

20 DEZ 1991

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Matemática
Cadernos de Matemática e Estatística
Série B: Trabalho de Apoio Didático

Cálculo Numérico
2ª Edição

Sandra R. Campani Pizzatto

Série B, nº 05, MAR/91
Porto Alegre, agosto de 1991

INTRODUÇÃO E AGRADECIMENTOS

Este trabalho reflete o conjunto de apontamentos e experiências vividas por mim, na disciplina de Cálculo Numérico do Departamento de Matemática Pura e Aplicada, do Instituto de Matemática da UFRGS, destinada a alunos dos cursos de Engenharia, Física e Química. Para sua concretização colaboraram também os subsídios extraídos dos seminários internos do departamento, realizados com professores da disciplina.

Quero registrar o meu sincero agradecimento a todos os colegas que contribuíram para o aperfeiçoamento deste trabalho. Também quero fazer uma homenagem especial ao Professor Manuel Luiz da Silva Neto por ter sido o iniciador e grande incentivador do ensino de Cálculo Numérico em nossa Universidade.

Agradeço à Direção, Coordenação do NAEC e funcionários do Instituto de Matemática por tornarem possível esta edição.

Quero registrar, também, a cuidadosa e excepcional digitação dos originais feita pelo bolsista Alexandre Lopes Amaro e a reprodução realizada pelo funcionário Nairo René Santana Duarte.

Finalmente, agradeço o apoio e o estímulo recebidos de parte do meu esposo Ayrir e dos filhos Marcos, Alessandra e Marcelo.

Sandra Regina Campani Pizzatto

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO E AGRADECIMENTOS

CAPÍTULO 0

0.1	Introdução ao estudo da matemática numérica.....	1
0.2	Número de ponto flutuante normalizado.....	4
0.3	Precisão e exatidão das máquinas digitais.....	4
0.4	Número de máquina.....	4
0.5	Erros computacionais.....	5
0.6	Medidas de exatidão.....	7
0.7	Dígitos significativos exatos de um valor aproximado.....	7
0.8	Representação esquemática da resolução numérica de um problema genérico.....	8
0.9	Acumulação de erros.....	9
0.10	Propagação de erros nas operações aritméticas.....	11
0.11	Processos infinitos - Sequências e Métodos Iterativos.....	13
0.12	Instabilidade.....	14

CAPÍTULO 1

Resolução Numérica de Equações Não Lineares

1.1	Introdução.....	16
1.2	Técnicas de separação das raízes reais de $f(x) = 0$	16
1.3	Algoritmo de Quebra ou Método da Bissecção.....	18
1.4	Método de Iteração Linear.....	20
1.4.1	Técnicas de aceleração de convergência.....	25
1.5	Método de Newton-Raphson.....	27
1.5.1	Perigos do Método de Newton-Raphson.....	28
1.5.2	Exemplos.....	29
1.6	Método da Posição Falsa.....	32
1.7	Equações polinomiais.....	34
1.7.1	Localização das raízes de um polinômio real.....	34
1.7.2	Algoritmo de Newton-Viète.....	37
1.8	Equações polinomiais: raízes complexas.....	42
1.8.1	Localização das raízes complexas.....	42
1.8.2	Método de Bairstow.....	43
1.9	Solução numérica de sistemas de equações não lineares.....	48
1.9.1	Fórmula de Newton para sistemas de equações não lineares.....	50

CAPÍTULO 2

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Lineares

2.1	Colocação do problema.....	53
2.2	Algoritmos usados no cálculo numérico de sistemas de equações lineares.....	54
2.3	Método de Eliminação de Gauss.....	54
2.3.1	Algoritmo básico de Gauss.....	54
2.3.2	Resolução de sistemas triangulares (algoritmo).....	56
2.3.3	Triangularização do método de Eliminação de Gauss Básico (algoritmo).....	56
2.3.4	Técnicas de pivotamento.....	57
2.3.5	Refinamento da solução de um SELA.....	60
2.4	O condicionamento de uma matriz e as dificuldades na estimativa de erros computacionais.....	63
2.4.1	Medidas de condicionamento.....	64
2.5	Inversão de matrizes via métodos numéricos.....	67
2.5.1	Refinamento de uma matriz inversa calculada.....	68
2.5.2	Erro relativo no cálculo de uma matriz inversa.....	68
2.6	Sistemas lineares complexos.....	68
2.7	Método de Gauss-Jordan.....	69
2.8	Métodos iterativos para resolução de SELAS.....	70
2.8.1	Método de Jacobi.....	70
2.8.2	Método de Gauss-Seidel.....	71
2.8.3	Testes de parada.....	71
2.8.4	Critérios de convergência.....	72
2.9	Exercícios.....	75
2.10	Rudimentos de valores e vetores próprios.....	76
2.10.1	Algoritmos baseados na obtenção do polinômio característico de "A".....	77
2.10.2	Algoritmo iterativo para obtenção do autovalor dominante e autovetor associado de uma matriz "A".	79
2.11	Exercícios.....	82
2.12	Observações.....	83

CAPÍTULO 3

Interpolação

3.1	Introdução.....	84
3.2	Interpolação polinomial.....	85

3.2.1	Fórmula interpoladora de Lagrange.....	86
3.2.2	Diferenças finitas e diferenças divididas.....	89
3.2.3	Fórmula do polinômio de Newton com diferenças ascendentes.....	92
3.2.4	Fórmula do polinômio de Newton com diferenças divididas.....	92
3.3	Interpolação polinomial em tabelas.....	93
3.4	Exemplos.....	93
3.5	Exercícios.....	99

CAPÍTULO 4

Derivação Numérica

4.1	Introdução.....	101
4.2	Erro de truncamento na derivação numérica.....	101
4.3	Fórmulas de derivação numérica.....	102
4.3.1	Fórmulas baseadas em diferenças ascendentes.....	102
4.3.2	Fórmulas baseadas em diferenças centrais.....	103
4.4	Exemplo.....	104

CAPÍTULO 5

Ajustamento de Equações

5.1	Introdução.....	105
5.2	Escolha da função de ajustamento.....	105
5.3	Determinação dos parâmetros da curva (critério dos Mínimos Quadrados).....	107
5.4	Problemas sobre ajustamento de curvas.....	113

CAPÍTULO 6

Integração Numérica

6.1	Introdução.....	114
6.2	Método de Newton-Cotes.....	115
6.3	Fórmula dos Trapézios.....	116
6.3.1	Extensão da fórmula dos Trapézios.....	117
6.3.2	Erro de truncamento para fórmula dos Trapézios....	117
6.3.3	Exemplos.....	117
6.4	Fórmula de Simpson.....	118
6.4.1	Extensão da fórmula de Simpson p/ n subintervalos.	118
6.4.2	Erro de truncamento para a fórmula de Simpson....	119
6.4.3	Exemplos.....	119

6.5	Cálculo iterado de integrais.....	120
6.5.1	Método de Romberg.....	120
6.5.2	Método de Simpson com exatidão crescente.....	122
6.6	Quadratura Gaussiana ou Método de Gauss-Legendre.....	123
6.7	Quadratura em intervalo limitado de funções mal condicionadas.....	128
6.8	Exercícios sobre integração numérica.....	130

CAPITULO 7

Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

7.1	Introdução.....	131
7.2	Erros computacionais.....	133
7.3	Aproximação da solução por série de Taylor.....	134
7.4	Métodos de passo simples para EDO de 1ª ordem.....	135
7.4.1	Fórmula de Euler.....	135
7.4.2	Métodos de Runge Kutta	136
7.4.2-1	Método de Runge Kutta de 2ª ordem.....	137
7.4.2-2	Método de Runge Kutta de 4ª ordem.....	138
7.4.3	Comentário sobre os métodos de Runge Kutta.....	139
7.5	Como estimar a exatidão de uma aproximação calculada.....	139
7.6	Fórmulas de Passo Múltiplo.....	140
7.6.1	Fórmula de Adams Bashforth.....	141
7.6.2	Fórmula de Adams Moulton.....	142
7.6.3	Técnica de Predição e Correção.....	143
7.6.4	Fórmulas de Milne.....	143
7.7	Sistemas de Equações Diferenciais de 1ª ordem com C.I.....	145
7.7.1	Fórmula de Euler.....	145
7.7.2	Fórmula de Runge Kutta de 2ª ordem.....	146
7.7.3	Fórmula de Runge Kutta de 4ª ordem.....	147
7.7.4	Fórmulas de Predição e Correção.....	148
7.8	Solução de equações diferenciais de 2ª ordem com valores iniciais.....	148
7.8.1	Fórmula de Runge Kutta de 4ª ordem.....	149
7.8.2	Fórmulas de Adams Bashforth e Adams Moulton.....	150
7.9	Exemplos.....	150
7.10	Solução numérica de EDO de 2ª ordem com valores no contorno.....	152
7.10.1	Método das Diferenças Finitas.....	152
7.10.2	Exemplos.....	153

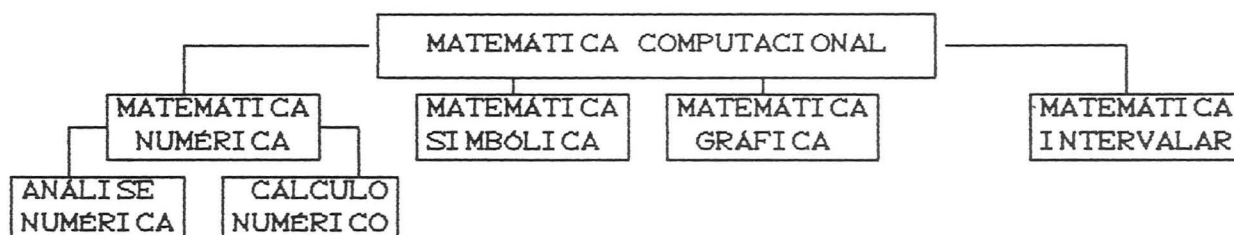
7.11	Exercícios	154
	Bibliografia.....	156

CAPÍTULO 0

0.1 INTRODUÇÃO AO ESTUDO DA MATEMÁTICA NUMÉRICA

Com a evolução dos computadores nas últimas décadas, cada vez mais obtém-se uma sensível melhora na exatidão e no tempo de execução das instruções. Porém algumas propriedades básicas da aritmética real não valem mais quando executadas em um computador.

O estudo da matemática sob o ponto de vista computacional constitui a Matemática Computacional. A Matemática Numérica é um dos ramos da Matemática Computacional.



A MATEMÁTICA NUMÉRICA consiste no desenvolvimento de métodos operacionais que envolvem apenas operações aritméticas utilizadas em um número finito de vezes, para a resolução de problemas que possam ser representados em forma matemática.

A MATEMÁTICA SIMBÓLICA trata com modelos de forma literal e busca uma solução analítica exata para os problemas matemáticos.

A MATEMÁTICA GRÁFICA trabalha com dados de forma gráfica e busca representar a solução dos seus problemas também na forma gráfica.

A MATEMÁTICA INTERVALAR trabalha com dados na forma de intervalos numéricos buscando controlar os limites de erro dos processos da Matemática Numérica.

A MATEMÁTICA NUMÉRICA tem por objetivo estudar processos numéricos (algoritmos) para a solução de problemas usando a máxima economia e confiabilidade em termos dos fatores envolvidos que podem ser: tempo de execução, memória utilizada, e erros de arredondamento.

Processo Numérico ou Algoritmo Numérico é uma sequência de instruções ordenadas de maneira a dar em seu decurso a solução

para um problema específico. A solução de um processo numérico é representado por um ou mais números resultantes da execução das operações aritméticas nele contidas.

Um algoritmo numérico possui como característica básica a de poder ser executado em tempo finito e a de envolver a execução de apenas um número finito de operações elementares, isto é, de operações bem definidas e também de execução em tempo finito.

Algoritmos numéricos serão utilizados para resolver por exemplo: - equações numéricas (não lineares, funcionais, lineares)

- cálculo de integrais

- cálculo de valores de funções, etc.

Um algoritmo numérico de boa qualidade deve ter as seguintes características:

1. Inexistência de Erro Lógico

Deve haver uma previsão completa de tudo que poderá ocorrer durante o procedimento.

Exemplo. referência [1] página 19

- Procura-se a solução x^* da equação $ax = b$

Um algoritmo com erro lógico seria: ler a, b

$$x^* = b / a$$

O correto fica:

se $a = 0$ e se $b = 0$, então imprima: IDENTIDADE,

caso contrário, imprima: CONTRADIÇÃO

caso contrário: $x^* = b / a$

2. Inexistência de Erro Operacional

Não deve ocorrer problemas de "OVERFLOW" ou "UNDERFLOW".

Exemplo: referência [1] página 19

Seja T o conjunto de números possíveis de serem representados por uma máquina e que valha:

a) $\forall x \in T, -x \in T$

b) $t_1 = \inf\{x \mid x \in T \wedge x > 0\}$ e $t_2 = \sup\{x \mid x \in T \wedge x > 0\}$

se tivermos valores y , tais que $|y| < t_1$ ou $|y| > t_2$, ocorrerá um erro operacional.

seja $z = x + iy \in \mathbb{C}$, x e $y \in \mathbb{R}$

deseja-se calcular $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$

se num algoritmo implementamos diretamente a fórmula acima,

conforme forem os valores de x e y poderemos ter overflow em x^2 e y^2 , embora valha $\sqrt{x^2 + y^2} < t_2$
isto não ocorrerá se o algoritmo for o seguinte:
se $x = y = 0$ então $z = 0$

caso contrário: se $|x| \geq |y|$ então $z = |x| \cdot \sqrt{1 + (y/x)^2}$

caso contrário $z = |y| \cdot \sqrt{1 + (x/y)^2}$

3. Quantidade finita de cálculos

O algoritmo deve terminar após um número finito de passos.

4. Existência de um critério de exatidão

Devido as limitações de precisão da máquina e da exatidão desta e do método, todo resultado obtido deverá enquadrar-se em um critério de exatidão fornecido previamente de forma que um resultado aceitável seja escrito na forma:

$$\text{RESULTADO} \leftarrow \text{VALOR APROXIMADO} \pm \text{LIMITE DE ERRO}$$

5. Independência da Máquina

O programa deve ser elaborado de forma que possa ser executado em diferentes máquinas.

6. Com Precisão Infinita os limites de erro devem convergir a zero

Estabelece a dependência entre a solução exata em \mathbb{R} e a solução de máquina.

7. Eficiência

É a qualidade em produzir uma resposta correta para o problema dado, no menor tempo possível. Eficácia é a qualidade em produzir a resposta correta.

Exemplo: Resolução de Sistemas de Equações Lineares $A \cdot X = B$

Utilizando o computador CRAY-1 que executa 10^7 operações/segundo temos:

Tamanho de sela	tempo gasto pelo algoritmo de CRAMER
5 x 5	10^{-5} segundos
10 x 10	5 segundos
15 x 15	45 dias

Observa-se portanto que o algoritmo de Cramer embora seja eficaz, não é eficiente para $n > 5$.

0.2 NÚMERO DE PONTO FLUTUANTE NORMALIZADO

Um número Real, $x \in \mathbb{R}$ é dito um número de ponto flutuante normalizado se valerem:

1) $x = m * b^e$

2) $m = \pm 0.d_1d_2d_3\dots d_n$, $n \in \mathbb{N}$

3) $1 \leq d_1 \leq b-1$, $0 \leq d_i \leq b-1$, $i = 2(1)n$

4) $e_1 \leq e \leq e_2$ sendo $e_1 \leq 0$, $e_2 \geq 1$, e_1 e $e_2 \in \mathbb{Z}$

onde b é chamado base, $b \geq 2$

e é chamado expoente, e_1 é o menor e e_2 é o maior expoente

m é a mantissa

n é o número máximo de dígitos usados na representação do número

d_i , $i = 1(1)n$ são os dígitos da mantissa.

Usualmente representa-se um sistema de ponto flutuante por $F = F(b, n, e_1, e_2)$ onde b é a base, n é a precisão, e_1 é o menor expoente e e_2 é o maior expoente que pode ser armazenado internamente na máquina. Exemplos de sistema de ponto flutuante: HP 25 : $F(10, 9, -98, 100)$; HP 41c: $F(10, 10, -98, 100)$.

5) Para qualquer mantissa m vale: $b^{-1} \leq m < 1$. Os números de ponto flutuante não são uniformemente distribuídos em \mathbb{R} (ver referência [1] páginas 29 e 30).

0.3 PRECISÃO E EXATIDÃO DAS MÁQUINAS DIGITAIS

A precisão de uma máquina digital é definida como o número de dígitos da mantissa dessa máquina.

Exatidão é a medida de perfeição de um resultado. A exatidão depende dos fatores máquina e algoritmo enquanto a precisão só depende da máquina utilizada.

Exemplo: Seja o número irracional $\sqrt{2} = 1.414213562\dots$

(1) 1.4142 é mais preciso e mais exato que 1.41

(2) 1.4149 é mais preciso e menos exato que 1.414

0.4 NÚMERO DE MÁQUINA

Um número que pode ser representado com exatidão em um computador é denominado um NÚMERO DE MÁQUINA.

Exemplo: Seja uma máquina cuja precisão é de 8 dígitos binários.

(a) $n_1 = 0.11100110 \times 2^2$ e seu consecutivo $n_2 = 0.11100111 \times 2^2$

cujo correspondente na base 10 são respectivamente:

$$(3.59375)_{10} \quad e \quad (3.609375)_{10}$$

Desta forma podemos observar que o conjunto dos Números de Máquina formam um subconjunto dos Reais.

0.5 ERROS COMPUTACIONAIS

A Matemática Numérica se ocupa com o cálculo de grandezas, as quais são dadas entre outras por fórmulas, equações e valores limites. Pelo fato de não podermos operar com o conjunto dos números reais e sim com um subconjunto $N \subset \mathbb{R}$ e N finito

poderão ocorrer diversos problemas: ERROS.

TIPOS DE ERROS

- a- Erro nos dados de entrada
- b- Erro de modelo
- c- Erro de truncamento
- d- Erro de arredondamento

a- ERRO NOS DADOS DE ENTRADA

As fórmulas matemáticas contém certos parâmetros como distância, tempo, temperatura, etc, cujos valores são obtidos por aparelhos com exatidão as vezes muito limitada (construção do aparelho, regulagem, mudança de temperatura, etc). Esses erros infelizmente não podem ser evitados.

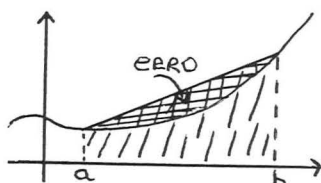
b- ERRO DE MODELO

Provém das simplificações das situações reais que fazemos através de modelos (procedimentos).

Exemplo: A integral definida $I = \int_a^b f(x) dx$, pode ser

aproximada pela fórmula dos Trapézios $I \sim \frac{b-a}{2} [f(a) + f(b)]$.

Na figura abaixo temos uma ilustração geométrica do erro ao usarmos o modelo acima, para calcular o valor de I .



c- ERRO DE TRUNCAMENTO

Este erro decorre da substituição de qualquer processo

ou fórmula infinita por uma finita. A diferença entre a solução do problema dado e a do processo numérico chama-se erro de TRUNCAMENTO.

Exemplo: Seja $\text{sen } x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} - \dots$
substituindo-se $\text{sen } x$ pelo polinômio do 5º grau

$P_5(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!}$; podemos calcular o valor numérico do polinômio e utilizá-lo como solução aproximada de $\text{sen } x$.

O erro de truncamento neste caso é definido por $E = \text{sen } x - p_5(x)$. Como o valor de $\text{sen } x$ não é conhecido, não poderemos avaliar o erro de truncamento. Em análise numérica são pesquisados resultados que permitam estimar, sem utilizar o valor exato de $\text{sen } x$, um número e_T tal que

$$| \text{sen } x - p_5(x) | \leq e_T$$

d - ERRO DE ARREDONDAMENTO

Ao associarmos a um número Real de x um número de máquina Δx , cometemos um erro que se propaga durante a execução do algoritmo com que se trabalha, e o efeito final desses erros é dito erro de ARREDONDAMENTO.

Teoricamente o erro de arredondamento define-se pela diferença entre a solução (exata) do processo numérico e a solução calculada, obtida após sua execução.

Exemplo: Algoritmo numérico: $S = 1/3 + 1/3 + 1/3$

Solução Exata: $S = 1$

Solução Calculada: Supondo uma máquina que opere com 3 dígitos de precisão, teremos:

$$S = 0.333 + 0.333 + 0.333 = 0.999$$

$$\text{Erro de arredondamento: } 1 - 0.999 = 0.001$$

Vamos analisar dois tipos de arredondamentos:

1º ARREDONDAMENTO TIPO CORTE (cancelamento). As casas decimais em excesso são simplesmente abandonadas.

Exemplo: $x = 1/3 = 0.33333\dots$ seria representado por $\Delta x = 0.3333 \times 10^0$ numa máquina de precisão de quatro algarismos significativos.

$$y = 0.66666\dots \quad \Delta y = 0.6666 \times 10^0$$

2º ARREDONDAMENTO PARA O NÚMERO MAIS PRÓXIMO DE MÁQUINA. Se a máquina trabalha com "d" algarismos significativos para a mantissa de um número (precisão da máquina) então analisa-se o

algarismo de ordem "d+1" e, se este for maior ou igual a 5 soma-se uma unidade ao algarismo de ordem "d". Caso contrário, o algarismo de ordem "d" permanece inalterado.

Exemplos: $x = 0.666\dots$ $d = 5$ então $\Delta x = 0.66667 \times 10^0$
 $x = -0.0004235437$ $d = 4$ então $\Delta x = -0.4235 \times 10^{-3}$

0.6 MEDIDAS DE EXATIDÃO

Ao operarmos com um certo número $x \in \mathbb{R}$ num computador, se ele não pertencer ao conjunto de números de máquina N , estaremos na verdade trabalhando com um número $\Delta x \in N \subset \mathbb{R}$. Faz-se necessário então, medir a exatidão que foi obtida. Veremos a seguir dois tipos de medidas de exatidão:

ERRO ABSOLUTO

Será anotado por E_x e definido por: $E_x = x - \Delta x$ ou $E_x = \Delta x - x$, onde x : valor exato e Δx : valor aproximado. Em geral, estamos interessados no valor absoluto do erro absoluto

ERRO RELATIVO

Anotaremos esse erro por R_x e será definido por :

$R_x = \frac{E_x}{x}$ ou $R_x = \frac{E_x}{\Delta x}$, o erro relativo nos fornece o erro cometido por unidade de valor exato. Como não conhecemos, em geral, o valor exato de x precisamos obter limites para o erro absoluto e relativo: $|E_x| \leq L_1$ e $|R_x| \leq L_2$

COTA SUPERIOR PARA O ERRO ABSOLUTO DE UM VALOR APROXIMADO

Considerando d , o número de algarismos fracionários de um número arredondado, temos:

- Se o arredondamento é por corte: $|E_x| \leq 10^{-d}$
- Se o arredondamento é para o número mais próximo de máquina:

$$|E_x| \leq \frac{1}{2} * 10^{-d}$$

Exemplos:

$$\Delta x = 726.54 \text{ (arred. p/ n}^\circ \text{ + próximo)} |E_x| \leq 0.5 * 10^{-2}$$

$$\Delta x = 726.537 \text{ (arred. p/ n}^\circ \text{ corte)} |E_x| < 10^{-3}$$

$$\Delta x = 726.53 \text{ (arred. p/ n}^\circ \text{ corte)} |E_x| < 10^{-2}$$

$$\Delta x = 0.726537 \times 10^3 \text{ (arred. p/ n}^\circ \text{ + próx)} |E_x| < 0.5 * 10^{-6} * 10^3 = 0.5 * 10^{-3}$$

0.7 DÍGITOS SIGNIFICATIVOS EXATOS DE UM VALOR APROXIMADO (DIGSE)

Dado um número Δa aproximado de um valor exato a , se $|R_a| \leq \frac{1}{2} * 10^{-n}$, diremos que a aproximação Δa tem pelo

menos n dígitos significativos exatos.

Exemplo: $X = 0.435795 * 10^{-3}$ e $\Delta X = 0.43521 * 10^{-3}$

$$|R_x| = \frac{|x-\Delta x|}{|x|} = \frac{5.85 * 10^{-7}}{0.435795 * 10^{-3}} = 0.1342 * 10^{-2} < 0.5 * 10^{-2}$$

... $n = 2$, logo a aproximação Δx possui dois dígitos significativos exatos: 4 e 3.

Isolando-se n na expressão do erro relativo acima: $|R_x| \leq \frac{1}{2} * 10^{-n}$, obtém-se uma outra forma de determinar o número de dígitos significativos exatos de uma aproximação.

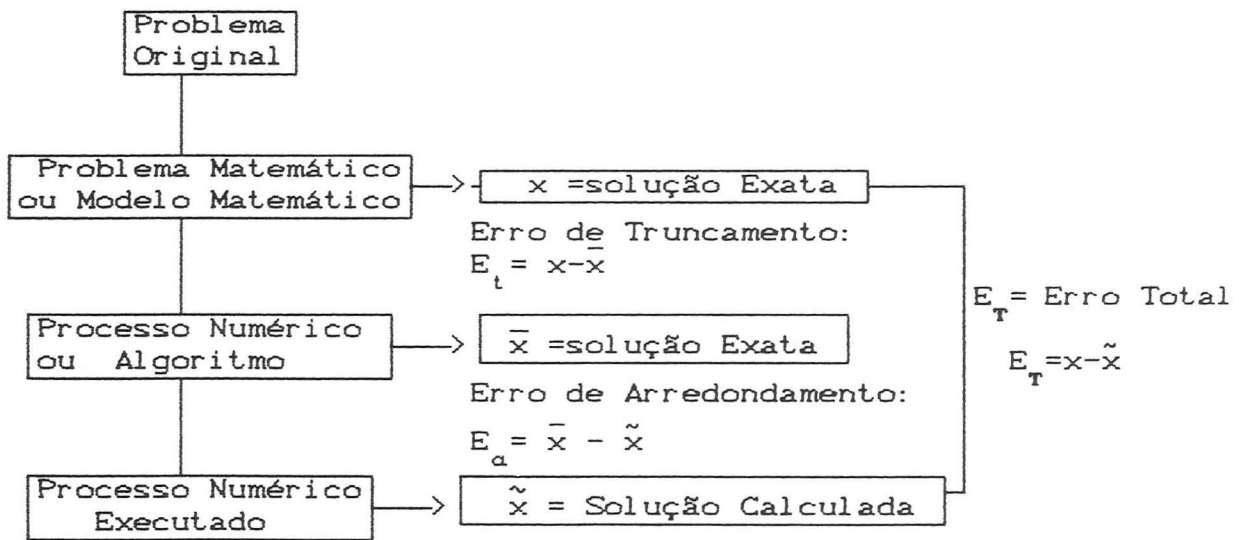
DIGSE ($\Delta x, x$) = $-(0.3 + \log(\mu + \frac{|x-\Delta x|}{|x|}))$, μ : unidade de arredondamento da máquina.

$\mu = \frac{1}{2} * 10^{1-m}$. m : nº de algarismos da mantissa da máquina.

* Na prática, geralmente não conhecemos o valor exato de x , e teremos então, que usar duas aproximações consecutivas de x , mas ficando sujeito a algum problema.

DIGSE (x_k, x_{k+1}) = $-(0.3 + \log(\mu + |x_{k+1} - x_k| / |x_{k+1}|))$
 DIGSE de x_k em relação a x_{k+1}

0.8 REPRESENTAÇÃO ESQUEMÁTICA DA RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE UM PROBLEMA GENÉRICO



Então $E_T = E_t + E_a$ ou $E_T = x - \tilde{x}$

* Observação

É importante salientar que numa máquina digital não são válidas as propriedades dos números reais de distributividade e associatividade em relação a adição, subtração, multiplicação e divisão.

Exemplo: $x_1 = 0.3491 \times 10^4$ e $x_2 = 0.2345 \times 10^0$

suponha que as operações sejam processadas numa máquina com precisão de 4 dígitos significativos

$$(x_2 + x_1) - x_1 = (0.2345 \times 10^0 + 0.3491 \times 10^4) - 0.3491 \times 10^4 = 0.000$$

$$x_2 + (x_1 - x_1) = 0.2345 \times 10^0 + (0.3491 \times 10^4 - 0.3491 \times 10^4) = 0.2345 \times 10^0$$

0.9 ACUMULAÇÃO DE ERROS

Suponha que desejamos somar dois números de ponto flutuante, por exemplo:

$$x_1 = 349,53 = 0.34953 \times 10^3$$

$$x_2 = 14,987 = 0.14987 \times 10^2$$

numa máquina de precisão = 5 dígitos significativos.

Para somar números em ponto flutuante, precisa-se em primeiro lugar alinhar os pontos decimais dos números. Para alinhar devemos desnormalizar o número com o menor expoente, deslocando sua fração para a direita o número de casas necessário, que é, a diferença entre os dois expoentes. Então

$$\begin{aligned}x_1 + x_2 &= 0.34953 \times 10^3 + 0.014987 \times 10^3 \\ &= (0.34953 + 0.014987) \times 10^3 \\ &= 0.364517 \times 10^3\end{aligned}$$

Como resposta poderemos obter $x_1 + x_2 = 0.36451 \times 10^3$ ou $x_1 + x_2 = 0.36452 \times 10^3$ dependendo do tipo de arredondamento da máquina utilizada.

Vamos citar agora alguns procedimentos inexatos que podem nos levar a situações desagradáveis de erros.

- O primeiro caso é quando em uma máquina de precisão definida n, tentamos somar duas grandezas bastante desproporcionadas.

Por exemplo, sendo uma delas inteira muitas vezes maior que a unidade e a outra fracionada muito pequena. Na soma só restará a informação trazida pela maior grandeza, pois qualquer máquina

representa preferencialmente os números mais significativos, perdendo-se completamente a outra informação.

- Um segundo caso, ocorre quando nas mesmas condições de precisão limitada, tentamos subtrair grandezas muito próximas.

Exemplo: Sejam os valores: $x = 3.91543782$ e $\Delta x = 3.915438$

$y = 3.91542534$ e $\Delta y = 3.915425$

$\text{dif.} = x - y = 0.00001248$ e $\Delta \text{dif.} = 0.000013$

$$|E_{\text{dif}}| = |\text{dif.} - \Delta \text{dif.}| = |0.1248 \times 10^{-4} - 0.1300 \times 10^{-4}| \\ = 0.5200 \times 10^{-6}$$

$|R_{\text{dif}}| = 0.5200 \times 10^{-6} / 0.1248 \times 10^{-4} = 4.16666 \times 10^{-2} \cong 0.0417$
ou 4.17 %.

Em outros tipos de cálculo com multiplicações e divisões pode ocorrer que o resultado caia dentro da região de Over/Under/flow donde não pode ser mais recuperado, quando por uma simples troca na disposição dos termos, isto poderia ser evitado.

Exemplo 1) CÁLCULO DE EXPONENCIAIS (e^{-x}), $x \in \mathbb{R}$ POR SÉRIE DE TAYLOR

Calcular $e^{-5.5}$ em uma máquina digital com precisão de 5 algarismos significativos e arredondamento para o nº mais próximo de máquina (arred. após cada operação)

$$e^{-x} = 1 - x/1! + x^2/2! - x^3/3! + x^4/4! - x^5/5! + \dots$$

$$e^{-5.5} = 1 - 5.500 + 15.125 - 27.730 + 38.129 - 49.942 + \dots \\ - 3.4902 + 1.5997 - \dots = + 0.0026363 \text{ (com 25 termos).}$$

Na realidade $e^{-5.5} = 0.0040868$ o que ocorreu? Temos parcelas que desprezam toda grandeza inferior a 10^{-9} enquanto que o resultado real (0.0040868) é constituído de grandezas quase que exclusivamente desta ordem.

Causas deste erro: adição de grandezas de diferentes ordens; subtração de grandezas muito próximas.

Solução: calcular $e^{-5.5} = 1/e^{5.5} = 0.0040865$ (na mesma máq.).

Exemplo 2) SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES QUADRÁTICAS

Para a solução da equação $ax^2+bx+c=0$ com $a \neq 0$, b e c reais

temos as fórmulas: $x_1 = (-b + \sqrt{b^2 - 4ac}) / (2a)$ e $x_2 = (-b - \sqrt{b^2 - 4ac}) / (2a)$

Note que se $4ac$ for muito pequeno comparado com b^2 , sofreremos uma perda de significação no cálculo da raiz. Além de podermos

ter uma subtração de grandezas muito próximas. Para um procedimento mais correto, usa-se o algoritmo:

$$\text{Se } b > 0 \Rightarrow x_1 = (-b - \sqrt{b^2 - 4ac}) / (2a) \quad \text{e} \quad x_2 = c / (ax_1)$$

$$\text{Se } b < 0 \Rightarrow x_1 = (-b + \sqrt{b^2 - 4ac}) / (2a) \quad \text{e} \quad x_2 = c / (ax_1)$$

Este processo impede que se faça uma segunda subtração na fórmula além daquela que ocorre inevitavelmente no radical.

Exemplo: Calcular as Raízes de $x^2 + 80x + 1 = 0$ com precisão de 3 dígitos significativos e arredondamento por corte.

Solução Comum : $x^2 + 80x + 1 = 0$

$$\sqrt{b^2 - 4ac} = \sqrt{80^2 - 4} = 79.9$$

$$x_1 = (-80.0 - 79.9) / 2 = -79.9$$

$$x_2 = (-80.0 + 79.9) / 2 = -0.0500$$

Solução Sugerida : $x^2 + 80x + 1 = 0$ $b > 0$

$$\sqrt{b^2 - 4ac} = 79.9$$

$$x_1 = (-80.0 - 79.9) / 2 = -79.9 \quad x_2 = 1 / (1.0 (-79.9)) = -0.0125$$

Exemplo 3) Dado o sistema de equações lineares

$$\begin{cases} x + 5y = 17 \\ 1.5x + 7.501y = 25.503 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{a solução exata é :} \\ x = 2 \quad \text{e} \quad y = 3 \end{array}$$

Já o mesmo sistema linear afetado de um erro de 0.002 no elemento (25.503) do vetor independente, nos fornece como resultado :

$$\begin{cases} x + 5y = 17 \\ 1.5x + 7.501y = 25.501 \end{cases} \quad x = 12 \quad \text{e} \quad y = 1$$

0.10 PROPAGAÇÃO DE ERROS NAS OPERAÇÕES ARITMÉTICAS

Vimos que a conversão de um número real num número de máquina introduz usualmente um erro. Se a dois números de máquina em ponto flutuante, forem aplicadas operações aritméticas, sejam esses números exatos ou não, podem essas operações introduzirem erros de arredondamento.

Exemplo: Sejam os números (a) $0.5624 \times 10^3 = 562,4$ e

(b) $0.4213 \times 10^{-2} = 0.004213$ e vamos

supor que a precisão de nossa máquina seja de 4 algarismos e que os dois números (a) e (b) sejam exatos.

Façamos o produto de (a) por (b).

$(0.5624 \times 10^3) \cdot (0.4213 \times 10^{-2}) = 2.3693912$, mas como $n = 4$, o resultado é $2.369 = 0.2369 \times 10^1$

- O erro absoluto do resultado é: $E_p = 3.912 \cdot 10^{-4}$ (erro introduzido pela limitação da máquina).

Vamos a seguir, analisar a propagação dos erros em cada operação aritmética.

Adição: Sejam Δx e Δy valores aproximados de x e y respectivamente. Sejam e_x e e_y os erros em x e y .

temos então: $S = x + y$ soma exata

$$\Delta S = \Delta x + \Delta y \quad \text{soma aproximada}$$

$$e_s = S - \Delta S = (x+y) - (\Delta x + \Delta y) = e_x + e_y;$$

$$|e_s| \leq |e_x| + |e_y|$$

Note que desprezamos o erro de arredondamento que surge na adição de x com y . Este erro, então representa o erro na soma devido aos erros dos números a serem adicionados e nada mais.

Subtração: de maneira similar obtemos

$$e_{x-y} = e_x - e_y$$

$$|e_{x-y}| \leq |e_x| + |e_y|$$

Multiplicação: $e_{x \cdot y} \cong \Delta x \cdot e_y + \Delta y \cdot e_x$ ou

$$|e_{x \cdot y}| \leq |\Delta x| \cdot |e_y| + |\Delta y| \cdot |e_x|$$

Divisão: $|e_{x/y}| \leq \frac{|\Delta y| \cdot |e_x| + |\Delta x| \cdot |e_y|}{(\Delta y)^2}$

*Quando dividimos um número de ponto flutuante por outro muito pequeno, a propagação do erro é muito grande.

Exemplo: $\Delta x = 3.2548 \quad |e_x| \leq 0.5 \times 10^{-4}$

$\Delta y = 0.0351 \quad |e_y| \leq 0.5 \times 10^{-4}$

$$|e_{x/y}| \leq 0.1335 < 0.5 \times 10^0$$

As fórmulas apresentadas dão o erro no resultado de cada uma das quatro operações aritméticas como funções de Δx , Δy , e_x e e_y , supondo-se inexistência de erro de arredondamento no resultado de cada operação. Para saber como este erro se propaga em outras operações aritméticas, devemos somar ainda o erro de arredondamento explicitamente.

Sejam $x = \Delta x + e_x$ e $y = \Delta y + e_y$ e representemos por W uma operação aritmética qualquer. Em geral, não efetuaremos a operação W exatamente, mas antes uma pseudo operação W^* . Portanto, em vez de obtermos o resultado $x W y$, obteremos $\Delta x W^* \Delta y$. Para estimar

a diferença destes dois resultados, podemos escrever:

$x \ W \ y - \Delta x \ W^* \ \Delta y = (x \ W \ y - \Delta x \ W \ \Delta y) + (\Delta x \ W \ \Delta y - \Delta x \ W^* \ \Delta y)$
<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> Erro introduzido pelos valores Erro introduzido pela máquina </div>

A diferença entre o resultado verdadeiro e o aproximado consiste portanto, de duas partes.

0.11 PROCESSOS INFINITOS - SEQUÊNCIAS E MÉTODOS ITERATIVOS

Processos numéricos infinitos podem ser definidos como métodos de cálculo que fornecem o valor exato procurado com um número infinito de operações.

A condição de exatidão do processo, com um número infinito de operações nos induzirá sempre a truncá-lo após certo número finito das mesmas. Isto fornecerá portanto uma aproximação.

Erro de truncamento de um processo infinito é o erro absoluto do resultado obtido com um número finito de operações.

Exemplo:

$$e = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \quad \text{se truncarmos a série com } n \text{ finito, teremos}$$

$$e' = \sum_{i=0}^n \frac{1}{i!} \quad \text{e o erro de truncamento será : } \text{ERRO} = \sum_{i=n+1}^{\infty} \frac{1}{i!}$$

SEQUÊNCIA : Uma sequência de números reais é um conjunto finito ou infinito de valores ordenados: $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ representados por $\langle x_n \rangle$ onde x_n é chamado termo geral. Uma sequência é infinita se contiver um número infinito de elementos.

CONVERGÊNCIA : Uma sequência infinita de números $\langle x_n \rangle$ converge para um valor x se $\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - x| = 0$

Quando a sequência é truncada em x_n , o erro de truncamento é dado por $e_n = |x_n - x|$.

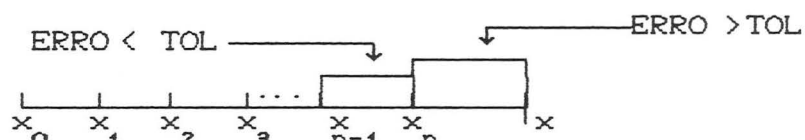
Podemos verificar dois tipos de convergência.

Caso A $\overbrace{x_0 \quad x_1 \quad x_2 \quad x_3 \quad \dots \quad x_{n-1} \quad x_n} \quad | \quad x$

Caso B $\overbrace{x_0 \quad x_2 \quad x_4 \quad \dots \quad x \quad \dots \quad x_5 \quad x_3 \quad x_1} \quad | \quad x_n - x| < |x_n - x_{n-1}|$

Então se o processo infinito converge, a sequência x_0, x_1, x_2, \dots se aproxima indefinidamente do resultado procurado x , de modo

que sempre teremos um valor aproximado de x . Como na prática x é um valor desconhecido, adota-se então comparar o erro, entre os valores x_n e x_{n-1} de dois passos consecutivos, isto é, se $|e_{x_n}| = |x_n - x_{n-1}| < \text{TOL}$, supomos o processo convergente, sendo x_n o provável valor aproximado de x . Se a convergência é alternada (caso B), podemos afirmar que o valor x_n , realmente é uma aproximação de x com erro menor que TOL, caso contrário (caso A), o critério pode falhar, como mostra o esquema:



$|x_n - x_{n-1}| < \text{TOL}$ e $|x - x_n| > \text{TOL}$, mas em geral isto não acontece.

MÉTODO ITERATIVO é um método recursivo infinito, no qual o valor x_n obtido no n -ésimo passo é função somente do valor x_{n-1} do passo anterior. Cada passo no método iterativo é denominado de iteração.

Fórmula de Recorrência: $x_i = G(x_{i-1})$, $i=1, 2, 3, \dots$ com x_0 o valor inicial. A função G é denominada função de iteração do método.

0.12 INSTABILIDADE

Muitos problemas ao serem resolvidos podem fornecer diferentes soluções dependendo da maneira como são solucionados. Existe, é lógico, muitos problemas em que não influi no resultado a maneira pelo qual foram resolvidos.

A instabilidade é entendida como uma "sensibilidade a perturbações" e pode ocorrer tanto no problema em si como no algoritmo, ou seja, na maneira de resolvê-lo.

INSTABILIDADE DO ALGORITMO

Exemplos: O cálculo de e^{-x} por série de Taylor já examinado na página 10.

A resolução de equações quadráticas pela fórmula de Báskara também já explicado e exemplificado na pág. 10.

INSTABILIDADE DO PROBLEMA

Exemplo 1: Seja o polinômio:

$$p(x) = x^{20} - 210x^{19} + \dots = (x-1)(x-2)(x-3) \dots (x-19)(x-20) = 0$$

as raízes de $p(x) = 0$ são 1, 2, 3, 4, ..., 19, 20

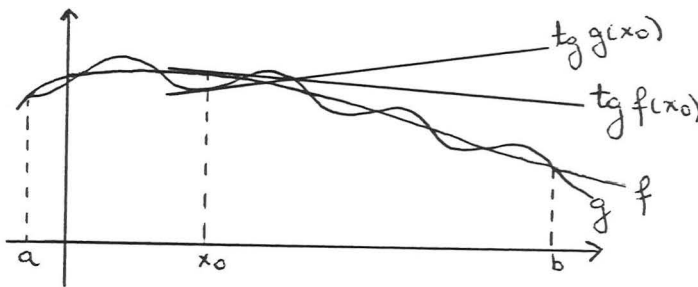
se calcularmos as raízes de $p(x) - 2^{-23} * x^{19}$ num sistema de ponto

flutuante teremos:

$R_1 = 1$	$R_8 = 8.007267603$
$R_2 = 2$	$R_9 = 8.917250249$
$R_3 = 3$	$R_{10}, R_{11} = 10.095266145 \pm 0.643500904i$
$R_4 = 4$	$R_{12}, R_{13} = 11.793633881 \pm 1.652329728i$
$R_5 = 4.999999928$	$R_{14}, R_{15} = 13.992358137 \pm 2.518830070i$
$R_6 = 6.000006944$	$R_{16}, R_{17} = 16.730737466 \pm 2.812624894i$
$R_7 = 6.999697234$	$R_{18}, R_{19} = 19.502439400 \pm 1.940330347i$
	$R_{20} = 20.846908101$

a alteração no coeficiente de x^{10} foi insignificante para a alteração que ocorreu nas raízes. Isto não dependeu do algoritmo nem do arredondamento e sim um problema de condicionamento. Resolvido num computador com sistema de ponto flutuante de base = 2 e mantissa com 90 algarismos binários.

Exemplo 2: Dada uma curva $y = f(x)$, determinar a tangente a essa curva em $x = x_0$ e assim como a área limitada por esta curva e as retas $x = a$, $x = b$ e $y = 0$



Se pequenas variações ocorrem em $f(x)$ em virtude, por exemplo de arredondamento ou de truncamento podemos ter grandes variações no cálculo da tangente à curva no ponto $(x_0, f(x_0))$, onde a curva g constitui uma perturbação na curva f . No entanto, a área sob a curva f ou g mantém-se praticamente a mesma.

RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES NÃO LINEARES
EQUAÇÕES ALGÉBRICAS E TRANSCENDENTAIS

1.1 Introdução

Resolver uma equação $f(x)=0$ consiste em determinar os valores de x para os quais é satisfeita a igualdade acima.

EQUAÇÕES ALGÉBRICAS - São aquelas em que a função $f(x)$ só contém operações algébricas, repetidas um número finito de vezes.

Exemplos: $f(x) = -7x^5 + 2x^9 + 9 = 0$

$$f(x) = x^8 - 3x^7 + 4x = 0$$

$$f(x) = -\sqrt{x} + x^2 - 1 = 0$$

EQUAÇÕES TRANSCENDENTAIS - são aquelas em que a incognita x aparece submetida a operação não algébrica em pelo menos um termo da função.

Exemplos: $f(x) = 0.5x + \log x + x^2 = 0$

$$f(x) = e^{-x^2} + \cos x = 0$$

$$f(x) = \operatorname{tg} x + x^4 - x^3 = 0$$

Importância: A necessidade da determinação de raízes de equações não lineares aparece em vários problemas, tais como:

- Cálculo de máximos e mínimos
- Problemas de valores próprios
- Estabilidade de sistemas

Dificuldades: São raras as fórmulas analíticas para a determinação das raízes de $f(x)=0$

Exemplos: $p_2(x) = ax^2 + bx + c = 0$ usa-se a fórmula de Báskara

$p_3(x) = 0$ usa-se a fórmula de Cardan

$p_4(x) = 0$ usa-se a fórmula de Ferrari

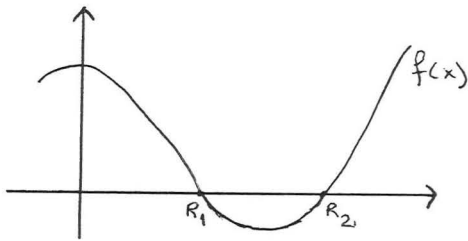
Teorema de Abel-Galois

"Para $n \geq 5$ não existe nenhuma fórmula racional finita capaz de calcular as raízes de um polinômio arbitrário de grau n "

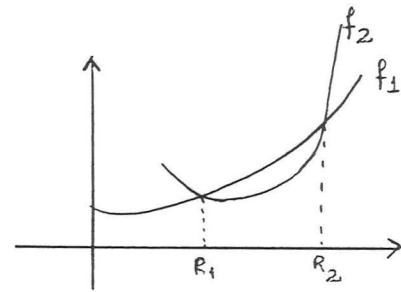
Por esses motivos, sente-se a necessidade de métodos numéricos para resolver este tipo de problema.

1.2 TÉCNICAS DE SEPARAÇÃO DAS RAÍZES REAIS DE $f(x) = 0$

a) Gráfica - O processo consiste em representar no plano cartesiano alguns pontos $(x, f(x))$. Os valores para os quais $f(x) \simeq 0$ são as aproximações para as raízes da função.



ou



$$f(x) = 0$$

$$f(x) = f_1(x) - f_2(x) = 0$$

$$f_1(x) = f_2(x)$$

b) Procedimento Analítico - Seja $f(x)$ uma função contínua em um certo intervalo $[a, b]$

1- Se $f(a) * f(b) < 0 \rightarrow \exists$ um número ímpar de raízes reais neste intervalo (1, 3, 5, 7, 9, ...).

2- Se $f(a) * f(b) > 0 \rightarrow \exists$ um número par de raízes reais em $[a, b]$ (0, 2, 4, 6, ...)

