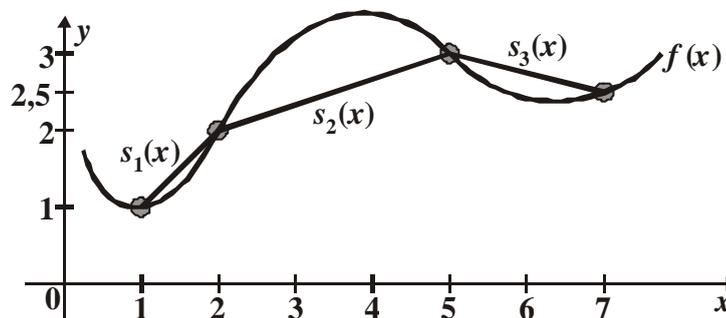
$S_1(x)$ pode ser escrita em cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$, com $i=1,2,\dots,n$ como:

$$(Eq.22) \quad s_i(x) = f(x_{i-1}) \frac{x_i - x}{x_i - x_{i-1}} + f(x_i) \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad \forall x \in [x_{i-1}, x_i].$$

$S_1(x)$ definida dessa forma satisfaz as condições 1), 2) e 3).

Exercício 74. Achar a função spline linear que interpola a função $f(x)$ tabelada a seguir.

	x_0	x_1	x_2	x_3
x	1	2	5	7
$y = f(x)$	1	2	3	2,5



[Fig. 27]: Spline linear interpolando 4 pontos.

Resolução: Pela definição, pode-se definir 3 splines lineares para os 4 pontos: $s_1(x)$, $s_2(x)$ e $s_3(x)$.

$$s_1(x) = y_0 \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

$$s_1(x) = \Rightarrow s_1(x) = \dots, \quad x \in [\dots, \dots].$$

$$s_2(x) = y_1 \frac{x_2 - x}{x_2 - x_1} + y_2 \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

$$s_2(x) = \Rightarrow s_2(x) = \dots, \quad x \in [\dots, \dots].$$

$$s_3(x) = y_2 \frac{x_3 - x}{x_3 - x_2} + y_3 \frac{x - x_2}{x_3 - x_2}$$

$$s_3(x) = \dots \Rightarrow \boxed{s_3(x) = \dots}, x \in [\dots, \dots].$$

Então, no intervalo $[a, b] = [1, 7]$, a spline linear $S_1(x)$ é dada por:

$$S_1(x) =$$

4.4.3 Spline cúbica interpolante

É representada por $\boxed{S_3(x)}$.

A spline linear tem derivada primeira descontínua nos nós. A spline quadrática $S_2(x)$ tem derivadas contínuas até ordem 1, portanto, pode ter picos ou troca abrupta de curvatura nos nós.

A spline cúbica $S_3(x)$ é mais utilizada por ter derivadas primeira e segunda contínuas, que faz $S_3(x)$ ser mais suave nos nós.

Suponha $f(x)$ dada por x_i , com $i=0, 1, \dots, n$.

Tome $S_3(x)$ como spline cúbica de $f(x)$ nos nós x_i , caso existam n polinômios de grau 3 definidos em cada subintervalo k por $s_k(x)$, com $k=1, 2, \dots, n$. Então a spline cúbica $S_3(x)$ deve satisfazer as 5 igualdades seguintes:

- 1) $S_3(x) = s_k(x)$ para $x \in [x_{k-1}, x_k]$, $k=1, 2, \dots, n$.
- 2) $S_3(x_i) = f(x_i)$, com $i=0, 1, \dots, n$.
- 3) $s_k(x_k) = s_{k+1}(x_k)$, $k=1, 2, \dots, (n-1)$.
- 4) $s_k'(x_k) = s_{k+1}'(x_k)$, $k=1, 2, \dots, (n-1)$.
- 5) $s_k''(x_k) = s_{k+1}''(x_k)$, $k=1, 2, \dots, (n-1)$.

Em cada intervalo $[x_{k-1}, x_k]$, $s_k(x)$ será dada por:

$$\text{(Eq.23)} \quad \boxed{s_k(x) = a_k(x - x_k)^3 + b_k(x - x_k)^2 + c_k(x - x_k) + d_k}, \text{ com } k=1, 2, \dots, n.$$

São 4 coeficientes para cada k à serem determinados.

Tome a notação $h_k = x_k - x_{k-1}$, para $x = x_{k-1}$.

Condição 1) : é satisfeita pela definição de $s_k(x)$.

Para a condição 2) , tem-se as equações:

$$\text{(Eq.24)} \quad d_k = f(x_k) = s_k(x_k), \quad k=1, 2, \dots, n.$$

$$\text{(Eq.25)} \quad s_1(x_0) = f(x_0) \Rightarrow -a_1 h_1^3 + b_1 h_1^2 - c_1 h_1 + d_1 = f(x_0), \quad k=1.$$

Condição 3) para $k=1, 2, \dots, (n-1)$.

$$s_{k+1}(x_k) = f(x_k)$$

$$(Eq.26) \quad -a_{k+1}h_{k+1}^3 + b_{k+1}h_{k+1}^2 - c_{k+1}h_{k+1} + d_{k+1} = f(x_k).$$

Para as condições 4) e 5), tome as derivadas:

$$(Eq.27) \quad s_k'(x) = 3a_k(x-x_k)^2 + 2b_k(x-x_k) + c_k.$$

$$(Eq.28) \quad s_k''(x) = 6a_k(x-x_k) + 2b_k.$$

Para $x = x_k \Rightarrow s_k''(x_k) = 2b_k$. Assim, o coeficiente b_k é dado por:

$$(Eq.29) \quad b_k = \frac{s_k''(x_k)}{2}.$$

Para $x = x_{k-1} \Rightarrow s_k''(x_{k-1}) = -6a_k h_k + 2b_k$.

$$a_k = \frac{2b_k - s_k''(x_{k-1})}{6h_k} = \frac{s_k''(x_k) - s_k''(x_{k-1})}{6h_k}.$$

Impondo a condição 5), $s_k''(x_{k-1}) = s_{k-1}''(x_{k-1})$, obtém-se:

$$(Eq.30) \quad a_k = \frac{s_k''(x_k) - s_{k-1}''(x_{k-1})}{6h_k}, \text{ com } s_0''(x_0) \text{ arbitrária.}$$

Na obtenção de c_k , utilizam-se as equações (Eq.25) e (Eq.26):

$$c_k = \frac{-f(x_{k-1}) - a_k h_k^3 + b_k h_k^2 + d_k}{h_k}, \quad d_k = f(x_k)$$

$$c_k = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{h_k} - (a_k h_k^2 - b_k h_k), \text{ substituindo } a_k \text{ e } b_k \text{ obtém-se:}$$

$$c_k = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{h_k} - \left(\frac{s_k''(x_k) - s_{k-1}''(x_{k-1})}{6} h_k - \frac{s_k''(x_k)}{2} h_k \right)$$

Daí, c_k pode ser dado por:

$$(Eq.31) \quad c_k = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{h_k} + \frac{2s_k''(x_k) \cdot h_k + s_{k-1}''(x_{k-1}) \cdot h_k}{6}.$$

Na obtenção dos coeficientes, tome $y_k = f(x_k)$ e $g_k = s_k''(x_k)$.

$$(Eq.32) \quad a_k = \frac{g_k - g_{k-1}}{6h_k}$$

$$(Eq.33) \quad b_k = \frac{g_k}{2}$$

$$(Eq.34) \quad c_k = \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} + \frac{2h_k g_k + g_{k-1} h_k}{6}$$

$$(Eq.35) \quad d_k = y_k.$$

Impondo a última condição 4) , $s_k^i(x_k) = s_{k+1}^i(x_k)$, com $k=1,2,\dots,(n-1)$, conclui-se que:

Para $x = x_k \Rightarrow s_k^i(x_k) = c_k$, então:

$$c_k = 3a_{k+1}h_{k+1}^2 - 2b_{k+1}h_{k+1} + c_{k+1}$$

$$\Rightarrow c_{k+1} = c_k - 3a_{k+1}h_{k+1}^2 + 2b_{k+1}h_{k+1}$$

Fazendo-se algumas substituições, através das equações (Eq.32), (Eq.33) e (Eq.34):

$$\frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}} + \frac{2h_{k+1}g_{k+1} + g_k h_{k+1}}{6} = \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} + \frac{2h_k g_k + g_{k-1} h_k}{6} - 3 \frac{g_{k+1} - g_k}{6} h_{k+1} + 2 \frac{g_{k+1} h_{k+1}}{2}$$

Daí, chega-se a (Eq.36):

(Eq.36)
$$h_k g_{k-1} + 2(h_k + h_{k+1})g_k + h_{k+1}g_{k+1} = 6 \left(\frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}} - \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} \right)$$
, com $k=1,2,\dots,(n-1)$.

A equação (Eq.36) é um sistema de equações lineares $A g = b$, onde $k=1,2,\dots,(n-1)$.

A ordem do sistema é: $A_{(n-1) \times (n+1)}$, $g_{(n+1) \times 1}$ e $b_{(n-1) \times 1}$.

Pela variação de k , o sistema $A g = b$ é indeterminado. Para se resolver o sistema, de forma única, é necessário impor mais duas condições, apresentadas nas três alternativas a seguir.

(1ª) Spline Natural \Rightarrow nos extremos, $S_3(x_0)$ é aproximadamente linear.

$$S_3''(x_0) = g_0 = 0$$

$$S_3''(x_n) = g_n = 0$$

(2ª) Nos extremos, $S_3(x)$ é aproximadamente parábola.

$$g_0 = g_1$$

$$g_n = g_{n-1}$$

(3ª) Nos extremos, é dada uma inclinação I_0 e I_n para $S_3(x)$.

$$S_3'(x_0) = I_0 \Rightarrow s_1^i(x_0) = I_0 \Rightarrow 3a_1 h_1^2 - 2b_1 h_1 + c_1 = I_0$$

$$S_3'(x_n) = I_n \Rightarrow s_n^i(x_n) = I_n \Rightarrow c_n = I_n$$

Nas alternativas (1ª) e (2ª), são eliminadas duas variáveis, g_0 e g_n . Assim $A g = b$ é SPD, sendo que, o sistema é dado na ordem: $A_{(n-1) \times (n-1)}$, $g_{(n-1) \times 1}$ e $b_{(n-1) \times 1}$.

Na alternativa (3ª), são acrescentadas duas equações. Assim $A g = b$ é SPD, sendo que, o sistema é dado na ordem: $A_{(n+1) \times (n+1)}$, $g_{(n+1) \times 1}$ e $b_{(n+1) \times 1}$.

Exercício 75 Encontrar uma aproximação para $f(0,25)$ por spline cúbica natural, interpolando a tabela:

	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
x	0	0,5	1,0	1,5	2,0
$y = f(x)$	3	1,8616	-0,5571	-4,1987	-9,0536

Resolução: $n=4$, logo, procura-se $s_1(x)$, $s_2(x)$, $s_3(x)$ e $s_4(x)$.

Spline Natural $\Rightarrow k=1,2,\dots,(n-1) \Rightarrow k=1,2,3 \Rightarrow$ Utilizando a (Eq.36), segue que:

$$(Eq.36) \Rightarrow h_k g_{k-1} + 2(h_k + h_{k+1}) g_k + h_{k+1} g_{k+1} = 6 \left(\frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}} - \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} \right)$$

Desenvolvendo o sistema $A g = b$:

$$\begin{cases} \dots\dots g_0 + \dots\dots g_1 + \dots\dots g_2 = \dots\dots \\ \dots\dots g_1 + \dots\dots g_2 + \dots\dots g_3 = \dots\dots \\ \dots\dots g_2 + \dots\dots g_3 + \dots\dots g_4 = \dots\dots \end{cases}$$

$g_0 = g_4 = \dots\dots$ (Spline Natural).

Então,

$$A g = b \Rightarrow \begin{bmatrix} \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots \\ \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots \\ \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{bmatrix} = \dots\dots * \begin{bmatrix} \dots\dots \\ \dots\dots \\ \dots\dots \end{bmatrix}.$$

Substituindo os valores:

$$\begin{bmatrix} \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots \\ \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots \\ \dots\dots & \dots\dots & \dots\dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dots\dots \\ \dots\dots \\ \dots\dots \end{bmatrix} \Rightarrow g = \begin{bmatrix} \dots\dots \\ \dots\dots \\ \dots\dots \end{bmatrix}.$$

Forma geral de $s_i(x) \Rightarrow s_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i$, com $i=1,2,3,4$.

$$f(0,25) \approx s_1(0,25)$$

$$a_1 = \frac{g_1 - g_0}{6h} = \dots\dots \Rightarrow a_1 = \dots\dots$$

$$b_1 = \frac{g_1}{2} = \dots\dots \Rightarrow b_1 = \dots\dots$$

$$c_1 = \frac{y_1 - y_0}{h} + \frac{2hg_1 + g_0h}{6} = \dots\dots \Rightarrow c_1 = \dots\dots$$

$$d_1 = y_1 = \dots\dots \Rightarrow d_1 = \dots\dots$$

Logo, $s_1(0,25) = \dots\dots$

$$\Rightarrow s_1(0,25) = \dots\dots \approx f(0,25).$$

Considerando os próximos 5 exercícios, encontrar uma aproximação para $f(x)$ por spline cúbica natural, interpolando a tabela:

	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
x	0	0,5	1,0	1,5	2,0
$y = f(x)$	3	1,8616	-0,5571	-4,1987	-9,0536

$n=4$, logo, procura-se $s_1(x)$, $s_2(x)$, $s_3(x)$ e $s_4(x)$.

Do exercício anterior, a forma geral de $s_i(x)$ é dada por:

$$s_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i, \text{ com } i=1,2,3,4.$$

Exercício 76 $f(0,8)$.

Resolução:

$$f(0,8) \approx s_2(0,8)$$

$$a_2 = \frac{g_2 - g_1}{6h} = \dots \Rightarrow a_2 = \dots$$

$$b_2 = \frac{g_2}{2} = \dots \Rightarrow b_2 = \dots$$

$$c_2 = \frac{y_2 - y_1}{h} + \frac{2hg_2 + g_1h}{6} = \dots \Rightarrow c_2 = \dots$$

$$d_2 = y_2 = \dots \Rightarrow d_2 = \dots$$

$$\text{Logo, } s_2(0,8) = \dots$$

$$\Rightarrow s_2(0,8) = \dots \approx f(0,8).$$

Exercício 77 $f(1,1)$.

Resolução:

$$f(1,1) \approx s_3(1,1)$$

$$a_3 = \frac{g_3 - g_2}{6h} = \dots \Rightarrow a_3 = \dots$$

$$b_3 = \frac{g_3}{2} = \dots \Rightarrow b_3 = \dots$$

$$c_3 = \frac{y_3 - y_2}{h} + \frac{2hg_3 + g_2h}{6} = \dots \Rightarrow c_3 = \dots$$

$$d_3 = y_3 = \dots \Rightarrow d_3 = \dots$$

$$\text{Logo, } s_3(1,1) = -0,7137(-0,4)^3 - 3,1260(-0,4)^2 - 8,6678(-0,4) - 4,1987$$

$$\Rightarrow s_3(1,1) = \dots \approx f(1,1).$$

Exercício 78 $f(1,2)$.**Resolução:**

$$f(1,2) \approx s_3(1,2)$$

$$a_3 = \frac{g_3 - g_2}{6h} = \dots \Rightarrow a_3 = \dots$$

$$b_3 = \frac{g_3}{2} = \dots \Rightarrow b_3 = \dots$$

$$c_3 = \frac{y_3 - y_2}{h} + \frac{2hg_3 + g_2h}{6} = \dots \Rightarrow c_3 = \dots$$

$$d_3 = y_3 = \dots \Rightarrow d_3 = \dots$$

$$\text{Logo, } s_3(1,2) = \dots$$

$$\Rightarrow s_3(1,2) = \dots \approx f(1,2).$$

Exercício 79 $f(1,3)$.**Resolução:**

$$f(1,3) \approx s_3(1,3)$$

$$a_3 = \frac{g_3 - g_2}{6h} = \dots \Rightarrow a_3 = \dots$$

$$b_3 = \frac{g_3}{2} = \dots \Rightarrow b_3 = \dots$$

$$c_3 = \frac{y_3 - y_2}{h} + \frac{2hg_3 + g_2h}{6} = \dots \Rightarrow c_3 = \dots$$

$$d_3 = y_3 = \dots \Rightarrow d_3 = \dots$$

$$\text{Logo, } s_3(1,3) = \dots$$

$$\Rightarrow s_3(1,3) = \dots \approx f(1,3).$$

Exercício 80 $f(1,7)$.**Resolução:**

$$f(1,7) \approx s_4(1,7)$$

$$a_4 = \frac{g_4 - g_3}{6h} = \dots \Rightarrow a_4 = \dots$$

$$b_4 = \frac{g_4}{2} = \dots \Rightarrow b_4 = \dots$$

$$c_4 = \frac{y_4 - y_3}{h} + \frac{2hg_4 + g_3h}{6} = \dots \Rightarrow c_4 = \dots$$

$$d_4 = y_4 = \dots \Rightarrow d_4 = \dots$$

$$\text{Logo, } s_4(1,7) = \dots$$

$$\Rightarrow s_4(1,7) = \dots \approx f(1,7).$$

5 Ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados

5.1 Introdução

Uma forma de se trabalhar com uma função definida por uma tabela de valores é a interpolação. Contudo, a interpolação pode não ser aconselhável quando:

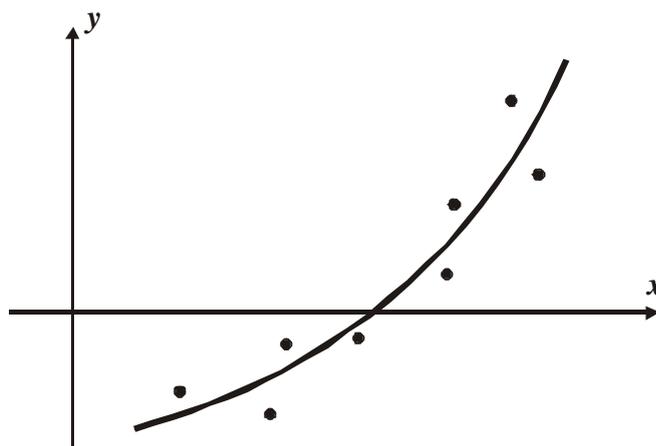
É preciso obter um valor aproximado da função em algum ponto fora do intervalo de tabelamento (extrapolação).