3- Supondo que a f e a f' são contínuas em $[a, b]$ e o sinal de f' é constante em $[a, b]$, isto é, f é monótona em $[a, b]$, tem-se:

- se $f(a) * f(b) < 0 \rightarrow \exists$ uma única raiz real em $[a, b]$

- se $f(a) * f(b) > 0 \rightarrow$ não \exists raiz real em $[a, b]$

Exemplos: Determinar graficamente os intervalos que contém cada uma das raízes reais da função abaixo:

1) $f(x) = x^3 - \text{sen } x$

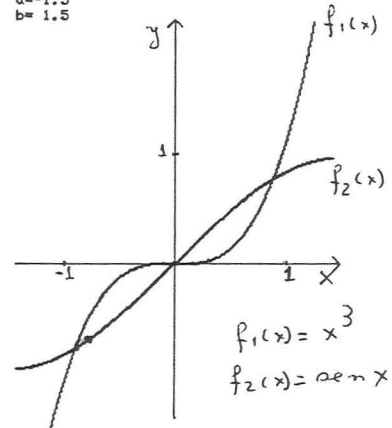
x	f(x)
$-\pi$	-31.006
$-\pi/2$	-2.876
-1	-0.159
-0.5	0.354
0	0
0.5	-0.354
1	0.159

$$R_1 = 0$$

$$R_2 \in [-1; -0.5]$$

$$R_3 \in [0.5; 1]$$

GRAFICO
a=-1.5
b=1.5



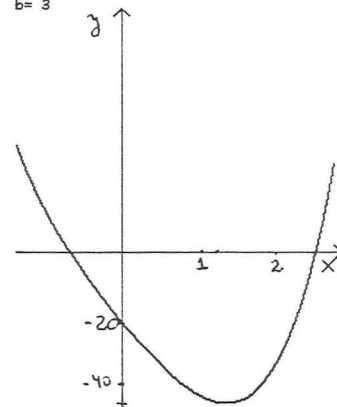
2) $f(x) = x^4 + 4x^2 - 24x - 20 = 0$

x	f(x)
-2	60
-1	9
-0.5	-6.938
0.5	-30.938
1	-39
2	-36
3	25

$$R_1 \in [-1; -0.5]$$

$$R_2 \in [2; 3]$$

GRAFICO
a=-1.5
b=3



1.3 ALGORITMO DE QUEBRA - MÉTODO DA BISSECÇÃO OU DICOTOMIA

Dada uma função f contínua em um intervalo $[a, b]$ e satisfazendo a condição $f(a) * f(b) < 0$, ou seja, $f(x)$ corta o eixo dos x num ponto em $[a, b]$.

1) Divide-se o intervalo $[a, b]$ em duas partes iguais, $x_m = \frac{a+b}{2}$ então $[a; x_m]$ e $[x_m; b]$ são dois novos intervalos

2) Se $f(x_m) \neq 0$ e $f(a) * f(x_m) < 0$, então $b = x_m$ e a raiz estará neste intervalo $[a; x_m]$; volta-se para (1)

Se $f(x_m) * f(b) < 0$, então $a = x_m$ e a raiz estará no intervalo $[x_m; b]$; volta-se para (1)

3) Repete-se o processo voltando para (1), até que tenhamos chegado "suficientemente perto da raiz", ou seja, tenha-se um critério de parada satisfeito, como por exemplo:

DIGSE $(x_m) \geq t$ e $f(x_m) < \varepsilon$

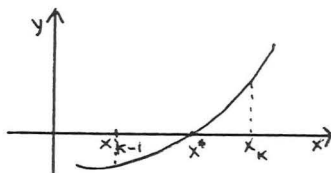
Características do método - Simples

- Convergência lenta mas garantida

Observações:

1) O método permite isolar raízes reais de $f(x)$

2) O limite de erro é direto: Seja $[x_{k-1}; x_k]$ um intervalo com $f(x_{k-1}) * f(x_k) < 0 \Rightarrow |x_k - x^*| \leq |x_k - x_{k-1}|$, isto é, o método é sempre convergente.



$$|x^* - x_k| < |x_k - x_{k-1}|$$

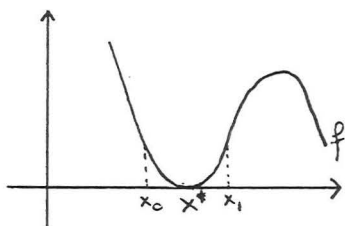
3) Problemas:

Baixa velocidade de convergência-

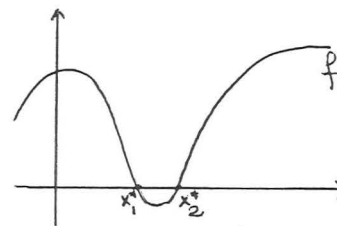
DIGSE $(x_{k+1}) - \text{DIGSE}(x_k) \approx 0.30$, isto é: a cada 3.3 iterações obtemos 1 dígito significativo exato a mais.

Velocidade de convergência $\approx 0.3 \text{ DIGSE} / \text{BISSECÇÃO}$

No método da Bissecção o intervalo é sempre reduzido a metade a cada nova divisão.



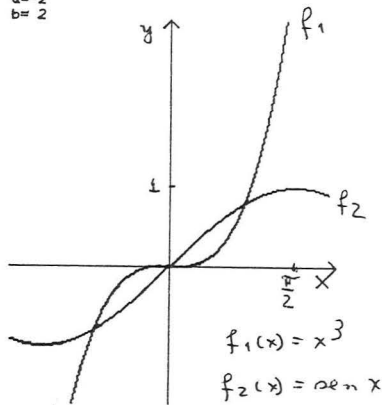
a condição $f(x_0) * f(x_1) < 0$, não é satisfeita.



raízes muito próximas

Exemplo 1: Calcular uma aproximação para uma das raízes de $f(x) = x^3 - \text{sen } x$ pelo método da Bissecção com pelo menos 6 DIGSE

GRAFICO
a=-2
b=2



$R_1 \in [-1 ; -\pi/4]$
 $R_2 = 0$
 $R_3 \in [\pi/4 ; 1]$

m	a	sinal f(a)	b	sinal f(b)	x_m	$f(x_m)$
1	0.785398164	-	1.00000000	+	0.892699082	-0.067365
2	0.892699082	-	1.00000000	+	0.946349541	0.0362426
3	0.892699082	-	0.946349541	+	0.919524312	-0.01783
4	0.919524312	-	0.946349541	+	0.932936927	0.008626
5	0.919524312	-	0.932936927	+	0.926230619	-0.0047446
6	0.926230619	-	0.932936927	+	0.929583773	0.001906
7	0.926230619	-	0.929583773	+	0.927907196	-0.001428
8	0.927907196	-	0.929583773	+	0.928745485	⋮
	⋮		⋮		⋮	⋮

$R = 0.928626$ com 6 DIGSE

Exercícios:

- 1) Seja $f(x) = x^2 + 1/x - 2$. Determinar por Bissecção uma aproximação para sua raiz negativa com DIGSE $(x_k) \geq 4$. $R \approx -1.618034$
- 2) Determinar todas as raízes de $p(x) = x^3 - 2x^2 + 20x + 30 = 0$. A raiz real deve ter pelo menos DIGSE $(x_k) \geq 6$. $R_1 \approx -1.24736708$
 $R_{2,3} = 1.62368354 \pm 4.62755989 i$

Exemplo 2:

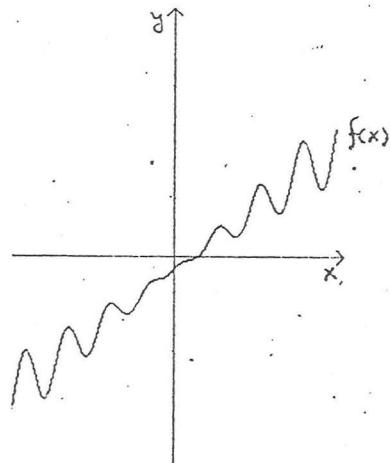
METODO DE BISSECAO

$F(x) = x * \text{COS}(SINX) - 1$

IT.	APROX.	f(x)
1	1.8	1.181869785E-02
2	1.7	-6.95946387E-02
3	1.75	-3.181132863E-02
4	1.775	-1.813855279E-02
5	1.7875	7.8234888E-04
6	1.78125	-4.75273722E-03
7	1.784375	-2.83374961E-03
8	1.7859375	-6.6784179E-04
9	1.78671875	1.67179E-05
10	1.786328125	-3.2568585E-04
11	1.786523438	-1.5452201E-04
12	1.786621894	-6.891841E-05
13	1.786669322	-2.689838E-05
14	1.786694336	-4.69877E-06
15	1.786706543	6.81343E-06
16	1.78670844	6.6178E-07
17	1.786697388	-2.8145E-06
18	1.786698914	-6.7641E-07
19	1.786699677	-7.31E-09
20	1.786700059	3.2762E-07
21	1.786699868	1.6817E-07
22	1.786699773	7.686E-08
23	1.786699725	3.478E-08

RAIZ= 1.786699725
COM 7 ALG.SIG. CORRETOS

grafico da f
a=-12
b=12



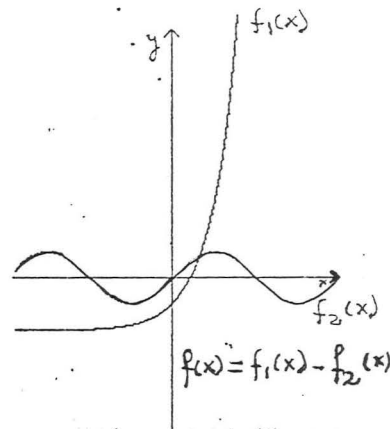
Exemplo 3:

METODO DE BISSECCAO
F(X)=EXP(X)-SIN(X)-2

IT.	APROX.	f(x)
1	1.25	0.541358338
2	1.125	1.779492548E-01
3	1.0625	2.002100895E-02
4	1.03125	-5.337248662E-02
5	1.046875	-1.712918604E-02
6	1.0546875	1.33175028E-03
7	1.05078125	-7.92715794E-03
8	1.052734375	-3.30482636E-03
9	1.053710938	-9.8831906E-04
10	1.054199219	1.7126987E-04
11	1.053955079	-4.0063482E-04
12	1.054077149	-1.1071035E-04
13	1.054138184	2.62728E-05
14	1.054107667	-4.621933E-05
15	1.054122926	-9.9725E-06
16	1.054130555	8.15005E-06
17	1.054126741	-9.1008E-07
18	1.054128648	3.01999E-06
19	1.054127695	1.35614E-06
20	1.054127218	0.000000223
21	1.05412658	-3.4235E-07
22	1.054127899	-5.966E-08
23	1.054127159	8.286E-08
24	1.054127129	1.16E-08

RAIZ= 1.054127129
 COM 7 ALG.SIG. CORRETOS

grafico da f
 a=-6
 b= 6



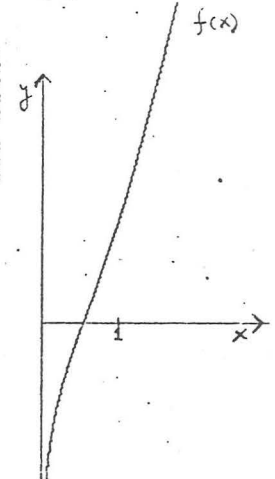
Exemplo 4:

METODO DE BISSECCAO
F(X)=X^2+LN(X)

IT.	APROX.	f(x)
1	0.75	2.748179276E-01
2	0.625	-7.937862923E-02
3	0.6875	9.796280058E-02
4	0.65625	9.450597444E-03
5	0.640625	-3.491062602E-02
6	0.6484375	-1.27184647E-02
7	0.65234375	-1.631263884E-03
8	0.654296875	3.910307434E-03
9	6.533203125E-01	1.139685268E-03
10	6.528320313E-01	-2.45747874E-04
11	6.530761719E-01	4.46978962E-04
12	6.529541016E-01	1.00618121E-04
13	6.528930665E-01	-7.256409E-05
14	6.529235841E-01	1.402731E-05
15	6.529083259E-01	-2.3268941E-05
16	6.529159547E-01	-7.028513E-06
17	6.529197694E-01	3.203407E-06
18	6.529178621E-01	-2.208409E-06
19	6.529188158E-01	4.97646E-07
20	6.52918339	-8.55244E-07
21	6.529185774E-01	-1.78802E-07
22	6.529186966E-01	1.59415E-07
23	0.652918637	-9.684E-09
24	6.529186668E-01	7.4866E-08

RAIZ= 6.529186668E-01
 COM 7 ALG.SIG. CORRETOS

grafico da f
 a= 0
 b= 5



ALGORITMOS ITERATIVOS

- Não apresentam propriedade de quebra
- Não garantem convergência para toda função f contínua.
- Quando convergem são quase sempre mais rápidos.

Exemplos: Iteração Linear, Newton-Raphson, Secantes, Müller, Bairstow, etc.

1.4 MÉTODO DE ITERAÇÃO LINEAR

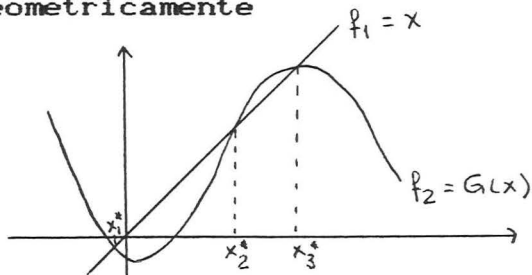
Dada uma função f(x), o método consiste em escrever a equação f(x)=0 na forma x=G(x).

G(x) é dita função de iteração do método. Inicia-se o processo iterativo com um valor x₀, próximo da raiz e as outras aproximações são dadas por :

$$x_{i+1} = G(x_i), \quad i=0, 1, 2, 3, \dots$$

A sequência de aproximações x_i, converge sob certas condições para a solução x* da equação f(x)=0

Geometricamente



Observação: A construção de G não é única.

O problema de achar uma função G(x) apropriada é dito problema de "ponto fixo".

Exemplos de construção da função G(x)

Seja f(x) = 4x sen x - e^x

$$x = \frac{e^x}{4 \text{ sen } x} = G_1(x)$$

$$x = \text{arc sen } \frac{e^x}{4x} = G_2(x)$$

$x = \ln(4x \operatorname{sen} x) = G_3(x)$ $x = x(1 - 4 \operatorname{sen} x) + e^x = G_4(x)$
 Uma Função $G(x)$ só irá convergir para uma determinada raiz de $f(x) = 0$, se satisfizer certas condições de convergência.

TEOREMA DE CONVERGÊNCIA

Seja (a) α um ponto fixo de G em $I = [a, b]$

(b) G e G' contínuas em I .

(c) $K = \max_{x \in I} |G'(x)| < 1$

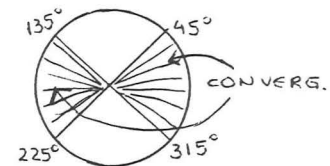
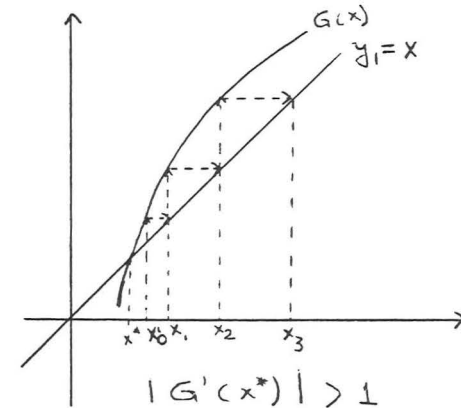
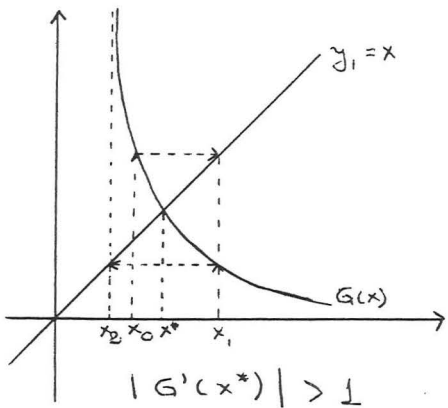
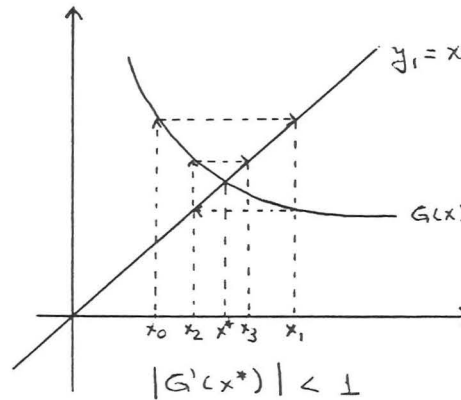
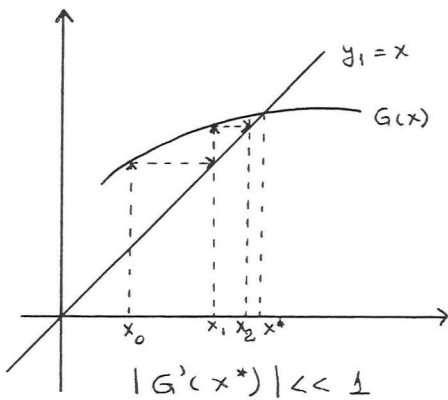
(d) $x_0 \in I, x_{n+1} = G(x_n) \in I, \forall n$

então $x_n \rightarrow \alpha$ quando $n \rightarrow \infty$. Isto é, para $x_0 \in I$ a sequência $x_{n+1} = G(x_n), n = 0, 1, 2, 3, \dots$ converge para a raiz de $f(x) = 0$

Observação: Pode-se mostra que $|e_{n+1}| \leq |e_n| * K$, onde $k = \max_{x \in I} |G'(x)|$ e $|e_n| = |\alpha - x_n|$

A convergência deste método é dita Linear

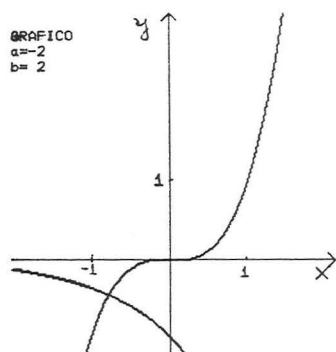
Interpretação Geométrica



Exemplo 1

Calcule a raiz de $f(x) = x^3 + e^x$ pelo método de Iteração Linear.

Pare o processo quando DIGSE $(x_i, x_{i+1}) \geq 5$.



$$R \in [-1, 0]$$

$$x_0 = \frac{-1 + 0}{2} = -0.5$$

$$f(x) = x^3 + e^x = 0$$

$$x^3 = -e^x$$

$$x = (-e^x)^{1/3} = -e^{x/3}$$

$$x_{i+1} = -e^{x_i/3}$$

Convergência: $|G'(x)| < 1, \forall x \in [-1; 0]$?

Prova:

$$G'(x) = (-1/3) * e^{x/3}$$

$$G''(x) = (-1/9) * e^{x/3} = 0 \rightarrow e^{x/3} = 0 \quad (1)$$

não existe valor de x que anule (1) $\therefore G'(x)$ não tem ponto de máximo e nem de mínimo local.

$$|G'(-1)| = 0.2389 \text{ e } |G'(0)| = 0.333 \rightarrow |G'(x)| < 1, \forall x \in [-1, 0]$$

i	x_i (aprox.)	$f(x_i)$	DIGSE (x_i, x_{i+1})
0	-0.50	0.481530660	0.0879
1	-0.846481725	-0.177609316	0.61212
2	-0.754152577	0.041487738	1.2184
3	-0.777723519	-0.01095833	1.8030
4	-0.771636903	0.002805028	2.3931
5	-0.773204044	-0.000723853	2.9819
6	-0.772800243	0.000186405	3.5710
7	-0.772904269	-0.000048028	4.1599
8	-0.772877469	0.000012373	4.7490
9	-0.772884374	-0.000003188	5.3380
10	-0.772882595		

então $R \simeq -0.772884374$ é uma aproximação para a raiz com 5 DIGSE em relação a aproximação seguinte. Como $f(x_i)$ está tendendo a zero e o DIGSE está aumentando podemos confiar na aproximação obtida.

* Podemos dizer que $R = -0.772883 \pm 10^{-6}$?

$$f(-0.772883 - 10^{-6}) = 0.2162 \times 10^{-5}$$

$$f(-0.772883 + 10^{-6}) = -0.2346 \times 10^{-5}$$

Resposta : SIM

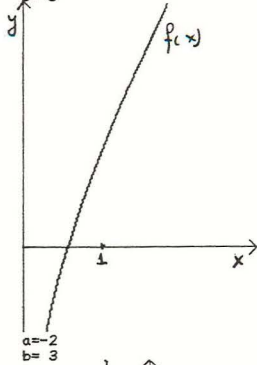
Exemplo 2

METODO DE ITERACAO LINEAR

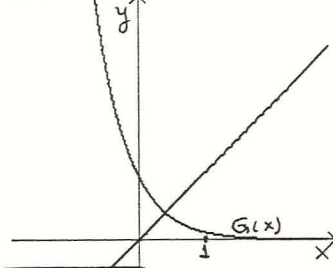
$$F(X) = 2 * X + \text{LN}(X)$$

GRAFICO

a = 0
b = 3



a = -2
b = 3



$$G(X) = \text{EXP}(-2 * X)$$

VALOR INICIAL X0 = 0.5

IT.	APROX.	F(X)
0	0.5	3.068528194E-01
1	3.678794412E-01	-2.642411175E-01
2	4.791417088E-01	2.225245353E-01
3	3.835587176E-01	-1.911819824E-01
4	4.643578886E-01	0.161612742
5	3.950613628E-01	-1.385914517E-01
6	4.527891083E-01	1.174554749E-01
7	4.035022383E-01	-1.005777241E-01
8	4.461944316E-01	0.538838654E-02
9	4.096759221E-01	-7.38370171E-02
10	4.407172145E-01	6.208258283E-02
11	4.141883616E-01	-5.305778571E-02
12	4.367576898E-01	4.513865635E-02
13	4.174813612E-01	-3.855265712E-02
14	4.338986555E-01	3.281858853E-02
15	4.198821044E-01	-2.801701212E-02
16	0.431812329	2.386044927E-02
17	4.216310409E-01	-2.036257624E-02
18	4.303045429E-01	1.734700413E-02
19	4.229044188E-01	-1.480024815E-02
20	4.292100565E-01	1.261127531E-02
21	0.423831159	-1.075779496E-02
22	4.284152609E-01	9.168203779E-03
23	0.424505413	-7.813655837E-03
24	4.278329289E-01	6.665031894E-03
25	4.249958572E-01	-5.684143468E-03
26	4.274184734E-01	4.845252516E-03
27	4.253525485E-01	-4.131865848E-03
28	0.427113676	3.522270959E-03
29	4.256119123E-01	-3.003527318E-03
30	0.426852171	2.568517428E-03
31	4.258085844E-01	-2.183333124E-03
32	4.267311844E-01	1.861360074E-03
33	4.269376228E-01	-1.587123182E-03
34	0.426614175	1.353184354E-03
35	4.268037311E-01	-1.153272612E-03
36	4.265291259E-01	9.83627927E-04
37	4.261097862E-01	-8.38679428E-04
38	4.264673856E-01	7.15838771E-04
39	4.261624739E-01	-6.09663489E-04
40	4.264223688E-01	5.19789761E-04
41	4.262007764E-01	-4.3184835E-04
42	0.426389704	3.7855241E-04
43	4.262286209E-01	-3.22166885E-04
44	4.263659594E-01	2.74678936E-04
45	4.262488626E-01	-2.34193573E-04
46	0.426348699	1.98672723E-04
47	4.262635773E-01	-1.70243382E-04
48	0.426336152	1.45149325E-04
49	4.262742741E-01	-1.23755766E-04
50	4.263270313E-01	1.05514485E-04
51	0.42628285	-8.9962589E-05
52	4.263204812E-01	7.6702487E-05
53	4.262877026E-01	-6.5397244E-05
54	4.263155816E-01	5.575811E-05
55	4.262918117E-01	-4.7538826E-05
56	0.426312878	4.0532551E-05
57	4.262947986E-01	-3.4559479E-05
58	4.263095312E-01	2.964990E-05
59	4.262969702E-01	-2.5122835E-05
60	4.263076798E-01	2.1419241E-05
61	4.262885487E-01	-1.8262225E-05

APROX. P/ RAIZ = 4.263076798E-01
COM 4 ALG. SIG. CORRETOS

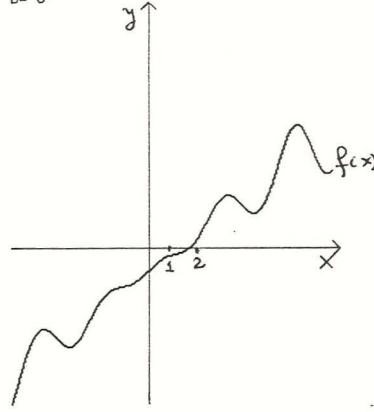
Exemplo 3

METODO DE ITERACAO LINEAR

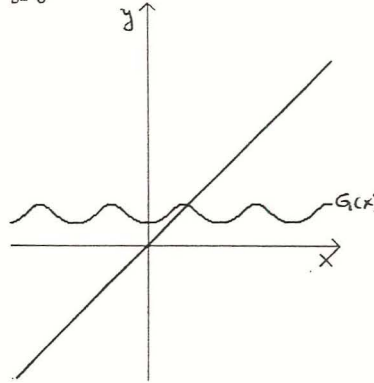
$$F(X) = X * \text{COS}(SIN(X)) - 1$$

GRAFICO

a = -6
b = 8



a = -6
b = 8



$$G(X) = 1 / (\text{COS}(SIN(X)))$$

VALOR INICIAL X0 = 1.5

IT.	APROX.	F(X)
0	1.5	-1.863872432E-01
1	1.84962691	5.280502708E-02
2	1.751158916	-3.006745962E-02
3	1.805444031	1.674658229E-02
4	1.775207007	-9.53368376E-03
5	1.792798841	5.38098384E-03
6	1.783203453	-3.05508725E-03
7	1.78866799	1.72938611E-03
8	1.785580033	-9.8071037E-04
9	1.787332889	5.5560106E-04
10	1.786903169	-3.1494339E-04
11	1.786903169	1.7846882E-04
12	1.786584319	-1.0115175E-04
13	1.786765053	5.732393E-05
14	1.786662634	-3.248869E-05
15	1.786728682	1.841214E-05
16	1.786687785	-1.043515E-05
17	1.78670643	5.91436E-06
18	1.786695863	-3.35179E-06
19	1.786701852	1.83992E-06
20	1.786688457	-1.07711E-06
21	1.786700381	6.1004E-07
22	1.786699231	-3.4581E-07
23	1.786699909	1.9611E-07
24	1.786699559	-1.108E-07
25	1.786699757	6.282E-08
26	1.786699645	-3.535E-08
27	1.786699708	1.989E-08
28	1.786699672	-1.171E-08
29	1.786699693	6.74E-09
30	1.786699681	-3.8E-09
31	1.786699688	2.34E-09

APROX. P/ RAIZ = 1.786699681
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

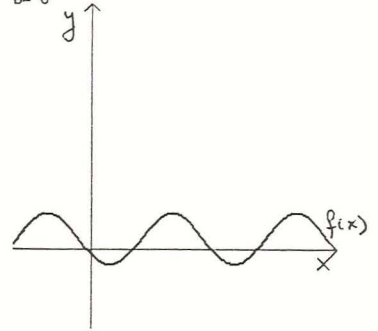
Exemplo 4

METODO DE ITERACAO LINEAR

$$F(X) = 0.6713 - 0.8391 * (\text{COS}(X))^2 - \text{SIN}(X) * \text{COS}(X)$$

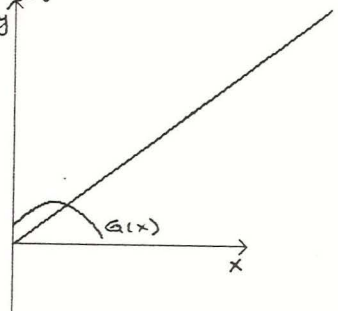
GRAFICO

a = -2
b = 6



GRAFICO

a = 8
b = 6



$$G(X) = \text{ARCCOS}(F(X)) = \text{ARCCOS}(0.6713 - \text{SIN}(X) * \text{COS}(X)) / 0.8391$$

VALOR INICIAL X0 = 1

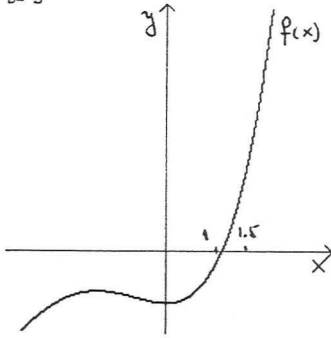
IT.	APROX.	F(X)
0	1	-2.830430815E-02
1	1.037785558	1.70070821E-02
2	1.014910538	-1.060081091E-02
3	1.029104322	6.468648933E-03
4	1.020418783	-4.000938686E-03
5	1.025781635	2.454553581E-03
6	1.02248805	-1.513519722E-03
7	1.024517603	9.30373882E-04
8	1.023269516	-5.73006441E-04
9	1.024038008	3.52493435E-04
10	1.023565187	-2.1699837E-04
11	1.023856233	1.33526918E-04
12	1.023677132	-8.218595E-05
13	1.023787365	5.0577067E-05
14	1.023718526	-3.1128086E-05
15	1.023761278	1.9157155E-05
16	1.023735583	-1.1789949E-05
17	1.023751397	7.250597E-06
18	1.023741604	-4.468028E-06
19	1.023747654	2.749317E-06
20	1.023743988	-1.691119E-06
21	1.023746236	1.040466E-06
22	1.02374484	-6.40883E-07
23	1.0237457	3.94922E-07
24	1.02374517	-2.43416E-07
25	1.023745496	1.49213E-07
26	1.023745296	-9.1666E-08
27	1.023745419	5.648E-08
28	1.023745343	-3.506E-08
29	1.02374539	2.1549E-08
30	1.023745361	-1.3361E-08
31	1.023745379	8.303E-09
32	1.023745368	-4.941E-09
33	1.023745375	3.488E-09
34	1.02374537	-2.537E-09

APROX. P/ RAIZ = 1.023745375
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

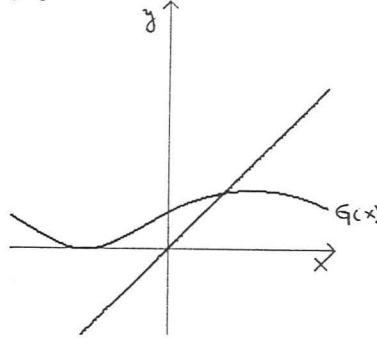
Exemplo 5

$$F(x) = \exp(x) - \sin(x) - 2$$

GRAFICO
a=-3
b= 3



a=-3
b= 3



METODO DE ITERACAO LINEAR

$$G(x) = \ln(\sin(x) + 2)$$

VALOR INICIAL $x_0 = 1.25$

IT.	APROX.	F(X)
0	1.25	0.541358338
1	1.081460914	6.633918283E-02
2	1.058708427	1.09220959E-02
3	1.054912317	1.86636481E-03
4	1.054262195	3.2889263E-04
5	1.054150374	5.523072E-05
6	1.054131127	9.58882E-06
7	1.054127813	1.63645E-06
8	1.054127243	2.8241E-07
9	1.054127145	4.96E-08
10	1.054127128	9.23E-09
11	1.054127125	2.1E-09

APROX. P/ RAIZ= 1.054127128
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

Prova de Convergência:

$$f(x) = e^x - \sin x - 2 \quad e \quad R \in [1.0 ; 1.5]$$

$$e^x = \sin x + 2$$

$$x = \ln(\sin x + 2) = G(x)$$

Pergunta:

$$| G'(x) | < 1, \quad \forall x \in [1.0 ; 1.5] ?$$

$$G'(x) = \cos x / (\sin x + 2)$$

$$G''(x) = ((\sin x + 2)(-\cos x) - \cos^2 x) / (\sin x + 2)^2 = 0$$

$$G''(x) = (-2 \sin x - 1) / (\sin x + 2)^2 = 0 \iff -2 \sin x = 1$$

$$\sin x = -0.5 \quad \rightarrow x = -0.523598776$$

Como este valor de x está fora do intervalo $[1.0 ; 1.5]$ a $G'(x)$ não possui pontos de máximo ou mínimo local. Testa-se então só os extremos $|G'(1.0)| = 0.19015 < 1$ e $|G'(1.5)| = 0.02359 < 1$, então a $G(x)$ escolhida converge para a raiz.

Observa-se que a velocidade de convergência no método de Iteração Linear depende do valor de $|G'(x^*)|$, onde x^* é a raiz desejada. A tabela abaixo fornece o número de iterações necessárias na Iteração Linear dependendo do valor de $L \approx |G'(x^*)|$ e o número de algarismos significativos corretos exigidos.

L	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	0.95	0.99
DIGSE											
5	5	7	10	13	18	24	36	60	130	280	1600
6	6	9	12	16	21	29	42	70	150	330	1850
7	7	10	14	18	24	33	50	80	175	370	2060
8	8	12	16	21	28	38	55	90	200	420	2300
9	9	13	18	23	31	42	60	100	220	460	2500
10	10	14	19	26	34	47	70	110	240	500	2750

1.4.1 TÉCNICAS DE ACELERAÇÃO DA CONVERGÊNCIA

Propósito: Determinar mais rapidamente a raiz de uma função.

1] Seja $f(x) = 0 \rightarrow x = G(x)$

usar $x = G_N(x)$, onde $G_N(x) = \frac{G(x) + x}{2}$ (se $G'(x^*) \simeq -1$)

ou mais geral:

$G_N(x) = \frac{G(x) - \rho x}{1 - \rho}$, se $G'(x^*) \simeq \rho \neq 1$, $x^* \simeq R$

2] Acelerador de Aitken (apresenta em alguns casos instabilidade)

Seja $\{x_n\}$ a sequência convergente gerada por iteração linear

Calcula-se a sequência $\{x'_n\}$ por :

$$x'_n = \frac{x_n * x_{n+2} - x_{n+1}^2}{x_{n+2} - 2x_{n+1} + x_n} \quad (1)$$

Na prática usa-se o acelerador da seguinte forma:

- Calcula-se por Iteração Linear x_0, x_1, x_2 $x_{i+1} = G(x_i)$
- Usa-se a equação (1) para calcular x'_0
- Calcula-se por Iteração Linear $x'_1 = G(x'_0)$ e $x'_2 = G(x'_1)$
- E usa-se (1) novamente, com x'_0, x'_1, x'_2 para obter x''_0
- Continua-se o processo até obter a raiz com a exatidão exigida.

Exemplo: Aplicação do acelerador de Aitken ao exemplo 1.

Utilizando uma máquina com precisão $p = 6$

Iteração Linear

$$x_0 = -0.5$$

$$x_1 = -0.846482$$

$$x_2 = -0.754153$$

Acelerador de Aitken

$$x'_0 = -0.773580$$

Iteração Linear

$$x'_1 = -0.772703$$

$$x'_2 = -0.772929$$

Acelerador de Aitken

$$x''_0 = -0.772883$$

$$x''_0 = -0.772883$$

Utilizando uma máquina que opera com $p = 10$

Iteração Linear

$$x_0 = -0.5$$

$$x_1 = -0.8464817249$$

$$x_2 = -0.7541525768$$

Acelerador de Aitken

$$x'_0 = -0.7735793324$$

Iteração Linear

$$x'_1 = -0.772703575$$

$$x'_2 = -0.772929175$$

Acelerador de Aitken

$x_0' = -0.772883019$

$x_0'' = -0.7726778762$

$x_0^{IV} = -0.772882903$

Verifica-se um erro de arredondamento nos dois últimos algarismos.

Iteração Linear

$x_1' = -0.772882944$

$x_2' = -0.772882963$

$x_1'' = -0.772935568$

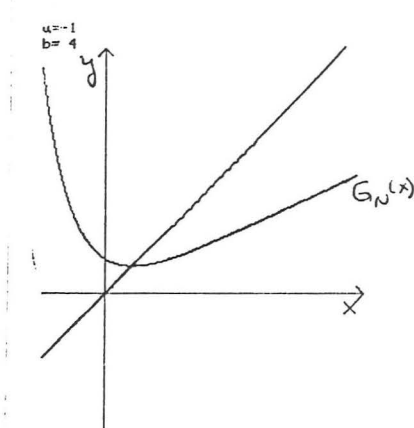
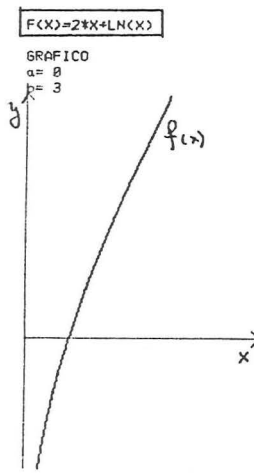
$x_2'' = -0.772869406$

$x_1^{IV} = -0.772882974$

$x_2^{IV} = -0.772882955$

EXEMPLOS sobre a técnica de aceleração N° 1 para o método de Iteração Linear.

$G_N(x) = \frac{G(x) - \rho x}{1 - \rho}$, se $G'(x^*) \approx \rho \neq 1$ e $x^* \approx R$



$G'(0.4263) = -0.8526 \approx -0.86$

GN(X)=(EXP(-2*X)+0.86*X)/1.86

VALOR INICIAL X0= 0.5

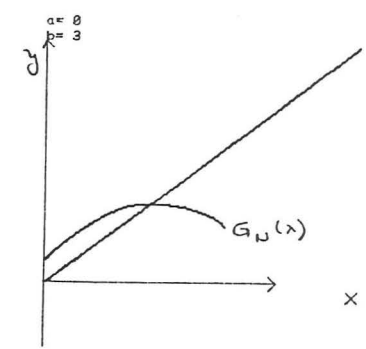
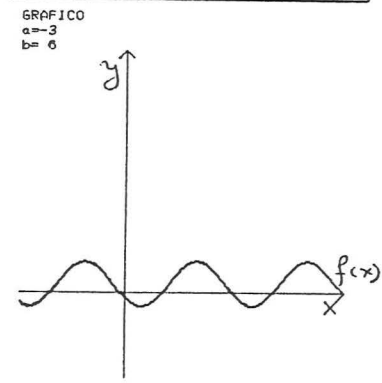
IT.	APROX.	F(X)
0	0.5	3.068528191E-01
1	4.289674415E-01	1.156062613E-02
2	4.263165936E-01	6.8153335E-05
3	4.263028061E-01	2.39423E-07
4	4.263027512E-01	8.42E-10
5	0.426302751	-2.8E-11

APROX. P/ RAIZ= 4.263027512E-01
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

como o valor da f(x) está se aproximando de zero a cada iteração, e o DIGSE está aumentando, conclui-se que a raiz encontrada é uma boa aproximação para a raiz de f(x) = 0.

METODO DE IT. LINEAR COM ACELERADOR

F(X)=0.6713-0.8391*(COSX)^2-SINX*COSX



GN(X)=(ARCCOSF((0.6713-SINX*COSX)/0.8391)+0.6*X)/1.6

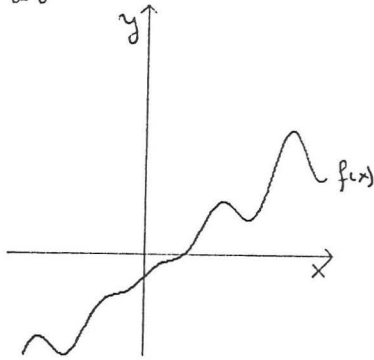
VALOR INICIAL X0= 1

IT.	APROX.	F(X)
0	1	-2.830430815E-02
1	1.023745372	-1.55838509E-04
2	1.02374661	1.480823E-06
3	1.02374536	-1.4583E-08
4	1.023745372	-1.29E-10
5	1.023745372	-1.29E-10

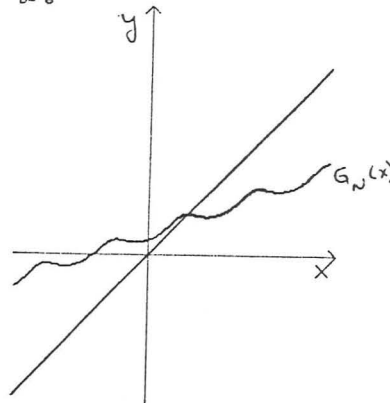
APROX. P/ RAIZ= 1.023745372
COM 9 ALG. SIG. CORRETOS

$$F(x) = x \cdot \cos(\sin x) - 1$$

GRAFICO
a = -6
b = 8



a = -6
b = 8



METODO DE IT. LINEAR COM ACELADOR

$$GN(x) = (1/\cos(\sin x) + 0.55 * x) / 1.55$$

VALOR INICIAL $x_0 = 1.5$

IT.	APROX.	F(x)
0	1.5	-1.863872432E-01
1	1.721696071	-5.336878306E-02
2	1.78438868	-2.89163064E-03
3	1.786721543	1.916710E-05
4	1.786699448	-2.0722E-07
5	1.786699688	2.34E-09
6	1.786699685	-3E-10

APROX. P/ RAIZ = 1.786699688
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

$$G'(1.78) \approx -0.55$$

Exercícios:

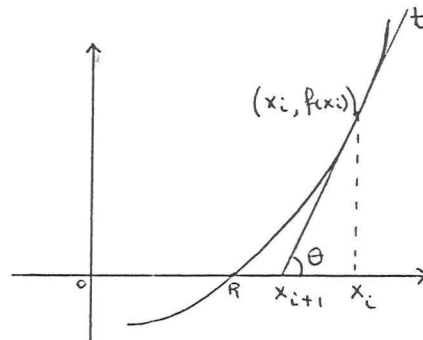
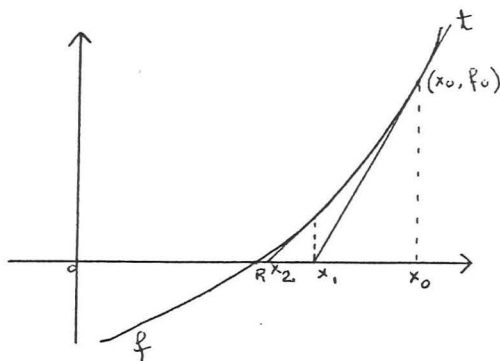
1) Um movimento oscilatório é descrito por: $x = 2 e^{-t/4} \cdot \cos t$
 $y = e^{-t/4} \cdot \sin t$
 pede-se: achar os máximos e mínimos de $R^2 = x^2 + y^2$ para $t \in [0; \pi]$

2) Seja $f(x) = e^x - 12 \ln x$, determinar suas raízes reais com pelo menos 7 algarismos significativos exatos. Justificar sua resposta.

Em caso de convergência lenta usar a técnica de aceleração.

1.5 MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON (M. N. R.)

O método baseia-se na obtenção de x_{i+1} , valor da raiz na i -ésima iteração, como a intersecção da tangente a $f(x)$ no ponto $(x_i, f(x_i))$ com o eixo x para $i = 0, 1, 2, \dots$ sendo x_0 uma aproximação inicial da raiz de $f(x) = 0$



Determinação da fórmula de NEWTON-RAPHSON

Equação de reta tangente t : $y - f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i)$ (1)

interseccionando (1) com o eixo x , isto é, quando $y = 0 \rightarrow$

$x = x_{i+1}$ (2) e agora, substituindo (2) em (1) fica:

$$- f(x_i) = f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) \therefore x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad i = 0, 1, 2, \dots$$

$$f'(x_i) \neq 0$$

CONVERGÊNCIA

A condição suficiente para a convergência do M.N.R. é que $|G'(x)| < 1 \quad \forall x \in I$, onde I é o intervalo que contém a raiz procurada. Então:

$$G(x) = x - f(x)/f'(x) \longrightarrow G'(x) = (f(x) * f''(x)) / (f'(x))^2 \text{ e}$$

$$\text{então } |G'(x)| = \left| \frac{f(x) * f''(x)}{(f'(x))^2} \right|$$

Como em geral é muito trabalhoso provar que $|G'(x)| < 1$, $\forall x \in I$, isto no método de Newton Raphson, costuma-se testar o valor da $|G'(x)|$ para 2 ou 3 pontos. Prova-se que a convergência do M.N.R. é quadrática para raízes simples, i. é: $e_{i+1} \leq K \cdot e_i^2$, onde $K = \text{constante}$ e $K = \frac{1}{2} |G''(\xi)|$. Para raízes duplas ou triplas a convergência é linear e não chega a uma exatidão definida a priori normalmente.

ESCOLHA DO PONTO INICIAL

Muito importante no método de Newton-Raphson é a escolha do ponto inicial, pois, se ele for adequado a convergência será rápida, a menos que hajam outros fatores influenciando.

Seja $R \in [a, b]$,

testa-se $f(a) * f''(a) > 0 \Rightarrow x_0 = a$

se $f(b) * f''(b) > 0 \Rightarrow x_0 = b$

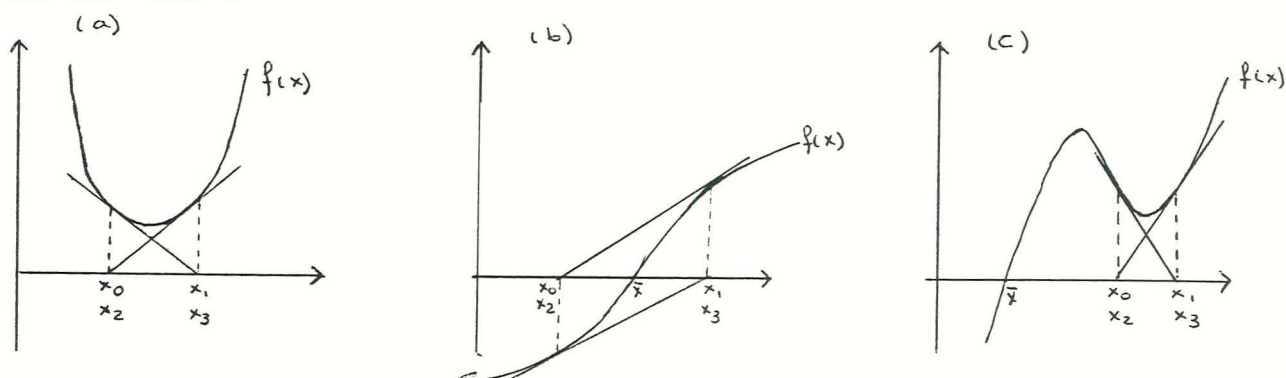
caso contrário, $x_0 = (a+b)/2$ ou $x_0 = a$ ou $x_0 = b$ mas, tome cuidado.

1.5.1 PERIGOS DO MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

Quando o método de Newton funciona, produz resultados rápidos em poucas iterações. Como a convergência para raízes simples é de segunda ordem e cada erro e_i é proporcional ao quadrado do erro precedente e_{i-1} devido à ordem, para erros pequenos nós duplicaremos, aproximadamente, em cada iteração, o número de algarismos significativos corretos.

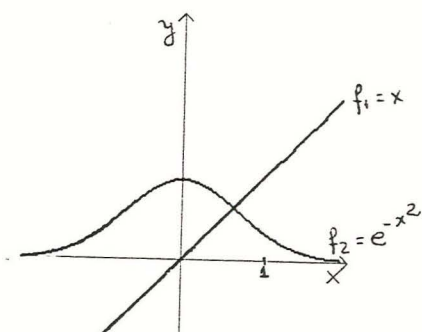
Outras vezes, no entanto, o método de Newton-Raphson

não converge, mas oscila indefinidamente. Isto acontece se não há raiz real, como em (a), ou como em (b) há uma simetria de $f(x)$ em torno do ponto \bar{x} ou se a estimativa inicial estiver tão distante da raiz exata que uma outra parte da função "prenda" a iteração, como em (c).



1.5.2 EXEMPLOS

Exemplo 1- Achar a raiz de $f(x) = x - e^{-x^2}$ pelo método de Newton-Raphson, com pelo menos 5 algarismos significativos exatos.



$$R \in [0, 1]$$

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

$$f(x) = x - e^{-x^2}$$

$$f'(x) = 1 + 2x e^{-x^2}$$

$$f''(x) = e^{-x^2} \cdot (2 - 4x^2)$$

Escolha de x_0

$$f(0) * f''(0) = -2 < 0$$

$$f(1) * f''(1) < 0$$

$$f(0.5) * f''(0.5) < 0 \quad ; \quad \text{então façamos } x_0 = \frac{0 + 1}{2} = 0.5 \text{ (ponto$$

médio do intervalo)

$$x_0 = 0.5$$

$$x_1 = 0.5 - \frac{f(0.5)}{f'(0.5)} = 0.5 - \frac{(-0.27880078)}{1.77880078} =$$

$$= 0.65673525$$

$$x_2 = 0.65673525 - \frac{f(0.65673525)}{f'(0.65673525)} = 0.65291936$$

$$x_3 = 0.65291936 - \frac{f(0.65291936)}{f'(0.65291936)} = 0.65291864$$

$$\text{DIGSE}(x_2, x_3) = 5.6578 \quad R \approx 0.65292$$

Exemplo 2 - Calcular todas as raízes do polinômio $p(x) = x^3 - 3x - 1$ com exatidão até a 5ª casa decimal, pelo método de Newton-Raphson.

$$p(x) = x^3 - 3x - 1 \quad \begin{array}{c|c|c|c|c|c|c} x & 3 & -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ \hline p(x) & 19 & -3 & 1 & -1 & -3 & 1 \end{array}$$

$$R_1 \in [-2; -1]$$

$$R_2 \in [-1; 0]$$

$$R_3 \in [1; 2]$$

$$R_1 \in [-2; -1]$$

$$p(-2) * p'(-2) = 36 > 0$$

então:

$$x_0 = -2 \text{ é pto. inicial}$$

$$x_0 = -2$$

$$x_1 = -1.66666667$$

$$x_2 = -1.54861111$$

$$x_3 = -1.53239016$$

$$x_4 = -1.53208899$$

$$x_5 = -1.53208889$$

$$R_1 \approx -1.53209$$

$$R_2 \in [-1; 0]$$

$$p(-1) * p'(-1) = -6 < 0$$

$$p(0) * p'(0) = 0$$

$$x_0 = 0 \text{ é pto. inicial}$$

$$x_0 = 0$$

$$x_1 = -0.33333333$$

$$x_2 = -0.34722222$$

$$x_3 = -0.34729635$$

$$x_4 = -0.34729636$$

$$R_2 \approx -0.34730$$

$$R_3 \in [1; 2]$$

$$p(1) * p'(1) = -18 < 0$$

$$p(2) * p'(2) = 12 > 0$$

$$x_0 = 2 \text{ é pto. inicial}$$

$$x_0 = 2$$

$$x_1 = 1.88888889$$

$$x_2 = 1.87945157$$

$$x_3 = 1.87938525$$

$$x_4 = 1.87938524$$

$$R_3 \approx 1.87939$$

Exercício: Achar uma aproximação para as raízes dos exercícios propostos na página 27, pelo método de Newton-Raphson.