Os valores tabelados são resultado de experimentos físicos, pois estes valores poderão conter erros inerentes que, em geral, não são previsíveis.

Surge então a necessidade de se ajustar a estas funções tabeladas uma função que seja uma “boa aproximação” para as mesmas e que nos permita “extrapolar” com certa margem de segurança.

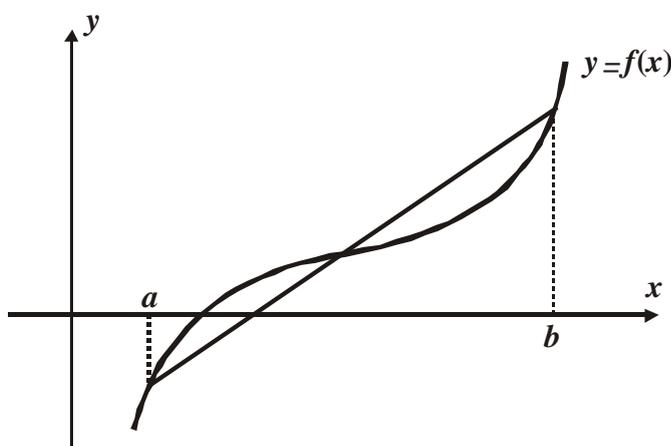
Assim, o objetivo deste processo é aproximar uma função f por outra função g , escolhida de uma família de funções em duas situações distintas:

Domínio discreto: quando a função f é dada por uma tabela de valores.



[Fig. 28]: Domínio discreto

Domínio contínuo: quando a função f é dada por sua forma analítica.



[Fig. 29]: Domínio contínuo

5.2 Caso Discreto

O problema do ajuste de curvas no caso em que se tem uma tabela de pontos:

x_1	x_2	x_3	...	x_m
$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$...	$f(x_m)$

com $x_1, x_2, x_3, \dots, x_m \in [a, b]$, consiste em: “escolhidas” n funções contínuas $g_1(x), g_2(x), g_3(x), \dots, g_n(x)$, contínuas em $[a, b]$, obter n constantes $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$ tais que a função $g(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) + \alpha_3 g_3(x) + \dots + \alpha_n g_n(x)$ se aproxime ao máximo de $f(x)$.

Este modelo matemático é linear pois os coeficientes que devem ser determinados $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$ aparecem linearmente, embora as funções $g_1(x), g_2(x), g_3(x), \dots, g_n(x)$ possam ser não lineares.

Surge então a primeira pergunta: Como escolher as funções contínuas $g_1(x), g_2(x), g_3(x), \dots, g_n(x)$?

Esta escolha pode ser feita observando o gráfico dos pontos tabelados (diagrama de dispersão) ou baseando-se em fundamentos teóricos do experimento que forneceu a tabela.

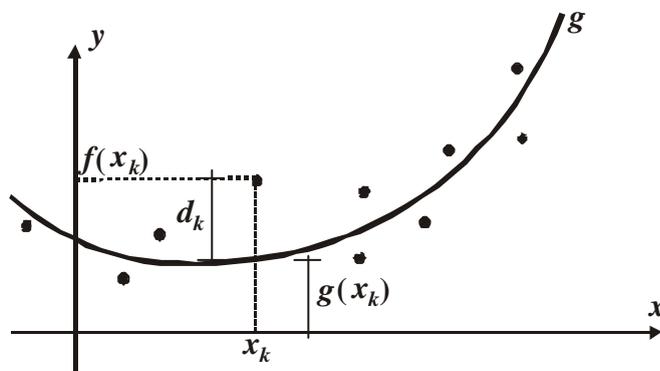
Seja $d_k = f(x_k) - g(x_k)$ o desvio em x_k .

O método dos mínimos quadrados consiste em escolher os coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$ de tal forma que a soma dos quadrados dos desvios seja mínima, isto é:

$$\sum_{k=1}^m d_k^2 = \sum_{k=1}^m [f(x_k) - g(x_k)]^2 \text{ deve ser mínimo.}$$

Assim, os coeficientes $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$ que fazem com que $g(x)$ se aproxime ao máximo de $f(x)$, são os que minimizam a função:

$$F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n) = \sum_{k=1}^m [f(x_k) - g(x_k)]^2 = \sum_{k=1}^m [f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \alpha_3 g_3(x_k) - \dots - \alpha_n g_n(x_k)]^2.$$



[Fig. 30]: O método dos mínimos quadrados

Para isto é necessário que:

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_j}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n) = 0, \quad j=1, 2, 3, \dots, n, \text{ isto é:}$$

$$\frac{\partial F}{\partial \alpha_j}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n) =$$

$$2 \cdot \sum_{k=1}^m [f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \dots - \alpha_n g_n(x_k)] \cdot [-g_j(x_k)] = 0, \quad j=1, 2, 3, \dots, n$$

ou

$$\sum_{k=1}^m [f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \dots - \alpha_n g_n(x_k)] \cdot [g_j(x_k)] = 0,$$

$$j=1, 2, 3, \dots, n$$

Assim, tem-se o seguinte sistema de n equações lineares com n incógnitas $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$:

$$(\text{Eq.37}) \quad \begin{cases} \sum_{k=1}^m [f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \dots - \alpha_n g_n(x_k)] \cdot [g_1(x_k)] = 0 \\ \sum_{k=1}^m [f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \dots - \alpha_n g_n(x_k)] \cdot [g_2(x_k)] = 0 \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^m [f(x_k) - \alpha_1 g_1(x_k) - \alpha_2 g_2(x_k) - \dots - \alpha_n g_n(x_k)] \cdot [g_n(x_k)] = 0 \end{cases}$$

Que é equivalente a:

$$(\text{Eq.38}) \quad \begin{cases} \left[\sum_{k=1}^m g_1(x_k) \cdot g_1(x_k) \right] \cdot \alpha_1 + \dots + \left[\sum_{k=1}^m g_1(x_k) \cdot g_n(x_k) \right] \cdot \alpha_n = \sum_{k=1}^m g_1(x_k) \cdot f(x_k) \\ \left[\sum_{k=1}^m g_2(x_k) \cdot g_1(x_k) \right] \cdot \alpha_1 + \dots + \left[\sum_{k=1}^m g_2(x_k) \cdot g_n(x_k) \right] \cdot \alpha_n = \sum_{k=1}^m g_2(x_k) \cdot f(x_k) \\ \vdots \\ \left[\sum_{k=1}^m g_n(x_k) \cdot g_1(x_k) \right] \cdot \alpha_1 + \dots + \left[\sum_{k=1}^m g_n(x_k) \cdot g_n(x_k) \right] \cdot \alpha_n = \sum_{k=1}^m g_n(x_k) \cdot f(x_k) \end{cases}$$

As equações deste sistema linear são chamadas de equações normais.

Este sistema pode ser escrito na forma matricial $A \cdot \alpha = b$:

$$\begin{cases} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 + \dots + a_{1n}\alpha_n = b_1 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 + \dots + a_{2n}\alpha_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}\alpha_1 + a_{n2}\alpha_2 + \dots + a_{nn}\alpha_n = b_n \end{cases}$$

onde $A = (a_{ij})$ tal que $a_{ij} = \sum_{k=1}^m g_i(x_k) \cdot g_j(x_k) = \sum_{k=1}^m g_j(x_k) \cdot g_i(x_k) = a_{ji}$, ou seja, A é uma matriz simétrica;

$$\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n]^T \text{ e } b = [b_1, b_2, \dots, b_n]^T \text{ é tal que } b_i = \sum_{k=1}^m g_i(x_k) \cdot f(x_k).$$

Lembrando que, dados os vetores x e $y \in \mathfrak{R}^m$ o número real $\langle x, y \rangle = \sum_{k=1}^m x_k \cdot y_k$ é chamado de produto escalar de x por y , e usando esta notação no sistema normal $A \cdot \alpha = b$, tem-se: $a_{ij} = \langle \bar{g}_i, \bar{g}_j \rangle$ e $b_i = \langle \bar{g}_i, \bar{f} \rangle$ onde:

$$\bar{g}_l \text{ é o vetor } [g_l(x_1) \ g_l(x_2) \ g_l(x_3) \ \dots \ g_l(x_m)]^T \text{ e}$$

$$\bar{f} \text{ é o vetor } [f(x_1) \ f(x_2) \ f(x_3) \ \dots \ f(x_m)]^T.$$

Desta forma o sistema na forma matricial fica:

$$(Eq.39) \begin{bmatrix} \langle \bar{g}_1, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_1, \bar{g}_2 \rangle & \dots & \langle \bar{g}_1, \bar{g}_n \rangle \\ \langle \bar{g}_2, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_2, \bar{g}_2 \rangle & \dots & \langle \bar{g}_2, \bar{g}_n \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \bar{g}_n, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_n, \bar{g}_2 \rangle & \dots & \langle \bar{g}_n, \bar{g}_n \rangle \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \bar{g}_1, \bar{f} \rangle \\ \langle \bar{g}_2, \bar{f} \rangle \\ \vdots \\ \langle \bar{g}_n, \bar{f} \rangle \end{bmatrix}$$

Demonstra-se que, se as funções $g_1(x), g_2(x), g_3(x), \dots, g_n(x)$ forem tais que os vetores $\bar{g}_1, \bar{g}_2, \bar{g}_3, \dots, \bar{g}_n$, sejam linearmente independentes (LI), então $\det A \neq 0$ e o sistema de equações é possível e determinado (SPD). Demonstra-se ainda que a solução única deste sistema, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$ é o ponto em que a função $F(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n)$ atinge seu valor mínimo.