Os exemplos a seguir foram resolvidos pelo método de Newton-Raphson, e a aproximação para a raiz foi obtida com pelo menos 8 algarismos significativos corretos. Verifica-se também, que a $f(x)$ está tendendo a zero e o DIGSE está aumentando.

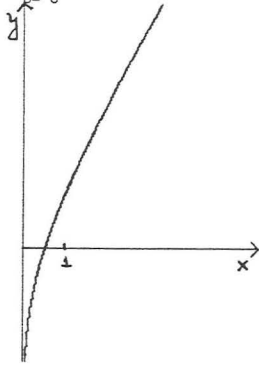
Exemplo 1

METODO DE NEWTON RAPHSON

$F(x) = 2x + \ln(x)$

GRAFICO

a= 0
b= 6



$F(x) = 2x + \ln(x)$

VALOR INICIAL $x_0 = 0.5$

ITER.	APROX.	F(X)
0	0.5	3.068528194E-01
1	4.232867952E-01	-1.313173644E-02
2	4.262969599E-01	-2.5166798E-05
3	0.426302751	-2.8E-11
4	0.426302751	

APROX. P/ RAIZ= 0.426302751
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

$R \in [0 ; 1]$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{2x_i + \ln x_i}{2 + 1/x_i}$$

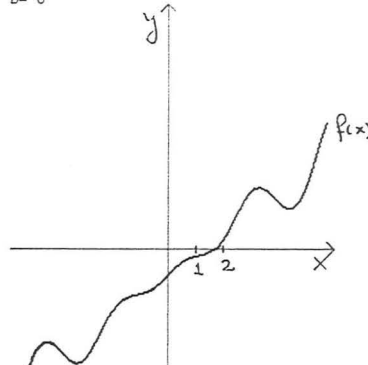
Exemplo 2

METODO DE NEWTON RAPHSON

$F(x) = x \cdot \cos(\sin x) - 1$

GRAFICO

a=-6
b= 6



$F(x) = x \cdot \cos(\sin x) - 1$

VALOR INICIAL $x_0 = 1.5$

ITER.	APROX.	F(X)
0	1.5	-1.063872432E-01
1	1.9112081	1.231642782E-01
2	1.799642474	1.149691019E-02
3	1.786864196	1.4428126E-04
4	1.786699712	2.339E-08
5	1.786699685	-3E-10
6	1.786699685	

APROX. P/ RAIZ= 1.786699685
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

$R \in [1 ; 2]$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i \cos(\sin x_i) - 1}{\cos(\sin x_i) - x_i \sin(\sin x_i) \cos x_i}$$

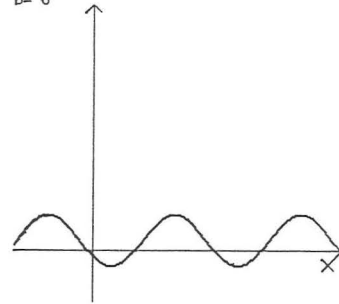
Exemplo 3

METODO DE NEWTON RAPHSON

$F(x) = 0.6713 - 0.8391 * (\cos x)^2 - \sin x * \cos x$

GRAFICO

a=-2
b= 6



$F(x) = 0.6713 - 0.8391 * (\cos x)^2 - \sin x * \cos x$

VALOR INICIAL $x_0 = 0$

ITER.	APROX.	F(X)
0	0	-0.1678
1	-0.1678	2.827336537E-02
2	-1.511900914E-01	1.31440657E-04
3	-1.510889675E-01	5.956E-09
4	-1.510889626E-01	5.7E-11
5	-1.510889626E-01	

APROX. P/ RAIZ= -1.510889626E-01
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL $x_0 = 1$

ITER.	APROX.	F(X)
0	1	-2.838438815E-02
1	1.024004231	3.11803073E-04
2	1.0237454	3.3592E-08
3	1.023745372	-1.29E-10
4	1.023745372	

APROX. P/ RAIZ= 1.023745372
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

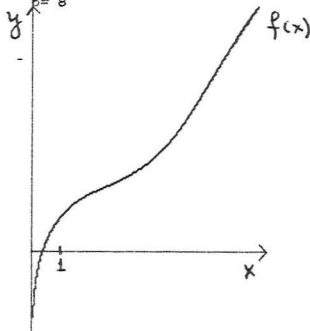
Exemplo 4

METODO DE NEWTON RAPHSON

$F(x) = \cos(x) + \ln(x) + x$

GRAFICO

a= 0
b= 6



$F(x) = \cos(x) + \ln(x) + x$

VALOR INICIAL $x_0 = 0.5$

ITER.	APROX.	F(X)
0	0.5	6.844353813E-01
1	2.284605585E-01	-2.739149363E-01
2	2.816412663E-01	-2.487928588E-02
3	2.874641377E-01	-2.2709008E-04
4	2.875182709E-01	-1.906E-08
5	2.875182754E-01	-1.8E-10
6	2.875182754E-01	

APROX. P/ RAIZ= 2.875182754E-01
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

$R \in [0 ; 1]$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{\cos x_i + \ln x_i + x_i}{-\sin x_i + \frac{1}{x_i} + 1}$$

VALOR INICIAL $x_0 = 3$

ITER.	APROX.	F(X)
0	3	-1.13816947E-02
1	2.990472602	4.7079435E-05
2	2.99051169	1.27E-09
3	2.990511691	1.3E-11
4	2.990511691	

APROX. P/ RAIZ= 2.990511691
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

$R_1 \in [-1 ; 0]$
 $R_2 \in [1 ; 2]$
 $R_3 \in [2 ; 3]$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{0.6713 - 0.8391 \cos^2 x_i - \sin x_i \cos x_i}{1.6782 \cos x_i \sin x_i + 2 \sin^2 x_i - 1}$$

Exemplo 5

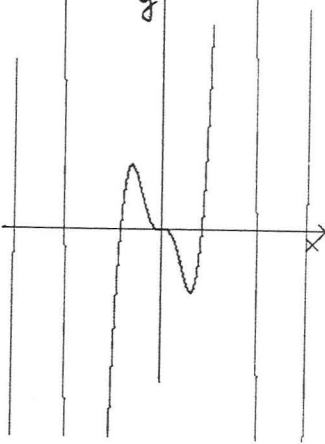
METODO DE NEWTON RAPHSON

$$F(X) = (4 - 3X^2) * \text{SINX} - 4 * X * \text{COSX}$$

GRAFICO

a = 10

b = 10



METODO DE NEWTON RAPHSON

$$F(X) = (4 - 3X^2) * \text{SINX} - 4 * X * \text{COSX}$$

VALOR INICIAL X0 = 2.3

ITER.	APROX.	F(X)
0	2.3	-2.721781473
1	2.681012102	1.800136827
2	2.574703957	1.561921559E-01
3	2.563556264	1.67393441E-03
4	2.563434178	2.0477E-07
5	2.563434163	-1.03E-09
6	2.563434163	

APROX. P/ RAIZ = 2.563434163
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL X0 = 2

ITER.	APROX.	F(X)
0	2	-3.945204722
1	4.908215529	63.14676304
2	19.1508859	-398.514323
3	18.77565878	2.887752038
4	18.77840401	-8.578565E-04
5	18.7784032	-5.4753E-06
6	18.77840319	5.5493E-06
7	18.7784032	-5.4753E-06
8	18.77840319	5.5493E-06
9	18.7784032	-5.4753E-06
10	18.77840319	5.5493E-06
11	18.7784032	

APROX. P/ RAIZ = 18.77840319
COM PELO MENOS 8 DIG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL X0 = 6.5

ITER.	APROX.	F(X)
0	6.5	-51.79725682
1	6.090791206	-3.39817928
2	6.059005946	-3.51556705E-02
3	6.058670122	-4.0079E-06
4	6.058670084	-4.33E-08
5	6.058670084	

APROX. P/ RAIZ = 6.058670084
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL X0 = 9

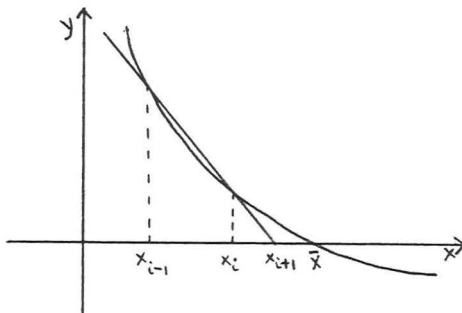
ITER.	APROX.	F(X)
0	9	-65.69562853
1	9.387008256	6.98708432
2	9.280014243	3.87365992E-02
3	9.279861119	1.1696E-06
4	9.279861114	-1.104E-07
5	9.279861114	

APROX. P/ RAIZ = 9.279861114
COM PELO MENOS 9 DIG. SIG. CORRETOS

O método de Newton-Raphson, embora seja muito usado, possui uma séria desvantagem que é a necessidade de se calcular o valor numérico da $f'(x)$. Uma das maneiras de modificar o método de Newton, é substituir a derivada $f'(x_i)$ pelo quociente das diferenças. Este processo é conhecido como **Método das Secantes**. $f'(x_i) \approx (f(x_i) - f(x_{i-1})) / (x_i - x_{i-1})$ onde x_i e x_{i-1} são duas aproximações para a raiz de $f(x) = 0$.

A fórmula iterativa é então:

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



Muito relacionado com o método da secante é o método da Posição Falsa. Este método é descrito da seguinte forma:

1.6 MÉTODO DA POSIÇÃO FALSA

Algoritmo:

1º - escolher duas aproximações x_0 e x_1 tais que $f(x_0) * f(x_1) < 0$.

2º determinar uma aproximação seguinte a partir da fórmula

$$x_2 = \frac{x_0 \cdot f(x_1) - x_1 \cdot f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)}$$

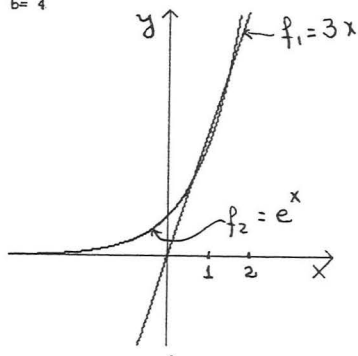
3º - se $|x_2 - x_1| < \epsilon$ ou $|x_2 - x_0| < \epsilon$ para um determinado ϵ , x_2 é aceito como sendo a resposta. Em caso contrário continuar.

4º - se $f(x_2) \cdot f(x_0) < 0$, substituir x_1 por x_2 , manter x_0 inalterado e voltar ao 2º passo. Em caso contrário, substituir x_0 por x_2 , manter x_1 inalterado e voltar ao 2º passo.

Este método sempre converge só que não tão rapidamente como o de Newton-Raphson.

Exemplo 1: Calcular pelo método da Posição Falsa as raízes da equação $f(x) = e^x - 3x = 0$

GRAFICO
a=-4
b= 4



$$R_1 \in [0 ; 1]$$

$$R_2 \in [1 ; 2]$$

nº iter.	x_0	x_1	x_2
1	0.00000000	1.00000000	0.78020271
2	0.00000000	0.78020271	0.67334686
3	0.00000000	0.67334686	0.63568161
4	0.00000000	0.63568161	0.62399050
5	0.00000000	0.62399050	0.62050908
6	0.00000000	0.62050908	0.61948530
10	0.00000000	0.61907190	0.61906439
11	0.00000000	0.61906439	0.61906219

$$R_1 \approx 0.61906$$

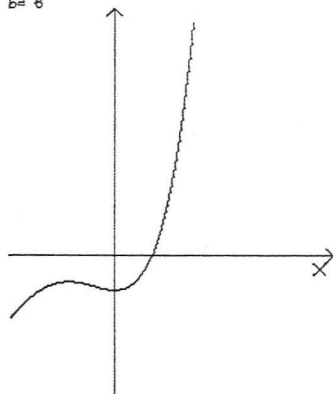
$$R_2 \approx 1.51211090$$

Exemplo 2:

MÉTODO DA SECANTE-POSICAO FALSA

$$F(X)=EXP(X)-SIN(X)-2$$

GRAFICO
a=-3
b= 6



INTERVALO INICIAL
X0= 1 X1= 1.2

IT.	APROX.	ERRO ABSOLUTO
1	1.048189755	0.048189755
2	1.053489622	0.005298867
3	1.054058835	0.000565213
4	1.054119811	0.00006576
5	1.054126341	0.00000653
6	1.05412784	0.000000699
7	1.054127115	0.000000075
8	1.054127123	0.000000008
9	1.054127124	0.000000001
10	1.054127124	0

RAIZ= 1.054127124
F(RAIZ)=-2.6E-10

Exemplo 3:

Exemplo 4:

Exemplo 5:

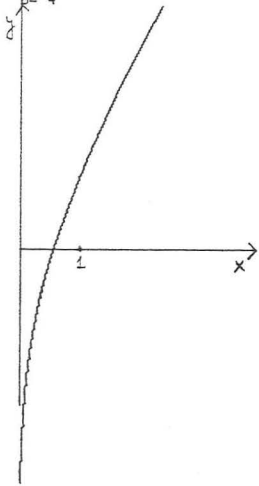
Exemplo 6:

METODO DA SECANTE-POSICAO FALSA

$F(x) = 2x + \ln x$

GRAFICO

a = 0
b = 4



INTERVALO INICIAL
x0 = 0.3 x1 = 0.5

IT.	APROX.	ERRO ABSOLUTO
1	4.326209515E-01	6.73790485E-02
2	4.260750694E-01	5.7450021E-03
3	4.263550025E-01	5.200669E-04
4	0.4263027517	4.74055E-05
5	4.263027513E-01	4.3313E-06
6	4.263027513E-01	0.000000395
7	4.263027513E-01	3.61E-08
8	4.263027513E-01	3.3E-09
9	0.426302751	3E-10
10	0.426302751	0

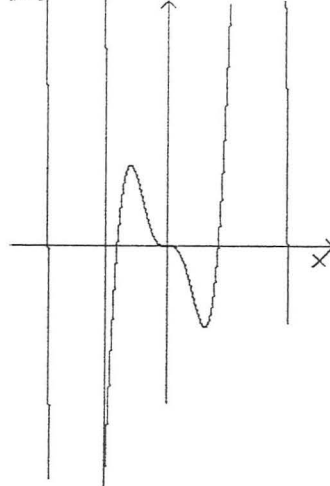
RAIZ = 0.426302751
F(RAIZ) = -2.8E-11

METODO DA SECANTE-POSICAO FALSA

$F(x) = (4 - 3x^2) * \sin x - 4 * x * \cos x$

GRAFICO

a = -6
b = 8



INTERVALO INICIAL
x0 = 18 x1 = 19

IT.	APROX.	ERRO ABSOLUTO
1	18.74149698	0.25850302
2	18.77770827	0.02629129
3	18.77803270	0.00060551
4	18.77840305	0.00000927
5	18.77840319	0.00000014
6	18.7784032	0.00000001
7	18.77840319	0

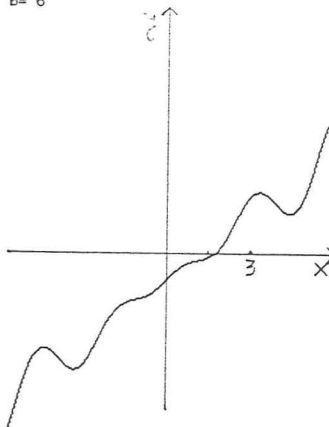
RAIZ = 18.77840319
F(RAIZ) = 5.5493E-06

METODO DA SECANTE-POSICAO FALSA

$F(x) = x * \cos(\sin x) - 1$

GRAFICO

a = -6
b = 6



INTERVALO INICIAL
x0 = 1.5 x1 = 1.8

IT.	APROX.	ERRO ABSOLUTO
1	1.782111408	0.017808512
2	1.786689907	0.004527509
3	1.786689885	0.000059088
4	1.786689875	0.00000079
5	1.786689885	0.00000001
6	1.786689885	0

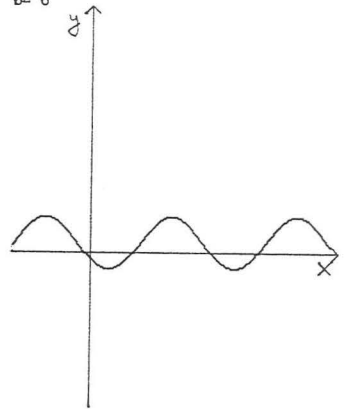
RAIZ = 1.786689885
F(RAIZ) = -2E-10

METODO DA SECANTE-POSICAO FALSA

$F(x) = 0.6713 - 0.8391 * (\cos x)^2 - \sin x * \cos x$

GRAFICO

a = -2
b = 6



INTERVALO INICIAL
x0 = 1 x1 = 1.5

IT.	APROX.	ERRO ABSOLUTO
1	1.02264904	0.02264904
2	1.023745372	0.001053701
3	1.023745372	0.000040814
4	1.023745372	0.00001574
5	1.023745372	0.00000061
6	1.023745372	0.00000002
7	1.023745372	0

RAIZ = 1.023745372
F(RAIZ) = -1.20E-10

1.7 EQUAÇÕES POLINOMIAIS

1.7.1 - LOCALIZAÇÃO DAS RAÍZES DE UM POLINÓMIO REAL - P(x)

Seja $P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0$ onde os a_i , $i = 0, n$ são números reais.

Perguntas Básicas:

- Quantas raízes reais e complexas tem $P(x)$?
- Onde se situam essas raízes ?

ENUMERAÇÃO DAS RAÍZES REAIS DE $P(x)$

Um polinômio $P_n(x) = 0$ tem exatamente n raízes reais e complexas, contando a multiplicidade. Se os coeficientes de $P(x)$ forem reais então as raízes complexas ocorrerão aos pares conjugados.

Na forma fatorada:

$P(x) = A(x - x_1)^{p_1} * (x - x_2)^{p_2} * (x - x_3)^{p_3} \dots (x - x_m)^{p_m}$, onde p_1, p_2, \dots, p_m indicam a multiplicidade de cada raiz.

REGRA DE DESCARTES OU REGRA DOS SINAIS

Consideremos um polinômio real $P(x) = 0$ e seja T o número de trocas de sinais dos coeficientes de $P(x)$, então

$P(x) = 0$ tem ou T ou $T-2$ ou $T-4$ ou ... raízes reais positivas.

Exemplo:

$$P(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 5 = 0 \quad \text{Sinais de } p(x): + + - - \quad \text{Então}$$

$T = 1 \rightarrow$ que $P(x)$ tem uma raiz positiva.

Seja T' o número de trocas de sinais dos coeficientes de $P(-x)$, então $P(x) = 0$ tem ou T' ou $T'-2$ ou $T'-4$ ou ... raízes reais negativas.

Exemplo: $P(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 5 = 0$

$$P(-x) = (-x)^3 + 2(-x)^2 - 3(-x) - 5 \quad \text{Sinais de } P(-x): - + + -$$

então $T' = 2 \rightarrow P(x)$ tem 0 ou 2 raízes reais negativas.

$R > 0$	$R < 0$	C
1	0	2
1	2	0

ENUMERAÇÃO DAS RAÍZES COMPLEXAS DE $P(x)$

1) - REGRA DE HUAT

Se para algum K tivermos $a_k^2 \leq a_{k-1} * a_{k+1}$, então $P(x)$ terá raízes complexas.

Exemplo 1

$$P(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 5$$

$$a_1^2 \leq a_0 * a_2 ?$$

$$(-3)^2 > (2) (-5) = -10$$

$$a_2^2 \leq a_1 * a_3 ?$$

$$(2)^2 > (-3) (1) = -3$$

logo nada se pode afirmar sobre existência de raízes complexas.

Exemplo 2.

$$P(x) = x^3 - 2x^2 + 3x - 5$$

$$a_1^2 \leq a_0 * a_2 ?$$

$$(3)^2 \leq (-5) (-2) = 10$$

$9 < 10 \therefore$ tem raízes complexas

$$\text{sinais de } p(x) = + - + - \quad T = 3$$

$$\therefore 1 \text{ ou } 3 \ R > 0$$

$$\text{sinais de } p(-x) = - - - - \quad T' = 0$$

$R > 0$	$R < 0$	C
1	0	2

2) A existência de máximo local negativo e (ou) mínimo local positivo indica a existência, nas proximidades, de raízes complexas.

ESTIMATIVA DO MÓDULO DE TODAS AS RAÍZES DE UM POLINÓMIO REAL $P(x)$

COTA DE FUJIWARA

Seja α uma raiz de $p(x) = 0$

$$|\alpha| \leq 2 \max \left\{ \left| \frac{a_{n-1}}{a_n} \right|, \left| \frac{a_{n-2}}{a_n} \right|^{1/2}, \left| \frac{a_{n-3}}{a_n} \right|^{1/3}, \dots, \left| \frac{a_1}{a_n} \right|^{1/n-1}, \left| \frac{a_0}{a_n} \right|^{1/n} \right\}$$

COTA DE KOJIMA

$|\alpha| \leq q_1 + q_2$, onde q_1 e q_2 são os dois maiores valores de:

$$\left\{ \left| \frac{a_{n-1}}{a_n} \right|, \left| \frac{a_{n-2}}{a_n} \right|^{1/2}, \left| \frac{a_{n-3}}{a_n} \right|^{1/3}, \dots, \left| \frac{a_1}{a_n} \right|^{1/n-1}, \left| \frac{a_0}{a_n} \right|^{1/n} \right\}$$

Exemplo: Dada a equação $P(x) = x^4 - 14x^2 + 24x - 10 = 0$. Enumerar suas raízes e determinar a região do plano complexo onde elas se encontram.

Aplicando Descartes: sinais de $P(x)$: + - + - $T = 3 \rightarrow$ tem 1 ou 3 raízes $\mathbb{R} > 0$

sinais de $P(-x)$: + - - - $T' = 1 \rightarrow$ tem 1 raiz $\mathbb{R} < 0$

Regra de Huat: $(24)^2 > (-14) * (-10)$

$$(-14)^2 > 0 * (24) = 0$$

$$(24)^2 > (-14) * (-10)$$

$\mathbb{R} > 0$	$\mathbb{R} < 0$	\mathbb{C}
1	1	2
3	1	0

Região onde se encontram todas as raízes de $P(x)$

Cota de Fujiwara:

$$|\alpha| \leq 2 \max \left\{ \left| \frac{a_3}{a_4} \right|, \left| \frac{a_2}{a_4} \right|^{1/2}, \left| \frac{a_1}{a_4} \right|^{1/3}, \left| \frac{a_0}{a_4} \right|^{1/4} \right\}$$

$$|\alpha| \leq 2 \max \{ 0, 14^{1/2}, 24^{1/3}, 10^{1/4} \} = 2 * 3.74 = 7.48$$

$$\{ 0, 3.74, 2.884, 1.78 \}$$

Cota de Kojima: $|\alpha| \leq q_1 + q_2 = 3.74 + 2.884 = 6.624 \therefore |\alpha| \leq 6.7$

COTA DE CAUCHY:

Dado um polinômio real $P(x)$, então toda raiz real ou complexa α de $P(x)$ satisfaz $|\alpha| \leq \beta$, sendo β dado por:

$$\beta_0 = x_0 = 0$$

$$\beta_1 = x_1 = \left[\left| \frac{a_0}{a_n} \right| \right]^{1/n}$$

$$\beta_2 = x_2 = \left[\left| \frac{a_{n-1}}{a_n} \right| x_1^{n-1} + \dots + \left| \frac{a_1}{a_n} \right| x_1 + \left| \frac{a_0}{a_n} \right| \right]^{1/n}$$

$$\beta_{k+1} = x_{k+1} = \left[\left| \frac{a_{n-1}}{a_n} \right| x_k^{n-1} + \dots + \left| \frac{a_1}{a_n} \right| x_k + \left| \frac{a_0}{a_n} \right| \right]^{1/n}$$

Exemplo: $P(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 5 = 0$

Cota de Cauchy:

$$\beta_0 = x_0 = 0$$

$$\beta_{k+1} = x_{k+1} = \left[2x_k^2 + 3x_k + 5 \right]^{1/3}$$

$$\beta_0 = 0$$

$$\beta_1 = 1.709975$$

$$\beta_2 = 2.518685$$

$$\beta_3 = 2.933484$$

$$\beta_4 = 3.1417560$$

$$\beta_5 = 3.244892$$

$$\beta_6 = 3.295596$$

⋮

⋮

$$\beta_{14} = 3.344014$$

$$\beta_{15} = 3.344095 \quad \therefore |\alpha| \leq 3.35$$

SEPARAÇÃO DAS RAÍZES REAIS DE P(x)

Para separar as raízes de $P(x) = 0$ devemos construir uma tabela com alguns pontos do disco e verificar onde há trocas de sinal.

Separadas as raízes, aplicamos o método de Newton para polinômios e assim determinamos uma aproximação para cada raiz com a exatidão desejada.

1.7.2 ALGORITMO DE NEWTON- VIÈTE (Para raízes de polinômios)

É o método de Newton após ser reduzido ao mesmo denominador com o alinhamento de parênteses.

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{P(x_k)}{P'(x_k)}$$

$$= x_k - \frac{(\dots (a_n x_k + a_{n-1}) x_k + a_{n-2}) x_k + \dots + a_1) x_k + a_0}{(\dots (n a_n x_k + (n-1) a_{n-1}) x_k + \dots + 3 a_3) x_k + 2 a_2) x_k + a_1} \quad \text{ou}$$

$$x_{k+1} = \frac{-a_0 + x_k^2 (a_2 + x_k (2a_3 + x_k (3a_4 + x_k (\dots + x_k ((n-2)a_{n-1} + x_k (n-1)a_n) \dots)))}{a_1 + x_k (2a_2 + x_k (3a_3 + x_k (4a_4 + x_k (\dots + x_k n a_n) \dots)))}$$

Exemplo 1:

Calcular as raízes reais e complexas de $p(x) = x^4 + 4x^2 - 24x - 20 = 0$

- enumeração das raízes: sinais de $p(x)$: + + - -

$\mathbb{R} > 0$	$\mathbb{R} < 0$	\mathbb{C}
1	1	2

$T = 1 \rightarrow 1$ raiz $\mathbb{R} > 0$

sinais de $P(-x)$: + + + -

$T' = 1 \rightarrow 1$ raiz $\mathbb{R} < 0$

Região onde se encontram todas as raízes:

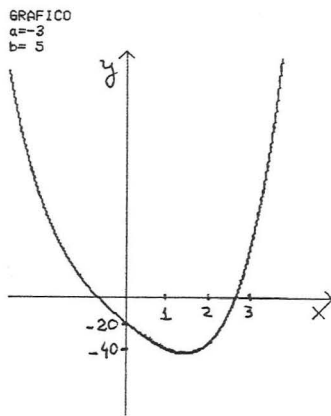
Cota de Fujiwara:

$$|\alpha| \leq 2 \max\{0, 4^{1/2}, 24^{1/3}, 20^{1/4}\} = 2\max\{0; 2; 2.885; 2.115\} \approx 5.8$$

Cota de Cauchy: $|\alpha| \leq 3.53$

Fórmula Iterativa de Newton-Viéte

$$x_{k+1} = \frac{20 + x_k^2(4 + 3x_k^2)}{-24 + x_k(8 + 4x_k^2)} \quad \text{ou} \quad x_{k+1} = x_k - \frac{((x_k^2 + 4)x_k - 24)x_k - 20}{(4x_k^2 + 8)x_k - 24}$$



METODO DE NEWTON VIETE

A 0=-20
A 1=-24
A 2= 4
A 3= 0
A 4= 1

COTA DE CAUCHY
X0=0

X1= 2.114742527
3.068388405
3.385067223
3.482456482
3.511756773
3.52051516
3.523128176
3.528907309

-4 <= x <= 4

VALOR INICIAL
X0=-1

ITER.	APROX.	P(X)
0	-1	9
1	-0.75	0.56640625
2	-7.321252465E-01	2.3333309E-03
3	-7.320508080E-01	3.67E-08
4	-7.320508076E-01	0.000000004
5	-7.320508075E-01	1.2E-09
6	-7.320508075E-01	

APROX. P/ A RAIZ=-7.320508075E-01
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL
X0= 3

ITER.	APROX.	P(X)
0	3	25
1	2.768518519	2.96189093
2	2.732845046	6.31136989E-02
3	2.732051194	3.07185E-05
4	2.732050007	-6.07E-08
5	2.732050008	5.31E-08
6	2.732050007	-6.07E-08
7	2.732050008	5.31E-08
8	2.732050007	-6.07E-08
9	2.732050008	5.31E-08
10	2.732050007	-6.07E-08
11	2.732050008	

APROX. P/ A RAIZ=2.732050007
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

Dividindo-se o polinômio por cada uma das raízes, obtém-se:

$$x^2 + 2.000x + 10 = 0 \quad , \text{e aplicando Báskara, resulta}$$

$$x = -1.000 \pm 3.000i$$

Exemplo 2:

Calcular todas as raízes de

$$P(x) = x^4 - 3x^3 + 3.37x^2 - 1.68x + 0.3136 = 0 \quad \text{Analisar o resultado.}$$

Enumeração das Raízes:

Sinais de $P(x)$: + - + - + $T = 4 \rightarrow P(x)$ tem 4 ou 2 ou 0 raízes $\mathbb{R} > 0$

Sinais de $P(-x)$: + + + + + $T' = 0 \rightarrow$ nenhuma raiz $\mathbb{R} < 0$

HUAT: nada afirma sobre raízes complexas

Delimitação das raízes:

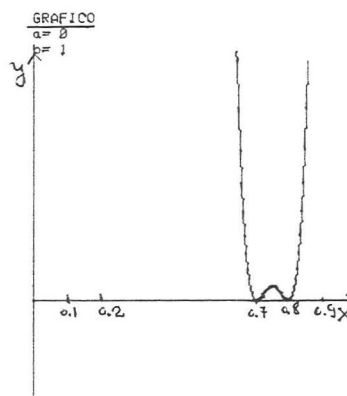
Cota de Fujiwara:

$$|x| \leq 2\max. \langle |3|^1, |3.37|^{1/2}, |-1.68|^{1/3}, |0.3136|^{1/4} \rangle = 6$$

Cota de Cauchy:

$$\begin{aligned} \beta_0 &= x_0 = 0 \\ \beta_1 &= x_1 = (0.3136)^{0.25} \\ \beta_2 &= x_2 = 0.748331477 \\ \beta_3 &= x_3 = 1.473583962 \\ \beta_4 &= x_4 = 2.106939580 \\ \beta_5 &= x_5 = 2.616555566 \\ &\vdots \\ &\vdots \\ \beta &= 3.962458317 \end{aligned}$$

$$|\alpha| \leq 3.97$$



Separação das raízes:

x	0	0.5	0.6	1.0	2.0	3.0
p(x)	0.3136	0.0036	0.0004	0.0036	2.43	25.60

Cálculo: Newton-Viète

$$\begin{aligned} x_0 &= 0.5 \\ x_1 &= 0.60421053 \\ x_2 &= 0.63637087 \\ x_3 &= 0.65927772 \\ x_4 &= 0.67506938 \\ x_5 &= 0.68546119 \\ x_6 &= 0.69191175 \\ x_7 &= 0.69567623 \\ x_8 &= 0.69775343 \\ &\dots \\ x_{12} &= 0.69987553 \\ x_{13} &= 0.70016013 \\ x_{14} &= 0.70006275 \\ x_{15} &= 0.69992019 \\ x_{16} &= 0.69975000 \\ &\dots \\ x_{20} &= 0.7000000 \\ x_{21} &= \text{ERROR} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_0 &= 1.0 \\ x_1 &= 0.94000000 \\ x_2 &= 0.895789474 \\ x_3 &= 0.863629075 \\ x_4 &= 0.840722138 \\ x_5 &= 0.824930766 \\ x_6 &= 0.814539224 \\ &\dots \\ x_{12} &= 0.800286750 \\ x_{13} &= 0.800051858 \\ x_{14} &= 0.799807507 \\ &\dots \\ x_{16} &= 0.800767018 \\ x_{18} &= 0.800152594 \\ x_{19} &= 0.8002936 \end{aligned}$$

continua desta
forma oscilando

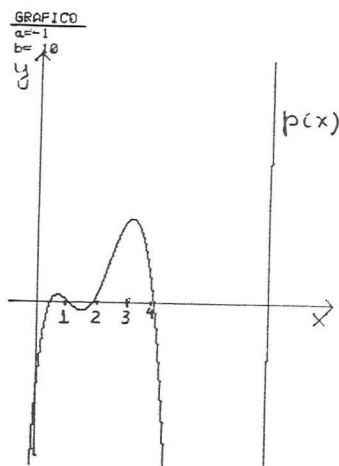
O que ocorreu nestas duas raízes ?

Exemplo 3:

Calcular todas as raízes do polinômio:

$$p(x) = x^5 - 15.5x^4 + 77.5x^3 - 155x^2 + 124x - 31 = 0$$

$R > 0$	$R < 0$	C
1	0	4
3	0	2
5	0	0



Cota de Fujiwara $|\alpha| \leq 31$

x	0	0.5	1	1.5	2.0	3.0	4.0	5.0	7.0	8.0
p(x)	-31	1.0	1.0	-3.063	1.0	26.0	1.0	-161.0	-584	1.0
		R_1		R_2		R_3		R_4		R_5

$$x_0 = 0.5$$

$$x_1 = 0.449206349$$

$$x_2 = 0.455426302$$

$$x_3 = 0.455530026$$

$$x_4 = 0.455530055$$

$$x_5 = 0.455530055$$

$$\text{DIGSE}(x_4, x_5) = 8.001$$

$$x_0 = 1.0$$

$$x_1 = 1.095238095$$

$$x_2 = 1.092601194$$

$$x_3 = 1.092601932$$

$$x_4 = 1.092601936$$

$$x_5 = 1.092601954$$

$$x_6 = 1.092601950$$

$$x_7 = 1.092601943$$

$$x_8 = 1.092601937$$

$$x_9 = 1.092601949$$

$$x_{10} = x_8 ; x_{11} = x_9 \dots$$

$$x_0 = 2$$

$$x_1 = 1.944444444$$

$$x_2 = 1.940893332$$

$$x_3 = 1.940878218$$

$$x_4 = 1.940878175$$

$$x_5 = 1.940878219$$

$$x_6 = 1.940878236$$

$$x_7 = 1.940878209$$

$$x_8 = 1.940878238$$

$$x_9 = 1.940878221$$

OSCILA

$$x_0 = 4.0$$

$$x_1 = 4.011904762$$

$$x_2 = 4.011783896$$

$$x_3 = 4.011783926$$

$$x_4 = 4.011783878$$

$$x_5 = 4.011783893$$

$$x_6 = 4.011783927$$

$$x_7 = 4.011783862$$

$$x_8 = 4.011783898$$

OSCILA

$$x_0 = 8.0$$

$$x_1 = 7.999206349$$

$$x_2 = 7.999205911$$

$$x_3 = 7.999205869$$

$$x_4 = 7.999205938$$

$$x_5 = 7.999205911$$

$$x_6 = 7.999205869$$

$$x_7 = 7.999205938$$

$$x_8 = 7.999205911$$

OSCILA

$$P(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 5$$

$$P(x) = x^4 - 3x^3 + 3.37x^2 - 1.68x + 0.3136$$

$$P(x) = x^5 - 15.5x^4 + 77.5x^3 - 155x^2 + 124x - 3$$

METODO DE NEWTON ULETE

A 0=-5
A 1=-2
A 2= 2
A 3= 1

COTA DE CAUCHY

X0=0	X1=
	1.708875847
	2.518684715
	2.93484249
	3.141755366
	3.2448923
	3.285586483
	3.320423419
	3.332572744
	3.338518629
	3.341407802
	3.342822253

-4 <= X <= 4

SEPARACAO DAS RAIZES REAIS

X	P(X)
-4	-25
-3	-5
-2	1
-1	-1
0	-5
1	5
2	31
4	76

VALOR INICIAL

X0=-2

ITER.	APROX.	P(X)
0	-2	1
1	-3	-5
2	-2.582333333	-1.142939812
3	-2.412426445	-1.629806486E-01
4	-2.278544767	-5.87333456E-02
5	-2.372202854	-8.21867E-06
6	-2.372202854	3E-11
7	-2.372202854	

APROX. P/A RAIZ=-2.372202854
COM 9 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL

X0=-1.5

ITER.	APROX.	P(X)
0	-1.5	0.625
1	-1.222222222	-1.714677649E-01
2	-1.272544283	-4.34794855E-02
3	-1.273889535	-3.23112E-06
4	-1.273889535	2.6E-10
5	-1.273889535	

APROX. P/A RAIZ=-1.273889535
COM 9 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL

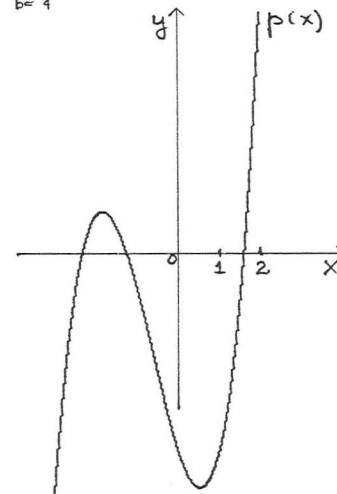
X0= 1.5

ITER.	APROX.	P(X)
0	1.5	-1.625
1	1.666666667	1.851851884E-01
2	1.651224568	1.66237445E-02
3	1.651083421	1.4224E-07
4	1.651083421	2.8E-10
5	1.651083421	

APROX. P/A RAIZ= 1.651083421
COM 9 ALG. SIG. CORRETOS

GRAFICO

a=-4
b= 4



METODO DE NEWTON ULETE

A 0= 0.3136
A 1=-1.68
A 2= 3.37
A 3=-3
A 4= 1

COTA DE CAUCHY

X0=0	X1=
	7.483314774E-01
	1.473583962
	2.106559566
	2.616555666
	3.004833903
	3.290144452
	3.494780772
	3.639185061
	3.739971867
	3.80979398
	3.857920724
	3.890979528
	3.913634937
	3.929136122
	3.939730772
	3.946966582
	3.951985921
	3.955276475
	3.957575968
	3.959144499

-4 <= X <= 4

SEPARACAO DAS RAIZES REAIS

X	P(X)
-4	508.9536
-3.5	326.1636
-3	197.6836
-2.5	111.5136
-2	57.1536
-1.5	25.6836
-1	9.3636
-0.5	2.4336
0	0.3136
0.5	0.0036
1	0.0036
1.5	0.3136
2	2.4336
2.5	9.3636
3	25.6836
3.5	57.1536
4	111.5136

VALOR INICIAL

X0= 0.5

ITER.	APROX.	P(X)
0	0.5	0.0036
1	0.56	0.00112896
2	6.042105263E-01	3.51733822E-04
3	6.363708827E-01	1.08408017E-04
4	6.659277789	3.2838817E-05
5	6.750691604E-01	9.708867E-06
6	6.85460786	2.773159E-06
7	6.891911329	7.64315E-07
8	6.956737246E-01	2.04875E-07
9	6.977544368E-01	5.2835E-08
10	6.988553752E-01	1.3195E-08
11	6.994127864E-01	3.171E-09
12	6.996781856E-01	1.186E-09
13	6.998685534E-01	2.15E-10
14	6.999373372E-01	1.52E-10
15	6.999812969E-01	4.53E-10
16	6.99989279E-01	-3.1E-11
17	6.999135955E-01	-2.75E-10
18	6.997549827E-01	7.17E-10
19	6.99900667E-01	-3.9E-11
20	6.998806132E-01	6E-11
21	6.999856589E-01	

APROX. P/A RAIZ= 6.998806132E-01
COM 4 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL

X0= 1

ITER.	APROX.	P(X)
0	1	0.0036
1	0.94	0.00112896
2	6.957894737E-01	3.51733854E-04
3	6.636291163E-01	1.08408431E-04
4	6.848722289	3.2838861E-05
5	6.249389483E-01	9.708662E-06
6	6.145396126E-01	2.773632E-06
7	6.080882857E-01	7.64236E-07
8	6.043259516E-01	2.03902E-07
9	6.022468242E-01	5.2561E-08
10	6.011520501E-01	1.3543E-08
11	6.0058480415E-01	3.474E-09
12	6.002917813E-01	6.33E-10
13	6.001842502E-01	5.53E-10
14	6.0003499393E-01	1.65E-10
15	6.002703975E-01	3.15E-10
16	6.002126198E-01	7.85E-10
17	6.000291773E-01	3.64E-10
18	6.006527746E-01	4.507E-09
19	6.003142046E-01	1.434E-09
20	6.000881464E-01	-4.62E-10
21	6.003494527E-01	

APROX. P/A RAIZ= 8.008881464E-01
COM 3 ALG. SIG. CORRETOS

METODO DE NEWTON ULETE

A 0=-31
A 1= 124
A 2=-155
A 3= 77.5
A 4=-15.5
A 5= 1

COTA DE CAUCHY

X0=0	X1=
	1.987340755
	4.44277955
	*
	*
	*
	19.76074368
	19.7755987
	19.78677663
	19.78518663

-20 <= X <= 20

VALOR INICIAL

X0= 0.5

ITER.	APROX.	P(X)
0	0.5	1
1	4.482063492E-01	-1.632428935E-01
2	4.554263824E-01	-2.6347088E-03
3	4.555308261E-01	-7.214E-07
4	4.555308545E-01	-4.8E-08
5	4.555308547E-01	-0.000000005
6	4.555308548E-01	-5E-10
7	4.555308549E-01	

APROX. P/A RAIZ= 4.555308549E-01
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL

X0= 1

ITER.	APROX.	P(X)
0	1	1
1	1.095228095	-2.87147687E-02
2	1.092601199	8.1146E-06
3	1.092601944	-7.6E-09
4	1.092601944	7.7E-09
5	1.092601944	-7.6E-08
6	1.092601944	7.7E-09
7	1.092601944	-7.6E-09
8	1.092601944	7.7E-09
9	1.092601944	-7.6E-09
10	1.092601944	7.7E-09
11	1.092601944	

APROX. P/A RAIZ= 1.092601944
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL

X0= 2

ITER.	APROX.	P(X)
0	2	1
1	1.944444444	0.056617154
2	1.940893262	2.395819E-04
3	1.940878207	4.71E-08
4	1.940878204	-1.173E-07
5	1.940878211	7.21E-08
6	1.940878206	6.99E-08
7	1.940878202	-0.000000091
8	1.940878208	8.25E-08
9	1.940878203	-0.000000075
10	1.940878208	8.25E-08
11	1.940878202	

APROX. P/A RAIZ= 1.940878208
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL

X0= 4

ITER.	APROX.	P(X)
0	4	1
1	4.011904762	-1.03640546E-02
2	4.011783888	2.055E-07
3	4.01178388	-3.326E-07
4	4.011783886	5.832E-07
5	4.011783888	-1.7858E-06
6	4.011783872	8.346E-07
7	4.011783876	1.8298E-06
8	4.011783857	-0.000000772
9	4.011783888	2.055E-07
10	4.01178388	-3.326E-07
11	4.011783886	

APROX. P/A RAIZ= 4.011783899
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

VALOR INICIAL

X0= 8

ITER.	APROX.	P(X)
0	8	1
1	7.999206349	5.471549E-04
2	7.998205914	3.2829E-06
3	7.999205911	4.316E-07
4	7.999205911	

APROX. P/A RAIZ= 7.999205911
COM 8 ALG. SIG. CORRETOS

1.8 EQUAÇÕES POLINOMIAIS: RAÍZES COMPLEXAS

1.8.1 LOCALIZAÇÃO DAS RAÍZES COMPLEXAS

Localização através de esboço gráfico- Sabe-se que uma reversão no gráfico de uma função sem cortar o eixo dos x indica a existência de um par de raízes complexas; entretanto, a localização da reversão por si só não dá base para se estimar o valor das raízes, talvez, no caso, em que a reversão seja tão próxima do eixo dos x que se possa estimar um valor para as raízes com uma parte real correspondente à abscissa da reversão e uma pequena parte imaginária.

Caso a reversão não seja próxima do eixo dos x , pode-se recorrer à localização gráfica das raízes complexas usando o seguinte artifício:

- a equação em questão é escrita com variável complexa $f(z) = 0$
- substitui-se z por $x + iy$, obtendo-se $f(x + iy) = 0$
- separa-se agora os termos reais dos imaginários, obtendo-se:
 $u(x, y) + i v(x, y) = 0 \quad (1)$
- para que (1) seja satisfeita é necessário que:

$$u(x, y) = 0 \quad \text{e} \quad v(x, y) = 0 \quad (2)$$

(2) é um sistema de equações não lineares cujas soluções serão os valores das partes reais e imaginárias das raízes complexas de $f(z) = 0$. Pode-se usar este sistema para localizar as raízes esboçando-se os gráficos das duas equações e determinando suas intersecções.

Exemplo: Determinar as raízes de $p(z) = z^3 - 4.2z^2 + 5.9z - 4 = 0$

$$\text{vem } (x + iy)^3 - 4.2(x + iy)^2 + 5.9(x + iy) - 4 = 0$$

$$(x^3 - 3xy^2) + i(3x^2y - y^3) - 4.2(x^2 - y^2) - 4.2(2xy) i + 5.9(x + iy) - 4 = 0$$

separando as partes real e imaginária, vem:

$$u(x, y) = x^3 - 3xy^2 - 4.2(x^2 - y^2) + 5.9x - 4 = 0$$

$$v(x, y) = 3x^2y - y^3 - 8.4xy + 5.9y = 0$$

pode-se simplificar a última equação observando que possui a raiz $y = 0$, para qualquer x . Então:

$$\begin{cases} u(x, y) = x^3 - 3xy^2 - 4.2(x^2 - y^2) + 5.9x - 4 = 0 \\ v(x, y) = 3x^2y - y^3 - 8.4xy + 5.9y = 0 \end{cases}$$

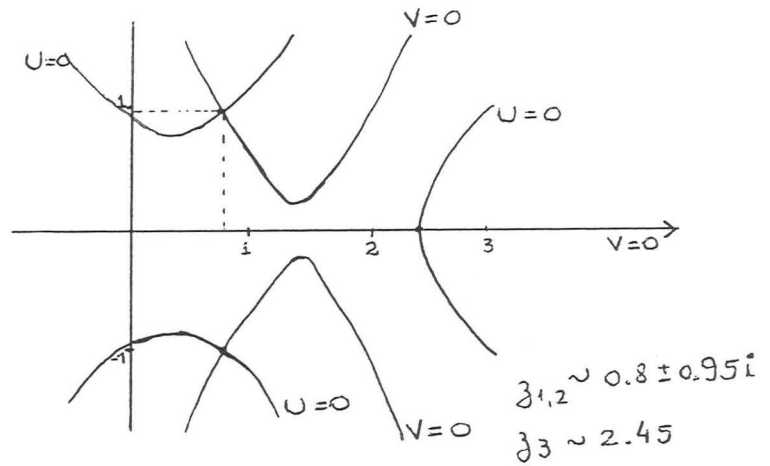
Tabela de Valores de x e y :

Dado um valor de x , determina-se y tal que $u(x, y) = 0$

Dado um valor de x , determina-se y tal que $v(x, y) = 0$

GRÁFICO

x	y u = 0	x	y v = 0
0	± 0.976	0	± 2.43
0.5	± 0.855	0.5	± 1.57
1	± 1.04	1.0	± 0.707
1.25	± 1.66	1.5	± 0.224
1.5	não existe	2.0	± 1.05
2	não existe		
2.5	± 0.20		
3.0	± 0.78		
$z_{1,2} \approx 0.8 \pm 0.95i$		$z_3 \approx 2.45$	



1.8.2 MÉTODO DE BAIRSTOW

Se $p(x)$ é um polinômio com coeficientes reais, então as raízes complexas ocorrem em pares conjugados. A cada par de raízes complexas conjugadas, está associado um fator quadrático de $p(x)$ da forma $x^2 - \alpha x - \beta$, onde α e β são números reais.

Se $R = a \pm bi$ é uma raiz de $p(x)$, então: $\alpha = 2a$ e $\beta = -(a^2 + b^2)$

$$\text{Seja } p_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 \quad [1]$$

1º Arbitrar um fator quadrático da forma $x^2 - \alpha x - \beta$ onde $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$

2º Dividir $p(x)$ pelo fator quadrático $(x^2 - \alpha x - \beta)$

$$p_n(x) = (x^2 - \alpha x - \beta) * q(x) + \text{resto} \quad [2]$$

$$q(x) = b_n x^{n-2} + b_{n-1} x^{n-3} + \dots + b_3 x + b_2 \quad \text{e resto} = b_1(x - \alpha) + b_0 \quad [3]$$

Para determinar os coeficientes $b_k (k = \overline{0, n})$ em [3], com valores arbitrários de α e β , expandimos o lado direito da igualdade [2], comparamos os coeficientes do polinômio expandido e obtemos:

$$b_n = a_n$$

$$b_{n-1} = a_{n-1} + \alpha b_n$$

$$b_{n-2} = a_{n-2} + \alpha b_{n-1} + \beta b_n$$

$$b_{n-3} = a_{n-3} + \alpha b_{n-2} + \beta b_{n-1}$$

.....

$$b_1 = a_1 + \alpha b_2 + \beta b_3$$

$$b_0 = a_0 + \alpha b_1 + \beta b_2 \quad [4]$$

3º - Análise dos coeficientes b_1 e b_0

Se $b_1 = b_0 = 0$, então o fator quadrático $(x^2 - \alpha x - \beta)$ contém o par de raízes imaginárias de $p_n(x)$. Para obter o par de

raízes complexas basta aplicar a fórmula de

$$\text{Báskara } x = \frac{\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4\beta}}{2}$$

Se $b_1 \neq 0$ ou $b_0 \neq 0$ ou $b_1 \neq 0$ e $b_0 \neq 0$, para valores de α e β arbitrários, ocorrerá geralmente este caso, isto é, b_1 e b_0 não se anularão. Neste caso, deve-se calcular as correções a serem feitas aos valores de α e β . Deve-se resolver o sistema de equações não lineares:

$$\begin{cases} b_1(\alpha, \beta) = 0 \\ b_0(\alpha, \beta) = 0 \end{cases} \quad \text{Se } (\alpha_0, \beta_0) \text{ forem aproximações às raízes } (\alpha, \beta)$$

poderemos aplicar o método de Newton para funções de duas variáveis, e então teremos:

$$\begin{cases} \frac{\partial b_1}{\partial \alpha} * h\alpha + \frac{\partial b_1}{\partial \beta} * h\beta = -b_1 \\ \frac{\partial b_0}{\partial \alpha} * h\alpha + \frac{\partial b_0}{\partial \beta} * h\beta = -b_0 \end{cases}$$

onde $h\alpha = \alpha - \alpha_0$ e $h\beta = \beta - \beta_0$. As funções e as derivadas parciais devem ser calculadas em α_0 e β_0 .

Cálculo dos coeficientes "C" (derivadas parciais de b_1 e b_0 em relação a α e β).

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_{n-1}}{\partial \alpha} &= c_n = b_n \\ &\dots \\ &\dots \\ &\dots \\ c_{n-1} &= b_{n-1} + \alpha c_n \\ c_{n-2} &= b_{n-2} + \alpha c_{n-1} + \beta c_n \\ c_{n-3} &= b_{n-3} + \alpha c_{n-2} + \beta c_{n-1} \\ &\dots \\ &\dots \end{aligned}$$

$$\frac{\partial b_1}{\partial \alpha} = c_2 = b_2 + \alpha c_3 + \beta c_4$$

$$\frac{\partial b_0}{\partial \alpha} = c_1 = b_1 + \alpha c_2 + \beta c_3$$

Para calcular $\frac{\partial b_1}{\partial \beta}$ e $\frac{\partial b_0}{\partial \beta}$, procede-se da mesma forma:

Observa-se que $\frac{\partial b_n}{\partial \beta} = \frac{\partial b_{n-1}}{\partial \beta} = 0$ e estabelecendo que

$$\frac{\partial b_i}{\partial \beta} = d_{i+2}, \quad i = \overline{0, n-2} \quad \text{obtem-se: } \frac{\partial b_0}{\partial \beta} = d_2 = c_2 \quad e$$

$$\frac{\partial b_1}{\partial \beta} = d_3 = c_3, \quad \text{e finalmente forma-se o sistema:}$$

$$\begin{cases} c_2 h_\alpha + c_3 h_\beta = -b_1 \\ c_1 h_\alpha + c_2 h_\beta = -b_0 \end{cases} \quad \text{onde } h_\alpha = \alpha - \alpha_0 \quad \text{e} \quad h_\beta = \beta - \beta_0$$

Resolve-se este sistema e determina-se:

$$\alpha_1 = \alpha_0 + h_\alpha \quad \text{e} \quad \beta_1 = \beta_0 + h_\beta$$

4º Considerar $\alpha_0 = \alpha_1$ e $\beta_0 = \beta_1$ e repetir as etapas desde (2º), até ocorrer convergência, isto é, $b_1 \approx 0$ e $b_0 \approx 0$.

5º Calcular as raízes de $p(x)$ a partir da fórmula de Báskara:

$$x = (\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4\beta}) / 2$$

OBS: Quando as aproximações iniciais forem escolhidas adequadamente o método de Bairstow converge quadraticamente.

Exemplos:

1) Calcular todas as raízes da equação polinomial

$$p(x) = x^4 - 2x^3 + 4x^2 - 4x + 4 = 0, \quad \text{iniciando com } \alpha_0 = 1 \quad \text{e} \quad \beta_0 = -1$$

$\alpha \quad / \quad \beta$	$k = 4$	$k = 3$	$k = 2$	$k = 1$	$k = 0$	
	1	-2	4	-4	4	a_k
$\alpha_0 = 1$	1	-1	2	-1	1	b_k
$\beta_0 = -1$	1	0	1	0	—	c_k
$\alpha_1 = 2$	1	0	2	0	0	b_k
$\beta_1 = -2$						

Sistema para as correções

$$\begin{cases} c_2 h_\alpha + c_3 h_\beta = -b_1 \\ c_1 h_\alpha + c_2 h_\beta = -b_0 \end{cases} \quad \longrightarrow \quad \begin{cases} 1h_\alpha + 0h_\beta = 1 \\ 0h_\alpha + 1h_\beta = -1 \end{cases}$$

$$1 h_\alpha = 1 \quad \longrightarrow h_\alpha = 1 \quad \text{e} \quad h_\beta = -1 \quad \longrightarrow \begin{cases} \alpha_1 = 1 + 1 = 2 \\ \beta_1 = -1 + (-1) = -2 \end{cases}$$

como $b_1 = b_0 = 0$ então o fator quadrático $x^2 - 2x + 2 = 0$ contém o par de raízes complexas de $p(x) = 0$. Resolve-se tal trinômio por Baskara:

$$x_{1,2} = \frac{2 \pm \sqrt{4 - 8}}{2} = 1 \pm i \quad p(x) = (x^2 - 2x + 2) * q(x) = 0$$

então $q(x) = x^2 + 2 = 0 \rightarrow x = \pm \sqrt{2} i$. Portanto as raízes de $p(x) = x^4 - 2x^3 + 4x^2 - 4x + 4 = 0$ são: $x_{1,2} = 1 \pm i$

$$x_{3,4} = \pm 1.414213562 i$$

2) Calcular por Bairstow todas as raízes de :

$p(x) = x^6 + 5x^3 + 7x^2 + 1$ iniciando com $\alpha_0 = 0$ e $\beta_0 = 0$

α / β	k=6	k=5	k=4	k=3	k=2
$\alpha_0 = 0$	1	0	0	5	7
$\beta_0 = 0$	1	0	0	5	7
$\alpha_1 = 0.1020408$	1	0.1020408	-0.1324448	4.971908	7.526258
$\beta_1 = -0.1428571$	1	0.2040816	-0.2544773	4.916786	8.064325
$\alpha_2 = 0.08947630$	1	0.08947630	-0.1259812	4.976739	7.462180
$\beta_2 = -0.1339872$	1	0.1789526	-0.243956	4.930933	7.936069

α / β	k = 1	k = 0	a_k
$\alpha_0 = 0$	0	1	b_k
$\beta_0 = 0$	0	_____	c_k
$\alpha_1 = 0.1020408$	0.05771297	-0.06929067	b_k
$\beta_1 = -0.1428571$	0.1782053	_____	c_k
$\alpha_2 = 0.08947630$	0.0008686999	0.0002407733	b_k
$\beta_2 = -0.1339872$	0.0502766	_____	c_k

continuando-se o processo encontra-se para:

$$\alpha = 0.08938533 \quad e \quad \beta = -0.1340170 \quad \text{com } b_1 = -1.46 \times 10^{-10} \quad e$$

$$b_0 = -2.2 \times 10^{-10}$$

$$R_{1,2} = 0.04469267 \pm 0.3633450 i$$

$$p(x) = x^6 + 5x^3 + 7x^2 + 1$$

METODO DE BAIRSTOW

COEFICIENTES DO POLINOMIO:

A 0 = 1
A 1 = 0
A 2 = 7
A 3 = 5
A 4 = 0
A 5 = 0
A 6 = 1

VALOR INICIAL
ALFA = 0
BETA = 0

CORRECAO DE ALFA E BETA
1.020408163E-01 -1.428571429E-01

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
1.020408163E-01 -1.428571429E-01

CORRECAO DE ALFA E BETA
-1.256451792E-02 8.869897023E-03

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
8.947629838E-02 -1.339872459E-01

CORRECAO DE ALFA E BETA
-9.096967055E-05 -2.976278978E-05

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
8.938532871E-02 -1.340170087E-01

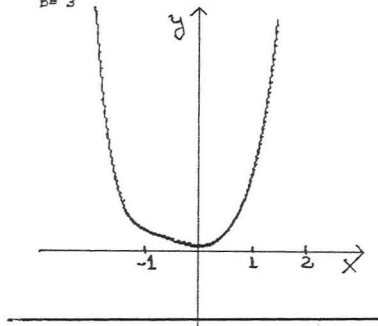
CORRECAO DE ALFA E BETA
2.65343705E-09 -1.207134201E-08

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
8.938533136E-02 -1.340170208E-01

PAR DE RAIZES COMPLEXAS

Re = 4.469266568E-02
Im = 3.633449964E-01

GRAFICO
a = -3
b = 3



METODO DE BAIRSTOW

COEFICIENTES DO POLINOMIO:

A 0 = -20
A 1 = -24
A 2 = 4
A 3 = 0
A 4 = 1
VALOR INICIAL
ALFA = -1.5
BETA = -9

CORRECAO DE ALFA E BETA
-6.062473438E-01 -6.599022524E-01

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2.106247344 -9.659902252

CORRECAO DE ALFA E BETA
0.120468968 -3.130830129E-01

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-1.985778376 -9.972985265

CORRECAO DE ALFA E BETA
-1.429509145E-02 -2.682733986E-02

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2.000074067 -9.999812605

CORRECAO DE ALFA E BETA
7.407179377E-05 -1.873844048E-04

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-1.999999995 -9.999999989

CORRECAO DE ALFA E BETA
-5.001923098E-09 -1.102307688E-08

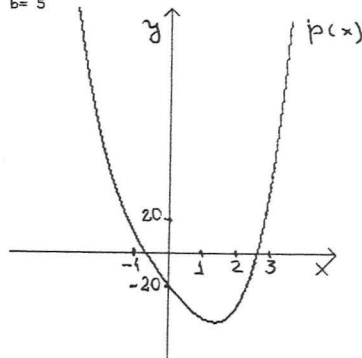
NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2 -10

PAR DE RAIZES COMPLEXAS

Re = -1
Im = 3

$$p(x) = x^4 + 4x^2 - 24x - 20$$

GRAFICO
a = -5
b = 5



METODO DE BAIRSTOW

COEFICIENTES DO POLINOMIO:

A 0 = 7.461738772
A 1 = 4.976755854
A 2 = -1.260272833E-01
A 3 = 8.938533136E-02
A 4 = 1

VALOR INICIAL
ALFA = -2.5
BETA = -2.5

B(4) = 1
B(3) = -2.410614669
B(2) = 3.400509389
B(1) = 2.502019054
B(0) = -7.294582336
CORRECAO DE ALFA E BETA
3.37723288E-02 6.001363953E-01

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2.466227671 -1.899863605

B(4) = 1
B(3) = -2.37684234
B(2) = 3.83594346
B(1) = 3.212228514E-02
B(0) = 8.474873835E-02
CORRECAO DE ALFA E BETA
-1.263764312E-02 -2.958675422E-02

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2.478865314 -1.929450359

B(4) = 1
B(3) = -2.389479983
B(2) = 3.867721406
B(1) = -4.2157252E-04
B(0) = 2.0733818E-04
CORRECAO DE ALFA E BETA
6.717298177E-05 1.066622388E-04

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2.478798141 -1.929343697

B(4) = 1
B(3) = -2.38941281
B(2) = 3.867501051
B(1) = -1.703E-08
B(0) = 3.833E-08
CORRECAO DE ALFA E BETA
7.124353189E-10 -1.44858324E-09

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2.47879814 -1.929343698

B(4) = 1
B(3) = -2.389412809
B(2) = 3.867501045
B(1) = 2.17E-09
B(0) = -1.54E-09
CORRECAO DE ALFA E BETA
-3.141905079E-10 -4.581530313E-10

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
-2.47879814 -1.929343698

CORRECAO COM ERRO < 5E-9

PAR DE RAIZES COMPLEXAS

Re = -1.23939907
Im = 6.270834421E-01

METODO DE BAIRSTOW

COEFICIENTES DO POLINOMIO:

A 0 = 1
A 1 = 0
A 2 = 7
A 3 = 5
A 4 = 0
A 5 = 0
A 6 = 1

VALOR INICIAL
ALFA = 2.38941281
BETA = -3.867501051

B(6) = 1
B(5) = 2.38941281
B(4) = 1.841792526
B(3) = 0.159746101
B(2) = 2.585648501E-01
B(1) = -4.8466E-08
B(0) = 5.4687E-08
CORRECAO DE ALFA E BETA
-1.033643205E-09 5.183674136E-09

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
2.389412809 -3.867501046

B(6) = 1
B(5) = 2.389412809
B(4) = 1.841792526
B(3) = 0.159746115
B(2) = 2.585648926E-01
B(1) = -5.2E-10
B(0) = 6.171E-09
CORRECAO DE ALFA E BETA
1.166265669E-11 2.003862263E-10

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
2.389412809 -3.867501046

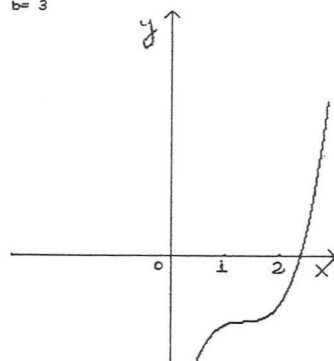
CORRECAO COM ERRO < 5E-9

PAR DE RAIZES COMPLEXAS

Re = 1.194708405
Im = 1.5621068

$$p(x) = x^3 - 4.2x^2 + 5.9x - 4$$

GRAFICO
a = -3
b = 3



METODO DE BAIRSTOW

COEFICIENTES DO POLINOMIO:

A 0 = -4
A 1 = 5.9
A 2 = -4.2
A 3 = 1

VALOR INICIAL
ALFA = 1.6
BETA = -1.5

CORRECAO DE ALFA E BETA
1.357512953E-01 -1.042487047E-01

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
1.735751295 -1.604248705

CORRECAO DE ALFA E BETA
-3.904179783E-04 -1.871283259E-02

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
1.735360877 -1.622961538

CORRECAO DE ALFA E BETA
4.349344123E-06 3.019852054E-06

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
1.735365226 -1.622958518

CORRECAO DE ALFA E BETA
3.643768237E-10 -1.542710785E-10

NOVO VALOR DE ALFA E BETA
1.735365226 -1.622958518

CORRECAO COM ERRO < 5E-9

PAR DE RAIZES COMPLEXAS

Re = 0.807082013
Im = 0.932783604

$$p(x) = x^5 + x^4 - x^3 + x - 1000 = 0$$

METODO DE BAIRSTOW

COEFICIENTES DO POLINOMIO:

A 0=-1000

A 1= 1

A 2= 0

A 3=-1

A 4= 1

A 5= 1

VALOR INICIAL

ALFA= 1

BETA=-12

CORRECAO DE ALFA E BETA

1.40367597 -1.486725664

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

2.40367597 -13.48672566

CORRECAO DE ALFA E BETA

-3.460461738E-01 -1.310704281

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

2.057629796 -14.79750594

CORRECAO DE ALFA E BETA

6.509387993E-02 -1.938168913E-01

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

2.122723676 -14.99132683

CORRECAO DE ALFA E BETA

-9.325250005E-04 -3.039726233E-03

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

2.121791151 -14.99436656

CORRECAO DE ALFA E BETA

3.796507973E-07 -1.942794188E-06

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

2.121791531 -14.9943685

CORRECAO DE ALFA E BETA

-3.237639343E-10 -3.080006493E-09

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

2.121791531 -14.9943685

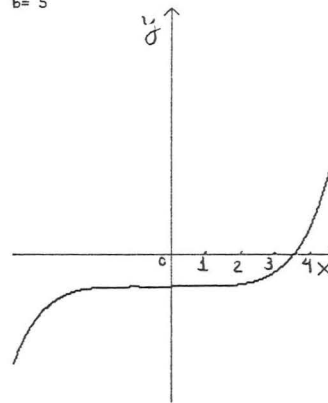
CORRECAO COM VALOR < 5E-9

PAR DE RAIZES COMPLEXAS

Re= 1.060895766

Im= 3.724093

a=-5
b= 5



VALOR INICIAL

ALFA=-6.5

BETA=-17

CORRECAO DE ALFA E BETA

-3.558155538E-01 5.235850305E-01

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

-6.855815554 -16.47641497

.

.

CORRECAO DE ALFA E BETA

-6.962113216 -17.36617669

CORRECAO DE ALFA E BETA

-8.250572644E-11 -3.380323531E-11

NOVO VALOR DE ALFA E BETA

-6.962113216 -17.36617669

CORRECAO COM ERRO < 5E-9

PAR DE RAIZES COMPLEXAS

Re=-3.481056608

Im= 2.290943383

1.9 SOLUÇÃO NUMÉRICA DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES NÃO LINEARES

Frequentemente defrontamo-nos com problemas envolvendo várias incógnitas e um igual número de equações. Por exemplo, podemos desejar obter x e y de modo que:

$$\begin{cases} x^2 + y = 3 \\ y^2 + x = 5 \end{cases}$$

Neste caso podemos resolver a primeira equação para y e substituir na segunda para obtermos $x^4 - 6x^2 + x + 4 = 0$. Temos então, um polinômio em x e suas raízes podem ser calculadas pelo método de Newton-Viète ou Bairstow, caso forem complexas.

Muitas vezes, entretanto, é difícil ou impraticável transformar um sistema de equações não lineares numa equação de uma incógnita. Um exemplo disto é quando as equações são lineares.

Vamos considerar de início, o caso de duas equações a duas incógnitas.

Sejam as equações:

$$\begin{cases} f(x, y) = 0 \\ g(x, y) = 0 \end{cases} \quad \boxed{1} \text{ e } (x_0, y_0) \text{ uma solução aproximada de } \boxed{1}.$$

Admitindo que f e g sejam suficientemente deriváveis, expandimos $f(x, y)$ e $g(x, y)$ para (x_0, y_0) usando a série de Taylor para a função de duas variáveis,

$$f(x, y) = f(x_0, y_0) + f_x(x_0, y_0) \cdot (x - x_0) + f_y(x_0, y_0) \cdot (y - y_0) +$$

$$+f_{xx}(x_0, y_0) * \frac{(x-x_0)^2}{2!} + f_{yy}(x_0, y_0) * \frac{(y-y_0)^2}{2!} + \dots$$

$$g(x, y) = g(x_0, y_0) + g_x(x_0, y_0) * (x-x_0) + g_y(x_0, y_0) * (y-y_0) + \\ + g_{xx}(x_0, y_0) * \frac{(x-x_0)^2}{2!} + g_{yy}(x_0, y_0) * \frac{(y-y_0)^2}{2!} + \dots$$

Admitindo que (x_0, y_0) esteja suficientemente próximo da solução, a ponto de poderem ser abandonados os termos de mais alta ordem, igualamos a zero o desenvolvimento através dos termos lineares. Obtemos, então o sistema:

$$\begin{cases} f_x(x_0, y_0) * (x-x_0) + f_y(x_0, y_0) * (y-y_0) = -f(x_0, y_0) \\ g_x(x_0, y_0) * (x-x_0) + g_y(x_0, y_0) * (y-y_0) = -g(x_0, y_0) \end{cases} \quad [2]$$

Devemos, então, esperar que a solução (x_1, y_1) de [2] esteja mais próxima da solução do sistema que (x_0, y_0)

A solução de [2] pela regra de Cramer nos fornece

$$x_1 - x_0 = \frac{\begin{vmatrix} -f & f_y \\ -g & g_y \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} f_x & f_y \\ g_x & g_y \end{vmatrix}} = \left[\frac{-f * g_y + g * f_y}{J(f, g)} \right]_{(x_0, y_0)}$$

$$y_1 - y_0 = \frac{\begin{vmatrix} f_x & -f \\ g_x & -g \end{vmatrix}}{J(f, g)} = \left[\frac{-g * f_x + f * g_x}{J(f, g)} \right]_{(x_0, y_0)}$$

desde que $J(f, g) = f_x * g_y - g_x * f_y \neq 0$ em (x_0, y_0)

A função $J(f, g)$ é denominada o jacobiano das funções f e g . A solução (x_1, y_1) deste sistema nos fornece agora, uma nova aproximação para a solução de [1]. A repetição deste processo conduz ao método de Newton para sistemas, que é dado a seguir.

1.9.1 FÓRMULA DE NEWTON PARA SISTEMAS DE EQUAÇÕES NÃO LINEARES

Seja (x_0, y_0) uma aproximação para uma raiz de [1].

Gerar aproximações sucessivas a partir de

$$x_{i+1} = x_i - \left[\frac{f \cdot g_y - g \cdot f_y}{J(f, g)} \right]_i \quad \text{e} \quad y_{i+1} = y_i - \left[\frac{g \cdot f_x - f \cdot g_x}{J(f, g)} \right]_i$$

onde $J(f, g) = f_x \cdot g_y - g_x \cdot f_y$ e todas as funções envolvidas devem ser calculadas em (x_i, y_i) . Quando esta iteração converge ela o faz quadraticamente.

Um conjunto de condições suficientes para assegurar a convergência é o seguinte:

1. f e g e todas as suas derivadas até 2ª ordem devem ser contínuas e limitadas numa região R que contenha a raiz.
2. O jacobiano $J(f, g)$ não se anule em R .
3. A aproximação inicial (x_0, y_0) deve ser escolhida suficientemente próxima da raiz.

Exemplo 1:

O sistema $\begin{cases} 0.1x^2 - x + 0.1y^2 + 0.8 = 0 \\ 0.1x - y + 0.1xy^2 + 0.8 = 0 \end{cases}$ possui uma solução

próxima de $x_0 = 0.5$ e $y_0 = 0.5$.

Determinar pelo método de Newton uma aproximação para essa raiz com pelo menos 3 algarismos significativos exatos.

$$\begin{aligned} f(x, y) &= 0.1x^2 - x + 0.1y^2 + 0.8 & f_x &= 0.2x - 1 & f_y &= 0.2y \\ g(x, y) &= 0.1x - y + 0.1xy^2 + 0.8 & g_x &= 0.1 + 0.1y^2 & g_y &= -1 + 0.2xy \end{aligned}$$

x	y	f(x, y)	g(x, y)	f _x (x, y)
0.5	0.5	0.35	0.3625	-0.9
0.937685460	0.939169140	0.0385	0.03731	-0.8124628
0.998693990	0.998388283	⋮	⋮	⋮
0.999999201	0.999998951	⋮	⋮	⋮
1.00000000	1.00000000	⋮	⋮	⋮

f _y (x, y)	g _x (x, y)	g _y (x, y)
0.1	0.125	-0.95
0.1878338	0.1882038	-0.8238709
⋮	⋮	⋮

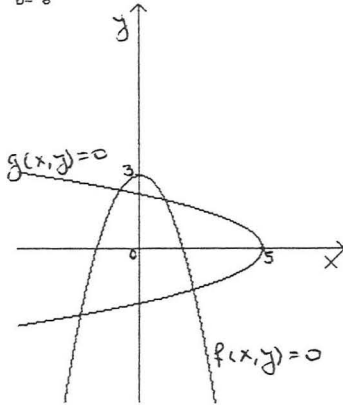
DIGSE $(x_3, x_4) = 5.7$
 DIGSE $(y_3, y_4) = 5.67$
 log₁₀ $(x, y) = (1.0; 1.0)$

Exemplo 2.

Determinar as soluções do sistema abaixo pelo método de Newton

$$\begin{cases} x^2 + y = 3 \\ x + y^2 = 5 \end{cases}$$

GRAFICO
a=-5
b= 8



$$R_1 = (1.0 ; 2.0)$$

$$R_2 \sim (-0.8 ; 2.4)$$

$$R_3 \sim (1; -2) \quad \text{e} \quad R_4 \sim (-2; -2)$$

$$f(x, y) = x^2 + y - 3$$

$$f'_x(x, y) = 2x$$

$$f'_y(x, y) = 1$$

$$g(x, y) = x + y^2 - 5$$

$$g'_x(x, y) = 1$$

$$g'_y(x, y) = 2y$$

x	y	f(x, y)	g(x, y)	f'_x(x, y)
-0.80000	2.40000	0.04	-0.04	-1.6
-0.773271889	2.402680167	1.483×10^{-6}	6.333×10^{-6}	-1.545731304
-0.772865652	2.402678830	0.00	2×10^{-9}	-1.545731115
-0.772865557	2.402678830			

$g'_y(x, y)$	$f'_y(x, y)$	$g'_x(x, y)$
4.8	1	1
4.805360334	1	1
4.805357660	1	1

DIGSE (x_2, x_3) = 6.61 DIGSE (y_2, y_3) = 9.0 logo $R_2 \approx (-0.772866; 2.40268)$

A tabela abaixo, fornece uma aproximação para as quatro raízes do sistema.

```
METODO DE NEWTON P/ SISTEMA
X0= 0.5
Y0= 1
IT.
1 0.5 X 2.75 Y
2 1.188555556 2.069444444
3 1.014831389 1.937581753
4 1.008122881 1.995978726
5 1.000000000 1.999999998
6 1 2
7 1 2

APROX. P/ A SOLUCAO
X= 1
Y= 2
COM PELO MENOS 9 DIGITOS SIG. EXATOS
```

```
METODO DE NEWTON P/ SISTEMA
X0=-0.8
Y0= 2.4
IT.
1 -0.732718894E-01 2.402764977
2 -0.772865651 2.40267885
3 -0.7728655578E-01 2.40267883
4 -0.7728655578E-01 2.40267883

APROX. P/ A SOLUCAO
X= -0.7728655578E-01
Y= 2.40267883
COM PELO MENOS 9 DIGITOS SIG. EXATOS

X0= 1
Y0=-2
IT.
1 2.777777778 -1.555555556
2 2.22919949 -1.668392227
3 2.16514986 -1.683771559
4 2.164248117 -1.683969098
5 2.164247938 -1.683969139
6 2.164247938 -1.683969139
```

```
X0=-2
Y0=-2
IT.
1 -2.466666667 -2.866666667
2 -2.393375686 -2.722875684
3 -2.391383936 -2.718713163
4 -2.391382381 -2.71870969
5 -2.391382381 -2.71870969

APROX. P/ A SOLUCAO
X= -2.391382381
Y= -2.71870969
COM PELO MENOS 9 DIGITOS SIG. EXATOS
```

```
APROX. P/ A SOLUCAO
X= 2.164247938
Y= -1.683969139
COM PELO MENOS 9 DIGITOS SIG. EXATOS
```

Exemplo 3.

Calcular a raiz real do sistema de equações não lineares

$$\begin{cases} 2x^3 - y^2 = 1 \\ x \cdot y^3 - y = 4 \end{cases}, \text{ pelo método de Newton para sistemas.}$$

$$f(x, y) = 2x^3 - y^2 - 1$$

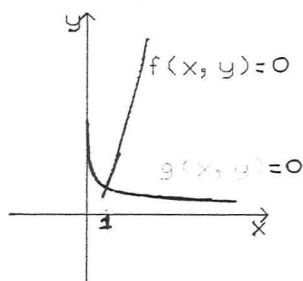
$$g(x, y) = x \cdot y^3 - y - 4$$

$$f'_x = 6x^2$$

$$f'_y = -2y$$

$$g'_x = y^3$$

$$g'_y = 3xy^2 - 1$$



METODO DE NEWTON P/ SISTEMA

X0= 1.25

Y0= 1.3

IT.

	X	Y
1	1.252654929	1.777361522
2	1.236403527	1.670229155
3	1.234291129	1.661584782
4	1.234274485	1.66152647
5	1.234274484	1.661526467

APROX. P/ A SOLUCAO

X= 1.234274485

Y= 1.66152647

COM PELO MENOS 8 DIGITOS SIG. EXATOS

S

Exercícios:

1. Calcular as raízes do sistema de equações não lineares

$$\begin{cases} x + 3 \log x - y^2 = 0 \\ 2x^2 - x \cdot y - 5x + 1 = 0 \end{cases}$$

$$R_1 = (-3.487443 ; 2.261629)$$

$$\begin{cases} y^3 + x \cdot y = 9 \\ x^2 \cdot y^2 - y^2 = 1 \end{cases}$$

$$R_2 = (1.458890 ; -1.396767)$$

$$\begin{cases} y^3 + x \cdot y = 9 \\ x^2 \cdot y^2 - y^2 = 1 \end{cases}$$

$$R_1 = (-1.09392 ; 2.255500)$$

$$\begin{cases} y^3 + x \cdot y = 9 \\ x^2 \cdot y^2 - y^2 = 1 \end{cases}$$

$$R_2 = (1.13012 ; 1.89948)$$

2.1. Colocação do Problema

Muitos problemas de Matemática Numérica são traduzidos em termos de Sistemas de Equações Lineares. Isto vale em geral para o tratamento numérico de equações funcionais lineares que ocorrem entre outras como equações diferenciais parciais ou ordinárias e equações integrais que surgem em diversos problemas da física e engenharia. Temos por exemplo que a análise tensorial de uma estrutura, a análise de uma estrutura elétrica complicada ou a análise de vibrações de um sistema mecânico, requerem a resolução de um sistema de equações lineares.

Também, no caso do tratamento numérico de equações funcionais não lineares é preciso usar os métodos de solução para o uso linear, se a solução do sistema não linear for construída passo a passo através da resolução de equações linearizadas. Portanto, um dos problemas mais importantes em ciências e engenharia é a resolução eficiente de n equações lineares com n incógnitas. Este problema pode ser escrito na forma

$$A \cdot X = B \quad \text{onde } A \in \mathbb{R}^n, \quad X \in \mathbb{R}^n \text{ e } B \in \mathbb{R}^n$$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \dots + a_{3n}x_n = b_3 \\ \dots \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

onde os a_{ij} com $i=1(1)n$ e $j=1(1)n$ são valores conhecidos, ditos coeficientes e b_i , $i=1(1)n$, são também conhecidos e ditos termos independentes e os x_j , $j=1(1)n$ são valores a serem determinados ditos incógnitas.

Uma maneira de resolver o SELA $AX = B$ é calcular a solução X por: $X = A^{-1}B$, porém esta forma não é aconselhável, pois, A^{-1} ao ser determinada pode diferir muito de seu valor exato.

2.2 ALGORITMOS USADOS NO CÁLCULO NUMÉRICO

DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES LINEARES (SELAS)

Existem duas classes gerais de algoritmos para a resolução de um sistema linear da forma $A\mathcal{X} = \mathcal{B}$ onde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^n$ e $\mathcal{B} \in \mathbb{R}^n$ (vetores n-dimensionais reais)

MÉTODO DIRETO - Um método é dito direto quando a solução exata \mathcal{X} é obtida realizando-se um número finito de operações aritméticas em \mathbb{R} (ou seja, com precisão infinita)

MÉTODO ITERATIVO - Um método é dito iterativo quando a solução \mathcal{X} é obtida como limite de uma sequência de aproximações sucessivas $\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2, \mathcal{X}_3, \dots$, isto é: $\lim_{n \rightarrow \infty} |\mathcal{X} - \mathcal{X}_n| = 0$

Exemplos: Métodos Diretos: Eliminação de Gauss, Gauss Jordan, etc

Métodos Iterativos: Gauss-Seidel, jacobi, etc.

Começaremos nosso estudo com os métodos diretos.

2.3 MÉTODO DE ELIMINAÇÃO DE GAUSS

O método direto mais conhecido e mais usado para a resolução de um SELA de porte pequeno a médio é o método de Eliminação de Gauss, ou como ele é usualmente chamado, Algoritmo de Gauss. Ele é em sua essência nada mais que uma aplicação esquemática do método de eliminação utilizado na matemática elementar.

Vamos considerar para o nosso estudo o sistema $A\mathcal{X} = \mathcal{B}$ onde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathcal{X}, \mathcal{B} \in \mathbb{R}^n$. Devemos observar que os métodos diretos não são em geral usados para matrizes esparsas e também para as do tipo banda, isto é, quando poucos elementos $a_{ij} \neq 0$ no caso de esparsa e uma faixa com elementos $a_{ij} \neq 0$ para as do tipo banda.

2.3.1 ALGORITMO BÁSICO DE GAUSS

Calcula-se a solução do SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{B}$ em duas etapas:

1ª etapa - TRIANGULARIZAÇÃO

Consiste em transformar a matriz A numa matriz triangular superior, mediante operações elementares nas linhas das equações.

2ª etapa - RETRO-SUBSTITUIÇÃO

Consiste no cálculo dos componentes do vetor \mathcal{X} ,

solução do SELA $A\mathcal{X} = B$

TEOREMA - O método de Gauss produz (em precisão infinita) sempre a solução exata do sistema $A\mathcal{X} = B$ desde que:

1º - A matriz seja regular ($\det A \neq 0$)

2º - As linhas de A sejam permutadas quando $a_{ii} = 0$

Exemplo: Resolver o sistema linear abaixo por Eliminação de Gauss.

$$\begin{cases} 3x + 2y + w = 3 & :E_1 \\ 9x + 8y - 3z + 4w = 6 & :E_2 \\ -6x + 4y - 8z = -16 & :E_3 \\ 3x - 8y + 3z - 4w = 18 & :E_4 \end{cases}$$

1º pivô

$$\left[\begin{array}{ccccc} \boxed{3} & 2 & 0 & 1 & 3 \\ 9 & 8 & -3 & 4 & 6 \\ -6 & 4 & -8 & 0 & -16 \\ 3 & -8 & 3 & -4 & 18 \end{array} \right] \begin{array}{l} E_2 - 3E_1 \\ E_3 + 2E_1 \\ E_4 - E_1 \end{array} \sim \longrightarrow$$

2º pivô

$$\left[\begin{array}{ccccc} 3 & \boxed{2} & 0 & 1 & 3 \\ 0 & -3 & -3 & 1 & -3 \\ 0 & 8 & -8 & 2 & -10 \\ 0 & -10 & 3 & -5 & 15 \end{array} \right] \begin{array}{l} E_3 - 4E_2 \\ E_4 + 5E_2 \end{array} \sim \longrightarrow$$

3º pivô

$$\left[\begin{array}{ccccc} 3 & 2 & \boxed{0} & 1 & 3 \\ 0 & 2 & -3 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & 4 & -2 & 2 \\ 0 & 0 & -12 & 0 & 0 \end{array} \right] \begin{array}{l} E_4 + 3E_3 \end{array} \sim \left[\begin{array}{ccccc} 3 & 2 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 2 & -3 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & 4 & -2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -6 & 6 \end{array} \right]$$

RETRO-SUBSTITUIÇÃO

$$\begin{cases} 3x + 2y + w = 3 \\ 2y - 3z + w = -3 \\ 4z - 2w = 2 \\ -6w = 6 \end{cases}$$

Vetor solução

$$\mathcal{X} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

2.3.2 RESOLUÇÃO DE SISTEMAS TRIANGULARES

Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathbb{B}$ onde A: matriz (n x n) triangular superior

\mathcal{X} : vetor (n) componentes

\mathbb{B} : vetor (n) componentes

a_{ij} : $i = 1, n$ e $j \geq i$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \quad a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \quad a_{33}x_3 + \dots + a_{3n}x_n = b_3 \\ \quad \quad \quad \dots \dots \dots \\ \quad \quad \quad \quad \dots \dots \dots \\ \quad \quad \quad \quad \quad \quad a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right.$$

Algoritmo: (Resolução de um SELA triangular superior)

...

$$x_n = b_n / a_{nn}$$

$$x_n = b_n / a_{nn}$$

para $k = n-1, \dots, 1$

$$x_{n-1} = (b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n) / a_{n-1,n-1}$$

$$x_k = (b_k - \sum_{j=k+1}^n a_{kj} \cdot x_j) / a_{kk}$$

$$\vdots$$

$$x_1 = (b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n)) / a_{11}$$

2.3.3 TRIANGULARIZAÇÃO DO MÉTODO DE ELIMINAÇÃO DE GAUSS

Dado o SELA $A\mathcal{X} = \mathbb{B}$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} * \mathcal{X} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

- eliminação dos elementos abaixo da diagonal principal da 1ª coluna

se $a_{11} \neq 0$

$$\left(\begin{array}{cccccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} & : & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} & : & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} & : & b_3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} & : & b_n \end{array} \right) \begin{array}{l} L_2 - (a_{21} / a_{11}) * L_1 \\ L_3 - (a_{31} / a_{11}) * L_1 \\ \dots \\ L_n - (a_{n1} / a_{11}) * L_1 \end{array}$$

a_{11} = pivô se $a_{11} \neq 0$

$$a'_{21} = a_{21} - (a_{21} / a_{11}) * a_{11}$$

...

$$a'_{2n} = a_{2n} - (a_{21} / a_{11}) * a_{1n}$$

$$b'_2 = b_2 - (a_{21} / a_{11}) * b_1$$

$$a'_{31} = a_{31} - (a_{31} / a_{11}) * a_{11}$$

$$a'_{32} = a_{32} - (a_{31} / a_{11}) * a_{12}$$

...

$$a'_{3n} = a_{3n} - (a_{31} / a_{11}) * a_{1n}$$

$$b'_3 = b_3 - (a_{31} / a_{11}) * b_1$$

$$a'_{n1} = a_{n1} - (a_{n1} / a_{11}) * a_{11}$$

$$a'_{n2} = a_{n2} - (a_{n1} / a_{11}) * a_{12}$$

...

$$a'_{nn} = a_{nn} - (a_{n1} / a_{11}) * a_{1n}$$

$$b'_n = b_n - (a_{n1} / a_{11}) * b_1$$

continua-se da mesma forma para as demais colunas da matriz e do vetor independente.

ALGORITMO (triangularização do método de Eliminação de Gauss Básico)

- para $k = 1, \dots, n-1$

(indica linha do pivô)

para $i = k + 1, \dots, n$

(indica a linha a transformar de A)

$$m = a_{ik} / a_{kk}$$

$$a_{ik} = 0$$

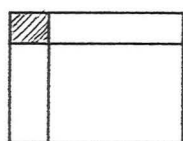
para $j = k + 1, \dots, n$ (indica a coluna a transformar da linha i)

$$a_{ij} = a_{ij} - m \cdot a_{kj}$$

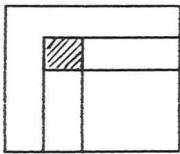
$$b_i = b_i - m \cdot b_k$$

2.3.4 TÉCNICAS DE PIVOTAMENTO

PIVOTAMENTO PARCIAL - Consiste em trocar linhas (ou colunas) de maneira a minimizar a propagação de erros nas operações. A escolha dos pivôs é feita de acordo com o esquema:



1º pivô - é o elemento de maior valor absoluto da coluna 1



2º pivô - é o elemento de maior valor absoluto da coluna 2 e da diagonal para baixo, da matriz resultante

Procede-se da mesma forma para os demais pivôs.

Exemplo 1 - Resolução de um SELA por Gauss + pivotamento parcial.

Precisão utilizada $n = 3$ algarismos significativos.

$$\begin{cases} 3x - 6y + 7z = 3 \\ 9x \quad \quad - 5z = 3 \\ 5x - 8y + 6z = -4 \end{cases}$$

p	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	b_i
1	3	-6	7	3
2	9	0	-5	3
3	5	-8	6	-4
2	9	0	-5	3
1'	(+0.333)	-6	8.67	2.0
3'	(+0.556)	-8	8.78	-5.67
3'		-8	8.78	-5.67
1''		(+0.75)	2.09	6.25
X^t	1.99	3.99	2.99	

Sistema triangularizado:

$$\begin{cases} 9x \quad \quad - 5z = 3 \\ \quad - 8y + 8.78z = -5.67 \\ \quad \quad 2.09z = 6.25 \end{cases} \quad \begin{aligned} z &= \frac{6.25}{2.09} = 2.99 \\ y &= \frac{-5.67 * 8.78 * (2.99)}{-8} = 3.99 \\ x &= 1.99 \end{aligned}$$

Exemplo 2 - Resolução de um SELA (3x3) por Gauss + pivotamento parcial. Precisão utilizada $n = 5$ algarismos significativos.

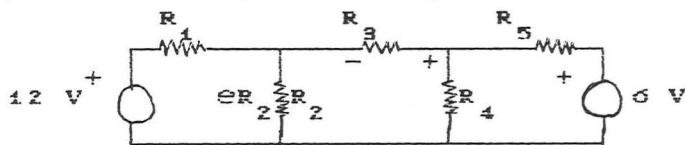
$$\begin{cases} 2.4759x + 1.6235y + 4.6231z = 0.0647 \\ 1.4725x + 0.9589y - 1.3253z = 1.0473 \\ 2.6951x + 2.8965y - 1.4794z = -0.6789 \end{cases}$$

p	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	b_i
1	2.4759	1.6235	4.6231	0.0647
2	1.4725	0.9589	-1.3253	1.0473
3	2.6951	2.8965	-1.4794	-0.6789
3	2.6951	2.8965	-1.4794	-0.6789
1'	(+0.91867)	-1.0374	5.9822	0.68839
2'	(+0.54636)	-0.62363	-0.51702	1.4182
1'		-1.0374	5.9822	0.68839
2''		(+0.60115)	-4.1132	1.0044
X^t	1.8406	-2.0717	-0.24419	

Verificação:

$$\begin{pmatrix} 2.4759 & 1.6235 & 4.6231 \\ 1.4725 & 0.9589 & -1.3253 \\ 2.6951 & 2.8965 & -1.4794 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1.8406 \\ -2.0717 \\ -0.24419 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.064821801 \\ 1.047355377 \\ -0.678823304 \end{pmatrix}$$

Exemplo 3 - No circuito abaixo, determinar o valor das tensões sobre os resistores R_2 e R_3 . Utilizar o método de Gauss + pivotamento parcial e precisão $n = 4$



$$R_1 = R_2 = R_3 = R_4 = R_5 = 1 \Omega$$

Usando o método das malhas, obtemos:

$$\begin{aligned} 12 &= I_1(R_1 + R_2) - I_2 \cdot R_2 \\ 0 &= -I_1 \cdot R_2 + I_2(R_2 + R_3 + R_4) - I_3 \cdot R_4 \\ -6 &= -I_2 \cdot R_4 + I_3 \cdot (R_4 + R_5) \end{aligned}$$

onde I_1 , I_2 e I_3 são as correntes no sentido horário nas malhas tomadas da esquerda para a direita.

O sistema formado é:

$$\begin{cases} 2I_1 - I_2 = 12 \\ -I_1 + 3I_2 - I_3 = 0 \\ -I_2 + 2I_3 = -6 \end{cases}$$

então $I_1 = 6.75 \text{ A}$;

$I_2 = 1.5 \text{ A}$

e $I_3 = -2.25 \text{ A}$

e $R_2 = R_2 * (-I_1 - I_2) = -5.25 \text{ v}$

e $R_3 = R_3 * (-I_2) = -1.5 \text{ v}$

P	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	b_i
1	2	-1	0	12
2	-1	3	-1	0
3	0	-1	2	-6
1	2	-1	0	12
2'	(-0.5)	2.5	-1	6
3'	0	-1	2	-6
2'		2.5	-1	6
3''		(-0.4)	1.6	-3.6
I	6.75	1.50	-2.25	

PIVOTAMENTO TOTAL

A escolha dos pivôs é feita do seguinte modo:

1º PIVÔ - $\max |a_{ij}|$ isto é, é escolhido o maior elemento em
 $1 \leq i \leq n$ valor absoluto da matriz dos
 $1 \leq j \leq n$ coeficientes (A).

2º PIVÔ - $\max |a'_{ij}|$ onde os $|a'_{ij}|$ são elementos da matriz
 $2 \leq i \leq n$ resultante após a primeira transformação
 $2 \leq j \leq n$ (eliminação dos elementos da 1ª
coluna).

Prossegue-se de forma análoga para a escolha dos demais pivôs.

Nesta técnica será necessário tanto a troca de linhas

como a de colunas de A , tornando assim o processo mais demorado. A melhora da exatidão que esta técnica proporciona pode não ser vantajosa em função do aumento do esforço computacional.

2.3.5 REFINAMENTO DA SOLUÇÃO DE UM "SELA". O REFINAMENTO DE GAUSS

O método de Gauss, seja ou não com pivotamento, não nos leva necessariamente a uma exatidão definida a priori. Essa exatidão pode ser melhorada se usarmos a técnica de refinamentos ou resíduos.

Descrição do Método : Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$

1º passo : Obter uma primeira aproximação \mathcal{X}_1 da solução exata do SELA, pelo método de Gauss com pivotamento.

2º passo : refinar a solução obtida a partir de \mathcal{X}_n gerando assim uma aproximação \mathcal{X}_{n+1} e mediante condições de convergência obtendo-se $\mathcal{X} = \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{X}_n$

GERAÇÃO DAS APROXIMAÇÕES

Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$ com aproximação inicial \mathcal{X}_1 . Queremos determinar Z_1 para então obter $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 + Z_1$

1º Refinamento (determinação de Z_1 : erro em \mathcal{X}_1)

$$A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$$

$$A\mathcal{X}_1 = \mathcal{Y}_1 \longrightarrow A(\mathcal{X} - \mathcal{X}_1) = \mathcal{Y} - \mathcal{Y}_1 = \mathcal{R}_1 \longrightarrow A Z_1 = \mathcal{R}_1$$

$AZ_1 = \mathcal{R}_1$

então $AZ_1 = \mathcal{R}_1$ é um sistema de equações lineares e resolvendo-o por Gauss com pivotamento obtém-se o valor de Z_1 . Como a matriz A já foi triangularizada anteriormente basta só efetuar as operações necessárias no vetor \mathcal{R}_1 e aplicar a retro-substituição. Assim obtemos $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 + Z_1$.

Devido a imperfeição da máquina, ou seja, a precisão limitada e por consequência, a propagação de erros, não obteremos exatamente o valor de Z_1 , mas sim uma aproximação para Z_1 , que denotaremos por $\square Z_1$

$$\text{então } \mathcal{X}_2 = \mathcal{X}_1 + \square Z_1$$

2º Refinamento (determinação de Z_2 : erro em \mathcal{X}_2)

$$A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$$

$$A\mathcal{X}_2 = \mathcal{Y}_2 \longrightarrow AZ_2 = A(\mathcal{X} - \mathcal{X}_2) = A\mathcal{X} - A\mathcal{X}_2 = \mathcal{Y} - \mathcal{Y}_2 = \mathcal{R}_2$$

Resolvendo o SELA $A.Z_2 = \mathcal{R}_2$ encontra-se $Z_2 \longrightarrow \mathcal{X}_3 = \mathcal{X}_2 + \square Z_2$

3º Refinamento : Continua-se analogamente o processo de refinamentos até que seja obtida uma certa exatidão. Consegue-se convergência dos refinamentos se o SELA for bem condicionado. Com a sequência de refinamentos obtém-se X_1, X_2, X_3, \dots que apresentará convergência se forem satisfeitas as condições do teorema abaixo.