OBS. 22: Se os vetores $\bar{g}_1, \bar{g}_2, \bar{g}_3, \dots, \bar{g}_n$, forem ortogonais entre si, isto é, se $\langle \bar{g}_i, \bar{g}_j \rangle = 0$ se $i \neq j$ e $\langle \bar{g}_i, \bar{g}_j \rangle \neq 0$ se $i = j$, a matriz dos coeficientes A será uma matriz diagonal, o que facilita a resolução do sistema $A \cdot \alpha = b$.

Exercício 81 (Regressão Linear) Ajustar os dados da tabela abaixo através de uma reta.

i	1	2	3	4	5
x_i	1,3	3,4	5,1	6,8	8,0
$f(x_i)$	2,0	5,2	3,8	6,1	5,8

Resolução: Fazendo $g(x) = \alpha_1 \cdot g_1(x) + \alpha_2 \cdot g_2(x)$ e considerando $g_1(x) = \dots$ e $g_2(x) = \dots$, tem-se: $g(x) = \dots$.

Assim, a reta que melhor se ajusta aos valores da tabela terá coeficientes α_1 e α_2 , que são solução do seguinte sistema na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \langle \bar{g}_1, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_1, \bar{g}_2 \rangle \\ \langle \bar{g}_2, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_2, \bar{g}_2 \rangle \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \bar{g}_1, \bar{f} \rangle \\ \langle \bar{g}_2, \bar{f} \rangle \end{bmatrix}$$

$$\bar{g}_1 = [\dots \dots \dots \dots \dots]^T$$

$$\bar{g}_2 = [\dots \dots \dots \dots \dots]^T$$

$$\bar{f} = [\dots \dots \dots \dots \dots]^T$$

Logo a equação da parábola procurada é: $g(x) = \dots\dots\dots$

Exercício 83 Ajustar os dados da tabela abaixo por um polinômio do segundo grau $g(x) = \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x + \alpha_3 \cdot x^2$.

i	1	2	3	4
x_i	-2	-1	1	2
$f(x_i)$	1	-3	1	9

Resolução: Neste caso tem-se que: $g_1(x) = \dots\dots\dots$, $g_2(x) = \dots\dots\dots$ e $g_3(x) = \dots\dots\dots$

$$\begin{bmatrix} \langle \bar{g}_1, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_1, \bar{g}_2 \rangle & \langle \bar{g}_1, \bar{g}_3 \rangle \\ \langle \bar{g}_2, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_2, \bar{g}_2 \rangle & \langle \bar{g}_2, \bar{g}_3 \rangle \\ \langle \bar{g}_3, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_3, \bar{g}_2 \rangle & \langle \bar{g}_3, \bar{g}_3 \rangle \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \bar{g}_1, \bar{f} \rangle \\ \langle \bar{g}_2, \bar{f} \rangle \\ \langle \bar{g}_3, \bar{f} \rangle \end{bmatrix}$$

$$\bar{g}_1 = [\dots\dots\dots]^T$$

$$\bar{g}_2 = [\dots\dots\dots]^T$$

$$\bar{g}_3 = [\dots\dots\dots]^T$$

$$\bar{f} = [\dots\dots\dots]^T$$

$$\langle \bar{g}_1, \bar{g}_1 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_1, \bar{g}_2 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_2, \bar{g}_1 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_1, \bar{g}_3 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_3, \bar{g}_1 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_2, \bar{g}_2 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_2, \bar{g}_3 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_3, \bar{g}_2 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_3, \bar{g}_3 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_1, \bar{f} \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_2, \bar{f} \rangle = \dots\dots\dots$$

$$\langle \bar{g}_3, \bar{f} \rangle = \dots\dots\dots$$

Assim,

Logo a equação da parábola procurada é:

$$g(x) = \dots\dots\dots$$

Exercício 84 Aproximar a função $f(x) = 4x^3$ por um polinômio do primeiro grau, uma reta, no intervalo $[0,1]$.

Resolução:

$g(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) = \dots\dots\dots$, isto é, $g_1(x) = \dots\dots\dots$ e $g_2(x) = \dots\dots\dots$.

$$A\alpha = b \Rightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \langle g_1, g_1 \rangle & \langle g_1, g_2 \rangle \\ \langle g_2, g_1 \rangle & \langle g_2, g_2 \rangle \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f, g_1 \rangle \\ \langle f, g_2 \rangle \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \langle g_1, g_1 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$a_{12} = \langle g_1, g_2 \rangle = \langle g_2, g_1 \rangle = a_{21} = \dots\dots\dots$$

$$a_{22} = \langle g_2, g_2 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$b_1 = \langle f, g_1 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$b_2 = \langle f, g_2 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$A\alpha = b \Rightarrow$$

Logo:

$$\boxed{g(x) = \dots\dots\dots} \approx f(x) = 4x^3 \text{ em } [0,1].$$

Exercício 85 Aproximar a função $f(x) = e^x$ no intervalo $[0,1]$ por uma reta.

Resolução:

$g(x) = \alpha_1 g_1(x) + \alpha_2 g_2(x) = \dots\dots\dots$, isto é, $g_1(x) = \dots\dots\dots$ e $g_2(x) = \dots\dots\dots$.

$$A\alpha = b \Rightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \langle g_1, g_1 \rangle & \langle g_1, g_2 \rangle \\ \langle g_2, g_1 \rangle & \langle g_2, g_2 \rangle \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f, g_1 \rangle \\ \langle f, g_2 \rangle \end{bmatrix}$$

$$a_{11} = \langle g_1, g_1 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$a_{12} = \langle g_1, g_2 \rangle = \langle g_2, g_1 \rangle = a_{21} = \dots\dots\dots$$

$$a_{22} = \langle g_2, g_2 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$b_1 = \langle f, g_1 \rangle = \dots\dots\dots$$

$$b_2 = \langle f, g_2 \rangle = \dots\dots\dots$$

Usando o método de integração por partes em $b_2: \int u \cdot dv = u \cdot v - \int v \cdot du$

$$g(x) = \dots \approx f(x) = e^x \text{ em } [0,1].$$

5.4 Família de Funções Não Lineares nos Parâmetros

Em alguns casos, a família de funções escolhidas pode ser não linear nos parâmetros, isto é, $g(x)$ não é da forma $\sum_{k=1}^m \alpha_k \cdot g_k(x)$. Nestes casos é preciso efetuar uma “linearização”, através de transformações convenientes.

Exemplos:

$$1^{\text{a}}) f(x) \approx \alpha_1 \cdot e^{\alpha_2 x} = g(x)$$

$$\ln f(x) \approx \ln \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x = G(x).$$

$$\text{Fazendo } \ln \alpha_1 = a_1 \text{ e } \alpha_2 = a_2, \text{ tem-se: } G(x) = a_1 + a_2 \cdot x,$$

Desta forma $G(x) \approx \ln f(x)$, sendo que $G(x)$ é linear nos parâmetros a_1 e a_2 .

$$2^{\text{a}}) f(x) \approx \frac{1}{\alpha_1 + \alpha_2 \cdot x} = g(x)$$

$$\frac{1}{f(x)} \approx \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x = G(x).$$

$$\text{Fazendo } \alpha_1 = a_1 \text{ e } \alpha_2 = a_2, \text{ tem-se: } G(x) = a_1 + a_2 \cdot x,$$

Desta forma $G(x) \approx \frac{1}{f(x)}$, sendo que $G(x)$ é linear nos parâmetros a_1 e a_2 .

$$3^{\text{a}}) f(x) \approx \sqrt{\alpha_1 + \alpha_2 \cdot x} = g(x)$$

$$f^2(x) \approx \alpha_1 + \alpha_2 \cdot x = G(x).$$

$$\text{Fazendo } \alpha_1 = a_1 \text{ e } \alpha_2 = a_2, \text{ tem-se: } G(x) = a_1 + a_2 \cdot x,$$

Desta forma $G(x) \approx f^2(x)$, sendo que $G(x)$ é linear nos parâmetros a_1 e a_2 .

Exercício 86 Ajustar os dados da tabela que segue por uma função da forma $g(x) = \alpha_1 \cdot e^{\alpha_2 x}$.

x	0	1	2
$f(x)$	1	0,5	0,7

Resolução: Desta forma, “linearizando” a função $g(x) = \alpha_1 \cdot e^{\alpha_2 x}$, como no primeiro exemplo anterior, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \langle \bar{g}_1, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_1, \bar{g}_2 \rangle \\ \langle \bar{g}_2, \bar{g}_1 \rangle & \langle \bar{g}_2, \bar{g}_2 \rangle \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle \dots, \bar{g}_1 \rangle \\ \langle \dots, \bar{g}_2 \rangle \end{bmatrix}$$

$\bar{g}_1 = [\dots \dots \dots]^T$
 $\bar{g}_2 = [\dots \dots \dots]^T$
 $\dots = [\dots \dots \dots]^T$
 $\langle \bar{g}_1, \bar{g}_1 \rangle = \dots$
 $\langle \bar{g}_1, \bar{g}_2 \rangle = \dots$
 $\langle \bar{g}_2, \bar{g}_1 \rangle = \langle \bar{g}_1, \bar{g}_2 \rangle = \dots$
 $\langle \bar{g}_2, \bar{g}_2 \rangle = \dots$
 $\langle \dots, \bar{g}_1 \rangle = \dots$
 $\langle \dots, \bar{g}_2 \rangle = \dots$

$\Rightarrow g(x) = \boxed{\dots} \approx f(x).$

Os parâmetros assim obtidos não são ótimos dentro do critério dos mínimos quadrados, isto porque estamos ajustando o problema linearizado por mínimos quadrados e não o problema original. Portanto, os parâmetros a_1 e a_2 do exemplo, são os que ajustam a função $G(x)$ à função $\ln f(x)$, no sentido dos mínimos quadrados. Não se pode afirmar que os parâmetros α_1 e α_2 (obtidos de a_1 e a_2) são os que ajustam $g(x) = \alpha_1 \cdot e^{\alpha_2 x}$ à $f(x)$, dentro do critério dos mínimos quadrados.

6 Integração Numérica

Se uma função $f(x)$ é contínua em um intervalo $[a, b]$ e sua primitiva $F(x)$ é conhecida, então

$$(Eq.41) \quad \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

onde $F'(x) = f(x)$.

Por outro lado, nem sempre se tem $F(x)$ e em alguns casos, a função a ser integrada é dada por meio de tabela de pontos. Neste caso, torna-se necessária a utilização de métodos numéricos.

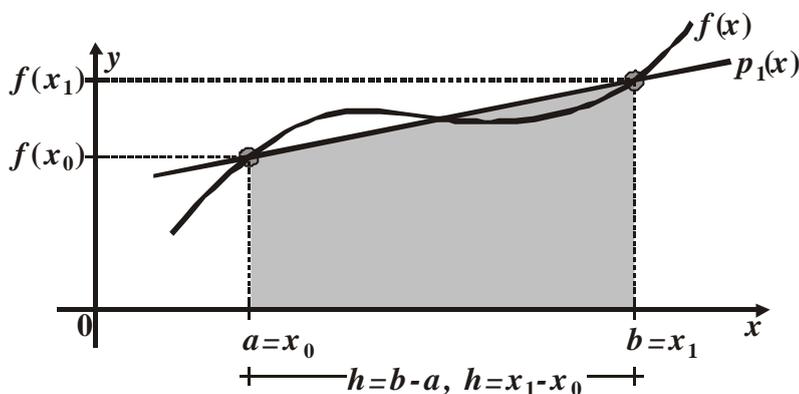
A idéia básica da integração numérica é a substituição da função $f(x)$ por um polinômio que a aproxime no intervalo $[a, b]$. Assim o problema fica resolvido pela integração de polinômios, o que é trivial de se fazer.

6.1 Fórmulas de Newton-Cotes

Neste caso, o polinômio que interpola $f(x)$ o faz em pontos igualmente espaçados de $[a, b]$.

Fórmulas êchadas: $x_0 = a$, $x_n = b$ e $\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$, sendo A_i coeficientes determinados de acordo com o grau do polinômio aproximador.

6.1.1 Regra dos Trapézios



[Fig. 32]: Regra dos trapézios.

A integral de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$ é aproximada pela área de um trapézio.

$$(Eq.42) \quad \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] = I_T$$

A aproximação de $f(x)$ pela fórmula de Lagrange é $p_1(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x)$

com $L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}$ e $L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$, logo:

$$(Eq.43) \quad p_1(x) = \frac{x - x_1}{-h} f(x_0) + \frac{x - x_0}{h} f(x_1)$$

6.1.1.1 Estimativa para o Erro

$$f(x) = p_1(x) + E(x)$$

$$E_n(x) = (x-x_0) \cdot \dots \cdot (x-x_n) \cdot \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!}$$

$$E(x) = (x-x_0) \cdot (x-x_1) \cdot \frac{f''(\xi_x)}{2}, \quad \xi_x \in (x_0, x_1)$$

$$f(x) = p_1(x) + (x-x_0) \cdot (x-x_1) \cdot \frac{f''(\xi_x)}{2}$$

Integrando $f(x)$:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} p_1(x) dx + \int_{x_0}^{x_1} (x-x_0)(x-x_1) \frac{f''(\xi_x)}{2} dx, \text{ com } \begin{cases} x_0 = a \\ x_1 = b \end{cases}$$

$$I_T = \int_a^b p_1(x) dx$$

$$E_T = \int_a^b (x-a)(x-b) \frac{f''(\xi_x)}{2} dx$$

$$E_T = \frac{1}{2} f''(c) \int_a^b (x-a)(x-b) dx$$

$$E_T = \frac{1}{2} f''(c) \frac{(b-a)^3}{6}$$

$$\text{(Eq.44)} \quad E_T = \frac{h^3}{12} f''(c) \text{ com } c \in (a, b)$$

ou

$$\text{(Eq.45)} \quad |E_T| \leq \frac{h^3}{12} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$

OBS. 23:

$$\int_a^b (x^2 - a x - b x + a b) dx = \left[\frac{x^3}{3} - \frac{ax^2}{2} - \frac{bx^2}{2} \right]_a^b = \frac{b^3 - 3ab^2 + 3a^2b - a^3}{6} = \frac{(b-a)^3}{6}$$

Exercício 87 Calcular $\int_1^9 \sqrt{6x-5} dx$, usando a regra dos trapézios.

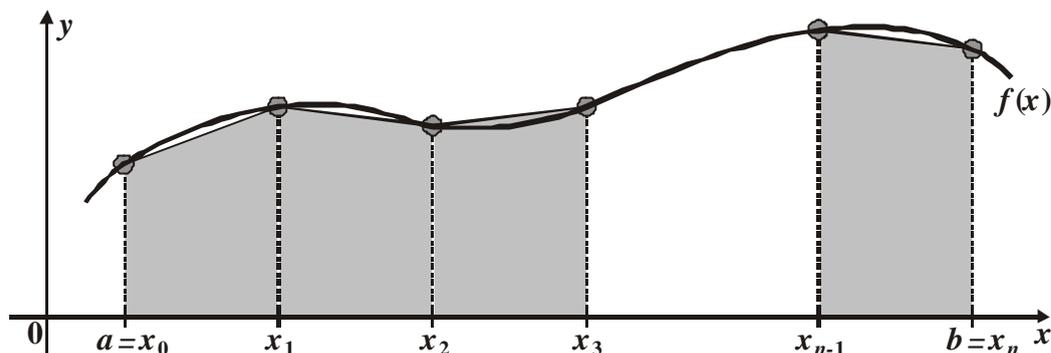
Resolução:

$$\int_1^9 \sqrt{6x-5} dx \approx \boxed{I_T = \dots\dots\dots}$$

O erro cometido será, no máximo:

Logo, $|E_T| \leq \dots\dots\dots$

6.1.2 Regra dos Trapézios repetida



[Fig. 33]: Regra dos trapézios repetida

$$h = x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = x_3 - x_2 = \dots = x_n - x_{n-1}$$

$h = \frac{b-a}{n}$, com n sendo o número de subdivisões do intervalo $[a, b]$.

$\int_a^b f(x)dx \approx A_1 + A_2 + A_3 + \dots + A_n$ tal que $A_i = \text{área do trapézio } i$, com $i=1,2,\dots,n$.

$$A_i = \frac{h}{2} [f(x_{i-1}) + f(x_i)]$$

$$(Eq.46) \quad \int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_n) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)]$$

6.1.2.1 Estimativa para o Erro

$$(Eq.47) \quad |E_{TR}| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|$$

Exercício 88 Calcular $\int_1^9 \sqrt{6x-5} dx$ empregando o método dos trapézios com 8 repetições. Determine uma aproximação para o erro cometido.