TEOREMA DE WILKINSON : Sejam os valores X_m definidos anteriormente. Seja X a solução de $AX = Y$ e valha:

i) $\text{cond}(A) < \frac{1}{16\mu(n^3 + 3n^2)}$ μ : unidade de arredondamento da máquina

n : ordem da matriz

ii) Os vetores resíduo R_m sejam calculados com precisão dupla.

$$R_m = Y - AX_m$$

Então a sequência $\{X_m\}$ converge para a solução exata do SELA .

Exemplo 1

Resolução do SELA por Gauss+ pivotamento parcial.

Precisão de 5 dígitos significativos. Após a solução X_1 são realizados refinamentos

	P	a_{i1}	a_{i2}	y_i	r_{1i}	r_{2i}
$\begin{cases} 4x + 4y = 20.5 \\ 7x + 6.99y = 34.97 \end{cases}$	1	4	4	20.5	0	0
	2	7	6.99	34.97	0.00149	0
	2	7	6.99	34.97	0.00149	
	1'	(+0.57143)	0.0057043	0.51709	-0.00085143	
	X_1^T	-85.524	90.649			
	Z_1	0.14926	-0.14926			
	X_2^T	-85.375	90.500			

$$\begin{cases} 7x + 6.99y = 34.97 \rightarrow x = (34.97 - 6.99(90.649)) / 7 = -85.524 \\ 0.0057043y = 0.51709 \rightarrow y = 0.51709 / 0.0057043 = 90.649 \end{cases}$$

$$AX_1 = \begin{bmatrix} 4 & 4 \\ 7 & 6.99 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} -85.524 \\ 90.649 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 20.500000 \\ 34.968510 \end{bmatrix}$$

$$R_1 = Y - AX_1 = \begin{bmatrix} 20.5 & - & 20.5 \\ 34.97 & - & 34.968510 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0.00149 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema $AZ_1 = R_1$, encontra-se $Z_1 = \begin{bmatrix} 0.14926 \\ -0.14926 \end{bmatrix}$

e então $X_2 = \begin{pmatrix} -85.375 \\ 90.500 \end{pmatrix}$

$AX_2 = \begin{pmatrix} 4 & 4 \\ 7 & 6.99 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} -85.375 \\ 90.500 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20.50000000 \\ 34.97000000 \end{pmatrix}, R_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

Exemplo 2:

O sistema
$$\begin{cases} 2.4759x + 1.6235y + 4.6231z = 0.0647 \\ 1.4725x + 0.95890y - 1.3253z = 1.0473 \\ 2.6951x + 2.8965y - 1.4794z = -0.6789 \end{cases}$$

foi resolvido por Eliminação de Gauss com pivotamento parcial e numa máquina com precisão de 5 dígitos significativos. A solução encontrada foi $X^T = (1.8406 \quad -2.0717 \quad -0.24419)$. Refinar esta solução.

$$AX_1 = \begin{pmatrix} 0.064821801 \\ 1.047355377 \\ -0.678823304 \end{pmatrix} R_1 = \begin{pmatrix} 0.0647 \\ 1.0473 \\ -0.67890 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.064821801 \\ 1.047355377 \\ -0.678823304 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} -0.12180 * 10^{-3} \\ -0.55377 * 10^{-4} \\ -0.76696 * 10^{-4} \end{pmatrix}$$

P	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	b_i	R_i
1	2.4759	1.6235	4.6231	0.0647	$-0.12180 * 10^{-3}$
2	1.4725	0.9589	-1.3253	1.0473	$-0.55377 * 10^{-4}$
3	2.6951	2.8965	-1.4794	-0.6789	$-0.76696 * 10^{-4}$
3	2.6951	2.8965	-1.4794	-0.6789	$-0.76696 * 10^{-4}$
1' (+0.91867)		-1.0374	5.9822	0.68839	$-0.51342 * 10^{-4}$
2' (+0.54636)		-0.62363	-0.51702	1.4182	$-0.13473 * 10^{-4}$
1'		-1.0374	5.9822	0.68839	$-0.51342 * 10^{-4}$
2''		(+0.60115)	-4.1132	1.0044	$0.17391 * 10^{-4}$
X_1^T	1.8406	-2.0717	-0.24419		
Z_1^T	$-5.7765 * 10^{-5}$	$2.5110 * 10^{-5}$	$-4.228 * 10^{-6}$		
X_2^T	1.8405	-2.0717	-0.24419		

2.4 O CONDICIONAMENTO DE UMA MATRIZ E AS DIFICULDADES NA ESTIMATIVA DOS ERROS COMPUTACIONAIS

Dado o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$, sejam os vetores \mathcal{X}_1 e \mathcal{X}_2 aproximações da solução exata \mathcal{X} . Queremos determinar qual dentre as duas aproximações tem maior exatidão. Vamos verificar, de início, através de exemplos.

Exemplo 1:

$$\text{Seja o sistema } \begin{cases} 0.24x + 0.36y + 0.12z = 0.84 \\ 0.12x + 0.16y + 0.24z = 0.52 \\ 0.15x + 0.21y + 0.25z = 0.64 \end{cases}$$

e temos que decidir qual das aproximações $\mathcal{X}_1^T = (25 \ -14 \ -1)$ ou $\mathcal{X}_2^T = (-3 \ 4 \ 0)$ tem maior exatidão. O que faríamos naturalmente seria calcular os vetores resíduos:

$$\mathbb{R}_1 = \mathcal{Y} - A\mathcal{X}_1 \quad \text{e} \quad \mathbb{R}_2 = \mathcal{Y} - A\mathcal{X}_2 \quad \mathbb{R}_1 = \begin{pmatrix} 0.00 \\ 0.00 \\ 0.08 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbb{R}_2 = \begin{pmatrix} 0.12 \\ 0.24 \\ 0.25 \end{pmatrix}$$

embora tenhamos $\mathbb{R}_1 < \mathbb{R}_2$, a solução aproximada \mathcal{X}_1 não coincide em nenhum dígito com a solução exata $\mathcal{X}^T = (-3, 4, 1)$. Portanto, \mathcal{X}_2 é bem mais exato do que \mathcal{X}_1 , mesmo este último tendo menor resíduo.

O que se conclui é que: "Nem sempre a aproximação de menor resíduo é mais exata".

Um problema é dito "MAL CONDICIONADO" se pequenas alterações nos dados de entrada ocasionam grandes erros no resultado final.

Exemplo 2

$$\begin{cases} 0.992x + 0.873y = 0.119 \\ 0.481x + 0.421y = 0.060 \end{cases} \quad \text{Sua solução exata é } \mathcal{X} = \begin{pmatrix} 1.00 \\ -1.00 \end{pmatrix}$$

se o lado direito da 1ª equação sofrer um erro de 0.001 teremos:

$$\begin{cases} 0.992x + 0.873y = 0.120 \\ 0.481x + 0.421y = 0.060 \end{cases} \quad \text{e resolvendo-o numa máquina cuja precisão é de 3 dígitos significativos a solução é}$$

$$\mathcal{X} = \begin{pmatrix} 0.815 \\ -0.789 \end{pmatrix}$$

Logo, temos cerca de 20% de variação no resultado para uma

variação de 1% nos dados de entrada.

Exemplo 3

Seja o SELA $\begin{cases} x + 5y = 17 \\ 1.5x + 7.501y = 25.503 \end{cases}$

Solução Exata

$$X = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

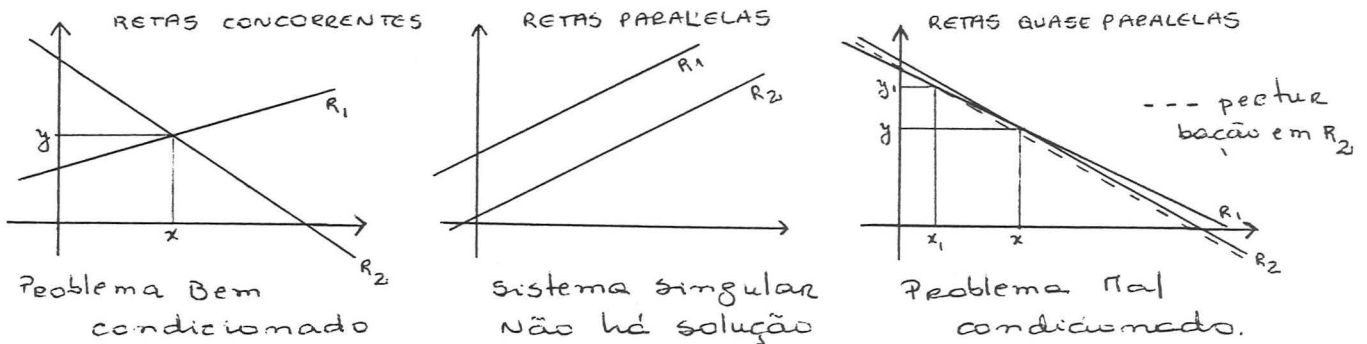
com uma alteração de 0.002 num dado de entrada:

$$\begin{cases} x + 5y = 17 \\ 1.5x + 7.501y = 25.501 \end{cases}$$

a solução é

$$X = \begin{pmatrix} 12 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Em geral temos a seguinte situação para o caso de duas RETAS.



CÁLCULO DO VALOR DO DETERMINANTE DE UMA MATRIZ TRIANGULAR

Se uma matriz A está na forma triangular então $\det A = (-1)^k \cdot a_{11} \cdot a_{22} \cdot a_{33} \dots a_{nn}$, onde k representa o número trocas entre as linhas da matriz A.

2.4.1 MEDIDAS DE CONDICIONAMENTO

1. DETERMINANTE NORMALIZADO DA MATRIZ DOS COEFICIENTES

Seja $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$, e $\alpha_k = \sqrt{a_{k1}^2 + a_{k2}^2 + a_{k3}^2 + \dots + a_{kn}^2}$

define-se determinante normalizado de A por:

$$\text{NORM } |A| = \begin{vmatrix} a_{11}/\alpha_1 & a_{12}/\alpha_1 & \dots & a_{1n}/\alpha_1 \\ a_{21}/\alpha_2 & a_{22}/\alpha_2 & \dots & a_{2n}/\alpha_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}/\alpha_n & a_{n2}/\alpha_n & \dots & a_{nn}/\alpha_n \end{vmatrix} = \frac{\det A}{\alpha_1 \cdot \alpha_2 \cdot \alpha_3 \cdot \dots \cdot \alpha_n}$$

O determinante normalizado está sempre compreendido entre (-1 e 1)

e quanto mais afastado de ± 1 , mais mal condicionada será a matriz A.

Exemplos:

$$1) \quad A = \begin{pmatrix} 0.992 & 0.873 \\ 0.481 & 0.421 \end{pmatrix} \quad \text{NORM } |A| = \frac{-0.00228}{0.84469} = -2.7 * 10^{-3}$$

$$2) \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 1.5 & 7.501 \end{pmatrix} \quad \text{NORM } |A| = \frac{0.001}{39.005} = 2.5 * 10^{-5}$$

2. NÚMERO DE CONDICIONAMENTO DE UMA MATRIZ "A" INVERSÍVEL

A pergunta que surge agora é: como pode ser medido o condicionamento de um SELA ?

Seja o sistema $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$ e alteremos \mathcal{Y} para \mathcal{Y}' . Assim obtemos um novo valor $A\mathcal{X}' = \mathcal{Y}'$ e temos que $\mathcal{Y} - \mathcal{Y}' = A\mathcal{X} - A\mathcal{X}' = A(\mathcal{X} - \mathcal{X}')$
 $\mathcal{X} - \mathcal{X}' = A^{-1}(\mathcal{Y} - \mathcal{Y}')$

$$\|\mathcal{X} - \mathcal{X}'\| = \|A^{-1} * (\mathcal{Y} - \mathcal{Y}')\| \leq \|A^{-1}\| * \|\mathcal{Y} - \mathcal{Y}'\|$$

$$\text{e então } \frac{\|\mathcal{X} - \mathcal{X}'\|}{\|\mathcal{X}\|} \leq \|A^{-1}\| * \frac{\|\mathcal{Y} - \mathcal{Y}'\|}{\|\mathcal{Y}\|} \quad [1]$$

tendo em vista que

$$A\mathcal{X} = \mathcal{Y} \rightarrow \|\mathcal{Y}\| \leq \|A\| * \|\mathcal{X}\| \rightarrow \frac{1}{\|\mathcal{X}\|} \leq \frac{\|A\|}{\|\mathcal{Y}\|} \quad [2]$$

e substituindo [2] em [1], obtemos:

$$\boxed{\frac{\|\mathcal{X} - \mathcal{X}'\|}{\|\mathcal{X}\|} \leq \|A\| * \|A^{-1}\| * \frac{\|\mathcal{Y} - \mathcal{Y}'\|}{\|\mathcal{Y}\|}} \quad [3]$$

valor relativo do
efeito provocado pela
alteração no SELA
 $\mathcal{Y} \rightarrow \mathcal{Y}'$

fator de ampliação
da
perturbação

valor relativo da
perturbação feita
no sistema
 $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$

Podemos agora definir o que entendemos por condicionamento de um SELA,

DEFINIÇÃO: Dado um SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$, o número de condicionamento é dado por $\text{COND}(A) = \|A\| * \|A^{-1}\|$

A fórmula [3] nos diz que quanto maior for $\text{COND}(A)$ mais sensível será o SELA.

Observação: Exemplos de normas vetoriais e matriciais mais usadas.

$$||X||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} \quad \text{norma euclidiana}$$

$$||X||_\infty = \max_{i=1, n} |x_i| \quad \text{norma do máximo}$$

$$||X||_1 = \sum_{i=1}^n |x_i| \quad \text{norma da soma}$$

$$||A||_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad \text{norma do máximo das colunas}$$

$$||A||_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad \text{norma do máximo das linhas}$$

$$||A||_E = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2} \quad \text{norma euclidiana}$$

No curso, utilizaremos usualmente $||X||_\infty$ e $||A||_\infty$, norma do máximo para vetores e norma do máximo das linhas para matrizes.

Exemplos sobre o Número de Condicionamento de uma matriz.

1.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 1.5 & 7.501 \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 7501 & -5000 \\ -1500 & 1000 \end{pmatrix} \quad ||A||_\infty = 9.001$$

$$||A^{-1}||_\infty = 12501$$

$$\text{COND}(A) = ||A||_\infty * ||A^{-1}||_\infty \approx 1.1 * 10^5$$

2.

$$A = \begin{pmatrix} 0.780 & 0.563 \\ 0.913 & 0.659 \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 659000 & -563000 \\ -913000 & 780000 \end{pmatrix} \quad ||A||_\infty = 1.572$$

$$||A^{-1}||_\infty = 1693000$$

$$\text{COND}(A) \approx 2.66 * 10^6 \quad \text{e NORM}|A| = 9.2 * 10^{-7}$$

Da fórmula [3] podemos determinar uma expressão que nos dará informações sobre a exatidão encontrada na solução de um SELA.

$$\frac{||X - X'||}{||X||} \leq \text{COND}(A) * \frac{||Y - Y'||}{||Y||}$$

$$\log \left[\frac{||X - X'||}{||X||} \right] \leq \log(\text{COND}(A)) + \log \left[\frac{||Y - Y'||}{||Y||} \right]$$

$$\boxed{\text{DIGSE}(X') \geq \text{DIGSE}(Y') - \log(\text{COND}(A))}$$

2.5 INVERSÃO DE MATRIZES VIA MÉTODOS NUMÉRICOS

Chama-se matriz inversa de uma matriz quadrada A , à matriz denotada por A^{-1} tal que :

$$A * A^{-1} = A^{-1} * A = I \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n} \text{ e } A^{-1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & \dots & b_{nn} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & 0 \\ & 1 & & & \\ & & \dots & & \\ 0 & & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$A * \begin{pmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ \vdots \\ b_{n1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \quad A * \begin{pmatrix} b_{12} \\ b_{22} \\ \vdots \\ b_{n2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \quad A * \begin{pmatrix} b_{13} \\ b_{23} \\ \vdots \\ b_{n3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}; \dots$$

$$\dots; \quad A * \begin{pmatrix} b_{1n} \\ b_{2n} \\ \vdots \\ b_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Para determinar os valores de $B \simeq A^{-1}$ aplica-se o método de Eliminação de Gauss com pivotamento parcial para cada um dos sistemas de equações lineares acima.

Exemplo: Calcular a inversa da matriz A , utilizando uma máquina que opere com 5 dígitos significativos por Eliminação de Gauss com pivotamento parcial.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 4 \\ -2 & 8 & -6 \\ 3 & -5 & 15 \end{pmatrix}$$

P	a_{i1}	a_{i2}	a_{i3}	i_{i1}	i_{i2}	i_{i3}
1	1	-3	4	1	0	0
2	-2	8	-6	0	1	0
3	3	-5	15	0	0	1
3	3	-5	15	0	0	1
1'	(+0.33333)	-1.3334	-0.99995	1	0	-0.33333
2'	(-0.66667)	4.6667	4.0001	0	1	0.66667
2'		4.6667	4.0001	0	1	0.66667
1''		(-0.28573)	0.14300	1	0.28573	-0.14284
	b_{i1}	b_{i2}	b_{i3}			
$A^{-1} \approx B$	-44.955	-12.488	6.9928			
	-5.9941	-1.4984	0.99905			
	6.9930	1.9981	-0.99888			

2.5.1 REFINAMENTO DE UMA MATRIZ INVERSA CALCULADA

Em geral, a matriz inversa obtida não será exata, devido a propagação de erros durante o processo de eliminação. Deve-se então aplicar a técnica dos refinamentos para melhorar a exatidão desta inversa, ou seja, $A * A^{-1} = I$ e $A * B = I_1$, onde B é a inversa de A , calculada.

$$A * (A^{-1} - B) = I - I_1 = R_1$$

$A * Z_1 = R_1$ onde Z_1 é a matriz dos erros em B R_1 é a matriz resíduo
--

2.5.2 ERRO RELATIVO NO CÁLCULO DE UMA MATRIZ INVERSA (A^{-1})

$$|E_R| \leq \|A\| * \|A^{-1}\| * \frac{\|I - I_1\|}{\|I\|}$$

2.6 SISTEMAS LINEARES COMPLEXOS

DESCOMPLEXIFICAÇÃO

Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{B}$ [1], onde $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$; \mathcal{X} e $\mathcal{B} \in \mathbb{C}^n$

Façamos $A = M + iN$

[2] $\mathcal{B} = \mathcal{C} + i\mathcal{D}$ onde M e N são matrizes reais ($\in \mathbb{R}^{n \times n}$)

$\mathcal{X} = \mathcal{S} + iT$ $\mathcal{C}, \mathcal{D}, \mathcal{S}$ e \mathcal{T} são vetores reais ($\in \mathbb{R}^n$)

substituindo [2] em [1] teremos:

$$(M + iN)(\mathcal{S} + iT) = \mathcal{C} + i\mathcal{D}$$

$$M \cdot \mathcal{S} - N \cdot \mathcal{T} + i(N \cdot \mathcal{S} + M \cdot \mathcal{T}) = \mathcal{C} + i\mathcal{D} \quad \text{ou ainda}$$

$$\begin{cases} M.S - N.T = C \\ N.S + M.T = D \end{cases} \quad \begin{bmatrix} M & -N \\ N & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S \\ T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}$$

O sistema linear [1] foi reduzido a um sistema real ($2n \times 2n$). Para resolvê-lo é só aplicar os métodos numéricos para resolução de SELAS.

Exemplo: Resolver o SELA pelo método de Gauss com pivotamento:

$$\begin{cases} (1 + 2i)x_1 + 3x_2 = -5 + 4i \\ -x_1 + x_2 = -1 \end{cases}$$

Descomplexificação:

$$A = \begin{bmatrix} 1+2i & 3 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}}_M + i \underbrace{\begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_N$$

$$Y = \begin{bmatrix} -5+4i \\ -1 \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -5 \\ -1 \end{bmatrix}}_C + i \underbrace{\begin{bmatrix} 4 \\ 0 \end{bmatrix}}_D$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & -2 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_1 \\ S_2 \\ t_1 \\ t_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -5 \\ -1 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{solução } X = \begin{bmatrix} i \\ -1+i \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} S_1 = 0 \\ S_2 = -1 \\ t_1 = 1 \\ t_2 = 1 \end{matrix}$$

2.7 MÉTODO DE GAUSS-JORDAN ou MÉTODO DA DIAGONALIZAÇÃO

Dado um SELA $AX = Y$, o método consiste em efetuar transformações lineares nas linhas das equações a fim de diagonalizar a matriz dos coeficientes A .

Utiliza-se, para este fim, a mesma técnica do método de Eliminação de Gauss com ou sem pivotamento.

O método de Gauss-Jordan é muito usado na prática, para calcular a inversa de uma matriz $A_{n \times n}$, pois através de operações elementares, transforma a matriz A numa matriz identidade e, a matriz dos termos independentes (matriz identidade) na inversa de A .

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

$$[A : I] \longrightarrow [A^{-1} * A : A^{-1} * I] \\ [I : A^{-1}]$$

2.8 MÉTODOS ITERATIVOS PARA RESOLUÇÃO DE SELAS:

MÉTODO DE JACOBI E MÉTODO DE GAUSS-SEIDEL

Introdução

Os sistemas lineares de grande porte (n grande) são em geral esparsos, isto é, grande porcentagem dos elementos da matriz dos coeficientes, são nulos. Desta forma não são aconselhados os métodos diretos para a resolução de SELAS de grande porte esparsos pois, eles não preservam a esparsidade, isto é, durante o processo de eliminação muitos elementos nulos poderão se tornar não nulos. Os métodos iterativos preservam a esparsidade, além de apresentarem relativa insensibilidade ao crescimento dos erros de arredondamento.

Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$, onde:

A - matriz dos coeficientes, $n \times n$

\mathcal{X} - vetor incógnita, $n \times 1$

\mathcal{Y} - vetor dos termos constantes, $n \times 1$

Este sistema é convertido de alguma forma, num sistema do tipo $\mathcal{X} = B\mathcal{X} + Z = \varphi(\mathcal{X})$ onde B é uma matriz $n \times n$ e Z um vetor $n \times 1$. Então $\varphi(\mathcal{X}) = B\mathcal{X} + Z$ é uma função de iteração dada na forma matricial.

O esquema iterativo produzirá a partir de $\mathcal{X}^{(0)}$ (aproximação inicial arbitrária) aproximações sucessivas $\mathcal{X}^{(1)}$, $\mathcal{X}^{(2)}$, ...

Se forem satisfeitos algum dos critérios de convergência então a sequência de vetores $\mathcal{X}^{(1)}$, $\mathcal{X}^{(2)}$, $\mathcal{X}^{(3)}$, ... convergirá para a solução exata \mathcal{X} do SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$.

2.8.1 MÉTODO DE JACOBI

Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n = y_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \dots + a_{3n}x_n = y_3 \\ \dots \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{nn}x_n = y_n \end{cases}$$

e vamos supor que o mesmo já está preparado de forma a produzir aproximações que converjam para a solução exata \mathcal{X} .

então:

$$\begin{aligned}
 x_1^{(k+1)} &= z_1 - (b_{12} x_2^{(k)} + b_{13} x_3^{(k)} + \dots + b_{1n} x_n^{(k)}) \\
 x_2^{(k+1)} &= z_2 - (b_{21} x_1^{(k)} + b_{23} x_3^{(k)} + \dots + b_{2n} x_n^{(k)}) \\
 &\vdots \\
 x_n^{(k+1)} &= z_n - (b_{n1} x_1^{(k)} + b_{n2} x_2^{(k)} + \dots + b_{n, n-1} x_{n-1}^{(k)})
 \end{aligned}$$

onde :

$$z_i = \frac{y_i}{a_{ii}}$$

$$b_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}, i \neq j$$

$$x_i^{(k+1)} = z_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n b_{ij} x_j^{(k)} \quad i = 1, n$$

Estas são ditas fórmulas de recorrência do método de Jacobi.

2.8.2 MÉTODO DE GAUSS-SEIDEL

Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$

O esquema iterativo produzirá a partir de $\mathcal{X}^{(0)}$, arbitrário, aproximações sucessivas $\mathcal{X}^{(1)}$, $\mathcal{X}^{(2)}$, $\mathcal{X}^{(3)}$, ... do seguinte modo:

$$\begin{aligned}
 x_1^{(k+1)} &= z_1 - (b_{12} x_2^{(k)} + b_{13} x_3^{(k)} + \dots + b_{1n} x_n^{(k)}) \\
 x_2^{(k+1)} &= z_2 - (b_{21} x_1^{(k+1)} + b_{23} x_3^{(k)} + \dots + b_{2n} x_n^{(k)}) \\
 x_3^{(k+1)} &= z_3 - (b_{31} x_1^{(k+1)} + b_{32} x_2^{(k+1)} + \dots + b_{3n} x_n^{(k)}) \\
 &\vdots \\
 x_n^{(k+1)} &= z_n - (b_{n1} x_1^{(k+1)} + b_{n2} x_2^{(k+1)} + \dots + b_{n, n-1} x_{n-1}^{(k+1)})
 \end{aligned}$$

ou seja:

$$x_i^{(k+1)} = z_i - \left[\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n b_{ij} x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, n$$

onde $z_i = \frac{y_i}{a_{ii}}$ e $b_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}$, $i \neq j$

2.8.3 TESTES DE PARADA

O processo iterativo é repetido até que o vetor $\mathcal{X}^{(k)}$ esteja suficientemente próximo de $\mathcal{X}^{(k+1)}$.

Se $\frac{\|\mathcal{X}^{(k+1)} - \mathcal{X}^{(k)}\|_{\infty}}{\|\mathcal{X}^{(k+1)}\|_{\infty}} < \varepsilon$ então pára o processo iterativo e o erro relativo em $\mathcal{X}^{(k)}$ é menor que ε .

Ou pára-se o processo quando $DIGSE(\mathcal{X}^{(k)}, \mathcal{X}^{(k+1)}) \geq M$. Usa-se também como teste de parada um número máximo de iterações.

2.8.4 CRITÉRIOS DE CONVERGÊNCIA:

Daremos um teorema que estabelece uma condição suficiente para a convergência do método de Jacobi e de Gauss-Seidel.

1 Teorema : (critério das Linhas ou de Frobenius)

Seja o SELA $A\mathcal{X} = \mathcal{Y}$, então se a matriz A é Diagonalmente Dominante, isto é, $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$, então tanto o método de Jacobi como o de Gauss-Seidel gera uma sequência $\{\mathcal{X}^{(k)}\}$ convergente para a solução do sistema dado, independente da escolha da aproximação inicial $\mathcal{X}^{(0)}$.

Exemplo: Resolva o sistema abaixo pelo método de Jacobi. Pare o processo quando o erro absoluto da solução calculada for menor que 10^{-3} .

$$\begin{cases} x_1 + 4x_2 - x_4 = -2 \\ -x_3 + 2x_4 = -3 \\ 2x_1 + x_4 = 1 \\ 0.5x_1 + x_3 = 1.5 \end{cases}$$

Reordenamos o SELA a fim de satisfazer ao critério de convergência.

$$\begin{cases} 2x_1 + x_4 = 1 & |2| > |1| \\ x_1 + 4x_2 - x_4 = -2 & |4| > |1| + |-1| \\ 0.5x_1 + x_3 = 1.5 & |1| > |0.5| \\ -x_3 + 2x_4 = -3 & |2| > |-1| \end{cases}$$

Como a matriz dos coeficientes após a reordenação, está diagonalmente dominante, então o método de Jacobi produzirá uma sequência $\{\mathcal{X}^{(k)}\}$ convergente para a solução do SELA.

FÓRMULAS DE RECORRÊNCIA

$$x_1^{(k+1)} = (1 - x_4) / 2 = 0.5 - 0.5 x_4^{(k)}$$

$$x_2^{(k+1)} = (-2 - x_1 + x_4) / 4 = -0.5 - 0.25x_1^{(k)} + 0.25x_4^{(k)}$$

$$x_3^{(k+1)} = (1.5 - 0.5x_1^{(k)})$$

$$x_4^{(k+1)} = (-3 + x_3) / 2 = -1.5 + 0.5x_3^{(k)}$$

Aproximação inicial: $\mathcal{X}^{(0)} = \mathbf{0}$

iter	x_1	x_2	x_3	x_4
0	0	0	0	0
1	0.5	-0.5	1.5	-1.5
2	1.25	-1.0	1.25	-0.75
3	0.875	-1.0	0.875	-0.875
4	0.9375	-0.9375	1.0625	-1.0625
5	1.03125	-1.0000	1.03125	-0.96875
6	0.984375	-1.0000	0.984375	-0.984375
7	0.9921875	-0.9921875	1.0078125	-1.0078125
8	1.00390625	-1.0000	1.00390625	-0.9960375
9	0.998046875	-1.0000	0.998046875	-0.998046875
10	0.9990234375	-0.9990234375	1.000976563	-1.000976563
11	1.000488282	-1.0000000	1.000488281	-0.9995117185

(cálculos realizados no PC 1500-SHARP)

na 12ª iteração consegue-se $\|X^{(12)} - X^{(11)}\|_{\infty} < 10^{-9}$

na 34ª iteração obtém-se a solução exata $X^T = (1, -1, 1, -1)$

RESOLUÇÃO do mesmo SELA pelo método de Gauss-Seidel.

Reordenando as linhas das equações já foi verificado que o SELA satisfaz o critério das linhas. Então

$\begin{cases} 2x_1 & +x_4 & = & 1 \\ x_1 & +4x_2 & -4x_4 & = & -2 \\ 0.5x_1 & & +x_3 & = & 1.5 \\ & -x_3 & +2x_4 & = & -3 \end{cases}$	<p>FÓRMULAS DE RECORRÊNCIA</p> $x_1^{(k+1)} = 0.5 - 0.5x_4^{(k)}$ $x_2^{(k+1)} = -0.5 - 0.25x_1^{(k+1)} + 0.25x_4^{(k)}$ $x_3^{(k+1)} = 1.5 - 0.5x_1^{(k+1)}$ $x_4^{(k+1)} = -1.5 + 0.5x_3^{(k+1)}$
---	---

iter	x_1	x_2	x_3	x_4
0	0	0	0	0
1	0.5	-0.625	1.25	-0.875
2	0.9375	-0.953125	1.03125	-0.984375
3	0.9921875	-0.994140625	1.00390625	-0.998046875
4	0.9990234375	-0.9992675781	1.000488281	-0.9997558595
5	0.999877929	-0.999908447	1.000061035	-0.9999694825
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
12	1	-1	1	-1

$\|X^{(5)} - X^{(4)}\|_{\infty} < 10^{-9}$

2 CRITÉRIO DE SASSENFELD - Condição suficiente para a convergência do método de Gauss-Seidel.

$$\text{Sendo } S_1 = \frac{1}{|a_{11}|} (|a_{12}| + |a_{13}| + |a_{14}| + \dots + |a_{1n}|)$$

$$S_2 = \frac{1}{|a_{22}|} (|a_{21}| * S_1 + |a_{23}| + |a_{24}| + \dots + |a_{2n}|)$$

$$S_3 = \frac{1}{|a_{33}|} (|a_{31}| * S_1 + |a_{32}| * S_2 + |a_{34}| + \dots + |a_{3n}|)$$

.....

$$S_n = \frac{1}{|a_{nn}|} (|a_{n1}| * S_1 + |a_{n2}| * S_2 + \dots + |a_{nn-1}| * S_{n-1})$$

e valendo $S_1 < 1$, $S_2 < 1, \dots$, $S_n < 1$ então o método de Gauss-Seidel produz uma sequência de vetores $X^{(k)}$ convergente para a solução do SELA, qualquer que seja $X^{(0)}$.

Exemplo:

$$\begin{cases} 3.17x - 2.31y + 9.04z = -37.2373 \\ 4.21x + 1.37y - 1.59z = 18.8798 \\ 1.13x - 1.95y + 2.09z = -10.5894 \end{cases}$$

Teste de convergência: critério Sassenfeld
reordenando linhas: (1ª tentativa)

$$\begin{cases} 4.21x + 1.37y - 1.59z = 18.8798 & S_1 = 0.703 < 1 \\ 1.13x - 1.95y + 2.09z = -10.5894 & S_2 = 1.479 > 1 \\ 3.17x - 2.31y + 9.04z = -37.2373 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{não} \\ \text{satisfaz o} \\ \text{critério de} \\ \text{Sassenfeld.} \end{array}$$

trocando linhas e colunas entre si: (2ª tentativa)

$$\begin{cases} 4.21x - 1.59z + 1.37y = 18.8798 \\ 3.17x + 9.04z - 2.31y = -37.2373 \\ 1.13x + 2.09z - 1.95y = -10.5894 \end{cases}$$

$$S_1 = \frac{1}{4.21} (1.59 + 1.37) = 0.7031 < 1$$

$$S_2 = \frac{1}{9.04} (3.17 * S_1 + 2.31) = 0.5021 < 1$$

$$S_3 = \frac{1}{1.95} (1.13 * S_1 + 2.09 * S_2) = 0.9456 < 1$$

então podemos afirmar que com esta última reordenação o método de Gauss-Seidel produzirá uma sequência de aproximações convergente para a solução do SELA.

Fórmulas Iterativas ou de Recorrência:

$$x^{(k+1)} = 4.484513064 + 0.3776722093z^{(k)} - 0.32541567y^{(k)}$$

$$z^{(k+1)} = -4.119170354 - 0.350663717x^{(k+1)} + 0.255530974y^{(k)}$$

$$y^{(k+1)} = 5.430461538 + 0.579487180x^{(k+1)} + 1.071794872z^{(k+1)}$$

it	x	z	y
0	0	0	0
1	4.484513064	-5.691726374	1.928816227
2	1.707239844	-4.224965135	1.891489175
3	2.273341434	-4.433014640	1.996551396
4	2.160578050	-4.366625961	2.002351506
5	2.183760500	-4.373270542	2.008673811
6	2.179196904	-4.370057265	2.009473240
7	2.180150322	-4.37018316	2.009886345
⋮	⋮	⋮	⋮
17	2.180000000	-4.3700000	2.01000000

2.9 EXERCÍCIOS PROPOSTOS:

1. Resolva os SELAS abaixo pelo método de Eliminação de Gauss com pivotamento parcial. Calcule o det A . Calcule o nº de condicionamento de A (COND (A)).

$$\begin{cases} -x_1 + 2x_2 + 42x_3 = 83 \\ 72x_1 - 41x_2 - 14x_3 = 44 \\ 35x_1 + 10x_2 - 5x_3 = 25 \end{cases} \quad \text{solução exata} = (1, 0, 2) = \mathcal{X}^T$$

$$\begin{cases} 0.8754x_1 + 3.0081x_2 + 0.9358x_3 + 1.1083x_4 = 0.8472 \\ 2.4579x_1 - 0.8758x_2 + 1.1516x_3 - 4.5148x_4 = 1.1221 \\ 5.2350x_1 - 0.8473x_2 - 2.3582x_3 - 1.1419x_4 = 2.5078 \\ 2.1015x_1 + 8.1083x_2 - 1.3232x_3 + 2.1548x_4 = -6.4984 \end{cases}$$

solução exata = $\mathcal{X}^T = (1, -1, 2, 1)$

2. Refine a solução encontrada para cada SELA. Pare quando $DIGSE(\mathcal{X}^{(k)}, \mathcal{X}^{(k+1)}) \geq 6$

3. Determine uma aproximação para a solução dos SELAS com pelo menos 6 dígitos significativos exatos:

$$\begin{cases} x_1 + 9x_2 - 3x_3 + 4x_4 = 26 \\ 3x_2 - 7x_3 + 2x_4 = -7 \\ 5x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 = 5 \\ -2x_1 + 2x_2 - 3x_3 + 10x_4 = 33 \end{cases} \quad \begin{cases} 4x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 7 \\ x_1 + 2x_2 - 5x_3 + x_4 = -1 \\ x_1 + x_2 + x_3 - 4x_4 = -1 \\ 2x_1 - 8x_2 + x_3 - x_4 = -6 \end{cases}$$

2.10 RUDIMENTOS DE VALORES E VETORES PRÓPRIOS (AUTOVALORES E AUTOVETORES)

Valores Próprios e Vetores Próprios Associados.

Dada uma matriz A $n \times n$ real ou complexa, $\lambda \in \mathbb{C}$ (λ escalar) é dito valor próprio de A se existir $\mathcal{X} \neq \mathbf{0}$ (real ou complexo) tal que:

$$A \mathcal{X} = \lambda \mathcal{X} \quad \lambda: \text{valor próprio ou autovalor de } A$$

\mathcal{X} : vetor próprio ou autovetor de A associado a λ .

Sabemos de álgebra linear que:

$$A \mathcal{X} = \lambda \mathcal{X} \longrightarrow A \mathcal{X} = \lambda I \mathcal{X}$$

($(A - \lambda I) \mathcal{X} = \mathbf{0}$, temos então um sistema linear homogêneo, e como \mathcal{X} (autovetor associado a λ) é um vetor não nulo, então

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

$$\det(A - \lambda I) = |A - \lambda I| = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = p(\lambda) = 0$$

Denominamos $p(\lambda)$, polinômio característico da matriz A ; $p(\lambda)$ é um polinômio de grau menor ou igual a n . As raízes de $p(\lambda)$ são denominadas autovalores da matriz A ou valores próprios ou valores característicos de A .

Os autovalores de uma matriz possuem grande importância em muitos problemas físicos. Por exemplo:

- A estabilidade de uma aeronave é determinada pela localização dos autovalores de uma certa matriz na complexa estrutura.
- As frequências naturais de vibrações de vigas.
- A força longitudinal máxima que uma coluna pode sustentar sem curvar.

Observações:

1) Se $\lambda \in \text{Spec}(A)$, então existe $X \neq 0$ tal que $AX = \lambda X$ i.e. :
 $(A - \lambda I) X = 0$

$\text{Spec}(A) = \{\text{raízes distintas de } p(\lambda)\}$

2) Se A é uma matriz simétrica real então todos seus valores próprios são reais.

3) Os valores próprios ou autovalores de A são as raízes distintas de $p(\lambda)$.

2.10.1 ALGORITMOS BASEADOS NA OBTENÇÃO DO POLINÔMIO CARACTERÍSTICO DE "A"

1. RESOLUÇÃO VIA DETERMINANTES

$$p(\lambda) = \det(A - \lambda I) = 0$$

Exemplo 1 - Determinar os autovalores e os autovetores da matriz:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 3 & -4 \end{pmatrix} \quad \text{polinômio característico: } \det(A - \lambda I) = 0$$

$$p(\lambda) = \begin{vmatrix} 2-\lambda & 5 \\ 3 & -4-\lambda \end{vmatrix} = (2-\lambda)(-4-\lambda) - 15 = 0$$

$$\lambda^2 + 2\lambda - 23 = 0 \quad \begin{aligned} \lambda_1 &= -5.898980 \\ \lambda_2 &= 3.898980 \end{aligned}$$

Cálculo dos autovetores correspondentes aos autovalores.

$(A - \lambda I) X = 0$ (equação característica de A)

$$\text{para } \lambda_1 = -5.898980 \quad \begin{pmatrix} 2 + 5.898980 & 5 \\ 3 & -4 + 5.898980 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$X = \begin{pmatrix} x \\ -1.579796x \end{pmatrix}, \quad x \neq 0$$

para $\lambda_2 = 3.898980$ o autovetor correspondente é

$$X = \begin{pmatrix} x \\ 0.3797959x \end{pmatrix}, \quad \text{para } x \neq 0$$

Exemplo 2 - Determinar os autovalores e os correspondentes autovetores da matriz A .

$$A = \begin{pmatrix} 3 & -3 & -4 \\ 0 & 3 & 5 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad p_3(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 3-\lambda & -3 & -4 \\ 0 & 3-\lambda & 5 \\ 0 & 0 & -1-\lambda \end{vmatrix} =$$

$$= (3-\lambda)(3-\lambda)(-1-\lambda) = 0 \quad \longrightarrow \quad \lambda_1 = 3 \quad \text{e} \quad \lambda_2 = -1$$

cálculo dos autovetores:

para $\lambda_1 = 3$

$$\begin{pmatrix} 3-3 & -3 & -4 \\ 0 & 3-3 & 5 \\ 0 & 0 & -1-3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{cases} 0x_1 - 3x_2 - 4x_3 = 0 \rightarrow x_2 = 0 \\ 0x_1 + 0x_2 + 5x_3 = 0 \\ 0x_1 + 0x_2 - 4x_3 = 0 \end{cases} \Rightarrow x_3 = 0$$

então a família de autovetores associada ao autovalor $\lambda = 3$ é :

$$\mathcal{X} = \begin{pmatrix} x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ para } x \neq 0 \text{ ou } \mathcal{X} = k * \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, k \neq 0$$

família de autovetores correspondente a $\lambda_2 = -1$

$$\begin{pmatrix} 3+1 & -3 & -4 \\ 0 & 3+1 & 5 \\ 0 & 0 & -1+1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{cases} 4x_1 - 3x_2 = 4x_3 \\ 4x_2 = -5x_3 \end{cases} \begin{cases} x_1 = \frac{4x_3 + 3x_2}{4} \\ x_2 = -1.25 x_3 \end{cases}$$

$\mathcal{X} = (0.0625x_3, -1.25x_3, x_3)$ para $x_3 \neq 0$ ou

$\mathcal{X} = K (0.0625, -1.25, 1)$ para $k \neq 0$

2. ALGORITMO DE BÖCHNER-LE VERRIER

Sendo $\det(\lambda I - A) = 0 \rightarrow \lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + \dots + p_{n-1} \lambda + p_n = 0 = p(\lambda)$.

Então $p(\lambda)$ é o polinômio característico da matriz A , e fornece os valores próprios de A .

Este algoritmo fornece os coeficientes do polinômio característico $p_A(\lambda)$.

$$p_A(\lambda) = \lambda^n + p_1 \lambda^{n-1} + \dots + p_{n-1} \lambda + p_n = 0$$

sendo $T_k = \text{tr}(A^k)$ traço de $A^k = \sum_{i=1}^n a_{ii}$ \rightarrow os a_{ii} são elementos de A^k
 $A^k =$ potência k -ésima da matriz A

$$p_1 = -T_1$$

$$p_2 = -1/2 (p_1 * T_1 + T_2)$$

$$p_3 = -1/3 (p_2 * T_1 + p_1 * T_2 + T_3)$$

⋮

$$p_n = -1/n (p_{n-1} * T_1 + p_{n-2} * T_2 + \dots + p_1 * T_{n-1} + T_n)$$

$T_1 =$ traço da matriz A

$T_2 =$ traço da matriz A^2

$T_3 =$ traço da matriz A^3

⋮

Exemplo

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \end{pmatrix} \quad \det (\lambda I - A) = \lambda^3 + p_1 \lambda^2 + p_2 \lambda + p_3 = 0$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \end{pmatrix} \longrightarrow T_1 = \text{tr}(A) = 2 + 1 - 1 = 2$$

$$A^2 = \begin{pmatrix} 5 & 3 & 1 \\ 4 & 2 & 3 \\ 4 & -2 & 7 \end{pmatrix} \longrightarrow T_2 = \text{tr}(A^2) = 5 + 2 + 7 = 14$$

$$A^3 = \begin{pmatrix} 14 & -4 & 17 \\ 13 & 3 & 11 \\ 13 & 11 & 3 \end{pmatrix} \longrightarrow T_3 = 14 + 3 + 3 = 20$$

$$p_1 = -2$$

$$p_2 = -1/2 ((-2)(2) + 14) = -5$$

$$p_3 = -1/3 ((-5)(2) + (-2)(14) + 20) = 6$$

$p(\lambda) = \lambda^3 - 2\lambda^2 - 5\lambda + 6 = 0$ é o polinômio característico de A .

Calculando as raízes de $p(\lambda)$ encontra-se:

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = -2 \quad \text{e} \quad \lambda_3 = 3$$

OBSERVAÇÃO: O algoritmo de Bôchner - Le Verrier nos fornece somente o polinômio característico da matriz A . Temos, então que calcular os valores próprios de A que são as raízes de $p(\lambda) = 0$. Os vetores próprios serão calculados pelas soluções do SELA $(A - \lambda I) \mathcal{X} = 0$

2.10.2 ALGORITMO ITERATIVO PARA OBTENÇÃO DO AUTOVALOR

DOMINANTE E CORRESPONDENTE AUTOVETOR DE UMA MATRIZ $A_{n \times n}$

Uma matriz A de ordem n diagonalizável sobre \mathbb{R} terá no máximo n autovetores. $A_{n \times n} \longrightarrow \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \dots, \lambda_n$.

Supomos, por hipótese que o maior autovalor de A em valor absoluto é λ_1 , isto é:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_m|, \quad m \leq n$$

$$A \mathcal{X} = \lambda \mathcal{X}$$

$$\mathcal{X} = c_1 \mathcal{X}_1 + c_2 \mathcal{X}_2 + c_3 \mathcal{X}_3 + \dots + c_m \mathcal{X}_m$$

$$\begin{aligned}
A \mathcal{X} &= c_1 A \mathcal{X}_1 + c_2 A \mathcal{X}_2 + \dots + c_m A \mathcal{X}_m \\
&= c_1 \lambda_1 \mathcal{X}_1 + c_2 \lambda_2 \mathcal{X}_2 + \dots + c_m \lambda_m \mathcal{X}_m \\
&= \lambda_1 \left[c_1 \mathcal{X}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) \mathcal{X}_2 + c_3 \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right) \mathcal{X}_3 + \dots + c_m \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right) \mathcal{X}_m \right] \\
A^2 \mathcal{X} &= \lambda_1 \left[c_1 A \mathcal{X}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) A \mathcal{X}_2 + c_3 \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right) A \mathcal{X}_3 + \dots + c_m \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right) A \mathcal{X}_m \right] \\
&= \lambda_1 \left[c_1 \lambda_1 \mathcal{X}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right) \lambda_2 \mathcal{X}_2 + c_3 \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right) \lambda_3 \mathcal{X}_3 + \dots + c_m \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right) \lambda_m \mathcal{X}_m \right] \\
&= \lambda_1^2 \left[c_1 \mathcal{X}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^2 \mathcal{X}_2 + c_3 \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right)^2 \mathcal{X}_3 + \dots + c_m \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right)^2 \mathcal{X}_m \right] \\
&\dots \\
A^k \mathcal{X} &= \lambda_1^k \left[c_1 \mathcal{X}_1 + c_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k \mathcal{X}_2 + c_3 \left(\frac{\lambda_3}{\lambda_1} \right)^k \mathcal{X}_3 + \dots + c_m \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_1} \right)^k \mathcal{X}_m \right]
\end{aligned}$$

$$\left[\frac{\lambda_j}{\lambda_1} \right]^k \longrightarrow 0 \text{ se } k \longrightarrow \infty \therefore A^k \mathcal{X} \cong \lambda_1^k c_1 \mathcal{X}_1$$

quando $k \rightarrow \infty$ então o que está entre parênteses tende para $c_1 \mathcal{X}_1$ que é o autovetor correspondente a λ_1 ;

$$e \lambda_1 = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{(A^{k+1} \mathcal{X})_r}{(A^k \mathcal{X})_r} \quad r = 1, n$$

ALGORITMO BÁSICO DAS POTÊNCIAS

Dada uma matriz $A_{n \times n}$ a partir de um vetor $\mathcal{X}_0 \in \mathbb{R}^n$ calcular sucessivamente $\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2, \mathcal{X}_3, \dots$ por :

$$\text{com } \mathcal{X}_0 \text{ calcular } \mathcal{Y}_1 = A \mathcal{X}_0 \text{ e então } \mathcal{X}_1 = \pm \frac{\mathcal{Y}_1}{\|\mathcal{Y}_1\|}$$

$$\text{com } \mathcal{X}_1 \text{ calcular } \mathcal{Y}_2 = A \mathcal{X}_1 \text{ e então } \mathcal{X}_2 = \pm \frac{\mathcal{Y}_2}{\|\mathcal{Y}_2\|}$$

e assim por diante.

Desde que a matriz A tenha um autovalor dominante isto é:

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots \geq |\lambda_m|$$

então $\pm \|\mathcal{Y}_1\|, \pm \|\mathcal{Y}_2\|, \pm \|\mathcal{Y}_3\|, \dots, \pm \|\mathcal{Y}_\infty\|$ converge para o

autovalor dominante de A , (λ_1). Resta determinar o sinal de λ .
 $\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2, \mathcal{X}_3, \dots, \mathcal{X}_\infty$ converge para o autovetor associado a λ_1 .