Resolução:

x	$x_0 = \dots\dots$	$x_1 = \dots\dots$	$x_2 = \dots\dots$	$x_3 = \dots\dots$	$x_4 = \dots\dots$	$x_5 = \dots\dots$	$x_6 = \dots\dots$	$x_7 = \dots\dots$	$x_8 = \dots\dots$
$f(x)$									

$$\int_1^9 \sqrt{6x-5} \, dx \approx \dots\dots\dots$$

Erro cometido será, no máximo:

$$|E_{TR}| \leq \dots\dots\dots$$

Neste caso em particular, $f(x)$ pode ser integrada de forma exata:

$$\int_1^9 \sqrt{6x-5} \, dx = \dots\dots\dots$$

Exercício 89 Seja $I = \int_0^1 e^x dx$. Calcule uma aproximação para I usando 10 subintervalos e a regra dos trapézios repetida. Estimar o erro cometido.

Resolução:

$$\int_0^1 e^x dx \approx \dots\dots\dots$$

Erro cometido será, no máximo:

$$|E_{TR}| \leq \dots\dots\dots$$

Exercício 90 Seja $I = \int_0^1 e^x dx$. Qual o número mínimo de subdivisões, para a regra dos trapézios repetida aplicada em I , de modo que o erro seja inferior a 10^{-3} ?

Resolução:

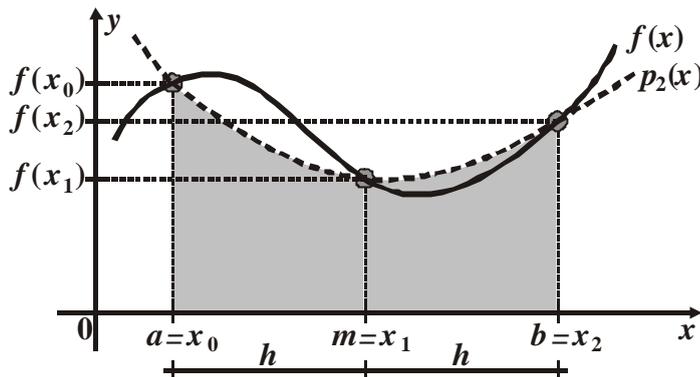
$$n = \dots\dots\dots$$

6.1.3 Regra 1/3 de Simpson

É obtida aproximando-se a função $f(x)$ da (Eq.41) por um polinômio interpolador de 2º grau, $p_2(x)$, que é dado pela fórmula de Lagrange:

$$p_2(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2)$$

tal que $L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^2 \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$, com $i=0,1,2$.



[Fig. 34]: Regra 1/3 de Simpson.

$$x_0 = a, \quad x_1 = m \text{ e } x_2 = b$$

$$m = x_1 = \frac{a + b}{2}$$

$$h = \frac{b - a}{2}$$

$$x_0 - x_1 = -h, \quad x_0 - x_2 = -2h,$$

$$x_1 - x_0 = h, \quad x_1 - x_2 = -h,$$

$$x_2 - x_0 = 2h, \quad x_2 - x_1 = h.$$

$$p_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(-h)(-2h)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(h)(-h)} f(x_1) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(2h)(h)} f(x_2)$$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx \\ &= \frac{f(x_0)}{2h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x - x_1)(x - x_2) dx - \frac{f(x_1)}{h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x - x_0)(x - x_2) dx + \frac{f(x_2)}{2h^2} \int_{x_0}^{x_2} (x - x_0)(x - x_1) dx \\ &= \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]. \text{ Logo:} \end{aligned}$$

$$\text{(Eq.48)} \quad \boxed{\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \approx \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]}$$

6.1.3.1 Estimativa para o Erro

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_2} p_2(x) dx + \int_{x_0}^{x_2} R_2(x) dx$$

$$\text{(Eq.49)} \quad E_S = \int_a^b R_2(x) dx = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \frac{f'''(\xi_x)}{3!} dx$$

6.1.3.2 Mudança de Variável

$$z = \frac{x - x_0}{h} \Rightarrow x = hz + x_0$$

$$x = x_0 = a \Rightarrow z = \frac{x_0 - x_0}{h} \Rightarrow z = 0$$

$$x = x_2 = b \Rightarrow z = \frac{x_2 - x_0}{h} = \frac{2h}{h} \Rightarrow z = 2$$

$$dz = \frac{dx}{h} \Rightarrow dx = h dz$$

$$E_S = \frac{h \cdot f'''(\xi_z)}{6} \int_0^2 hz(hz - h)(hz - 2h) dz$$

$$E_S = \frac{h^4 \cdot f'''(\xi_z)}{6} \int_0^2 z(z-1)(z-2) dz = \frac{h^4}{6} f'''(\xi_z) \int_0^2 (z^3 - 3z^2 + 2z) dz$$

$$E_S = \frac{h^4}{6} f'''(\xi_z) \cdot \underbrace{\left[\frac{z^4}{4} - z^3 + z^2 \right]_0^2}_{=0} = \frac{h^4}{6} f'''(\xi_z) \cdot 0 = 0.$$

Logo, $E_S = 0$. Isso quer dizer que E_S não depende de R_2 (resíduo de 2º grau).

Então:

$$E_S = \int_a^b R_3(x) dx = \int_a^b (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3) \frac{f^4(\xi_x)}{4!} dx$$

$$E_S = \frac{h^5 \cdot f^4(\xi_z)}{24} \int_0^2 z(z-1)(z-2)(z-3) dz = \frac{h^5}{24} f^4(\xi_z) \underbrace{\int_0^2 (z^4 - 6z^3 + 11z^2 - 6z) dz}_{=-\frac{4}{15}}$$

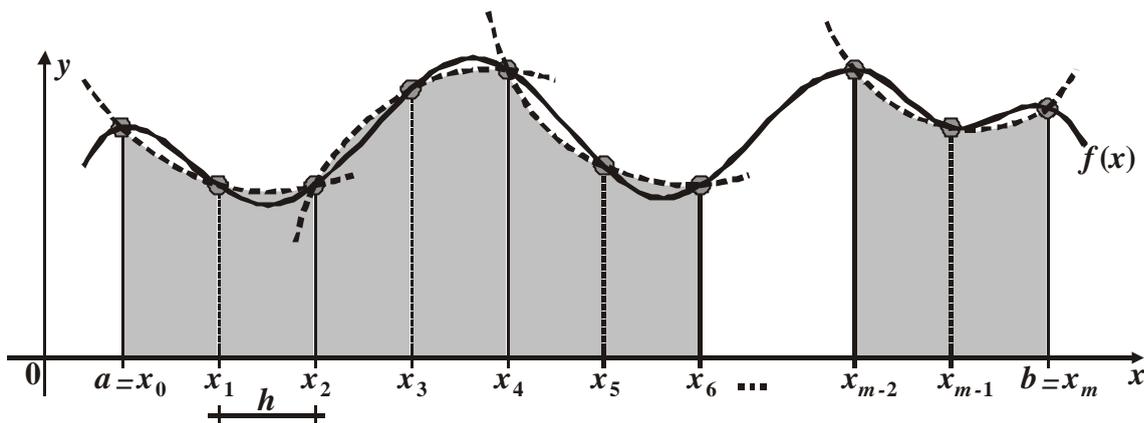
$$E_S = -\frac{h^5}{90} f^4(\xi) \text{ com } (a \leq \xi \leq b).$$

$$\text{(Eq.50)} \quad \boxed{\|E_S\| = \frac{h^5}{90} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^4(x)|}$$

Considerando $h = \frac{b-a}{2} \Rightarrow h^5 = \frac{(b-a)^5}{32}$, tem-se:

$$\text{(Eq.51)} \quad \boxed{\|E_S\| \leq \frac{(b-a)^5}{2880} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^4(x)|}$$

6.1.4 Regra 1/3 de Simpson repetida



[Fig. 35]: Regra 1/3 de Simpson repetida

Na figura, tome $h = \frac{b-a}{2n} \Rightarrow h = x_i - x_{i-1}$ ($i=1,2,\dots,m$), para $m=2n \Rightarrow m$ é par.

Aplica-se a regra de Simpson repetidas vezes no intervalo $[a, b] = [x_0, x_m]$.

x_0, x_1, \dots, x_m são pontos igualmente espaçados.

Então:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \int_{x_0}^{x_m} f(x) dx \\ &\approx \frac{h}{3} [y_0 + 4y_1 + y_2] + \frac{h}{3} [y_2 + 4y_3 + y_4] + \dots + \frac{h}{3} [y_{m-2} + 4y_{m-1} + y_m] \\ \int_a^b f(x) dx &\approx \frac{h}{3} [y_0 + y_m + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{m-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{m-1})] \end{aligned}$$

$$(Eq.52) \quad \int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[y_0 + y_m + 2 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}-1} y_{2i} + 4 \sum_{i=1}^{\frac{m}{2}} y_{2i-1} \right].$$

6.1.4.1 Estimativa para o erro: E_{SR}

$$|E_{SR}| \leq n \cdot \frac{h^5}{90} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

$$(Eq.53) \quad |E_{SR}| \leq n \cdot \frac{h^5}{90} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

Considerando $h = \frac{b-a}{2n} \Rightarrow h^5 = \frac{(b-a)^5}{32n^5}$, tem-se:

$$(Eq.54) \quad |E_{SR}| \leq \frac{(b-a)^5}{2880n^4} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|$$

Exercício 91 Seja $I = \int_0^1 e^x dx$. Calcule uma aproximação para I usando a regra 1/3 de Simpson com $m=10$. Estime o erro cometido.

Resolução:

$$\int_0^1 e^x dx \approx \dots\dots\dots$$

Estimativa do erro:

$$E_{SR} \leq \dots\dots\dots$$

Observe que $|E_{SR}| \leq \dots\dots\dots$ e $|E_{TR}| \leq \dots\dots\dots$.

Exercício 92 Seja $I = \int_0^1 e^x dx$. Para que valor de m teríamos erro inferior a 10^{-3} ?

Resolução:

$m = \dots\dots\dots \Rightarrow$ Para um erro inferior a 10^{-3} seriam necessários $\dots\dots\dots$ subintervalos.

Obs: na regra dos trapézios com repetição são necessários $\dots\dots\dots$ intervalos.

Exercício 93 Seja $I = \int_6^{10} \log x dx$. Aproxime I com a regra dos trapézios com 8 repetições. Estime o erro cometido.

Resolução:

$$h = \dots\dots\dots \Rightarrow h = \dots\dots\dots$$

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
x_i									
$f(x_i)$									

$$\int_6^{10} \log x dx \approx \dots\dots\dots$$

Estimativa do erro:

$$\Rightarrow |E_{TR}| \leq \dots\dots\dots$$

Exercício 94 Seja $I = \int_6^{10} \log x dx$. Aproxime I com a regra de Simpson com 8 subintervalos. Estime o erro cometido.

Resolução:

$$h = \dots\dots\dots \Rightarrow h = \dots\dots\dots, m = \dots\dots\dots \text{ e } n = \dots\dots\dots$$

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8
x_i									
$f(x_i)$									

$$\int_6^{10} \log x dx \approx \dots\dots\dots$$

Estimativa do erro:

$$\Rightarrow |E_{SR}| \leq \dots\dots\dots$$

7 Solução numérica de equações diferenciais ordinárias

7.1 Introdução

Se uma equação diferencial tem apenas uma variável independente, então ela é uma equação diferencial ordinária.

EXEMPLOS:

$$\frac{dy}{dx} = x + y; \quad y' = x^2 + y^2; \quad y'' + (1 - y^2) y' + y = 0.$$

Se uma equação diferencial envolve mais que uma variável independente, então ela é equação diferencial parcial.

EXEMPLO:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0, \text{ com } u \equiv u(x, y).$$

A ordem de uma equação diferencial é a mais alta ordem de derivação que aparece na equação.

Se, dada uma equação diferencial de ordem n , a função, assim como suas derivadas até ordem $n-1$, são especificadas em um mesmo ponto, então temos um problema de valor inicial (PVI).

Se, em problemas envolvendo equações diferenciais ordinárias de ordem n , $n \geq 2$, as n condições fornecidas não são dadas todas num mesmo ponto, então temos um problema de valor de contorno (PVC).

Exercício 95 Resolver a seguinte EDO: $\frac{dy}{dx} = -xy$.

Resolução:

$\Rightarrow y = \dots\dots\dots$, para $k \in \mathfrak{R}$. Que representa uma família de curvas em \mathfrak{R}^2 .

Exercício 96 Para a mesma EDO anterior, $y' = -xy$, resolva considerando uma condição inicial $y(x_0) = y_0$, com $x_0 = 0$ e $y_0 = 1$.

Resolução:

$$y = \dots\dots\dots$$

7.2 Problema de valor inicial (PVI)

Uma equação diferencial de ordem n se apresenta da seguinte forma:

$$(Eq.55) \quad y^{(n)} = f(x, y, y', y'', y^{(3)}, y^{(4)}, \dots, y^{(n-1)})$$

onde

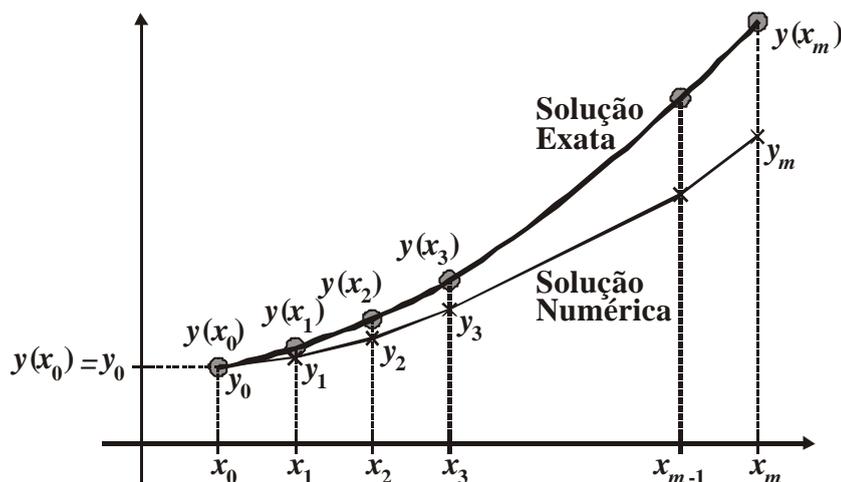
$$y^{(l)} = \frac{d^l y}{dx^l}, \quad l=1,2,\dots,n, \quad x \in [a, b] \text{ e } y : [a, b] \rightarrow \mathfrak{R}.$$

Associadas a (Eq.55), podem existir condições cujo número coincide com a ordem da EDO. Se tais condições se referem a um único valor x , tem-se um PROBLEMA DE VALOR INICIAL – PVI. Caso contrário, tem-se um problema de valores de contorno.

7.2.1 Solução numérica de um PVI de primeira ordem

Toma-se m subintervalos de $[a, b]$, ($m \geq 1$), e faz-se $x_j = x_0 + j h$ onde $h = \frac{b-a}{m}$, $j=0,1,2,\dots,m$, $x_j \in [a, b]$.

$I_h = \{x_0, x_1, \dots, x_m\}$ é denominado REDE ou MALHA de $[a, b]$. A solução numérica $y_m(x)$ é a função linear por partes.



[Fig. 36]: Gráfico da solução numérica de um PVI.

NOTAÇÃO: $y(x_j) \approx y_j$ significa que y_j é aproximação para $y(x_j)$, $x_j \in I_h$.

NO GRÁFICO: \bullet $y(x_j) \Rightarrow$ valor exato;

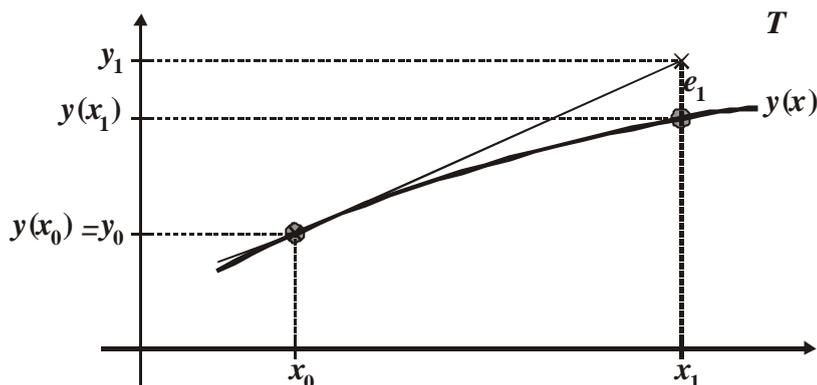
\times $y_j \Rightarrow$ valor aproximado; $j=1,2,\dots,m$.

7.2.2 Método de Euler

Seja o PVI de primeira ordem definido por:

$$(Eq.56) \quad \begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 = \eta, \text{ sendo } \eta \text{ um número dado.} \end{cases}$$

Para se aproximar y_j para as soluções exatas $y(x_j)$, com $j=1,2,\dots,m$, procura-se inicialmente y_1 .



[Fig. 37]: Gráfico do método de Euler.

Traça-se a tangente T à curva $y(x)$ no ponto $(x_0, y(x_0))$, cuja equação é:

$$(Eq.57) \quad y(x) = y(x_0) + (x - x_0) y'(x_0).$$

Fazendo $x=x_1$ e lembrando que $y(x_0)=y_0$, $x_1-x_0=h$, $y'(x_0)=f(x_0, y(x_0))$ e $y_1 \approx y(x_1)$, tem-se:

$$(Eq.58) \quad y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y(x_0)).$$

7.2.2.1 Erro cometido

$$e_1 = y_1 - y(x_1).$$

7.2.2.2 Aproximação e erro de y_j de forma geral

$$(Eq.59) \quad \begin{cases} y_{j+1} = y_j + h \cdot f(x_j, y_j) \\ e_{j+1} = y_{j+1} - y(x_{j+1}) \end{cases}, \text{ com } j=0,1,2,\dots,m-1.$$

O método de Euler consiste em calcular RECURSIVAMENTE a seqüência $\{y_j\}$ através das fórmulas:

$$(Eq.60) \quad \begin{cases} (A) & y_0 = y(a) = \eta \\ (B) & y_{j+1} = y_j + h \cdot f(x_j, y_j) \end{cases}, \text{ com } j=0,1,2,\dots,m-1.$$

Exercício 97 Achar aproximações para a solução do PVI $\begin{cases} y' = x - y + 2 \\ y(0) = 2 \end{cases}$ na malha de $[0,1]$

com $h=0,1$.