TÉCNICA DE USO:

Dada a matriz $A_{n \times n}$, queremos determinar o seu maior autovalor e o correspondente autovetor associado a λ . Parte-se

do vetor inicial $\mathcal{X}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$ para o autovetor.

Calcula-se $A \mathcal{X}_0$, $\mathcal{X}_1 = \frac{1}{y_1} * A \mathcal{X}_0$, onde y_1 é em valor absoluto o maior elemento do vetor $A \mathcal{X}_0$.

$$\mathcal{X}_2 = A \mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2 = \frac{1}{y_2} * A \mathcal{X}_1$$

$$\vdots$$

$$\mathcal{X}_m = \frac{1}{y_m} * A \mathcal{X}_{m-1}$$

$$y_m \rightarrow \lambda \text{ e } \mathcal{X}_m \rightarrow \mathcal{X}$$

Exemplo:

Seja $A = \begin{pmatrix} 10 & 9 & 8 \\ 3 & 5 & 6 \\ 7 & 2 & -1 \end{pmatrix}$ e $\mathcal{X}_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ calcular o autovalor dominante de A e seu correspondente autovetor.

Cálculos realizados com 6 algarismos significativos.

$$A \mathcal{X}_0 = \begin{pmatrix} 10 & 9 & 8 \\ 3 & 5 & 6 \\ 7 & 2 & -1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 27 \\ 14 \\ 8 \end{pmatrix} \rightarrow \mathcal{X}_1 = \frac{1}{27} * \begin{pmatrix} 27 \\ 14 \\ 8 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0.518518 \\ 0.296296 \end{pmatrix} \rightarrow 1 \text{ \# aproximação para } \mathcal{X}$$

$$A \mathcal{X}_1 = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0.518518 \\ 0.296296 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 17.0370 \\ 7.37037 \\ 7.74074 \end{pmatrix} \rightarrow \mathcal{X}_2 = \frac{1}{17.0370} \begin{pmatrix} 17.0370 \\ 7.37037 \\ 7.74074 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ 0.432610 \\ 0.454349 \end{pmatrix} \longrightarrow \text{2ª aproximação para } \mathcal{X}$$

$$A \mathcal{X}_2 = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0.432610 \\ 0.454349 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 17.5283 \\ 7.88914 \\ 7.41087 \end{pmatrix} \longrightarrow \mathcal{X}_3 = \frac{1}{17.5283} \begin{pmatrix} 17.5283 \\ 7.88914 \\ 7.41087 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ 0.450080 \\ 0.422795 \end{pmatrix}$$

$$A \mathcal{X}_3 = A \begin{pmatrix} 1 \\ 0.450080 \\ 0.422795 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 17.4331 \\ 7.78717 \\ 7.47737 \end{pmatrix} \longrightarrow \mathcal{X}_4 = \frac{1}{17.4331} \begin{pmatrix} 17.4331 \\ 7.78717 \\ 7.47737 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ 0.446689 \\ 0.428918 \end{pmatrix}$$

e assim continua-se efetuando as operações até que o autovalor λ possua a exatidão que foi definida a priori.

aproximações para λ	aproximações para \mathcal{X}		
	x_1	x_2	x_3
27	1	0.518518	0.296296
17.0370	1	0.432610	0.454349
17.5283	1	0.450080	0.422795
17.4331	1	0.446689	0.428918
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

2.11 EXERCÍCIOS

Calcular o autovalor dominante e o correspondente autovetor das matrizes abaixo:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \quad \text{resposta } \lambda = 9 \quad \text{e } \mathcal{X} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} -3 & 8 & 9 \\ 8 & -2 & 4 \\ 9 & 4 & 2 \end{pmatrix} \quad \lambda = 13.2576 \quad \text{e } \mathcal{X} = \begin{pmatrix} 0.9199 \\ 0.7445 \\ 1 \end{pmatrix}$$

2.12 OBSERVAÇÕES:

1) Quanto menor o valor da razão de dominância $\frac{|\lambda_2|}{|\lambda_1|}$ maior será a velocidade de convergência do algoritmo, onde λ_1 é o autovalor dominante de A e λ_2 é o segundo maior autovalor de A .

2) Seja K um escalar diferente de zero

Se $A X = \lambda X$, então

$$K A X = K \lambda X$$

$$A K X = \lambda K X , \text{ fazendo } y = K X \Rightarrow A Y = \lambda Y$$

3) Se a matriz A é simétrica, então todos seus autovalores são reais.

4) Se λ é um autovalor de A , então $\frac{1}{\lambda}$ é autovalor da inversa de A. Se for calculado o maior autovalor de A , então podemos encontrar o menor autovalor de A^{-1} .

$$A X = \lambda X \Rightarrow X = \lambda A^{-1} X$$

$$A^{-1} X = \frac{1}{\lambda} * X$$

INTERPOLAÇÃO

3.1 INTRODUÇÃO

A interpolação é uma técnica bastante antiga que era muito usada para o cálculo de valores de funções transcendentais, antes do advento dos computadores. Em geral, tinha-se uma tabela com valores de tais funções em um certo intervalo e desejava-se avaliá-las em pontos não tabelados. Como exemplo, pode-se citar as funções trigonométricas, exponenciais, hiperbólicas, logarítmicas, etc. Atualmente a interpolação é mais usada para o caso em que não conhecemos a expressão analítica de $f(x)$ ou mesmo quando a sua avaliação é muito difícil.

Interpoliar uma função consiste em "substituir" esta $f(x)$ por uma outra função $G(x)$ com a finalidade de se realizar ou facilitar certas operações.

Problema Geral de Interpolação

Sendo dada uma tabela com $(n+1)$ pontos distintos $(x_i, f(x_i))$, $i = \overline{0, n}$ deseja-se obter os valores $f(x^*)$ com $x^* \neq x_i$, $i = \overline{0, n}$, tal que:

$$(\forall x_i, x_0 \leq x_i \leq x_n) [G(x_i) \equiv f(x_i)], \quad i = \overline{0, n}$$

$$(\forall x \in [x_0, x_n]) (G(x) \cong f(x))$$

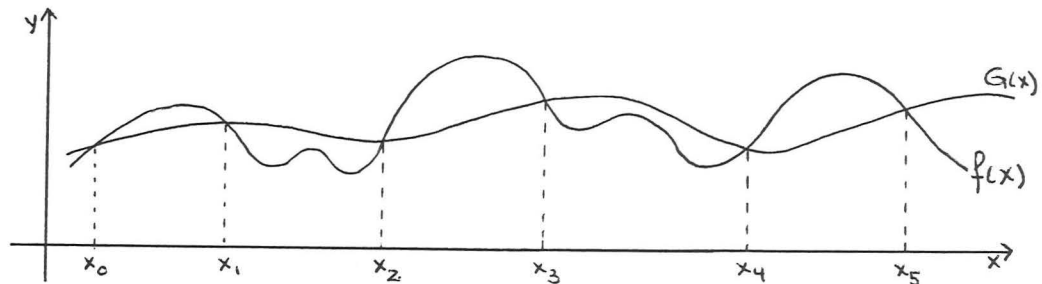
$$g(x_0) = f(x_0)$$

$$g(x_1) = f(x_1)$$

⋮

$$g(x_n) = f(x_n)$$

Graficamente:



A função $G(x)$ que interpolar f pode pertencer a uma das seguintes famílias:

- Polinômios: $y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n$

- Fourier: $f_j(x) = a_j \cdot \cos jx + b_j \cdot \sin jx$

- Exponenciais: $y = a \cdot e^{bx}$

- Splines: "pedaços" de polinômios

Obs: Os Splines são funções extremamente maleáveis, formadas por emendas suaves de polinômios. O nome vem da régua de cálculo em curva usada para fazer desenhos dita Spline.

A interpolação de Hermite é outra forma de se obter uma função interpoladora e ela requer que

$$P(x_0) = f(x_0), \quad P(x_1) = f(x_1), \quad \dots, \quad P(x_n) = f(x_n) \quad \text{e}$$

$$P'(x_0) = f'(x_0), \quad P'(x_1) = f'(x_1), \quad \dots, \quad P'(x_n) = f'(x_n)$$

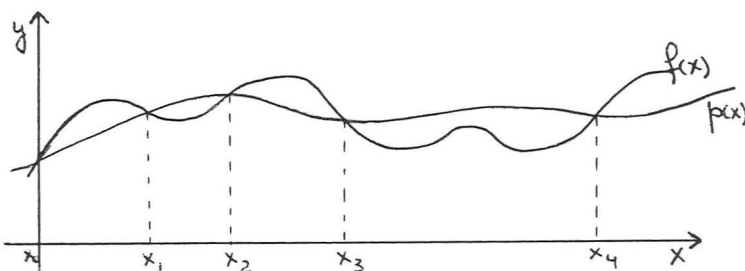
onde $P(x)$ será o polinômio interpolador de Hermite e os pontos x_0, x_1, \dots, x_n serão os $(n+1)$ pontos tabelados.

3.2 INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL

Dado um conjunto de $(n+1)$ pontos distintos $(x_i, f(x_i))$, $i = \overline{0, n}$ a interpolação polinomial consiste em obter um polinômio $P(x)$ que passa pelos referidos pontos, isto é:

$$P(x_i) = f(x_i), \quad i = \overline{0, n} \quad \text{e para os demais pontos:}$$

$\forall x \in [x_0, x_n], P(x) \approx f(x)$. O polinômio $P(x)$ se diz polinômio aproximante ou interpolador de $f(x)$ no intervalo $[x_0, x_n]$.



APLICAÇÕES

- Obter uma expressão analítica aproximada de uma função que é conhecida em apenas um nº finito de pontos

- Avaliar a função num ponto não tabelado $x^* \in [x_0, x_n]$
- Calcular aproximações para $\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx$, substituindo a $f(x)$ pelo polinômio interpolante.
- Calcular uma aproximação para $f'(x)$ para $x \in [x_0, x_n]$, substituindo $f(x)$ por $P(x)$.

EXISTÊNCIA E UNICIDADE DA SOLUÇÃO

Dados $x_i \in \mathbb{R}$ e $f(x_i) \in \mathbb{R}$, $i = \overline{0, n}$ [1]

Procura-se $P \in \mathbb{P}_n$ tal que: $P(x_i) = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$ [2]

como $P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_n x^n = \sum_{k=0}^n a_k x^k$ e pela

definição $P(x_i) = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, então $\sum_{k=0}^n a_k x_i^k = f(x_i)$,

$i = \overline{0, n}$ temos então o sistema:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + a_2 x_0^2 + \dots + a_n x_0^n = f_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_1^2 + \dots + a_n x_1^n = f_1 \\ \dots \\ a_0 + a_1 x_n + a_2 x_n^2 + \dots + a_n x_n^n = f_n \end{cases} \quad [3]$$

As $(n+1)$ igualdades de [3] representam um sistema linear de ordem $(n+1)$, onde as $(n+1)$ incógnitas são os a_k , $k = \overline{0, n}$ e a matriz dos coeficientes é dada por:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{De acordo com Vandermondes} \\ \det X = \prod_{i=0}^{n-1} \left(\prod_{j=i+1}^n (x_j - x_i) \right) \end{array}$$

logo $\det X \neq 0 \iff \forall i, i = \overline{0, n}$ e $\forall j, j = \overline{0, n}$ e $i \neq j$, $x_i \neq x_j$. Como os pontos são distintos a diferença $(x_j - x_i)$ será sempre diferente de zero, e portanto o polinômio interpolador existe e também é único.

3.2.1 FÓRMULA INTERPOLADORA DE LAGRANGE

Dada uma tabela com $(n+1)$ pontos distintos (x_i, f_i) , $i = \overline{0, n}$ o polinômio de Lagrange é tal que $P_n(x_i) = f_i$, $i = \overline{0, n}$

Lagrange escreveu o polinômio $p_n(x)$ como a soma de $(n+1)$

polinômios de grau n , $L_i(x)$, $i = \overline{0, n}$ com as propriedades:

i) $L_i(x) \in \mathbb{P}_n$

ii) $L_i(x_i) = f_i$

$L_i(x_j) = 0$ para $i \neq j$

então

$$L_i(x) = c (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)$$

mas

$$L_i(x_i) = c (x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n) = f(x_i)$$

portanto

$$c = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} * f(x_i)$$

e então

$$L_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \dots (x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_n)} * f(x_i) ;$$

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

$$e P_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) = L_0(x) + L_1(x) + \dots + L_n(x)$$

$$P_n(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \dots (x_0 - x_n)} * f_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2) \dots (x - x_n)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \dots (x_1 - x_n)} * f_1 +$$

$$\dots + \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_0)(x_n - x_1) \dots (x_n - x_{n-1})} * f_n$$

A fórmula de Lagrange permite calcular a expressão do polinômio interpolante sem resolver o sistema linear que define seus coeficientes e que é, no geral mal condicionado. Além disso, traz facilidades quando se quer apenas interpolar um ponto na tabela, pois neste caso, basta calcular apenas o valor numérico de cada $L_i(x)$ no ponto desejado

$$P_n(x^*) = \sum_{i=0}^n L_i(x^*) \quad \text{onde } x^* \in [x_0, x_n]$$

Exemplo 1 - Dada a tabulação abaixo, calcular uma aproximação para $f(2.3)$ pela fórmula interpoladora de Lagrange.

i	x_i	f_i
0	2.0	0.31495
1	2.4	0.020561
2	2.6	-0.09682
3	2.8	-0.18505

$$P_3(x^*) = \sum_{i=0}^3 L_i(x^*) = L_0(x^*) + L_1(x^*) + L_2(x^*) + L_3(x^*) ,$$

$$x^* = 2.3$$

$$L_0(2.3) = \frac{(2.3 - 2.4)(2.3 - 2.6)(2.3 - 2.8)}{(2.0 - 2.4)(2.0 - 2.6)(2.0 - 2.8)} * 0.31495 = 0.024605$$

$$L_1(2.3) = \frac{(2.3 - 2.0)(2.3 - 2.6)(2.3 - 2.8)}{(2.4 - 2.0)(2.4 - 2.6)(2.4 - 2.8)} * 0.020561 = 0.028914$$

$$L_2(2.3) = 0.060514$$

$$L_3(2.3) = -0.026023$$

então $P_3(2.3) = 0.088010$

Exemplo 2. - Dada a tabela abaixo, determinar o polinômio interpolador de Lagrange que passa por estes pontos

x	-2	-1	1
$f(x)$	-11	5	0.75

$$P_2(x) = L_0(x) + L_1(x) + L_2(x)$$

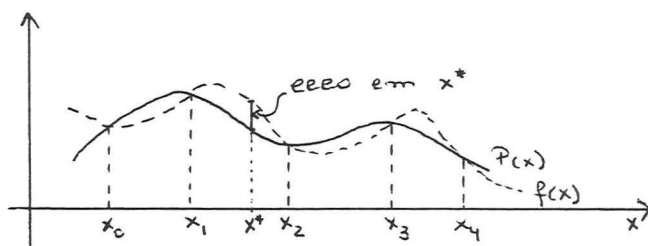
$$L_0(x) = \frac{(x + 1)(x - 1)}{(-2 + 1)(-2 - 1)} (-11) = \frac{(x^2 - 1)}{3} (-11) = -3.6667x^2 + 3.6667$$

$$L_1(x) = \frac{(x + 2)(x - 1)}{(-1 + 2)(-1 - 1)} (5) = \frac{x^2 + x - 2}{-2} (5) = -2.5x^2 - 2.5x + 5$$

$$L_2(x) = \frac{(x + 2)(x + 1)}{(1 + 2)(1 + 1)} (0.75) = \frac{x^2 + 3x + 2}{6} (0.75) = 0.125x^2 + 0.375x + 0.25$$

$$P_2(x) = -6.0417x^2 - 2.125x + 8.9167$$

ERRO DO POLINÔMIO INTERPOLADOR DE LAGRANGE (ERRO DE TRUNCAMENTO)



$$E(x) = f(x) - P(x)$$

$$E(x_i) = 0, \quad i = 0, \dots, n$$

a função erro tem pelo menos $(n+1)$ raízes.

Seja $\varphi_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$, para todos os pontos da tabulação $\varphi_{n+1}(x_i) = 0$

O erro de truncamento é dado por:

$$E(x) = f^{(n+1)}(\xi) * \frac{\varphi(x)}{(n+1)!} = f^{(n+1)}(\xi) * \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(n+1)!}$$

DEMONSTRAÇÃO VIDE: S. D. CONTE-ELEMENTOS DE ANÁLISE NUMÉRICA
2ª EDIÇÃO PÁG. 88

Podemos simplificar a fórmula do erro do polinômio interpolador, calculando uma cota superior de seu valor absoluto.

Para $x^* \in [x_0, x_n]$

$$|E(x^*)| \leq \frac{|\varphi(x^*)|}{(n+1)!} * \max |f^{(n+1)}(x)|, x \in [x_0, x_n]$$

Para $x \in [x_0, x_n]$

$$|E(x)| \leq \frac{\max |\varphi(x)|}{(n+1)!} * \max |f^{(n+1)}(x)|, x \in [x_0, x_n]$$

Exemplos:

1) Calcular o erro de truncamento na interpolação linear, dada a tabela abaixo.

x	1.0	2.0	
f(x)	0	0.6931472	e sabendo que f(x) = ln(x)

$$|E(x)| \leq \frac{1}{2!} \max |(x-1.0)(x-2.0)| * \max |f''(x)| \text{ para } x \in [1,2]$$

$$\max |(x-1.0)(x-2.0)| = \max |x^2 - 3x + 2| \quad 2x - 3 = 0 \rightarrow x = 1.5$$

$x = 1.5$ é o ponto que torna máximo o valor de $\varphi(x)$ no intervalo

$$[1, 2] \quad f(x) = \ln(x) \quad f'(x) = \frac{1}{x} \quad f''(x) = -\frac{1}{x^2}$$

$$\max |f''(x)|_{x \in [1,2]} = 1$$

$$|E(x)| \leq \frac{1}{2} |(1.5-1.0)(1.5-2.0)| * 1 = 0.125$$

2) Qual o erro de truncamento para $x = 1.1$ do exemplo 1?

$$|E(1.1)| \leq \frac{1}{2} |(1.1-1.0)(1.1-2.0)| \max_{x \in [1;2]} |f''(x)|$$

$$|E(1.1)| \leq 0.045$$

3.2.2 DIFERENÇAS FINITAS E DIFERENÇAS DIVIDIDAS

1. DIFERENÇAS FINITAS

É dada uma tabela de dados com os valores $(x_i, f(x_i))$, $i = \overline{0, n}$, isto é: $(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))$ os valores x_i , $i = \overline{0, n}$ satisfazem a:

$$x_1 - x_0 = x_2 - x_1 = \dots = x_n - x_{n-1} = h, \text{ ou seja, os pontos } x_i \text{ são}$$

equidistantes.

TABELA DE DIFERENÇAS ASCENDENTES (Δ)

Seja $y = f(x)$ $y_i = f(x_i) = f_i$ e $h = \frac{x_n - x_0}{n}$ ou $h = x_{i+1} - x_i$,
 $i = \overline{0, n}$

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
0	x_0	y_0	Δy_0	$\Delta^2 y_0$	$\Delta^3 y_0$	$\Delta^4 y_0$
1	x_1	y_1	Δy_1	$\Delta^2 y_1$	$\Delta^3 y_1$	
2	x_2	y_2	Δy_2	$\Delta^2 y_2$		
3	x_3	y_3	Δy_3			
4	x_4	y_4				

$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$: diferença de 1ª ordem, então

$\Delta y_0 = y_1 - y_0$ $\Delta y_1 = y_2 - y_1$

$\Delta^2 y_0 = \Delta(\Delta y_0) = \Delta(y_1 - y_0) = \Delta y_1 - \Delta y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0$

$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i$: diferença de 2ª ordem

⋮

$\Delta^k y_i = \Delta^{k-1} y_{i+1} - \Delta^{k-1} y_i$: diferença de ordem k

Exemplo 1:

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$	$\Delta^5 y_i$
2.55	3.5918	0.4212	-1.1386	1.2649	-1.9626	4.2605
2.60	4.0130	-0.7174	0.1263	-0.6977	2.2979	
2.65	3.2956	-0.5911	-0.5714	1.6002		
2.70	2.7045	-1.1625	1.0288			
2.75	1.5420	-0.1337				
2.80	1.4083					

Exemplo 2:

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
-1	3	-3	0	12	0
0	0	-3	12	12	
1	-3	9	24		
2	6	33			
3	39				

OBSERVAÇÕES: Seja $y = P_n(x)$

$$D^n P_n(x) = n! \cdot a_n \quad e$$

$$\Delta^n P_n(x) = a_n \cdot n! \cdot h^n$$

$$\Delta^{n+1} P_n(x) = 0$$

então

$$D^n P_n(x) = \frac{\Delta^n P_n(x)}{h^n}$$

$$\Delta^k f(x) = h^k f^{(k)}(\xi), \quad x < \xi < x + k \cdot h$$

2. DIFERENÇAS DIVIDIDAS

É dada uma tabela de dados (x_i, y_i) , $i = \overline{0, n}$, onde os x_i , $i = \overline{0, n}$ podem ter um espaçamento qualquer, não necessariamente equidistantes.

i	x_i	y_i	$[x_{i+1}, x_i]$	$[x_{i+2}, x_{i+1}, x_i]$
0	x_0	y_0	$a = (y_1 - y_0) / (x_1 - x_0)$	$e = (b - a) / (x_2 - x_0)$
1	x_1	y_1	$b = (y_2 - y_1) / (x_2 - x_1)$	$f = (c - b) / (x_3 - x_1)$
2	x_2	y_2	$c = (y_3 - y_2) / (x_3 - x_2)$	$g = (d - c) / (x_4 - x_2)$
3	x_3	y_3	$d = (y_4 - y_3) / (x_4 - x_3)$	
4	x_4	y_4		

$[x_{i+3}, x_{i+2}, \dots, x_i]$	$[x_{i+4}, x_{i+3}, \dots, x_i]$
$h = (f - e) / (x_3 - x_0)$	$j = (i - h) / (x_4 - x_0)$
$i = (g - f) / (x_4 - x_1)$	

$[x_{i+1}, x_i] = (y_{i+1} - y_i) / (x_{i+1} - x_i)$ diferença dividida de 1ª ordem

$[x_{i+2}, x_{i+1}, x_i] = ([x_{i+2}, x_{i+1}] - [x_{i+1}, x_i]) / (x_{i+2} - x_i)$

...

...

$[x_{i+k}, \dots, x_i] = ([x_{i+k}, \dots, x_{i+1}] - [x_{i+k-1}, \dots, x_i]) / (x_{i+k} - x_i)$
diferença dividida de ordem k

RELAÇÃO ENTRE DIFERENÇAS DIVIDIDAS E FINITAS

$[x_{i+k}, \dots, x_i] = \Delta^k f_i / k! \cdot h^k$ para h constante.

Exemplos:

x	$f(x)$	1ª ord	2ª ord	3ª ord	4ª ord
0	0	4	5	1	0
2	8	19	10	1	
3	27	49	14		
5	125	91			
6	216				

x	$f(x)$	1ª	2ª	3ª
1.5	2.30	0.6	0.2	0.222
1.8	2.48	0.7	0.333	
2.0	2.62	0.8		
2.1	2.70			

3.2.3 FÓRMULA DO POLINÓMIO INTERPOLADOR DE NEWTON COM DIFERENÇAS ASCENDENTES

Sejam os valores de $y = f(x)$ dados através da tabela (x_i, y_i) , $i = \overline{0, n}$ onde os valores de x são equidistantes, isto é: $x_{i+1} - x_i = h$, então

$$P(x) = y_0 + \frac{(x - x_0)}{h} \Delta y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2! h^2} \Delta^2 y_0 + \dots$$

$$\dots + \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})}{n! h^n} \Delta^n y_0$$

se $R = \frac{x - x_0}{h}$, então o polinômio pode ser escrito da forma:

$$P(R) = y_0 + R \Delta y_0 + \frac{R(R-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{R(R-1)(R-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \dots$$

$$+ \frac{R(R-1) \dots (R-n+1)}{n!} \Delta^n y_0 = \sum_{p=0}^n \binom{R}{p} \Delta^p y_0 \quad e \quad o$$

valor numérico de $P(R) = P(x)$

ERRO DE TRUNCAMENTO DO POLINÓMIO DE NEWTON COM DIFERENÇAS ASCENDENTES

$$E(x) = \frac{\varphi(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \quad \xi \in [x_0; x_n]$$

com $\varphi(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$

$$\text{fazendo } R = \frac{x - x_0}{h} \Rightarrow (x - x_0) = R h \quad e \quad (x - x_i) = (R - i) h$$

$$\varphi(x) = \varphi(R) = R(R-1) \dots (R-n) h^{n+1} = (n+1)! \binom{R}{n+1} h^{n+1}$$

então a fórmula do erro em função de R será:

$$E(R) \simeq \binom{R}{n+1} \Delta^{n+1} f_0$$

ou

$$E(R) \simeq \binom{R}{n+1} \frac{\max_{i=0, n} |\Delta^{n+1} f_i|}{1}$$

3.2.4 FÓRMULA DO POLINÓMIO DE NEWTON COM DIFERENÇAS DIVIDIDAS

Sejam os valores da função $y = f(x)$ dados através dos pontos $(x_i; y_i)$, $i = \overline{0, n}$, onde os x_i não são necessariamente equidistantes.

$$P(x) = y_0 + (x - x_0) [x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1) [x_2, x_1, x_0] + \dots$$

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

onde $[x_n, x_{n-1}, \dots, x_0]$ é a diferença dividida de orden n

ERRO DE TRUNCAMENTO

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

$$\text{com } \varphi(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n)$$

$$E(x) \approx (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) \frac{\Delta^{n+1} f_0}{(n+1)! h^{n+1}} =$$

$$= (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) [x_{n+1}, x_n, \dots, x_1, x_0] \text{ pois}$$

$$[x_{i+k}, \dots, x_i] = \frac{1}{k!} \frac{\Delta^k f_i}{h^k} \text{ para } h = \text{cte}$$

3.3 INTERPOLAÇÃO POLINOMIAL EM TABELAS

Sejam dados os pontos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ e seja x^* o ponto no qual pretendemos fazer a interpolação.

Então:

1º - Remunerar os pontos de acordo com:

(novo x_0) = ponto mais próximo de x^*

(novo x_1) = seguinte ponto mais próximo de x^* , etc, etc, ...

2º - Com os pontos novos, calcule $P_1(x^*), P_2(x^*), P_3(x^*), \dots$ continue até obter a exatidão desejada.

3.4 EXEMPLOS

1 - A tabela abaixo fornece a demanda diária máxima de energia elétrica em P.A.. Achar a data do pico máximo e o valor deste pico.

x (data)	5 out	15 out	25 out	4 nov
y (demanda MW)	10	15	20	13

x	y	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$
0	10	5	0	-12
10	15	5	-12	
20	20	-7		
30	13			

$$P(x) = 10 + \frac{(x-0)}{10} * 5 + \frac{(x-0)(x-10)}{2! \cdot 10^2} * 0 - \frac{(x-0)(x-10)(x-20)}{3! \cdot 10^3} * 12$$

$$P(x) = -0.002 x^3 + 0.06 x^2 + 0.1 x + 10$$

$$P'(x) = -0.006 x^2 + 0.12 x + 0.1 = 0$$

$$x_1 = 20.80$$

$$x_2 = -0.80125$$

$P''(20.80) = -0.1296 < 0 \rightarrow 20.80$ é o ponto máximo, logo a data do pico máximo é entre 25 e 26 de outubro e o valor do pico é :
 $P(20.80) = 20.041$ MW

2 - Dada a tabela, calcular $f(0.0032)$ e estimar o erro de truncamento do valor calculado.

x_i	$f(x_i)$	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$
0.002	0.5543829800	9.5591618×10^{-3}	9.5639×10^{-6}	9.6×10^{-9}
0.003	0.5639421418	9.5687257×10^{-3}	9.5735×10^{-6}	
0.004	0.5735108675	9.5782992×10^{-3}		
0.005	0.5830891669			

$$x^* = 0.0032 \quad x_0 = 0.002 \quad R = \frac{0.0032 - 0.002}{0.001} = 1.2$$

Vamos aproximar $f(x)$ por um polinômio de grau 2 para podermos estimar o erro.

$$P_2(0.0032) = 0.5543829800 + 1.2 (9.5591618 \times 10^{-3}) + \frac{1.2 (1.2 - 1.0)}{2!} * (9.5639 * 10^{-6})$$

$$P_2(0.0032) = 0.5543829800 + 0.11470994 \times 10^{-1} + 0.11476680 \times 10^{-5} = 0.56585512$$

$$E_{TR}(0.0032) \approx \frac{1}{3!} | R (R - 1) (R - 2) | * \Delta^3 f_0 =$$

$$\frac{1}{6} (1.2) (0.2) (-0.8) (9.6 \times 10^{-9})$$

$$E_{TR}(0.0032) \approx 3.072 \times 10^{-10}$$

3 - Achar o polinômio interpolador de Newton que se aproxima da função que é dada pela tabela de pontos:

x_i	y_i	$[x_i, x_{i+1}]$	$[x_i, \dots, x_{i+2}]$	$[x_i, \dots, x_{i+3}]$
1.5	2.30	0.6	0.2	0.2222
1.8	2.48	0.7	0.3333	
2.0	2.62	0.8		
2.1	2.70			

$$P_3(x) = 2.30 + (x - 1.5) * (0.6) + (x - 1.5) * (x - 1.8) * (0.2) + (x - 1.5) * (x - 1.8) * (x - 2.0) * (0.2222)$$

$$P_3(x) = 0.2222 x^3 - 0.977660 x^2 + 2.00646x + 0.74012$$

4 - Dada a função $y = f(x)$ pela tabela

x_i	1.00	1.10	1.30	1.45
y_i	1.175201	1.335647	1.698382	2.014272

Calcular uma aproximação para $f(1.25)$ pela fórmula de Lagrange.

$$\begin{aligned}
 f(1.25) \cong & \frac{(1.25 - 1.1)(1.25 - 1.3)(1.25 - 1.45)}{(1 - 1.1)(1 - 1.3)(1 - 1.45)} * 1.175201 + \\
 & + \frac{(1.25 - 1)(1.25 - 1.3)(1.25 - 1.45)}{(1.1 - 1)(1.1 - 1.3)(1.1 - 1.45)} * 1.335647 + \\
 & + \frac{(1.25 - 1)(1.25 - 1.1)(1.25 - 1.45)}{(1.3 - 1)(1.3 - 1.1)(1.3 - 1.45)} * 1.698382 + \\
 & + \frac{(1.25 - 1)(1.25 - 1.1)(1.25 - 1.3)}{(1.45 - 1)(1.45 - 1.1)(1.45 - 1.3)} * 2.014272 =
 \end{aligned}$$

$$f(1.25) \cong 1.601894$$

5 - Qual o limite superior do erro de truncamento quando se interpola linearmente em uma tabela de $f(x) = \text{sen}(x)$ para

$$x = 0^\circ(1')90^\circ$$

$$|f(x) - p_1(x)| \leq \frac{1}{2} \max_{x \in [x_0; x_1]} |(x - x_0)(x - x_1)| \max_{0 \leq x \leq \pi/2} |(\text{sen } x)''|$$

$$\max |(x - x_0)(x - x_1)| = \frac{(x_1 - x_0)^2}{4}; \quad 1' = 2.9 * 10^{-4} \text{ radianos};$$

$$\frac{(x_1 - x_0)^2}{4} = 2.12 * 10^{-8}$$

$$(\text{sen } x)'' = -\text{sen } x \quad \max |-\text{sen } x| = 1 \quad 0 \leq x \leq \pi/2$$

$$|f(x) - p_1(x)| \leq \frac{1}{2} * 2.12 * 10^{-8} * 1 = 1.06 * 10^{-8}$$

6 - A função definida pela tabela

x	1.9	2.0	2.1	2.2	2.3
$f(x)$	-1.941	-1.000	0.061	1.248	2.567

tem uma raiz

no intervalo (2 ; 2.1); calculá-la, aproximando a f por um polinômio de 3º grau.

f(x)	x	x [,]	x [, ,]	x [, , ,]
0.061	2.1	0.094250707	-0.004450493	0.000487022
.000	2.0	0.088967972	-0.005425511	
1.248	2.2	0.094073377		
-1.941	1.9			

para $f(x)=0$

$$x = 2.1 + 0.094250707(0-0.061) - 0.004450493(0-0.061)(0+1) + 0.000487022(0-0.061)(0+1)(0-1.248) = 2.094559263$$

7 - A que temperatura a água entra em ebulição no Pico da Bandeira (altitude de 2890 m), sabendo-se que o ponto de ebulição da H_2O varia com a altitude, conforme a tabela abaixo:

altitude (m)	ponto de ebulição (°C)
2600	91.34
2700	91.01
2800	90.67
2900	90.34
3000	90.00

Resposta: 90.37 °C

8 - A função $f(x) = \sqrt{2/\pi} e^{-x^2/2}$ é tabelada para $x = 0$ (0.125) 1. Qual o limite superior do erro de truncamento quando se interpola nesta tabela:

a- linearmente

b- por polinômio de 2º grau

c- por polinômio de 3º grau

$$E = f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} (x-x_0) \dots (x-x_n) f^{(n+1)}(\xi) = \frac{1}{(n+1)!} (R) (R-1) \dots (R-n) h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi)$$

$$\boxed{a} \quad |f(x) - p_1(x)| \leq \frac{1}{2} \max_{0 \leq R \leq 1} |R(R-1)| h^2 \max_{0 \leq x \leq 1} |f''(x)|$$

$$\max_{R \in [0;1]} |R(R-1)| = \frac{1}{4}$$

$$f'(x) = -\sqrt{2/\pi} x e^{-x^2/2}; \quad f''(x) = -\sqrt{2/\pi} (1-x^2) e^{-x^2/2};$$

$$f'''(x) = -\sqrt{2/\pi} (x^3-3x) e^{-x^2/2}; \quad f''''(x) = 0 \quad \begin{cases} x = 0 \\ x = \pm 1.732 \end{cases}$$

$$\max_{0 \leq x \leq 1} |f'''(x)| = |f'''(0)| = 0.8$$

$$|f(x) - p_1(x)| \leq \frac{1}{2} * \frac{1}{4} * (0.125)^2 * (0.8) = 1.6 * 10^{-3}$$

$$\boxed{b} \quad |f(x) - p_2(x)| \leq \frac{1}{6} \max_{R \in [0;2]} |R(R-1)(R-2)| * \max_{x \in [0;1]} |f'''(x)|$$

$$\max_{R \in [0;2]} |R(R-1)(R-2)| = 0.385$$

$$f'''(x) = -\sqrt{2/\pi} (x^3 - 3x) e^{-x^2/2};$$

$$f^{IV}(x) = -\sqrt{2/\pi} (-x^4 + 6x^2 - 3) \text{ para } f^{IV}(x) = 0 \Rightarrow \begin{cases} x = \pm 0.74 \\ x = \pm 2.33 \end{cases}$$

$$\max_{x \in [0;1]} |f'''(x)| = 1.6$$

$$|f(x) - p_2(x)| \leq \frac{1}{6} (0.385) (0.125)^3 (1.6) = 2.00521 * 10^{-4}$$

$$\boxed{c} \quad |f(x) - p_3(x)| \leq \frac{1}{24} \max_{R \in [0;3]} |R(R-1)(R-2)(R-3)| * h^4 * \max_{x \in [0;1]} |f^{IV}(x)|$$

$$\max_{R \in [0;3]} |R(R-1)(R-2)(R-3)| = 1$$

$$|f(x) - p_3(x)| \leq 2.5 * 10^{-5}$$

9 - Dada a tabela de valores da integral elíptica

$$E(x, y) = \int_0^y (1 - \text{sen}^2 x \text{sen}^2 t)^{1/2} dt$$

x \ y	50°	54°	58°
50°	0.8134	0.8060	0.7988
52°	0.8414	0.8332	0.8251
54°	0.8690	0.8598	0.8508

Calcular $E(52^\circ; 51^\circ)$ aproximando $E(x, y)$ por um polinômio do 2º grau.

Para $x = 52^\circ$ e $y = 50^\circ$ calcular $E(52^\circ; 50^\circ)$

i	x	$E(x, 50^\circ)$	ΔE_i	$\Delta^2 E_i$
0	50	0.8134	-0.0074	0.0002
1	54	0.8060	-0.0072	
2	58	0.7988		

$$\Delta E_i = E_{i+1} - E_i \quad R = (x - x_0)/h = \frac{52 - 50}{4} = 0.5$$

$$\Delta^2 E_i = \Delta E_{i+1} - \Delta E_i \quad p(R) = f_0 + R * \Delta E_0 + \frac{R(R-1)}{2!} * \Delta^2 E_0$$

$$p(0.5) = 0.8134 + 0.5 (-0.0074) + \frac{0.5 (0.5 - 1)}{2} * (0.0002)$$

$$E(52^\circ, 50^\circ) \sim p(0.5) = 0.8096750 \approx 0.8097$$

para $x = 52^\circ$ e $y = 52^\circ$ calcular $E(52^\circ, 52^\circ) = ?$

$$R = \frac{x - x_0}{h} = \frac{52 - 50}{4} = 0.5$$

i	x	$E(x, 52^\circ)$	ΔE_i	$\Delta^2 E_i$
0	50	0.8414	-0.0082	0.0001
1	54	0.8332	-0.0081	
2	58	0.8251		

$$E(52^\circ; 52^\circ) \sim p(0.5) = 0.8414 + 0.5 (-0.0082) + \frac{0.5 (0.5 - 1)}{2} (0.0001) = 0.8372875 \approx 0.8373$$

para $x = 52^\circ$ e $y = 54^\circ$ calcular um valor aproximado para $E(52^\circ; 54^\circ)$

$$R = 0.5$$

i	x	$E(x, 54^\circ)$	ΔE_i	$\Delta^2 E_i$
0	50	0.8690	-0.0092	0.0002
1	54	0.8598	-0.0090	
2	58	0.8508		

$$p(R) = p(0.5) = 0.8690 + 0.5 (-0.0092) + (0.5)(-0.25)(0.0002)$$

$$p(0.5) = 0.864375$$

$$E(52^\circ; 54^\circ) \approx 0.8644$$

Finalmente podemos calcular $E(52^\circ; 51^\circ)$

$$R = \frac{y - y_0}{h} = \frac{51 - 50}{2} = 0.5$$

i	y	$E(52^\circ, y)$	ΔE_i	$\Delta^2 E_i$
0	50	0.8097	0.0276	-0.0005
1	52	0.8373	0.0271	
2	54	0.8644		

$$P(51) = p(0.5) = 0.8097 + 0.5 (0.0276) + (0.5) \frac{(0.5 - 1)}{2} (-0.0005) = 0.82356250 \approx 0.8236$$

$$\text{então } E(52^\circ; 51^\circ) = 0.8236$$

3.5 EXERCÍCIOS

1 - A velocidade do som na água varia com a temperatura. Usando os valores da tabela abaixo, determinar o valor aproximado da velocidade do som na água a 100 °C

temperatura(°C)	velocidade (m/s)
86.0	1.552
93.3	1.548
98.9	1.544
104.4	1.538
110.0	1.532

2 - Uma esfera de superfície conhecida e coeficiente de absorção 0.7 foi mantida a temperatura de 600^oK . Foi calculada a energia irradiada de acordo com o tempo de irradiação, obedecendo a tabela a seguir:

Energia irradiada (J)	tempo de irradiação (s)
71.72 x 10 ³	600
94.72 x 10 ³	800
118.40 x 10 ³	1000
142.08 x 10 ³	1200
165.76 x 10 ³	1400
189.44 x 10 ³	1600

Pede-se obter a possível energia irradiada quando a irradiação atingir o tempo de 25 minutos.

3 - Uma hidroelétrica tem capacidade máxima de 60 MW , a qual é determinada por 3 geradores de respectivamente 30 MW , 15 MW e 15 MW . A demanda de energia varia num ciclo de 24 horas, e é em função dela que o engenheiro operacional distribui a tarefa dos geradores. Sabe-se que a demanda mínima ocorre entre 1h e 5h da manhã e a demanda máxima ocorre entre 13 e 17 horas da tarde.

Pede-se achar a partir dos dados abaixo, essas demandas máxima e mínima.

hora	2	3	4	5	13	14	15	16	17
demanda (MW)	16.4	15.2	14.9	16.0	28.0	36.5	41.0	34.0	31.2

Observações:

1 - Seja interpolar $f(x)$ sobre x_0, x_1, \dots, x_n , $(n + 1)$ pontos

distintos igualmente espaçados.

Mostra-se que $\varphi(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$ assume seu módulo máximo num dos intervalos (x_0, x_1) ou (x_{n-1}, x_n)

Referência:

RICE, J. R. Numerical Methods, Software, and Analysis. IMSL Reference Edition McGraw-Hill, 1983.

Assim se formos usar $K + 1$ pontos de interpolação, $K \leq n$, e se tivermos possibilidade de escolha destes pontos, dado \bar{x} , devemos escolher x_0, x_1, \dots, x_k de tal forma que \bar{x} fique o mais central possível em $[x_0 ; x_k]$

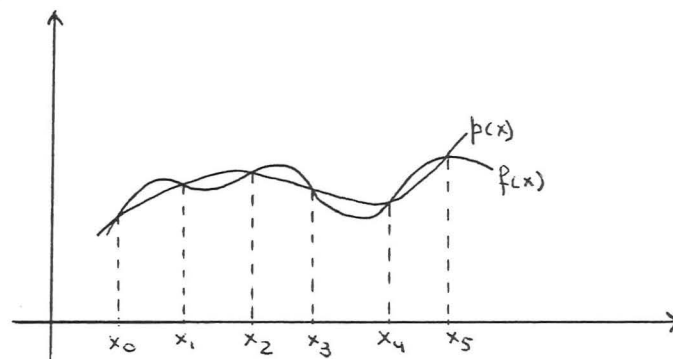
DERIVAÇÃO NUMÉRICA

4.1 INTRODUÇÃO

A idéia básica da derivação numérica é extremamente simples. Por exemplo, se temos um conjunto de valores $(x_i, f(x_i))$, $i = \overline{0, n}$, determinamos o polinômio interpolador $p(x)$ que passa por estes pontos. Derivamos, então, este polinômio para obtermos $p'(x)$, cujo valor, para qualquer x dado, é considerado uma aproximação para $f'(x)$.

No entanto, a derivação numérica é um processo instável, e não podemos, normalmente, esperar uma grande exatidão, mesmo que os dados originais sejam bastante exatos. Por exemplo, num ponto não tabelado, a declividade do polinômio interpolador pode ser muito diferente da declividade da verdadeira função $f(x)$. Além disso, os valores de $f(x)$ nos pontos interpolados, serão normalmente incorretos em virtude dos erros de arredondamento e outros.

x_i	$f(x_i) = f_i$
x_0	$f(x_0)$
x_1	$f(x_1)$
x_2	$f(x_2)$
\vdots	\vdots
x_n	$f(x_n)$



4.2 ERRO DE TRUNCAMENTO NA DERIVAÇÃO NUMÉRICA

Vamos fazer um estudo sobre o erro que resulta da derivação do polinômio interpolador $p(x)$, que passa pelos pontos $(x_0, f_0), (x_1, f_1), \dots, (x_n, f_n)$.

O erro do polinômio interpolador é dado por:

$$E(x) = f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} \varphi(x) f^{(n+1)}(\xi)$$

com $\varphi(x) = (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \dots \cdot (x - x_n)$, e $\xi = \xi(x)$ é uma função desconhecida de x . ξ depende do ponto x no qual a estimativa de erro é requerida

$$f'(x) - p'_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} \left[f^{(n+1)}(\xi) \varphi'(x) + \varphi(x) \frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi) \right]$$

para $x = x_i$, ($i = 0, 1, \dots, n$)

$$f'(x_i) - p'_n(x_i) = \frac{1}{(n+1)!} \cdot \varphi'(x_i) \cdot f^{(n+1)}(\xi) \quad \xi \in [x_0, x_n]$$

$$\varphi'(x_i) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n (x_i - x_j)$$

4.3 FÓRMULAS DE DERIVAÇÃO NUMÉRICA

4.3.1 FÓRMULAS BASEADAS EM DIFERENÇAS ASCENDENTES

Vamos supor agora que os pontos x_i ($i = 0, 1, \dots, n$) estejam igualmente espaçados com $x_{i+1} - x_i = h$. Considerando $R = (x - x_0)/h$ podemos obter uma aproximação para $f(x)$ utilizando a fórmula do polinômio de Newton com diferenças ascendentes. Então:

$$f(x) \cong P_n(R) = f_0 + R \Delta f_0 + \frac{R(R-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \dots + \frac{R(R-1) \dots (R-n+1)}{n!} \Delta^n f_0$$

1) CÁLCULO DE $f'(x)$, quando $f(x) \sim P_1(x)$

se $n = 1$, temos

$$f(x) \cong p_1(R) = f_0 + R \Delta f_0$$

$$f'(x_0) \cong \frac{d}{dx} (f_0 + R \Delta f_0) \Big|_{x=x_0} = \frac{d}{dR} (f_0 + R \Delta f_0) \cdot \frac{dR}{dx} \Big|_{R=0}$$

Como $R = \frac{x - x_0}{h} \quad \frac{dR}{dx} = \frac{1}{h}$

$$f'(x_0) \cong \frac{\Delta f_0}{h} = \frac{f_1 - f_0}{h} \quad \text{e} \quad EC(x_0) = \frac{-h}{2} f''(\xi) \quad \boxed{1}$$

CÁLCULO DO ERRO

$$EC(x_0) = \frac{1}{(n+1)!} \varphi'(x_0) f^{(n+1)}(\xi) \longrightarrow EC(x_0) = \frac{1}{2!} \varphi'(x_0) f''(\xi)$$

$$\varphi(x) = (x - x_0) \cdot (x - x_1)$$

$$\varphi'(x) = (x - x_0) + (x - x_1)$$

$$\varphi'(x_0) = (x_0 - x_0) + (x_0 - x_1) = -h$$

$$\text{então} \quad EC(x_0) = \frac{1}{2} (-h) f''(\xi) = \frac{-h}{2} f''(\xi)$$

2) CÁLCULO DE $f'(x)$ QUANDO $f(x) \sim p_2(x)$

$$f'(x_0) \cong \frac{d}{dx} \left[f_0 + R \Delta f_0 + \frac{R(R-1)}{2} \Delta^2 f_0 \right] \Big|_{R=0}$$

$$f'(x_0) \cong \frac{1}{h} \left[\Delta f_0 + \frac{2R-1}{2} \Delta^2 f_0 \right] \Big|_{R=0} =$$

$$= \frac{f_1 - f_0}{h} - \frac{1}{2h} \left[f_2 - 2f_1 + f_0 \right] =$$

$$= \frac{1}{2h} \left[2f_1 - 2f_0 - f_2 + 2f_1 - f_0 \right]$$

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{2h} \left[-3f_0 + 4f_1 - f_2 \right] \quad e \quad E = \frac{h^2}{3} f'''(\xi)$$

$$E = \frac{1}{3!} \varphi'(x_0) f'''(\xi)$$

$$\varphi(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

$$\varphi'(x_0) = (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) = 2h^2$$

fórmulas para se obterem as aproximações às derivadas de ordem mais elevada de $f(x)$ podem ser obtidas duma maneira similar.

3) CÁLCULO DE DERIVADAS DE ORDENS MAIS ELEVADA

$$f''(x_0) \approx \frac{\Delta^2 f_0}{h^2} = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2} \quad e \quad E = -h f'''(\xi)$$

$$f'''(x_0) \approx \frac{\Delta^3 f_0}{h^3} = \frac{f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0}{h^3} \quad e \quad E = -ch f^{IV}(\xi)$$

4.3.2 FÓRMULAS BASEADAS EM DIFERENÇAS CENTRAIS

Caso forem conhecidos valores da função $f(x)$, ou se pudermos calculá-los à direita e à esquerda de x_0 , poderemos estabelecer fórmulas de derivação baseadas em diferenças centrais, as quais são mais exatas que as baseadas em diferenças ascendentes.

Vamos usar a fórmula de Taylor para calcular $f(x)$ nos pontos $(x_i - h)$, (x_i) , $(x_i + h)$

$$f(x_i - h) = f(x_i) - h f'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) - \frac{h^3}{3!} f'''(\xi_1)$$

$$f(x_i + h) = f(x_i) + h f'(x_i) + \frac{h^2}{2!} f''(x_i) + \frac{h^3}{3!} f'''(\xi_2)$$

$$\xi_1 \in (x_i - h ; x_i)$$

$$\xi_2 \in (x_i ; x_i + h)$$

$$f(x_i + h) - f(x_i - h) = 2h f'(x_i) + \frac{h^3}{6} \left[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2) \right]$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} - \frac{h^2}{12} \left[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2) \right]$$

Se $f'''(x)$ é contínua no intervalo $[x_i - h; x_i + h]$, existe um ponto neste intervalo para o qual $f'''(\xi) = \left[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2) \right] / 2$.