Resolução:

$$x_0=0, y_0=2, a=0, b=1, m = \frac{1-0}{0,1} \rightarrow m=10.$$

Usar (Eq.59) para $j=0,1,2,\dots,9$.

$j=0$:

$j=1$:

TABELA:

j	x_j	y_j	$y(x_j)$	$y_j - y(x_j) = e_j$
0	0	2	2	
1			2,004837	
2			2,018731	
3			2,040818	
4			2,07032	
5			2,106531	
6			2,148812	
7			2,196585	
8			2,249329	
9			2,30657	
10			2,367879	

Na prática, não se dispõe da solução exata $y(x_j)$ do PVI. Daí a necessidade de se determinar uma expressão matemática para o erro. Usa-se a fórmula de Taylor para desenvolver $y(x)$, solução teórica do PVI, em torno de x_0 :

$$(Eq.61) \quad y(x) = y(x_0) + \frac{x-x_0}{1!} y'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!} y''(x_0) + \frac{(x-x_0)^3}{3!} y'''(x_0) + \dots$$

Fazendo $x=x_1$ e lembrando que $y(x_0)=y_0$, $x_1-x_0=h$, $y'(x_0)=f(x_0, y(x_0))$ e $y_1=y(x_1)$, toma-se os dois primeiros termos da (Eq.61):

$$y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0). \text{ Generalizando-se, tem-se (Eq.59).}$$

7.2.2.3 Erro local de truncamento - ELT

O erro no método de Euler quando se calcula y_1 é obtido a partir do resto da fórmula de Taylor, que é: $\frac{(x-x_0)^2}{2!} y''(\xi)$, $x_0 < \xi < x_1$, ou $e_1 = \frac{h^2}{2!} y''(\xi)$, para $h = x_1 - x_0$.

Numa etapa j dos cálculos, tem-se:

$$(Eq.62) \quad e_j = \frac{h^2}{2!} y''(\xi), \quad x_{j-1} < \xi < x_j,$$

que é o ERRO LOCAL DE TRUNCAMENTO – ELT.

Na prática, procura-se estabelecer COTAS ou ESTIMATIVAS para que se possa conduzir o cálculo do erro com segurança.

Toma-se $k = y''(\xi)$, constante, e h suficientemente pequeno para ser tomado como parâmetro do ELT. Diz-se que ELT é da ordem de h^2 e se escreve (h^2).

7.2.3 Métodos de Runge-Kutta

7.2.3.1 Métodos de passo simples

Um método para resolver o PVI (Eq.56) é de passo simples se a aproximação y_{j+1} depende apenas do resultado y_j da etapa anterior.

Forma geral para métodos de passo simples:

$$\text{(Eq.63)} \quad y_{j+1} = y_j + h \phi(x_j, y_j; h), \text{ para } j=0,1,2,\dots,m-1.$$

Onde ϕ é a função incremento e h o comprimento do passo.

OBS. 24: Para o método de Euler, a função incremento é $\phi(x_j, y_j; h) = f(x_j, y_j)$. Um caso especial de Runge-Kutta.

7.2.3.2 Métodos com Derivadas

O método de Euler possui ordem um pois, foi obtido da fórmula de Taylor com desenvolvimento até o termo em h .

Ao fazer o mesmo desenvolvimento até o termo em h^2 , obtém-se o método de passo simples e ordem dois.

$$\text{(Eq.64)} \quad y_{j+1} = y_j + h y'(x_j) + \frac{h^2}{2!} y''(x_j), \text{ para } j=0,1,2,\dots,m-1.$$

7.2.3.3 ELT – Erro local de truncamento

$$\text{(Eq.65)} \quad e_{j+1} = \frac{h^3}{3!} y'''(\xi), \quad x_j < \xi < x_{j+1}.$$

OBS. 25: Em (Eq.64), $y'(x_j) = f(x_j, y_j)$.

$y''(x_j) = ?$ Regra da cadeia de f em relação a x_j :

$$\underbrace{\frac{\partial f}{\partial x}(x_j, y_j)}_{=y''(x_j)} = \underbrace{\frac{\partial f}{\partial x}(x_j, y_j)}_{=1} \underbrace{\frac{\partial x}{\partial x}(x_j, y_j)}_{=1} + \frac{\partial f}{\partial y}(x_j, y_j) \underbrace{\frac{\partial y}{\partial x}(x_j, y_j)}_{=f(x_j, y_j)}$$

$$y''(x_j) = \frac{\partial f}{\partial x}(x_j, y_j) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_j, y_j) f(x_j, y_j)$$

Exercício 98 Achar aproximações para a solução do PVI $\begin{cases} y' = x - y + 2 \\ y(0) = 2 \end{cases}$ na malha $[0,1]$ com

$h=0,1$ usando o método da (Eq.64).

Resolução:

$$x_0=0, y_0=2, a=0, b=1, m=\frac{1-0}{0,1} \rightarrow m=10.$$

Usar (Eq.64) para $j=0,1,\dots,9$.

$j=0$:

$j=1$:

TABELA:

j	x_j	y_j	$y(x_j)$	$y_j - y(x_j) = e_j$
0	0	2	2	
1			2,004837	
2			2,018731	
3			2,040818	
4			2,07032	
5			2,106531	
6			2,148812	
7			2,196585	
8			2,249329	
9			2,30657	
10			2,367879	

7.2.4 Método de Euler Aprimorado (Método de Runge-Kutta de Segunda Ordem)

Retomando a (Eq.62): $y_{j+1} = y_j + h \phi(x_j, y_j; h)$, para $j=0,1,2,\dots, m-1$.

Fazendo-se $\phi(x_j, y_j; h) = \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$ e substituindo na equação, tem-se:

(Eq.66) $y_{j+1} = y_j + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$, para $j=0,1,2,\dots,m-1$

onde $k_1 = f(x_j, y_j)$ e $k_2 = f(x_j + h, y_j + h k_1)$.

Exercício 99 Achar aproximações para a solução do PVI $\begin{cases} \frac{dy}{dx} = -xy \\ y(0) = 1 \end{cases}$ na malha [0,1] com

$h=0,5$ usando o método de Euler Aprimorado.

Resolução:

j	x_j	y_j	k_1	k_2	$y(x_j) = e^{-x^2/2}$	$ y_j - y(x_j) $
0	0	1				
1						
2						

7.2.5 Fórmulas de Runge-Kutta de Quarta Ordem

Estas fórmulas são normalmente as mais utilizadas.

(Eq.67) $y_{j+1} = y_j + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$, para $j=0,1,2,\dots,m-1$

onde $k_1 = f(x_j, y_j)$,

$$k_2 = f\left(x_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2}k_1\right),$$

$$k_3 = f\left(x_j + \frac{h}{2}, y_j + \frac{h}{2}k_2\right) \text{ e}$$

$$k_4 = f(x_j + h, y_j + h k_3).$$

7.2.5.1 Erro local de truncamento: ETL

(Eq.68) $e_j = \frac{h^5}{5!} y^{(5)}(\xi)$, $x_{j-1} < \xi < x_j$.

Exercício 100 Calcular a solução do PVI $\begin{cases} \frac{dy}{dx} = -xy \\ y(0) = 1 \end{cases}$ com $h=0,1$, no interior do intervalo

[0,1], pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Resolução:

$$y_{j+1} = y_j + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \text{ para } j=0,1,2,\dots,9.$$

$$k_1 = \dots\dots\dots$$

$$k_2 = \dots\dots\dots$$

$$k_3 = \dots\dots\dots$$

$k_4 =$

j	x_j	y_j	k_1	k_2	k_3	k_4
0	0	1				
1						
2						
3						
4						
5						
6						
7						
8						
9						
10						

Exercício 101 Achar aproximação para a solução do PVI $\begin{cases} y' = x - y + 2 \\ y(0) = 2 \end{cases}$ na malha $[0,1]$ com $h=0,1$ usando o método de Runge-Kutta de segunda ordem (Euler aprimorado).

Resolução:

$$x_0=0, y_0=2, a=0, b=1, m = \frac{1-0}{0,1} \rightarrow m=10.$$

$$y_{j+1} = y_j + \frac{0,1}{2}(k_1 + k_2), \text{ para } j=0,1,2,\dots,9.$$

$k_1 =$ e $k_2 =$

j	x_j	y_j	k_1	k_2
0	0	2		
1				
2				
3				
4				
5				
6				
7				
8				
9				
10				