Então teremos:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} \quad E = \frac{-h^2}{6} f'''(\xi)$$

3

A fórmula [3] é, portanto mais exata que a [1] para h pequeno, e uma vez que ela não envolve, em geral mais trabalho que [1], deve ser preferida quando puder ser usada.

CÁLCULO DE DERIVADAS DE ORDEM MAIS ELEVADA

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} \quad \text{com } E = \frac{-h^2}{12} f^{IV}(\xi)$$

$$f''_0 \approx \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}$$

4.4 EXEMPLO

A partir dos valores abaixo, calcular $f'(1.4)$ usando as expressões [1], [2] e [3]. Comparar os resultados obtidos com o valor correto: $f'(1.4) = \cosh(1.4) = 2.1509$

x	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6
$f(x)$	1.5095	1.6984	1.9043	2.1293	2.3756

x	$f(x) = \sinh(x)$	$f'(x) = \cosh(x)$
1.2	1.5095	1.810655568
1.3	1.6984	1.970914231
1.4	1.9043	2.150898466
1.5	2.1293	2.352409615
1.6	2.3756	2.577464471

$f(x) = \sinh x = \frac{e^x - e^{-x}}{2}$
 $f'(x) = \cosh x = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$

- Cálculo de $f'(1.4)$ pela fórmula [1] $f'(x_0) \approx \frac{f_1 - f_0}{h}$

$$f'(1.4) \approx \frac{f(1.5) - f(1.4)}{0.1} = \frac{2.1293 - 1.9043}{0.1} = 2.2500$$

$$E = \frac{-h}{2} f''(\xi) \leq \frac{0.1}{2} * \max_{x \in [1.4; 1.5]} |f''(x)| = 0.05 \times 2.1293 = 0.106465$$

- Cálculo de $f'(1.4)$ pela fórmula [2] $n = 2$ (pol. do 2º grau)

$$f'(1.4) \approx \frac{1}{0.2} \left[-3f(1.4) + 4f(1.5) - f(1.6) \right] = 2.143500$$

$$E \leq \frac{0.01}{3} * 2.577464471 = 0.00859153$$

- Cálculo de $f'(1.4)$ pela fórmula [3] com diferenças centrais.

$$x_{-1} = 1.3; \quad x_1 = 1.5; \quad x_0 = 1.4$$

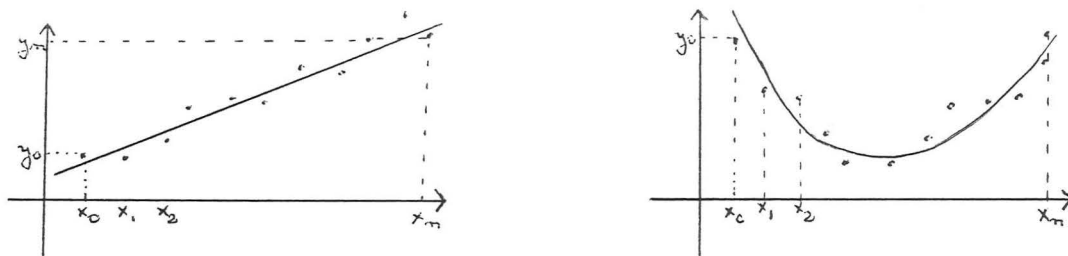
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_{-1}))}{2h} \rightarrow f'(1.4) \approx \frac{2.1293 - 1.6984}{2 \times 0.1} = 2.1545$$

$$E \leq \frac{0.01}{6} * 2.3524 = 0.0039207$$

AJUSTAMENTO DE EQUAÇÕES

5.1 INTRODUÇÃO

O ajustamento é uma técnica de aproximação. Conhecendo-se dados experimentais $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ deseja-se obter a lei $y = f(x)$ relacionando x com y .



Devido aos erros experimentais nos $(n+1)$ pares, (x_i, y_i) , $i = \overline{0, n}$ teremos em geral $f(x_1) + \varepsilon_1 ; f(x_2) + \varepsilon_2 ; \dots, f(x_n) + \varepsilon_n$, isto é, é impossível calcular exatamente a função $f(x)$. Por isso, em vez de procurarmos a função f tal que passa por cada um dos pontos experimentais, calcularemos a função que melhor se ajusta aos pontos dados. O ajustamento traduz um comportamento médio.

- Para ajustar uma tabela de dados a uma função devemos:

- 1º - Determinar o tipo de curva a que se ajustam os valores tabulados.
- 2º - Calcular os parâmetros da curva

5.2 ESCOLHA DA FUNÇÃO DE AJUSTAMENTO

[1] - RETA $y = f(x) = a_1 x + a_0$ [1]

Dada a tabela (x_i, y_i) $i = \overline{0, n}$; se Δx é um acréscimo a x então Δy será o acréscimo a y , e

$y + \Delta y = a_0 + a_1(x + \Delta x)$ [2]

Subtraindo [1] de [2] teremos: $y + \Delta y - y = a_0 + a_1 x + a_1 \Delta x - (a_0 + a_1 x)$

$\Delta y = a_1 \Delta x \rightarrow a_1 = \frac{\Delta y}{\Delta x}$.

Corresponderá à reta quando o quociente $\Delta y / \Delta x$ for constante ou quase constante para todos os pontos da tabela, isto é: $\frac{\Delta y_i}{\Delta x_i} \approx$ cte., então $y = a_0 + a_1 x$ será uma boa representação da tabela, onde $\Delta x_i = x_{i+1} - x_i$ e $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$

Observação: Se os $(x_i, i = \overline{0, n})$ dados na tabela forem

equidistantes usa-se diferenças finitas ou ordinárias, caso contrário usa-se diferenças divididas.

2 - PARÁBOLA $y = a_0 + a_1x + a_2x^2 \rightarrow$ função de ajustamento

Procedendo da mesma forma anterior teremos:

Se $\Delta^2 y \approx \text{cte.}$ ou $f [x_{i+2}, x_{i+1}, x_i] \approx \text{cte.}$, então a tabulação dada se aproxima de uma parábola.

Exemplo:

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$[x_{i+2}, \dots, x_i]$	
-3	-0.71	0.70	-0.18	-0.09	$\Delta^2 y_i \approx \text{cte.}$, logo a tabela se ajusta a uma parábola.
-2	-0.01	0.52	-0.21	-0.105	
-1	0.51	0.31	-0.25	-0.125	
0	0.82	0.06	-0.19	-0.095	
1	0.88	-0.13	-0.20	-0.100	
2	0.75	-0.33			
3	0.42				

3 - FUNÇÃO EXPONENCIAL $y = a b^x$

Seja $y = a b^x$ aplicando logaritmo temos:

$\log y = \log a + x \log b$ e fazendo $\log y = y_1$, $\log a = a_0$,

$\log b = a_1$ obtemos $y_1 = a_0 + a_1x \rightarrow$ equação de uma reta

então $\Delta y_i / \Delta x_i = \Delta \log y_i / \Delta x_i \approx \text{cte.}$, indica que a tabela dada se ajusta a uma equação exponencial do tipo $y = a b^x$

4 - FUNÇÃO POTÊNCIA $y = a x^p$

Seja $y = a x^p$ aplica-se logaritmo e temos:

$\log y = \log a + p \log x$ e fazendo $\log y = y_1$, $\log a = a_0$, $\log x = x_1$

$p = a_1$ obtemos $y_1 = a_0 + a_1x_1$

Então, se $\Delta \log y_i / \Delta \log x_i \approx \text{cte.} \rightarrow y = a x^p$ é uma boa representação da tabela:

x_i	y_i	$\log x_i$	$\log y_i$	$\Delta \log y_i$	$\Delta \log x_i$	$\Delta \log y_i / \Delta \log x_i$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

5 - FUNÇÃO HIPERBÓLICA $y = \frac{1}{a_0 + a_1x}$ ou $\frac{1}{y} = a_0 + a_1x$;

$$\frac{\Delta 1/y_i}{\Delta x_i} \approx \text{cte.}$$

6 - AJUSTAMENTO POR $y = \frac{x}{a_0 + a_1x}$ ou $\frac{x}{y} = a_0 + a_1x$;

$$\frac{\Delta (x_i/y_i)}{\Delta x_i} \approx \text{cte.}$$

[7] - AJUSTAMENTO POR $y = \frac{1}{a_0 + a_1x + a_2x^2}$ ou $\frac{1}{y} = a_0 + a_1x + a_2x^2$

uma tabela se ajusta a uma parábola se

$$\frac{\Delta y_{i+1} - \Delta y_i}{x_{i+2} - x_i} \cong \text{cte.}$$

então, relacionando com a equação [7] temos:

$$\frac{\Delta 1/y_{i+1} - \Delta 1/y_i}{x_{i+2} - x_i} \cong \text{cte.} \quad \text{obs: } \Delta : \text{diferença dividida}$$

[8] - AJUSTAMENTO POR $y = a e^{bx + cx^2}$ ou $\ln y = \ln a + bx + cx^2$

$$\frac{\Delta \ln y_{i+1} - \Delta \ln y_i}{x_{i+2} - x_i} \cong \text{cte.}$$

CRITÉRIOS DE ESCOLHA

a) Pelo desvio relativo em relação a média:

Seja m_i os valores de uma determinada coluna que se deseja analisar e $\bar{m} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m_i$, onde n é o número de termos da coluna. \bar{m} : é a média; calcula-se $\max |m_i - \bar{m}| / |\bar{m}| = t$ e escolhe-se a função para qual t é mínimo.

b) Pelo coeficiente de variação da amostra: $D = \sqrt{\frac{\sum (m_i - \bar{m})^2}{n-1}} / \bar{m}$
escolhe-se a função para qual D é mínimo.

* Obs: Muitas vezes observa-se que para uma dada tabela a função que melhor se ajusta pelo critério dos Mínimos quadrados não coincide com a indicada por um dos critérios acima, por isso vamos considerar a melhor função de ajuste aquela em que a soma dos mínimos quadrados for menor.

5.3 DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS DA CURVA

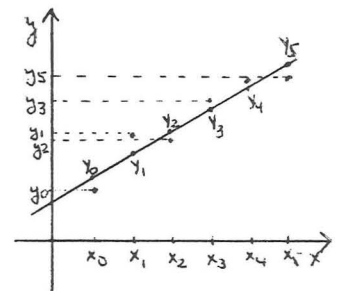
CRITÉRIO DOS MÍNIMOS QUADRADOS

Seja $Y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_px^p$ a função de ajustamento. Dada uma tabela com $n+1$ pontos (x_i, y_i) , denominamos resíduo a diferença entre o valor de Y_i da equação de ajustamento e o valor tabulado de y_i .

$$Y_i - y_i = \delta_i, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

O critério dos mínimos quadrados estabelece que:

$$\sum_{i=0}^n (Y_i - y_i)^2 = \sum_{i=0}^n \delta_i^2 = \text{mínimo}$$



Seja $F = \sum_{i=0}^n (Y_i - y_i)^2$, para F ter seu valor mínimo, é preciso

$$\text{que } \frac{\partial F}{\partial a_0} = 0 ; \frac{\partial F}{\partial a_1} = 0 ; \dots, \frac{\partial F}{\partial a_p} = 0$$

1 - AJUSTE POLINOMIAL

A função de ajustamento é dada por :

$$Y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_p x^p$$

$$Y = f(x, a_0, a_1, \dots, a_p)$$

AJUSTAMENTO A UMA RETA

A função de ajustamento terá a forma $Y = a_0 + a_1 x$, pois $p = 1$, ou para $i = \overline{0, n}$ $Y_i = a_0 + a_1 x_i$ pelo critério dos Mínimos Quadrados devemos ter:

$$F = \sum_{i=0}^n (Y_i - y_i)^2 = \sum_{i=0}^n (a_0 + a_1 x_i - y_i)^2 = \text{mínimo} \quad [1]$$

Sendo [1] uma equação de duas variáveis, a_0 e a_1 , o menor valor de F será obtido através de : $\frac{\partial F}{\partial a_0} = 0 ; \frac{\partial F}{\partial a_1} = 0$; assim ,

$$\frac{\partial F}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=0}^n (a_0 + a_1 x_i - y_i) = 0 \text{ e } \frac{\partial F}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=0}^n (a_0 + a_1 x_i - y_i) x_i = 0$$

e formamos o sistema:

$$\begin{cases} 2 \sum_{i=0}^n (a_0 + a_1 x_i - y_i) = 0 \\ 2 \sum_{i=0}^n (a_0 + a_1 x_i - y_i) x_i = 0 \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \sum_{i=0}^n y_i = \sum_{i=0}^n a_0 + \sum_{i=0}^n a_1 x_i \\ \sum_{i=0}^n x_i y_i = \sum_{i=0}^n a_0 x_i + \sum_{i=0}^n a_1 x_i^2 \end{cases}$$

e finalmente

$$\begin{cases} (n+1) a_0 + a_1 \sum_{i=0}^n x_i = \sum_{i=0}^n y_i \\ a_0 \sum_{i=0}^n x_i + a_1 \sum_{i=0}^n x_i^2 = \sum_{i=0}^n x_i y_i \end{cases}$$

Resolvendo-se este último sistema linear são obtidos os valores de a_0 e a_1 e assim determina-se a equação de ajustamento: $Y = a_0 + a_1 x$

AJUSTAMENTO A UMA PARÁBOLA

A equação de ajustamento é dado por: $Y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$ e pelo critério dos Mínimos Quadrados:

$$F = \sum_{i=0}^n (Y_i - y_i)^2 = \sum_{i=0}^n (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - y_i)^2 = \text{Mínimo}$$

$$\text{então } \frac{\partial F}{\partial a_0} = \frac{\partial F}{\partial a_1} = \frac{\partial F}{\partial a_2} = 0 \quad \boxed{2}$$

Resolvendo $\boxed{2}$ obtemos

$$\begin{cases} \sum y_i = (n+1) a_0 + a_1 \sum x_i + a_2 \sum x_i^2 \\ \sum x_i y_i = \sum x_i a_0 + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 y_i = \sum x_i^2 a_0 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 \end{cases} \quad \text{para } i = \overline{0, n}$$

Resolvendo este sistema linear obtém-se os valores de a_0 , a_1 , a_2 .

Exemplo 1- Dada a tabela (x_i, y_i) , $i = \overline{0, 5}$, achar a equação da reta que se ajusta usando o método dos Mínimos Quadrados.

x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2	Y_i	$(Y_i - y_i)^2$
0	2	0	0	2.07142857	0.005102041
1	3	3	1	3.142857143	0.020408163
2	5	10	4	4.21428571	0.617346946
3	5	15	9	5.2857143	0.081632661
4	5.5	22	16	6.3571429	0.698418375
5	8.0	40	25	7.4285714	0.326530614
\sum	15	28.5	90	55	1.785714407

$$\begin{cases} \sum y_i = (n+1) a_0 + a_1 \sum x_i \\ \sum x_i y_i = a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 \end{cases} \quad \begin{cases} 6a_0 + 15a_1 = 28.5 \\ 15a_0 + 55a_1 = 90.0 \end{cases}$$

$$a_0 = 2.071428572 \quad ; \quad a_1 = 1.071428571$$

$$Y = 2.071428572 + 1.071428571x$$

Exemplo 2- Ache a expressão do polinômio de 2º grau que se ajusta aos dados abaixo.

x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2	$x_i^2 y_i$	x_i^3	x_i^4
-2	-0.01	0.02	4	-0.04	-8	16
-1	0.51	-0.51	1	0.51	-1	1
0	0.82	0	0	0	0	0
1	0.88	0.88	1	0.88	1	1
2	0.81	1.62	4	3.24	8	16
3	0.49	1.47	9	4.41	27	81
3	3.5	3.48	19	9.0	27	115

$$\begin{cases} 6a_0 + 3a_1 + 19a_2 = 3.5 \\ 3a_0 + 19a_1 + 27a_2 = 3.48 \\ 19a_0 + 27a_1 + 115a_2 = 9.00 \end{cases}$$

$$Y(x) = -0.102142857x^2 + 0.201x + 0.806285714$$

AJUSTAMENTO A UM POLINÔMIO DE GRAU p

$$Y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_p x^p \quad p < n$$

Usando o raciocínio anterior temos o sistema:

$$\begin{pmatrix} (n+1) \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \dots & \sum x_i^p \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \dots & \sum x_i^{p+1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum x_i^p & \sum x_i^{p+1} & \dots & \dots & \dots & \sum x_i^{2p} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^p y_i \end{pmatrix}_{i=0, n}$$

2 - AJUSTE NÃO LINEAR NOS PARÂMETROS

- CASOS REDUTÍVEIS AO LINEAR OU PARABÓLICO POR MUDANÇA DE VARIÁVEIS

- AJUSTE POR FUNÇÃO EXPONENCIAL: $y = a b^x$

Aplica-se log ou ln (logaritmo decimal ou neperiano) na equação

acima, $\ln y = \ln a + x \ln b$

$$\ln y_1 = \ln a_0 + x \ln a_1$$

e acha-se a_0 e a_1

$$\begin{cases} (n+1)\ln a + \sum_{i=0}^n x_i \ln b = \sum_{i=0}^n \ln y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i \ln a + \sum_{i=0}^n x_i^2 \ln b = \sum_{i=0}^n x_i \ln y_i \end{cases}$$

$$\text{então } a_0 = \ln a \longrightarrow a = e^{a_0}$$

$$a_1 = \ln b \longrightarrow b = e^{a_1}$$

Exemplo: Ajustar os dados abaixo a uma função exponencial do tipo $y = a b^x$

x_i	y_i	$\ln y_i$	$x_i \ln y_i$	x_i^2	Y_i	$(Y_i - y_i)^2$
0	3	1.09861	0	0	2.98422	0.000249008
0.5	4	1.38629	0.693145	0.25	4.222803110	0.049641226
1.0	6	1.79176	1.79176	1	5.97542917	0.000602559
1.5	9	2.19722	3.29583	2.25	8.455529808	0.296447790
2.0	12	2.48491	4.96982	4	11.96494815	0.001228632
2.5	17	2.83321	7.08303	6.25	16.93093011	0.004770650
3.0	24	3.17805	9.53415	9	23.95801392	0.001762831
3.5	33	3.49651	12.2378	12.25	33.90164789	0.812968918
4.0	48	3.87120	15.4848	16	47.97232917	0.000765675
$\sum 18$		22.3378	55.0903	51		1.168440320

$$\begin{cases} 9 a_0 + 18 a_1 = 22.3378 \\ 18 a_0 + 51 a_1 = 55.0903 \end{cases}$$

Resolvendo-se o sistema linear obtém-se $a_1 = 0.69432 \longrightarrow$

$$b = e^{a_1} = 2.002347015$$

$$a_0 = 1.093337778 \longrightarrow$$

$$a = e^{a_0} = 2.984218125$$

$$Y = 2.98422 (2.00235)^x$$

AJUSTE POR FUNÇÃO POTÊNCIA: $Y = a x^b$

linearizando a função, temos:

$\ln y = \ln a + b \ln x$. Resolve-se o sistema de equações lineares e acha-se a_0 e a_1

$$\begin{cases} \ln y = y_1 \\ \ln a = a_0 \\ b = a_1 \\ \ln x = x_1 \end{cases} \quad \begin{cases} (n+1) \ln a + \sum_{i=0}^n \ln x_i b = \sum_{i=0}^n \ln y_i \\ \sum_{i=0}^n \ln x_i \ln a + \sum_{i=0}^n (\ln x_i)^2 b = \sum_{i=0}^n \ln x_i \ln y_i \end{cases}$$

$$\text{então } \ln a = a_0 \longrightarrow a = e^{a_0}$$

$$b = a_1$$

Exercício:

Os dados abaixo dão a duração de uma broca em função da velocidade de corte.

v (m/s)	100	120	150	180	DUR = a v ^b
D (seg.)	79	28	7.9	2.8	

Pede-se fazer uma tabela de D = D(v) para v = 100 (10) 180

AJUSTAMENTO POR FUNÇÃO HIPERBÓLICA: $Y = \frac{1}{a_0 + a_1 x}$

linearizando ,

$$1/y = a_0 + a_1 x \quad \left\{ \begin{array}{l} (n+1) a_0 + a_1 \sum_{i=0}^n x_i = \sum_{i=0}^n 1/y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i a_0 + a_1 \sum_{i=0}^n x_i^2 = \sum_{i=0}^n x_i / y_i \end{array} \right.$$

AJUSTAMENTO POR FUNÇÃO DO TIPO: $Y = \frac{x}{a_0 + a_1 x}$

$$x/y = a_0 + a_1 x \quad \left\{ \begin{array}{l} (n+1) a_0 + a_1 \sum_{i=0}^n x_i = \sum_{i=0}^n x_i / y_i \\ \sum_{i=0}^n x_i a_0 + a_1 \sum_{i=0}^n x_i^2 = \sum_{i=0}^n x_i^2 / y_i \end{array} \right.$$

AJUSTAMENTO POR FUNÇÃO DO TIPO: $Y = \frac{1}{a_0 + a_1 x + a_2 x^2}$

$$1/y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad \left\{ \begin{array}{l} (n+1)a_0 + a_1 \sum x_i + a_2 \sum x_i^2 = \sum 1/y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 = \sum x_i / y_i \\ a_0 \sum x_i^2 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 = \sum x_i^2 / y_i \end{array} \right. \quad i=0, \bar{n}$$

AJUSTAMENTO POR FUNÇÃO DO TIPO: $Y = a e^{bx + cx^2}$

$$Y = a e^{bx + cx^2} \quad \left\{ \begin{array}{l} (n+1) \ln a + b \sum x_i + c \sum x_i^2 = \sum \ln y_i \\ \ln a \sum x_i + b \sum x_i^2 + c \sum x_i^3 = \sum x_i \ln y_i \\ \ln a \sum x_i^2 + b \sum x_i^3 + c \sum x_i^4 = \sum x_i^2 \ln y_i \end{array} \right.$$

$$\ln y_1 = \ln a + bx + cx^2$$

$$\ln a = a_0 \rightarrow a = e^{a_0}$$

5.4 PROBLEMAS SOBRE AJUSTAMENTO DE CURVAS

1- A tabela abaixo fornece uma relação entre a temperatura de ebulição da água e a pressão barométrica.

p (mm de Hg)	680	690	700	710	720	730	740	780
t (°C)	96.92	97.32	97.71	98.11	98.49	98.88	99.26	100.73

achar a equação da função que melhor se ajusta aos dados acima pelo critério dos mínimos quadrados.

2- A tabela abaixo fornece uma relação entre a resistência à tração do aço em função da temperatura:

t (°C)	250	330	412	485	617
σ (Kg/cm ²)	5720	5260	4450	2780	1500

3- Os dados abaixo, referem-se a variação do coeficiente de atrito entre a roda e o trilho seco com a velocidade.

v (Km/h)	0	10	20	30	40	60	70
μ	0.450	0.313	0.250	0.215	0.192	0.164	0.154

Qual será o coeficiente de atrito quando a velocidade for de 100 Km/h?

4- Viscosidade η do óleo em função da temperatura t°

t°	7.5	10.9	14.0	15.0	16.0	18.0	21.0
η	1.409	1.276	1.175	1.148	1.121	1.069	0.990

Achar a função de ajustamento.

5- Verificar qual das duas funções Y_1 ou Y_2 melhor se ajusta à tabela dada:

$$Y_1 = 0.015619 - 0.0001523x \qquad Y_2 = 0.017054 (0.98028)^x$$

x_i	20	40	60	80	100
y_i	0.01310	0.00654	0.00459	0.00341	0.00263

6 - A intensidade de radiação de uma fonte radioativa é dada por:

$I = I_0 e^{-\alpha t}$. Determinar I_0 e α para os seguintes resultados experimentais.

t	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	Resp. $I_0 = 5.6081537$ $\alpha = 2.8755749$
I	3.16	2.38	1.75	1.34	1.00	

6.1 INTRODUÇÃO

Objetivo: Calcular a $\int_a^b f(x)dx$, onde a função integrando $f(x)$ ou é conhecida por sua expressão analítica ou por uma tabela de valores $(x_i; f(x_i))$, $i = \overline{0, n}$.

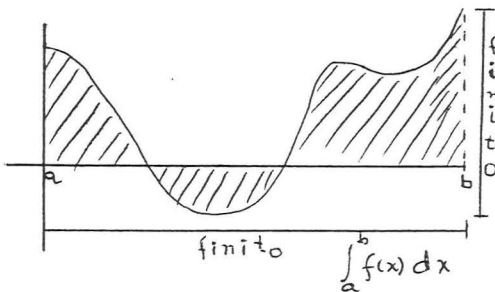
OBS: Quadratura: - f é função de uma única variável

Cubatura: - f é função de mais de uma variável

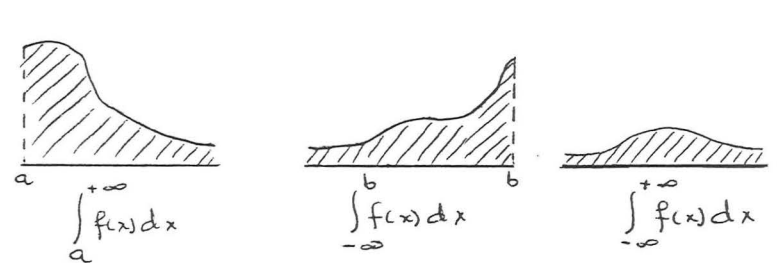
TIPOS DE INTEGRAIS DE UMA VARIÁVEL

Geometricamente $\int_a^b f(x)dx = \text{área do gráfico com relação ao eixo } ox$
 Dependendo da forma desta área, temos os diferentes tipos de Integrais.

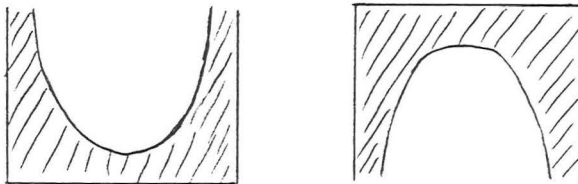
1- Integrais Próprias



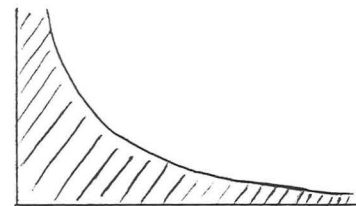
2- Integrais Impróprias de 1ª Espécie



3- Integrais Impróprias de 2ª Espécie

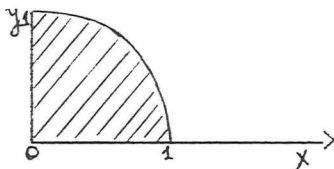


4- Integrais Impr. de 3ª Esp.



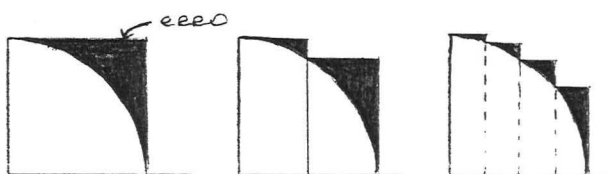
Idéia básica dos algoritmos de Quadratura

Seja $\int_0^1 4 \sqrt{1-x^2} dx$ $y = f(x)$ $y = \sqrt{1-x^2}$ $x^2 + y^2 = 1$



$$\int_0^1 4 \sqrt{1-x^2} dx = 4 \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx$$

a) Célula Retangular



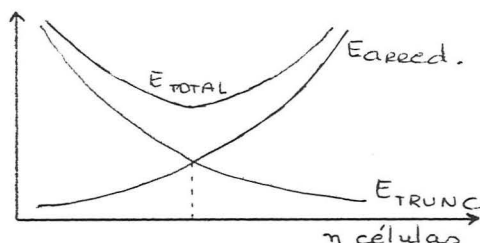
b) Célula Trapezoidal



e assim continua-se dividindo cada intervalo ao meio e fazendo nova avaliação para integral até o erro ser desprezível.

Caso Geral : $\int_a^b f(x)dx =$ soma de um número finito de áreas de células polinomiais.

ERROS COMPUTACIONAIS



$$\int_a^b f(x)dx = I_n + \epsilon_{TOTAL}$$

CLASSIFICAÇÃO DAS INTEGRAIS (PARA QUADRATURA)

INTEGRAIS PRÓPRIAS $\left\{ \begin{array}{l} \rightarrow \text{Bem comportadas (Comp. Polinomial)} \\ \rightarrow \text{Mal comportadas (Outras)} \end{array} \right.$

6.2 MÉTODO DE NEWTON-COTES

Seja a tabulação da função f abaixo

x_i	$f(x_i)$
x_0	$f(x_0)$
\vdots	\vdots
x_n	$f(x_n)$

onde os pontos x_i são igualmente espaçados, isto é:
 $x_{i+1} - x_i = h$ para $i = 0, n-1$

$$h = \frac{x_n - x_0}{n}$$

A integral da função $f(x)$ no intervalo $[x_0; x_n]$ é dada por:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \approx \int_{x_0}^{x_n} P_n(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} \left[f_0 + \frac{(x-x_0)}{h} \Delta f_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{2! h^2} \Delta^2 f_0 + \dots + \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{n-1})}{n! h^n} \Delta^n f_0 \right] dx$$

se $r = \frac{x-x_0}{h}$ então $x = x_0 \rightarrow r = 0$ e $x = x_n \rightarrow r = n$
 $x = x_0 + rh \rightarrow dx = h dr$

e temos

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \cong h \int_0^n P(R) dR = h \int_0^n \left(f_0 + R\Delta f_0 + \frac{R(R-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{R(R-1)\dots(R-n+1)}{n!} \Delta^n f_0 \right) dR \\ = h \left[f_0 \int_0^n dR + \Delta f_0 \int_0^n R dR + \frac{\Delta^2 f_0}{2!} \int_0^n R(R-1) dR + \dots \right. \\ \left. \dots + \frac{\Delta^n f_0}{n!} \int_0^n R(R-1)\dots(R-n+1) dR \right]$$

Na prática não costuma-se aproximar $f(x)$ por um polinômio de grau n (elevado) devido ao erro de arredondamento que ocorrerá no processo.

Métodos de integração do tipo fechado são os que utilizam os limites de integração na fórmula de integração e métodos de integração do tipo aberto subdividem o intervalo de integração sem utilizar os extremos do intervalo na fórmula como por exemplo, o método de Gauss-Legendre.

6.3 FÓRMULA DOS TRAPÉZIOS

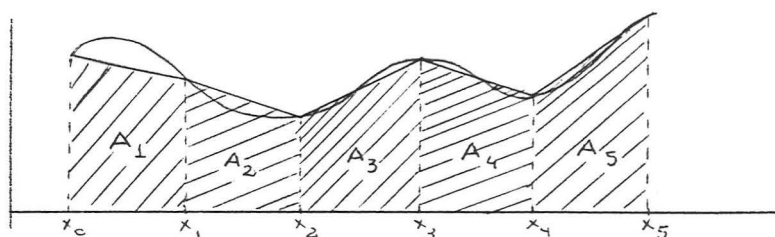
Considerando $n = 1$ na fórmula de Newton-Cotes temos:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \cong h \int_0^1 P(R) dR = h \left[f_0 \int_0^1 dR + \Delta f_0 \int_0^1 R dR \right] = \\ = h \left[f_0 [R]_0^1 + \Delta f_0 \left[\frac{R^2}{2} \right]_0^1 \right] \\ = h \left[f_0 + \frac{\Delta f_0}{2} \right] = \frac{h}{2} [f_0 + f_1]$$

ou para o intervalo $[x_i; x_{i+1}]$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \cong h \int_i^{i+1} P(R) dR = \frac{h}{2} [f_i + f_{i+1}]$$

6.3.1 EXTENSÃO DA FÓRMULA DOS TRAPÉZIOS



$$T(h) = A_1 + A_2 + A_3 + A_4 + A_5$$

$$A_1 = h/2 (f_0 + f_1)$$

$$A_2 = h/2 (f_1 + f_2)$$

$$A_3 = h/2 (f_2 + f_3)$$

$$A_4 = h/2 (f_3 + f_4)$$

$$A_5 = h/2 (f_4 + f_5)$$

Generalizando para n sub-intervalos:

$$T(h) = \frac{h}{2} [f_0 + 2(f_1 + f_2 + f_3 + \dots + f_{n-1}) + f_n]$$

6.3.2 ERRO DE TRUNCAMENTO PARA A FÓRMULA DOS TRAPÉZIOS (PARA n SUB-INTERVALOS)

$$E_T \leq \frac{h^2}{12} (x_n - x_0) \max |f''(x)| \quad x \in [x_0 ; x_n]$$

Vê-se que a fórmula dos Trapézios é exata para polinômios do 1º grau.

6.3.3 EXEMPLOS

1- Dada a tabela abaixo

x_i	1.9	2.0	2.1	2.2	2.3
y_i	3.41773	3.76220	4.14431	4.56791	5.03722

a) estimar o erro quando se calcula $\int_{1.9}^{2.3} f(x) dx$, com $h = 0.2$ pelo método dos Trapézios.

$$|E_T| = \left| \int_{1.9}^{2.3} f(x) dx - T(0.2) \right| \leq \frac{(0.2)^2}{12} (2.3 - 1.9) \max_{x \in [1.9 ; 2.3]} |f''(x)|$$

x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$
1.9	3.41773	0.72658	0.16633
2.1	4.14431	0.89291	
2.3	5.03722		

lembre que:

$$\Delta^k f(x) = h^k f^{(k)}(\xi), \quad \xi \in [x_c ; x_n]$$

$$E_T \approx \frac{1}{12} (0.4) 0.16633 = 0.55443 \times 10^{-2}$$

b) Estimar o erro quando se calcula, $\int_{1.9}^{2.3} f(x) dx$, com $h = 0.1$ pelo método dos Trapézios.

$$E_T \leq \frac{(0.1)^2}{12} (2.3 - 1.9) \max_{x \in [1.9 ; 2.3]} |f''(x)| \approx \frac{1}{12} (0.4) 0.04571 = 0.15237 \times 10^{-2}$$

x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$	$\Delta^4 f_i$
1.9	3.41773	0.34447	0.03764	0.00385	0.00037
2.0	3.76220	0.38211	0.04149	0.00422	
2.1	4.14431	0.42360	0.04571		
2.2	4.56791	0.46931			
2.3	5.03722				

c) Calcular $\int_{1.9}^{2.3} f(x) dx$ com $h = 0.2$ e $h = 0.1$ pelo método dos Trapézios.

$$T(0.2) = \frac{0.2}{2} [3.41773 + 2(4.14431) + 5.03722] = 1.674357$$

$$T(0.1) = \frac{0.1}{2} [3.41773 + 2(3.76220 + 4.14431 + 4.56791) + 5.03722] = 1.67019$$

d) Estimar o erro relativo em $T(0.2)$

$$E = |(1.67019 - 1.674357) / (1.67019)| \cong 0.25 \times 10^{-2}$$

$$DIGSE(T(0.2)) = 2.3$$

2 - Determinar h de tal forma que a regra trapezoidal forneça o

valor de $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ com um erro de truncamento menor que 10^{-4} .

$$E_T \leq \frac{h^2}{12} (1 - 0) \max_{x \in [0; 1]} |f''(x)| = \frac{h^2}{12} (2) < 10^{-4} \Rightarrow h < 0.0245$$

$$n = (x_n - x_0) / h, \quad h = (x_n - x_0) / n, \quad (x_n - x_0) / n < 0.0245,$$

$$n > 40.8 \rightarrow n = 41, \quad h = \frac{1}{41} = 0.02439$$

6.4 FÓRMULA DE SIMPSON

Fazendo $n = 2$ na fórmula de Newton Cotes, temos,

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \cong h \left[f_0 \int_{x_0}^{x_2} dR + \Delta f_0 \int_{x_0}^{x_2} R dR + \frac{\Delta^2 f_0}{2!} \int_{x_0}^{x_2} R(R-1) dR \right] =$$

$$= \frac{h}{3} [f_0 + 4f_1 + f_2]$$

6.4.1 EXTENSÃO DA FÓRMULA DE SIMPSON P/ n SUB-INTERVALOS (n PAR)

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \cong h \int_0^n P(R) dR =$$

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

6.4.2 ERRO DE TRUNCAMENTO PARA A FÓRMULA DE SIMPSON

$$E \cong \frac{-h^4}{180} (x_n - x_0) f^{IV}(\xi) \text{ ou } E_T \leq \frac{h^4}{180} (x_n - x_0) \max_{x \in [x_0; x_n]} |f^{IV}(x)|$$

6.4.3 EXEMPLOS

1- Calcular $\int_{1.9}^{2.3} f(x) dx$, sendo f a função tabelada no exemplo [1], do item 6.3.3, com $h = 0.1$ utilizando a fórmula de Simpson.

$$S(0.1) = \frac{0.1}{3} \left[3.41773 + 4(3.76220 + 4.56791) + 2(4.14431) + 5.03722 \right] = 1.66880$$

$$E_T \cong \frac{1}{180} (2.3 - 1.9) \max_{x \in [1.9; 2.3]} |\Delta^4 f(x)| = \frac{0.4}{180} 0.00037 = 0.822 \times 10^{-6}$$

2- Calcular $\int_1^2 x \ln x dx$ pela fórmula de Simpson para $n = 2$,

$n = 4$ e $n = 8$ subintervalos de integração. Determine o número de algarismos significativos exatos do resultado.

$$h = \frac{2-1}{2} = 0.5 \quad S(0.5) = \frac{0.5}{3} \left[0 + 2.4327906 + 1.3862944 \right] = 0.63651417$$

$$h = \frac{2-1}{4} = 0.25 \quad S(0.25) = \frac{0.25}{3} \left[0 + 5.0330283 + 1.2163953 + 1.3862944 \right] = 0.63630983$$

$$h = \frac{2-1}{8} = 0.125 \quad S(0.125) = \frac{0.125}{3} \left[0 + 10.151885 + 3.7329095 + 1.3862944 \right] = 0.63629537$$

$$\text{DIGSE}(S(0.5)) = - \left(0.3 + \log \left| \frac{0.63630983 - 0.63651417}{0.63630983} \right| \right) = 3.19$$

$$\text{DIGSE}(S(0.25)) = - \left(0.3 + \log \left| \frac{0.63629537 - 0.63630983}{0.63629537} \right| \right) = 4.3$$

Exercícios:

1- Calcular a $\int_0^{1.2} \frac{dx}{(e^x + x + 1)^{1/2}}$ pela fórmula de Simpson com

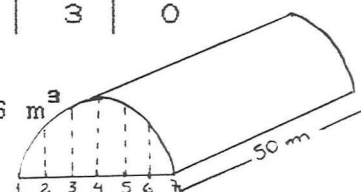
$h = 0.3$. Estimar o erro de truncamento de Simpson.

2- Calcular o volume do depósito. Utilizar método de Simpson.

ESTACAS	ALTURA	x(m)	0	5	10	15	20	25	30
1	0	f(x)(m)	0	3	4	4.6	4	3	0
2	3								
3	4								
4	4.6								

$$\text{resp. } S(5) = 97.3 \text{ m}$$

$$V = 50 \times 97.3 = 4865 \text{ m}^3$$



6.5 CÁLCULO ITERADO DE INTEGRAIS

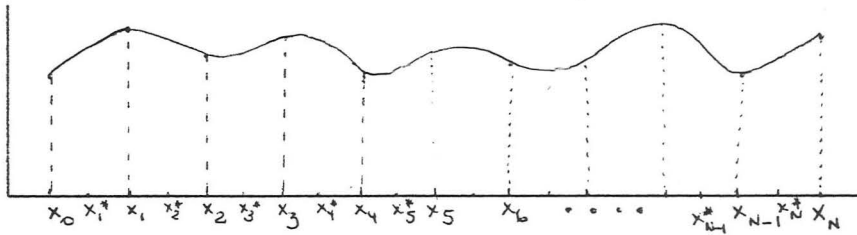
6.5.1 MÉTODO DE ROMBERG

Seja $I = \int_a^b f(x) dx$ e seja $N = \frac{b-a}{h}$ qualquer subdivisão do intervalo $[a, b]$ em N partes iguais.

Seja $T^{(0)}\left(\frac{h}{2^n}\right)$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) a aproximação pela regra dos Trapézios para I .

$$\text{Para } n = 0 \quad T^{(0)}(h) = h \left[\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + \frac{f_N}{2} \right]$$

$$\text{Para } n = 1 \quad T^{(0)}\left(\frac{h}{2}\right) = \frac{1}{2} T^{(0)}(h) + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N f_i^*$$



$$\begin{aligned} T\left(\frac{h}{2}\right) &= \frac{h/2}{2} \left[f_0 + 2(f_1^* + f_1 + f_2^* + f_2 + \dots + f_{N-1} + f_N^*) + f_N \right] = \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2} \left[f_0 + 2(f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1}) + f_N \right] + \frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2} \left[2(f_1^* + \dots + f_N^*) \right] \\ &= \frac{1}{2} T(h) + \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N f_i^* \end{aligned}$$

Gerar as entradas nas sucessivas colunas da tabela, de acordo com a fórmula [1]

$$T^k\left(\frac{h}{2^n}\right) = \frac{4^k T^{k-1}(h/2^n) - T^{k-1}(h/2^{n-1})}{4^k - 1} \quad [1] \quad \begin{matrix} k = 1, 2, \dots \\ n = 1, 2, \dots \end{matrix}$$

$$\text{ou } T^k(h/2^n) = T^{k-1}(h/2^n) + \frac{1}{4^k - 1} \left(T^{k-1}(h/2^n) - T^{k-1}(h/2^{n-1}) \right)$$

	k	n	0	1	2	3
$h = \frac{h}{2^0}$	0	0	T_0^0			
$h = \frac{h}{2^1}$	1	1	T_1^0	T_1^1		
$h = \frac{h}{2^2}$	2	2	T_2^0	T_2^1	T_2^2	
$h = \frac{h}{2^3}$	3	3	T_3^0	T_3^1	T_3^2	T_3^3

Pode ser provado, que as sucessivas entradas em cada coluna tornam-se cada vez mais exatas, no sentido que o erro de [1] é $O(h^{2k+2})$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) quando $h \rightarrow 0$.

A integração de Romberg possui uma vantagem muito importante em relação à fórmula dos Trapézios, porque se torna necessário um número muito menor de subdivisões para se obter uma exatidão requerida e, em consequência, a acumulação do erro de arredondamento diminui.

Verifica-se em alguns casos, problemas de instabilidade.

Exemplo: Calcular $\int_1^2 x \ln x \, dx$ pela integração de Romberg.

x	x ln x	$T(1) = \frac{1}{2} [0 + 1.386294] = 0.693147$
1	0	$T(0.5) = \frac{0.5}{2} [0 + 1.216395 + 1.386294] =$
2	1.386294	$= 0.650672$
1.5	0.608198	$T(1/2) = \frac{T(1)}{2} + \frac{1}{2} (0.608198) = 0.650672$
1.25	0.278929	$T(\frac{0.5}{2}) = T(0.25) = \frac{0.650672}{2} + \frac{0.5}{2} \sum_{i=1}^2 f_i^* =$
1.75	0.979328	$= 0.325336 + 0.314564 = 0.6399$
1.125	0.132506	$T(\frac{0.25}{2}) = T(0.125) = 0.319950 + \frac{0.25}{2} \sum f_i^* =$
1.375	0.437874	$= 0.319950 + 0.317246 = 0.637196$
1.625	0.788950	$T(0.0625) = 0.636520$
1.875	1.178641	

n	h	$T^0(h)$	$T^1(h)$	$T^2(h)$	$T^3(h)$	$T^4(h)$
0	1	0.693147				
1	0.5	0.650672	0.636514			
2	0.25	0.639900	0.636309	0.636295		
3	0.125	0.637196	0.636295	0.636294	0.636294	
4	0.0625	0.636520	0.636295	0.636295	0.636295	0.636295

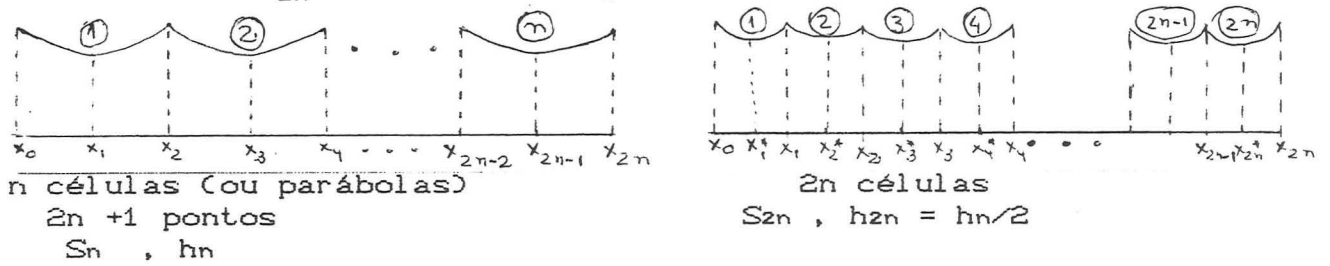
$$T^k(h/2^n) = \frac{4^k T^{k-1}(h/2^n) - T^{k-1}(h/2^{n-1})}{4^k - 1}$$

$$T_1^1 = \frac{4(0.650672) - 0.693147}{3} = 0.636514 \quad \int_1^2 x \ln x \, dx \approx 0.63629$$

$$T_2^1 = \frac{4(0.639900) - 0.650672}{3} = 0.636309$$

6.5.2 MÉTODO DE SIMPSON COM EXATIDÃO CRESCENTE.

Seja $\int_a^b f(x) dx$, calcula-se $S_1, S_2, S_4, S_8, S_{16}$ usando para o cálculo de S_{2n} , o valor de S_n como abaixo descrito.



$$S_n = \frac{hn}{3} \left[f_0 + 4 \left(f_1 + f_3 + \dots + f_{2n-1} \right) + 2 \left(f_2 + f_4 + \dots + f_{2n-2} \right) + f_{2n} \right]$$

$$S_{2n} = \frac{hn/2}{3} \left[f_0 - 4 f_1^* + 2 f_1 + 4 f_2^* + 2 f_2 + \dots + 2 f_{2n-1} + 4 f_{2n}^* + f_{2n} \right]$$

$$S_{2n} = \frac{hn/2}{3} \left[f_0 + 2 \left(f_2 + f_4 + \dots + f_{2n-2} \right) + f_{2n} + 2 \left(f_1 + f_3 + \dots + f_{2n-1} \right) + 4 \left(f_1^* + f_2^* + \dots + f_{2n}^* \right) \right]$$

Daí forma-se o algoritmo de Simpson com exatidão crescente

$$\boxed{S_1} \quad h_1 = \frac{b-a}{2} \quad \epsilon_1 = f(a) + f(b) \quad \gamma_1 = 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad \rightarrow \quad S_1 = \frac{h_1}{3} (\epsilon_1 + \gamma_1)$$

$$\boxed{S_2} \quad h_2 = \frac{h_1}{2} \quad \epsilon_2 = \epsilon_1 + \frac{\gamma_1}{2} \quad \gamma_2 = 4(f_1^* + f_2^*) \quad \rightarrow \quad S_2 = \frac{h_2}{3} (\epsilon_2 + \gamma_2)$$

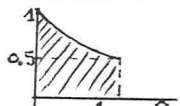
$$\gamma_2 = 4 (f(a + h_2) + f(a + 3h_2))$$

$$\boxed{S_4} \quad h_4 = \frac{h_2}{2} \quad \epsilon_4 = \epsilon_2 + \frac{\gamma_2}{2} \quad \gamma_4 = 4 \left(f(a+h_4) + f(a+3h_4) + f(a+5h_4) + f(a+7h_4) \right)$$

$$S_4 = \frac{h_4}{3} (\epsilon_4 + \gamma_4)$$

Continua-se calculando $S_8, S_{16}, S_{32}, \dots$ até obter a exatidão desejada

Exemplo 1- Calcular $I = \int_0^1 \frac{1}{1+x^2} dx$, pelo método de Simpson com exatidão crescente.



$$a = 0 \quad b = 1 \quad f(x) = \frac{1}{1+x^2}$$

$$h_1 = \frac{1-0}{2} = 0.5 \quad \epsilon_1 = f(0) + f(1) = 1 + 0.5 = 1.5$$

$$\gamma_1 = 4 \left(f\left(\frac{0+1}{2}\right) \right) = 4(0.8) = 3.2 \quad S_1 = \frac{0.5}{3} (1.5 + 3.2) = 0.7833333$$

$$h_2 = \frac{0.5}{2} = 0.25 \quad \epsilon_2 = \epsilon_1 + \frac{\gamma_1}{2} = 1.5 + 1.6 = 3.1$$

$$\gamma_2 = 4 \left[f(0.25) + f(0.75) \right] = 6.3247059 \quad S_2 = \frac{0.25}{3} (3.1 + 6.3247059) = 0.7853922$$

$$h_4 = 0.125 \quad \epsilon_4 = \epsilon_2 + \frac{\gamma_2}{2} = 3.1 + 3.1623530 \quad \gamma_4 = 12.5872021 \quad S_4 = 0.7853981$$

$$S_8 = 0.7853982 \quad \text{DIGSE}(S_2) = 4.8 \quad \text{DIGSE}(S_4) = 6.59 \quad \rightarrow I_4 \cong 0.785398$$

Exemplo 2- Calcular por aplicação iterada da fórmula de Simpson

$$\int_1^2 x \ln x \, dx .$$

$$S_1 : h_1 = 0.5 \quad S_1 = S(0.5) = \frac{0.5}{3} (0 + 1.386294 + 2.432791) = 0.636514$$

$$S_2 = S(0.25) = 0.636310 \quad S_4 = S(0.125) = 0.636296$$

$$S_8 = S(0.0625) = 0.636294 \quad S_{16} = S(0.03125) = 0.636294$$

6.6 QUADRATURA GAUSSIANA OU MÉTODO DE GAUSS LEGENDRE

As fórmulas de integração consideradas até agora basearam-se no emprego de pontos igualmente espaçados. Gauss procurou obter fórmulas de maior exatidão com um número fixo de pontos e onde as abcissas e os coeficientes na fórmula de quadratura não contivessem restrições. Uma fórmula de integração é, portanto, pesquisada na forma

$$\int_a^b f(x) \, dx = a_0 f(x_0) + a_1 f(x_1) + \dots + a_n f(x_n)$$

onde os a_i ($i = 0, 1, \dots, n$) e os argumentos x_i , ($i = 0, 1, \dots, n$) devam ser determinados de modo a se obter a melhor exatidão possível. Uma fórmula possui a melhor exatidão possível se é exata para todos os polinômios de graus tão elevados quanto possível.

Primeiro vamos trocar os limites de integração de a e b para -1 a $+1$ com o objetivo de simplificar a análise. Isto pode ser sempre realizado através da substituição:

$$x = \frac{1}{2} (b - a)t + \frac{1}{2} (a + b) \quad dx = \frac{1}{2} (b - a)dt \quad [1]$$

$$\text{de tal forma que } \int_a^b f(x) \, dx = \frac{b - a}{2} \int_{-1}^1 F(t) \, dt \quad [2]$$

Vamos agora determinar os A_i ($i = 0, 1, \dots, n$) e as abcissas t_i , ($i = 0, 1, \dots, n$) contidas no intervalo $[-1 ; 1]$ a fim de utilizá-los na fórmula

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) + \dots + A_n F(t_n) \quad [3]$$

de tal forma que a mesma seja exata para todos os polinômios de grau menor ou igual a $2n+1$.

Consideremos, primeiro, o caso $n = 1$, isto é, determinemos A_0 , A_1 , t_0 e t_1 de tal forma que a fórmula

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) \quad [4],$$

seja exata para todos os polinômios de grau menor ou igual a 3. Estabelecendo para $F(t) = t^k$ ($k = 0, 1, 2, 3$) em [4], chega-se as seguintes equações para determinar A_0 , A_1 , t_0 e t_1

$$k = 0 \quad \int_{-1}^1 t^0 dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) = A_0 t_0^0 + A_1 t_1^0 = A_0 + A_1 = 2$$

$$k = 1 \quad \int_{-1}^1 t^1 dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) = A_0 t_0^1 + A_1 t_1^1 = A_0 t_0 + A_1 t_1 = 0$$

$$k = 2 \quad \int_{-1}^1 t^2 dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) = A_0 t_0^2 + A_1 t_1^2 = \frac{2}{3} \quad [5]$$

$$k = 3 \quad \int_{-1}^1 t^3 dt = A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) = A_0 t_0^3 + A_1 t_1^3 = 0$$

Analisando-se as equações verifica-se que a única solução é $t_1 = -t_0$ e então substituindo-se nas equações [5]

obtemos: $A_0 = A_1 = 1$, $t_0^2 = \frac{1}{3}$ e substituindo-se estes valores em [4], obtemos a fórmula gaussiana para $n = 1$.

$$\int_{-1}^1 F(t) dt = F\left(\frac{-1}{\sqrt{3}}\right) + F\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

esta fórmula é exata se $F(t)$ é qualquer polinômio de grau ≤ 3 .

O mesmo procedimento pode ser usado para determinar a fórmula geral [3]. Suponhamos, agora, que $F(t)$ represente os polinômios especiais t^k ($k = 1, 2, 3, \dots, 2n+1$).

Observando-se que $\int_{-1}^1 t^k dt = 0$ se k é ímpar e $\int_{-1}^1 t^k dt = \frac{2}{k+1}$

se k é par, obtemos um sistema de $2n+2$ equações, e estas equações são não lineares. A solução deste sistema é muito complicada.

Usando a teoria dos polinômios ortogonais pode-se mostrar que

os t_k são as raízes dos polinômios de Legendre. As incógnitas A_k são determinadas, então, através do sistema formado.

DEFINIÇÃO DOS POLINÔMIOS DE LEGENDRE

$$P_0(x) = 1 \quad P_1(x) = x$$

$$P_{m+1}(x) = \frac{1}{m+1} \left[(2m+1)x P_m(x) - m P_{m-1}(x) \right] \quad m = 1, 2, \dots$$

com $m = 1$, encontramos: $P_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$ e com

$m = 2$, encontramos: $P_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x)$

m	$P_m(x)$	RAÍZES
0	$P_1(x) = x$	$x_0 = 0$
1	$P_2(x) = 1/2 (3x^2 - 1)$	$x_0 = -\sqrt{3}/3 \quad x_1 = \sqrt{3}/3 = 0.57735027$
2	$P_3(x) = 1/2 (5x^3 - 3x)$	$x_0 = -\sqrt{3/5} \quad , \quad x_1 = 0$ $x_2 = \sqrt{3/5} = 0.77459667$
3	$P_4(x) = 1/8 (35x^4 - 30x^2 + 3)$	$x_0 = -0.86113631 \quad , \quad x_1 = -0.33998104$ $x_2 = -x_1 \quad , \quad x_3 = -x_0$

n	t_k	A_k
0	t_0	$A_0 = 2$
1	$t_1 = -t_0 = 0.57735027$	$A_1 = A_0 = 1$
2	$t_1 = 0 \quad , \quad t_2 = -t_0 = 0.77459667$	$A_1 = 0.88888889 \quad ,$ $A_2 = A_0 = 0.55555556$
3	$t_2 = -t_1 = 0.33998104$ $t_3 = -t_0 = 0.86113631$	$A_2 = A_1 = 0.65214515$ $A_3 = A_0 = 0.34785485$
4	$t_4 = -t_0 = 0.90617985 \quad , \quad t_2 = 0$ $t_3 = -t_1 = 0.53846931$	$A_4 = A_0 = 0.23692689$ $A_3 = A_1 = 0.47862867$ $A_2 = 0.56888889$

Propriedades:

As raízes de $P_m(x)$ são todas reais e distintas;

situam-se no intervalo $[-1 ; 1]$.

As raízes de $P_m(x)$ estão simetricamente situadas com respeito à origem. Se m é par, uma raiz é sempre $x = 0$.

Na maioria dos casos essas raízes são números irracionais.

Os A_k são todos positivos e os correspondentes a pontos simétricos são iguais.

Como norma prática, a integração de Gauss-Legendre possibilitará a mesma exatidão que a regra de Simpson, com menos da metade do trabalho computacional.

Exemplo 1 - Calcular $\int_0^1 e^{-x^2} dx$ por Gauss-Legendre com $n = 2$

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = \left[\frac{b-a}{2} \right] \int_{-1}^1 F(t) dt \cong \frac{1}{2} \left[A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) + A_2 F(t_2) \right]$$

mudança de variável:

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

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 e^{-\left(\frac{t+1}{2}\right)^2} dt$$

$$\text{Cálculo de } x \text{ em função de } t: x_0 = \frac{t_0 + 1}{2} = \frac{-0.77459667 + 1}{2} = 0.11270167$$

$$x_1 = (t_1 + 1) / 2 = (0 + 1) / 2 = 0.5$$

$$x_2 = (t_2 + 1) / 2 = (0.77459667 + 1) / 2 = 0.88729834$$

Cálculo da função correspondente:

$$f(0.11270167) = e^{-(0.11270167)^2} = 0.98737866$$

$$f(0.5) = e^{-(0.5)^2} = 0.77880078$$

$$f(0.88729834) = 0.45507259$$

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = \frac{1}{2} \left[0.55555556 (0.98737866) + 0.88888889 (0.77880078) + 0.55555556 (0.45507259) \right] = 0.74681459$$

o erro de truncamento é dado por:

$$E_T^G = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b \left[(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n) \right]^2 dx \quad \boxed{a < \xi < b}$$

Exemplo 2- $I = \int_{-2}^2 e^{-(x^2/2)} dx$

h	Trapézios	E_T	Simpson	E	nº sub-int	Gauss Legendre	E_T
1.0	2.3484	0.0441	2.3743	0.0182	1	2.0536	0.3389
0.5	2.3813	0.0112	2.3923	0.0002	2	2.4471	-0.0546
0.25	2.3898	0.0027	2.3926	-0.0001	3	2.3859	0.0066
					4	2.3931	-0.0006
					5	2.3925	0.0000

Exemplo 3- Calcular $\int_{1.0}^{1.4} \frac{1}{1+x} dx$, pela fórmula de Gauss-Legendre com $n = 3$

$$x = \frac{b-a}{2} t + \frac{a+b}{2} = 0.2t + 1.2$$

$$\int_{1.0}^{1.4} \frac{1}{1+x} dx = 0.2 \int_{-1}^1 \frac{1}{1+0.2t+1.2} dt =$$

$$= 0.2 \left[A_0 F(t_0) + A_1 F(t_1) + A_2 F(t_2) + A_3 F(t_3) \right]$$

Cálculo de x em função de t :

$$x_0 = 0.2 t_0 + 1.2 = 0.2 (-0.86113631) + 1.2 = 1.02777274$$

$$x_1 = 0.2 t_1 + 1.2 = 0.2 (-0.33998104) + 1.2 = 1.13200379$$

$$x_2 = 0.2 t_2 + 1.2 = 0.2 (0.33998104) + 1.2 = 1.26799621$$

$$x_3 = 0.2 t_3 + 1.2 = 0.2 (0.86113631) + 1.2 = 1.37222726$$

Cálculo da função correspondente

$$f(1.02777274) = \frac{1}{1+1.02777274} = 0.49315191$$

$$f(1.13200379) = 0.46904232$$

$$f(1.26799621) = 0.44091784$$

$$f(1.37222726) = 0.42154477$$

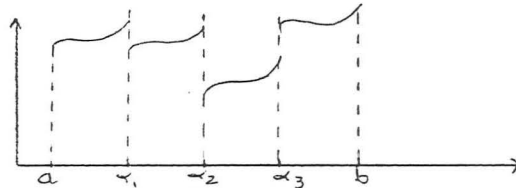
$$I_G = 0.2 \left[0.34785485 (0.49315191) + 0.65214515 (0.46904232) + 0.65214515 (0.44091784) + 0.34785485 (0.42154477) \right] =$$

$$I_G = 0.182321558$$

$$E_G = \frac{f^{(8)}(\xi)}{8!} \int_{1.0}^{1.4} \left[(x - 1.02777274) * (x - 1.13200379) * (x - 1.26799621) * (x - 1.37222726) \right]^2 dx$$

6.7 QUADRATURA EM INTERVALO LIMITADO DE FUNÇÕES MAL CONDICIONADAS (COMPORTADAS)

1) f tem um número finito de descontinuidade de 1ª espécie



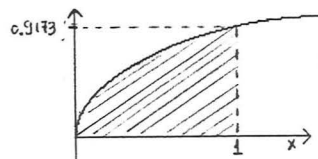
$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^{\alpha_1} f(x) dx + \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} f(x) dx + \int_{\alpha_2}^{\alpha_3} f(x) dx + \int_{\alpha_3}^b f(x) dx$$

Calcula-se cada integral por Romberg ou Simpson.

2) Existe uma tangente vertical

Exemplo:

$$f(x) = \int_0^1 \sqrt{\text{sen } x} dx$$



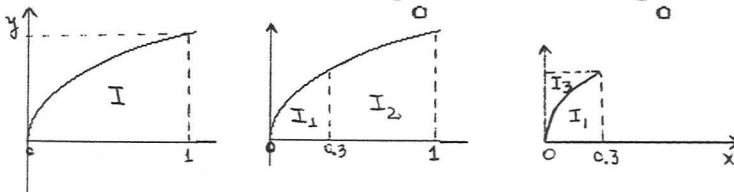
a velocidade é extremamente lenta.

Aplicando Simpson:

$$\begin{aligned} S_1 &= 6.144899575 \times 10^{-1} \\ S_2 &= 6.328478279 \times 10^{-1} \\ S_4 &= 6.393912583 \times 10^{-1} \\ S_8 &= 6.417092506 \times 10^{-1} \\ S_{16} &= 6.425291594 \times 10^{-1} \\ S_{32} &= 6.428190720 \times 10^{-1} \\ S_{64} &= 6.42921594 \times 10^{-1} \end{aligned}$$

a) Solução via função inversa:

$$\int_0^1 f(x) dx = \int_0^1 \sqrt{\text{sen } x} dx$$



$$\begin{aligned} I &= I_1 + I_2 \\ I_2 &: \text{Rápida} \\ I_1 &: \text{Lenta} \\ I_1 &: [0.3 \times f(0.3)] - I_3 \end{aligned}$$

$$I_3 = \int_c^{f(0.3)} f^{-1}(x) dx = \int_0^{\sqrt{\text{sen}(0.3)}} \text{arc sen}(y^2) dy \text{ (rápida de calcular)}$$

$$\int_0^1 \sqrt{\text{sen}(x)} dx = \int_{0.3}^1 \sqrt{\text{sen}(x)} dx + 0.3 \sqrt{\text{sen}(0.3)} - \int_0^{\sqrt{\text{sen}(0.3)}} \text{arcsen}(y^2) dy$$

b) Solução via mudança de variável

Achar uma mudança de variável $x = \varphi(u)$ tal que

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{\varphi_a}^{\varphi_b^{-1}} f(\varphi(u)) \varphi'(u) du,$$

deve ser bem comportada com intervalo de integração limitado.

Exemplo:

$\int_0^1 \sqrt{\text{sen}(x)}$ por Trapézios:

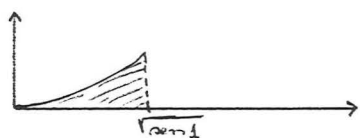
$T(1) = 0.458659$	$T(1/8) = 0.634173$	$T(1/256) = 0.642927$
$T(0.5) = 0.575532$	\vdots	$T(1/512) = 0.642960$
$T(0.25) = 0.618519$	$T(1/128) = 0.642836$	

Via mudança de variável:

$$u^2 = \text{sen } x \quad x = \text{arc sen } u^2 \quad x=0 \rightarrow u=0 \quad x=1 \rightarrow u = \sqrt{\text{sen } 1}$$

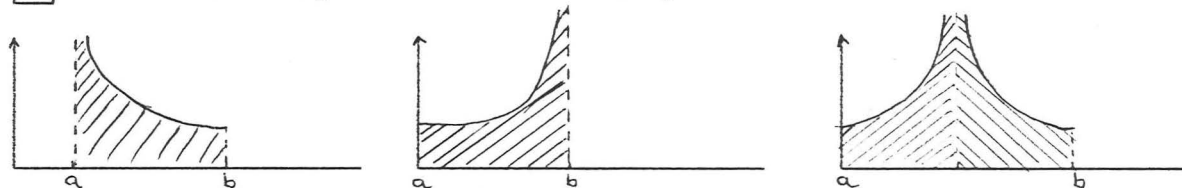
$$u^2 = \text{sen } x \rightarrow 2u du = \cos x dx \rightarrow dx = \frac{2u du}{\cos x} = \frac{2u du}{\sqrt{1-u^2}}$$

$$\int_0^1 \sqrt{\text{sen } x} dx = \int_0^{\sqrt{\text{sen}(1)}} u \cdot \frac{2u}{\sqrt{1-u^2}} du = 2 \int_0^{\sqrt{\text{sen}(1)}} \frac{u^2}{\sqrt{1-u^2}} du$$



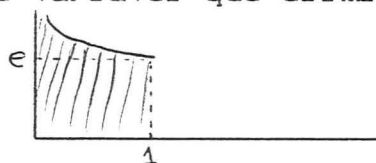
é melhor comportada

3 f tem singularidade em [a ; b]



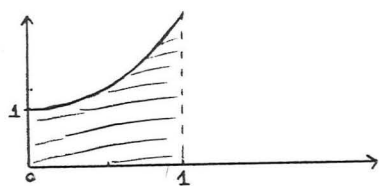
Usar um método de mudança de variável que elimine a singularidade.

Exemplo: $\int_a^1 \frac{e^x}{\sqrt{x}}$ dx



$$x = u^2 \quad \sqrt{x} = u \quad e^x \rightarrow e^{u^2} \quad dx = 2u du$$

$$\int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt{x}} dx = 2 \int_0^1 \frac{e^{u^2}}{u} u du = 2 \int_0^1 e^{u^2} du$$



muito bem comportada.

6.8 EXERCÍCIOS SOBRE INTEGRAÇÃO NUMÉRICA

1- Calcular o valor de Π , dada a expressão:

$\Pi = 4 \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2}$, aplicando a fórmula de Simpson, de forma que o erro de truncamento seja menor ou igual a 10^{-5} .

$$E_T \leq \frac{(b-a) * h^4}{180} \cdot \max_{x \in [a;b]} |f^{IV}(x)| \leq 10^{-5} \quad \max_{x \in [0;1]} |f^{IV}(x)| = 24$$

$$n \geq 10.75 \longrightarrow n = 12 \quad h = 1/12 \quad \Pi \approx 3.141592$$

2- Calcular $\int_0^2 \frac{e^{-x}}{\sqrt{e-x}} dx$ pela iteração de Romberg, com um erro $< 10^{-3}$

h	$T^0(h)$	$T^1(h)$	$T^2(h)$	$T^3(h)$
2	0.7662			
1	0.6638	0.6296		
0.5	0.6366	0.6275	0.6274	
0.25	0.6296	0.6273	0.6273	0.6273

3- Os gráficos de $f_1(x) = x$ e $f_2(x) = e^{x/2} - 2$ encontram-se no ponto (3.3567 ; 3.3567). Calcular a área da região delimitada por estes gráficos para $x \geq 0$. Usar o método de Simpson com $n = 2, 4, 8, 16, \dots$ subintervalos, até obter uma aproximação com erro menor que 10^{-3} .

n = 2	$h_1 = 1.6784$	$S(h_1) = 3.6116$
n = 4	$h_2 = 0.8392$	$S(h_2) = 3.6322$
n = 8	$h_3 = 0.4196$	$S(h_3) = 3.6336$
n = 16	$h_4 = 0.2098$	$S(h_4) = 3.6337$

4- Calcular $\int_{1/2}^{3/2} x \operatorname{tg} x$ com $n = 3$ por Gauss-Legendre

SOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS ORDINÁRIAS

7.1 INTRODUÇÃO

Uma equação diferencial ordinária é uma relação que envolve uma ou várias derivadas em relação a uma variável independente x , de uma função y não especificada; a relação pode também envolver a própria função y , funções dadas de x e constantes.

Exemplos:

$e^x y' + 7xy = x^2 + 1$	Eq. Dif. Ord. de 1ª ordem, 1º grau, linear, não homogênea
$y'' = 10y + 1$	Eq. Dif. Ord. de 2ª ordem, 1º grau, linear, não homogênea
$y'' + 3y' - 17y = 0$	Eq. Dif. Ord. de 2ª ordem, linear, homogênea
$x^2 yy'' + xy = 3$	Eq. Dif. Ord. de 3ª ordem, não linear, não homogênea
$(y'')^3 + 4y' + 2y = 3$	Eq. Dif. de 2ª ordem, 3º grau, não homogênea

ORDEM de uma EDO é a ordem máxima de derivada que ela contém.

GRAU de uma EDO é o expoente da mais alta derivada na equação.

Uma equação diferencial é dita LINEAR quando for do 1º grau, em relação a função e suas derivadas. Não poderá haver derivadas com potência superior a primeira ou produto da função por uma de suas derivadas.

TIPOS DE PROBLEMAS QUE SE RESOLVEM EM EDO NA MATEMÁTICA

- 1º P.C.I. (problema de condição inicial)
- 2º P.C.C. (problema de condição no contorno)
- 3º P.VAP. (problema de valores próprios)

APLICAÇÕES:

- Problemas relacionados com foguetes balísticos
- Estudo de redes elétricas
- Estabilidade de aviões
- Teoria das vibrações
- Curvatura de vigas, etc.

FORMA NORMAL DE UMA EDO

$y' = f(x, y)$	EDO de 1ª ordem
$y'' = f(x, y, y')$	EDO de 2ª ordem
\vdots	
$y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)})$	EDO de ordem n

SOLUÇÃO DE UMA EQUAÇÃO DIFERENCIAL DE ORDEM n

Seja uma EDO de ordem n ,

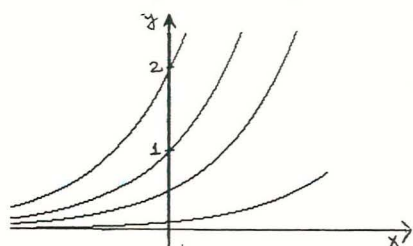
$$y^{(n)} = f(x, y, y', \dots, y^{(n-1)}). \quad [1]$$

Chama-se solução de [1] a uma função $y = F(x)$ que seja definida e n vezes diferenciável num certo intervalo $a < x < b$ e de forma que, substituindo y e suas derivadas por F e suas derivadas obtém-se uma identidade.

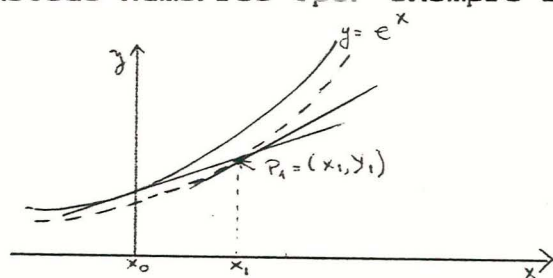
Se $y(x_0)$, $y'(x_0)$, \dots , $y^{(n-1)}(x_0)$ forem fixados previamente num certo ponto $x = x_0$, teremos um problema de valor inicial.

Portanto uma EDO de 1ª ordem precisa de uma condição inicial para fixar uma solução particular. Uma EDO de 2ª ordem precisa de duas condições iniciais para fixar uma solução particular e assim por diante.

Exemplo: Tomemos a equação diferencial $y' = y$, sua solução clássica é $y = a e^x$ onde a é uma constante arbitrária (solução geral) Valores diferentes de a levam a uma família de curvas, todas as quais satisfazem a equação diferencial dada. Se for dada a condição inicial então a constante a poderá ser determinada. Por exemplo, se $y(0) = 1$ isto é, para $x = 0$, $y = 1$ então $a = 1$ e $y = e^x$ é a solução particular.



Na prática para aproximarmos a solução em pontos por método numérico (por exemplo Euler), teríamos a situação:



— solução exata $y = e^x$
 --- solução aprox.

Observe que $P_1 = (x_1, y_1)$ pertence a um outro elemento da família de soluções da equação diferencial $y' = y$. Se continuarmos o processo veremos que este erro irá se acumulando cada vez mais.

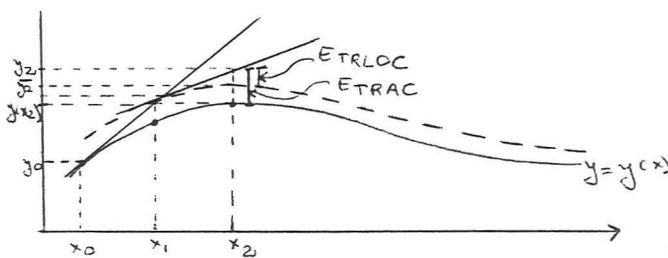
A solução será calculada aproximadamente em $x=x_1, x_2, \dots, x_n$. Não há algoritmos que calculem a expressão analítica da solução, mas apenas a solução em pontos e ainda, só aproximações. No exemplo acima, verificamos que quanto maior for x , mais nos afastaremos da solução exata. ($y' = cy$ com $c = 1$ ($c \geq 0$)). Dizemos neste caso, que nossa equação diferencial é instável. Caso $y' = cy$ com $c < 0$ ($c = -1$) verifica-se que o erro decresce a medida em que x cresce. Dizemos então que a EDO é estável.

7.2 ERROS COMPUTACIONAIS

Ao resolvermos uma EDO por métodos numéricos teremos como já é conhecido dois tipos de erros que são : de arredondamento e de truncamento ou de discretização.

Os erros de arredondamento dependem da máquina e algoritmo utilizados.

ERRO DE TRUNCAMENTO OU DISCRETIZAÇÃO

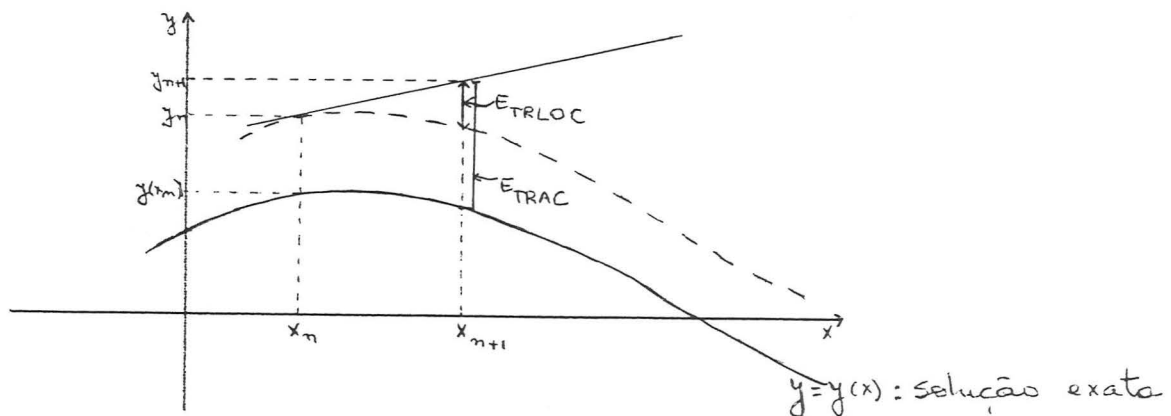


E_{TRLOC} = erro de truncamento local (depende apenas do passo $x_n \rightarrow x_{n+1}$)

E_{TRAC} = erro de truncamento acumulado (depende de todos os passos anteriores $x_0 \rightarrow x_1, x_1 \rightarrow x_2, \dots, x_n \rightarrow x_{n+1}$)

$$E_{TRLOC}(x_2) = y_2 - \bar{y}_2$$

$$E_{TRAC}(x_2) = y_2 - y(x_2)$$



Iniciaremos nosso estudo de métodos numéricos para EDO de 1ª ordem com condição inicial: $y' = f(x, y)$ e $y(x_0) = y_0$

7.3 APROXIMAÇÃO DA SOLUÇÃO POR SÉRIE DE TAYLOR

A aproximação da solução de uma EDO pela série de Taylor é um método que teoricamente prevê uma solução para qualquer equação diferencial mas é de pouco valor computacional prático. Sua importância reside no fato de que é uma base para compará-la com os demais métodos numéricos que são de considerável valor prático.

Seja a EDO de 1ª ordem com condição inicial: $y' = f(x, y)$ [2]
 $y(x_0) = y_0$

Seja $y = F(x)$ a solução

$F'(x) = f(x, F(x))$ e $F(x_0) = y_0$ e F derivável até ordem n em x_0 . Se $F(x)$ for a solução exata de [2], pode-se expandi-la em uma série de Taylor para o ponto $x = x_0$.

$$F(x) = F(x_0) + (x - x_0) F'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} F''(x_0) + \dots$$

$$\dots + \frac{(x - x_0)^n}{n!} F^n(x_0) + \frac{(x - x_0)^{n+1}}{(n+1)!} F^{(n+1)}(\xi), \quad \xi \in [x_0; x]$$

$F(x_0) = y_0$	$y' = f(x, y)$
$F'(x_0) = y'_0 = f(x_0, y_0)$	$y'' = f'(x, y, y') = f_x + f_y y' = f_x + f_y f$
$F''(x_0) = f'(x_0, y_0, y'_0) = y''_0$	$y''' = f_{xx} + f_x f_y + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_y^2 f$

As derivadas nesta expansão não são conhecidas explicitamente uma vez que a solução não é conhecida. Contudo, se f for suficientemente derivável, elas poderão ser obtidas considerando-se a derivada total com respeito a x , tendo em mente que f é uma função implícita de y .

Exemplo 1: Resolver a EDO $y' = x + y^2$, $y(0) = 1$ aproximando a solução pela fórmula de Taylor.

$$y(x) = y_0 + (x - x_0) y'_0 + \frac{(x - x_0)^2}{2!} y''_0 + \dots + \frac{(x - x_0)^n}{n!} y_0^{(n)} + R_{n+1}$$

$y' = x + y^2$	$y'_0 = 1$
$y'' = 1 + 2yy'$	$y''_0 = 1 + 2(1)(1) = 3$
$y''' = 2yy'' + y'2y'$	$y'''_0 = 2(1)(3) + 2(1)^2 = 8$
$y^{IV} = 2yy''' + 2y'y'' + 4y'y''$	$y^{IV}_0 = 2(1)(8) + 6(1)(3) = 34$

$$y(x) = 1 + x + 3 \frac{x^2}{2} + 8 \frac{x^3}{6} + 34 \frac{x^4}{24} + R_5$$

$$y(x) = 1 + x + \frac{3}{2}x^2 + \frac{4}{3}x^3 + \frac{17}{12}x^4 + R_5$$

Exemplo 2- Calcular $y(0.4)$ com $h=0.2$ através da fórmula de Taylor, sendo $y' = x - y$ e $y(0) = 2$

$$x_0 = 0 \quad y_0 = 2 \quad y' = x - y \quad y'' = 1 - y' \quad y''' = -y'' \quad y^{IV} = -y'''$$

$$y'_0 = -2 \quad y''_0 = 3 \quad y'''_0 = -3 \quad y^{IV}_0 = 3$$

$$y(0.2) \approx 2 + (-2)(0.2) + \frac{3(0.2)^2}{2} + \frac{(-3)(0.2)^3}{6} + \frac{3(0.2)^4}{24} = 1.6562$$

$$x_1 = 0.2 \quad y_1 = 1.656200 \quad y'_1 = -1.4562 \quad y''_1 = 2.4562 \quad y'''_1 = -2.4562$$

$$y(0.4) \approx y_2 = y_1 + hy'_1 + \frac{h^2}{2} y''_1 + \frac{h^3}{6} y'''_1 + \frac{h^4}{24} y^{IV}_1 = 1.4109728$$

$$E_{TR} \approx O(h^5)$$

TIPOS DE FÓRMULAS

a- fórmulas de passo simples: $y(x_{i+1})$ depende somente do conhecimento de $y(x_i)$

b- fórmulas de passo múltiplo: $y(x_{i+1})$ depende do conhecimento de $y(x_i)$, $y(x_{i-1})$, ..., $y(x_{i-p})$

Observação: A exatidão da fórmula será considerada pela potência de h na expressão do erro.

Convenção: $y(x_i)$ → valor exato da solução para $x = x_i$

y_i → valor aproximado da solução para $x = x_i$ calculado pela fórmula numérica.

7.4 MÉTODOS DE PASSO SIMPLES PARA EDO DE 1ª ORDEM COM C.I.

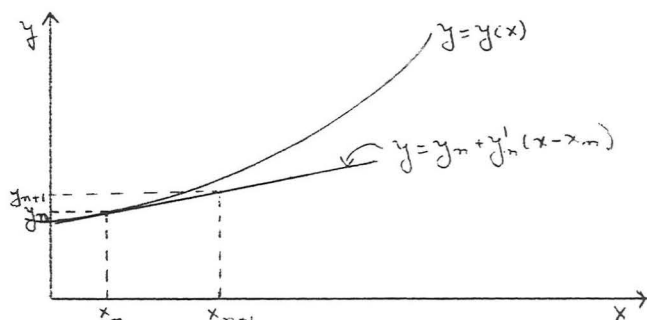
7.4.1 FÓRMULA DE EULER

Dado $\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$ a fórmula de Euler é dada por

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \quad E_{TRLOC} = \frac{h^2}{2!} f''(\xi) = \frac{h^2}{2} y''(\xi) \approx O(h^2)$$

$$n = 0, 1, 2, \dots$$

INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA



Dada a solução y_n no ponto $x = x_n$, calculamos $y'_n = f(x_n, y_n)$ e traçamos a reta que passa por (x_n, y_n) com declividade $y'_n = f(x_n, y_n)$ então:

$$y = y_n + y'_n(x - x_n)$$

y_{n+1} é o ponto onde a reta intercepta a ordenada levantada em

$$x = x_{n+1} = x_n + h$$

$$\text{então } y_{n+1} = y_n + y'_n (x_{n+1} - x_n) = y_n + h f(x_n, y_n)$$

Exemplo :

Dado $\begin{cases} y' = \frac{y-1}{x} + \frac{(y-1)^2}{x} \\ y(1) = 2 \end{cases}$ Calcular $y(x)$ para $x = 1(0.05)2$ pelo método de Euler. Utilizar nos cálculos 5 algarismos significativos

$$y_{i+1} = y_i + 0.05 \left[\frac{y_i-1}{x_i} + \frac{(y_i-1)^2}{x_i} \right]$$

$$x_0 = 1 \quad y_0 = 2 \quad y_1 = 2 + 0.05 \left[\frac{2-1}{1} + \frac{(2-1)^2}{1} \right] = 2.1000$$

$$x_1 = 1.05 \quad y_1 = 2.1000$$

$$y_2 = 2.1 + 0.05 \left[\frac{2.1-1}{1.05} + \frac{(2.1-1)^2}{1.05} \right] = 2.2100$$

$$x_2 = 1.10 \quad y_2 = 2.2100$$

$$x_3 = 1.15 \quad y_3 = 2.3316$$

$$x_4 = 1.20 \quad y_4 = 2.4666$$

⋮

$$x_{20} = 2.00 \quad y_{20} = \dots$$

$$E_{\text{TRLOC}} \leq \frac{(0.05)^2}{2} * \max_{x \in [1;2]} |y''(x)| ; E_{\text{TRLOC}} \approx 0.0025$$

O método de Euler é um dos mais antigos métodos numéricos para solução de equações diferenciais. Ele concorda com a série de Taylor até os termos em h .

Seu erro de truncamento é portanto relativamente grande. É um método frequentemente instável, isto é, um pequeno erro de arredondamento amplia-se a medida que o valor de x aumenta.

7.4.2 MÉTODOS DE RUNGE KUTTA

Como já foi visto, o método de Euler não é muito usado em problemas práticos, em virtude de requerer uma amplitude de intervalo muito pequena a fim de conseguir uma exatidão razoável. O método de Taylor de ordem mais elevada é inaceitável, devido à necessidade do cálculo das derivadas totais de elevadas ordens de $y(x)$. Os métodos de Runge Kutta procuram obter uma maior exatidão e ao mesmo tempo evitam o cálculo das derivadas de $y(x)$

calculando a função $f(x, y)$ em pontos selecionados de cada sub-intervalo.

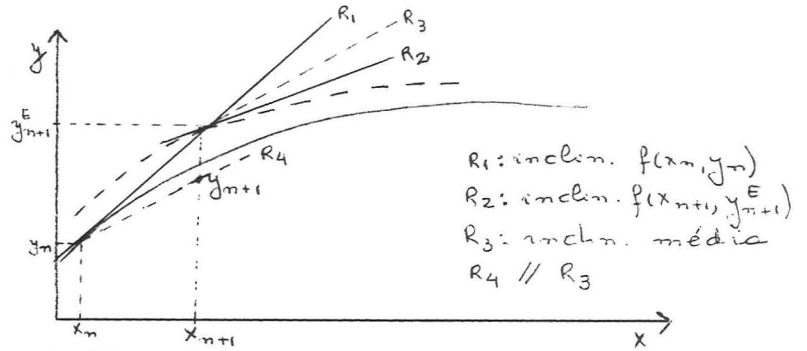
7.4.2 -1 FÓRMULA DE RUNGE KUTTA DE 2ª ORDEM (EULER APERFEIÇADO)

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

$$y(x_0) = y_0$$

$$y(x) = F(x)$$

$$F'(x) = f(x, F(x))$$



$$y_{n+1} = y_n + \frac{k_1 + k_2}{2}, \text{ onde}$$

$$k_1 = h f(x_n, y_n) \quad \text{e} \quad k_2 = h f(x_n + h, y_n + k_1)$$

O erro de truncamento local desta fórmula é da ordem de h^3 , e é bastante difícil calculá-lo devido a sua complexidade.

$$y_{n+1} - y(x_{n+1}) = \frac{h^3}{12} \left[f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2 f_{yy} - 2f_x f_y - 2ff_y^2 \right] + O(h^4)$$

Exemplo: Calcular pela fórmula de Runge Kutta de 2ª ordem o valor de y , sendo dado $y' = x - y$ e $y(0) = 2$ para $x = 0(0.2)1$

n	x_n	y_n	k_1	k_2	
0	0	2.0000	-0.4000	-0.2800	$f(x_n, y_n) = x_n - y_n$
1	0.2	1.6600	-0.2920	-0.1936	$k_1 = h f(x_n, y_n)$
2	0.4	1.4172	-0.20344	-0.12276	$k_2 = h f(x_n + h, y_n + k_1)$
3	0.6	1.2541	-0.13082	-0.06466	$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$
4	0.8	1.1564	-0.07128	-0.017024	$k_1 = 0.2(0 - 2) = -0.4$
5	1.0	1.1122			$k_2 = 0.2(0.2 - 1.6) = -0.28$

$$y_1 = 2 + \left[\frac{-0.4 - 0.28}{2} \right] = 1.66$$

$$k_1 = 0.2(0.2 - 1.66) = -0.2920$$

$$k_2 = 0.2(0.4 - 1.368) = -0.1936$$

$$y_2 = 1.66 + \frac{(-0.292 - 0.1936)}{2} = 1.4172$$

$$k_1 = 0.2(0.4 - 1.172) = -0.20344$$

$$k_2 = 0.2(0.6 - 1.2138) = -0.12276$$

$$y_3 = 1.4172 + \left[\frac{-0.20344 - 0.12276}{2} \right] = 1.2541$$

Este método concorda com a série de Taylor até os termos de ordem h^2

7.4.2 - 2 MÉTODO DE RUNGE KUTTA DE 4ª ORDEM

Seja $\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$ gerar aproximações y_n para $y(x_0 + nh)$

sendo h fixo e $n = 0, 1, 2, \dots$ usando a fórmula

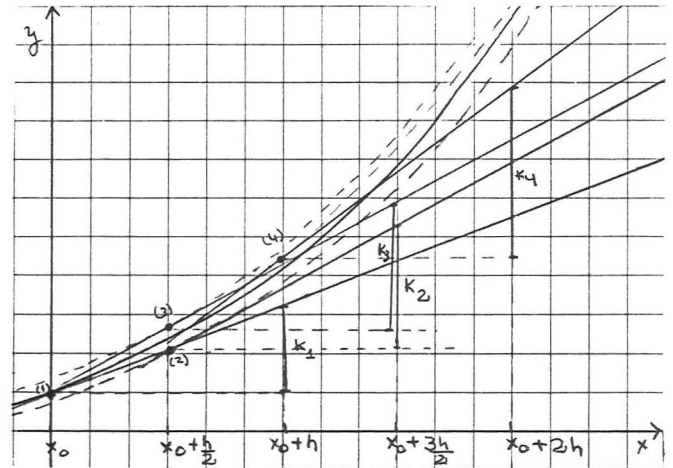
$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \text{ onde :}$$

$$k_1 = h f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = h f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}\right) \text{ e}$$

$$k_4 = h f(x_n + h, y_n + k_3)$$



O erro de truncamento local deste método é da ordem de $O(h^5)$.

Por Taylor teríamos:

$$y_{n+1} = y_n + h y'_n + \frac{h^2}{2} y''_n + \frac{h^3}{6} y'''_n + \frac{h^4}{24} y^{IV}_n + O(h^5)$$

Ao invés de avaliarmos as derivadas até 4ª ordem, precisamos avaliar a função f em quatro pontos para cada valor de x .

Exemplo: Calcular a solução da equação diferencial $\begin{cases} y' = x - y^2 \\ y(0) = 2 \end{cases}$

por Runge Kutta de 4ª ordem com $x = 0(0.1) 0.5$

x_n	y_n
0	2.000000
0.1	1.671145
0.2	1.445037
0.3	1.284750
0.4	1.16980
0.5	1.087855

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$k_1 = h f(x_0, y_0)$$

$$k_2 = h f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_1}{2}\right)$$

$$k_3 = h f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{k_2}{2}\right)$$

$$k_4 = h f(x_0 + h, y_0 + k_3)$$

$$x_0 = 0 \quad y_0 = 2 \quad h = 0.1$$

$$k_1 = 0.1 (0 - 2^2) = -0.4$$

$$k_2 = 0.1 \left[0.05 - \left(2 + \frac{-0.4}{2} \right)^2 \right] = 0.1 (0.05 - 3.24) = -0.319$$

$$k_3 = 0.1 \left[0.05 - \left(2 + \frac{-0.319}{2} \right)^2 \right] = 0.1 (0.05 - 3.387440) = -0.333744$$

$$k_4 = 0.1 (0.1 - 1.666256^2) = -0.267641$$

$$y_1 \approx y(0.1)$$

$$y_1 = 2 + \frac{1}{6} \left[-0.4 + 2*(-0.319 - 0.333744) - 0.267641 \right] = 1.671145$$

$$x_1 = 0.1 \quad y_1 = 1.671145 \quad y_2 = ?$$

$$k_1 = 0.1 (0.1 - 1.671145^2) = -0.269273$$

$$k_2 = 0.1 \left(0.15 - \left(1.671145 - \frac{0.269273}{2} \right)^2 \right) = -0.221086$$

$$k_3 = 0.1 \left(0.15 - \left(1.671145 - \frac{0.221086}{2} \right)^2 \right) = -0.228548$$

$$k_4 = 0.1 \left(0.2 - \left(1.671145 - 0.228548 \right)^2 \right) = -0.188109$$

$$y_2 = 1.671145 + \frac{1}{6} \left(-0.269273 + 2(-0.221086 - 0.228548) - 0.188109 \right)$$

$$y_2 = 1.445037$$

7.4.3 COMENTÁRIO SOBRE OS MÉTODOS DE RUNGE KUTTA

1º - Os métodos de Runge Kutta possuem a importante vantagem de serem auto inicializados.

2º - Eles não precisam do cálculo de derivadas de ordem elevadas, mas requerem o cálculo da função $f(x, y)$ em vários pontos.

3º - Sendo capazes de começar por si próprios, eles permitem uma troca fácil no tamanho do intervalo.

4º - Eles não fornecem nenhuma informação facilmente alcançável sobre o erro de truncamento

7.5 COMO ESTIMAR A EXATIDÃO DE UMA APROXIMAÇÃO JÁ CALCULADA?

Sejam x_1, x_2, \dots, x_n pontos obtidos com um passo h , supondo h constante. Calcula-se os valores y_1, y_2, \dots, y_n usando numa 1ª vez: passo h e numa 2ª vez: passo $h/2$.

A exatidão dos y_i calculados será feita comparando-os com o valor y_i^* (calculado com $h/2$) e isso porque se não fossem cometidos erros de arredondamento as aproximações y_i, y_i^*, \dots tenderiam ao valor exato ao $h \rightarrow 0$

Exemplo: Dado $y' = y$ com $y(0) = 1$. Calcule y para $x = 1$

sub-int divisão	EULER		EULER MODIF.		RUNGE KUTTA 4 ^ª ORDEM	
	EULER	ERRO	MODIF.	ERRO	4 ^ª ORDEM	ERRO
1	2.000000	-0.718280	2.500000	-0.218280	2.70833	-0.009947
2	2.250000	-0.468280	2.640625	-0.077655	2.717346	-0.000934
4	2.441406	-0.276874	2.694856	-0.023425	2.718209	-0.000071
8	2.565784	-0.152496	2.711840	-0.006440	2.718276	-0.000005
16	2.637927	-0.080354	2.716590	-0.001690	2.718277	-0.000003
32	2.676983	-0.041297	2.717843	-0.000437	2.718273	-0.000008
64	2.697332	-0.020948	2.718158	-0.000123	2.718264	-0.000016
128	2.707707	-0.010573	2.718225	-0.000056	2.718250	-0.000030
256	2.712931	-0.005349	2.718212	-0.000068	2.718217	-0.000063
512	2.715500	-0.002780	2.718148	-0.000133	2.718148	-0.000132
1024	2.716705	-0.001575	2.718027	-0.000253	2.718027	-0.000253
2048	2.717119	-0.001162	2.717766	-0.000514	2.717766	-0.000514
4096	2.716937	-0.001343	2.717260	-0.001020	2.717260	-0.001020
8192	2.716088	-0.002192	2.716253	-0.002027	2.716253	-0.002027
16384	2.714149	-0.004131	2.714230	-0.004051	2.714230	-0.004051

ESTES VALORES FORAM EXTRAÍDOS DE: INTRODUÇÃO AOS MÉTODOS NUMÉRICOS DE PETER A. STARK.

7.6 FÓRMULAS DE PASSO MÚLTIPLO

O método de Taylor de ordem K e os métodos de Runge Kutta requerem informações a respeito da solução num único ponto $x = x_n$, a partir do qual o método avança para obter y no ponto seguinte $x = x_{n+1}$. Os métodos de passo múltiplo fazem uso da informação sobre a solução em mais de um ponto.

Vamos supor que já obtivemos aproximações para y' e y em um número de pontos igualmente espaçados, digamos x_0, x_1, \dots, x_n . Uma classe de métodos de passo múltiplo é baseada no princípio da integração numérica. Caso integrarmos a equação diferencial $y' = f(x, y)$ de x_n a x_{n+1} teremos:

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} y' dx = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx \longrightarrow y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

A função $f(x, y(x))$ é aproximada por um polinômio que interpola nos $(n+1)$ pontos $x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_{n-m}$.

x_i	f_i
x_{n-m}	f_{n-m}
$x_{n-(m-1)}$	$f_{n-(m-1)}$
\vdots	\vdots
x_{n-2}	f_{n-2}
x_{n-1}	f_{n-1}
x_n	f_n

7.6.1 FÓRMULA DE ADAMS BASHFORTH

A função $f(x, y)$ é aproximada por um polinômio interpolador de Newton do 3º grau com diferenças descendentes.

A aproximação para y_{n+1} é dada por:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + \frac{h}{24} \left[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3} \right] \quad [1]$$

A fórmula [1] é conhecida como fórmula de Adams-Bashforth.

Como o polinômio obtido foi de 3º grau, pode-se conseguir uma estimativa para o erro de truncamento do método. Tomando o erro do polinômio de Newton descendente do 3º grau e integrando-o obtemos:

$$E_{AB} = \frac{251}{720} h^5 y^{(v)}(\xi)$$

Exemplo: Dada $\begin{cases} y' = -y^2 \\ y(1) = 1 \end{cases}$ Calcular uma aproximação para a solução para $x = 1.0 (0.1) 1.5$ pelo método de Adams-Bashforth.

Para aplicar A.B. precisa-se de 4 valores anteriores da $f(x, y)$. Estes valores podem ser calculados por Runge-Kutta de 4ª ordem. Como a solução particular da equação diferencial dada é $y = \frac{1}{x}$, vamos calcular estes 4 valores pelo valor exato da solução.

n	x_n	y_n	$y'_n = f_n = -y_n^2$	$y(x_n) = 1/x_n$
0	1.0	1.000000	-1.000000	1.000000
1	1.1	0.909091	-0.826446	0.909091
2	1.2	0.833333	-0.694444	0.833333
3	1.3	0.769231	-0.591716	0.769231
4	1.4	0.714436	-0.510419	0.714286
5	1.5	0.666860	-0.444703	0.666667
		sol. A. B.		sol. exata

$$x_0 = 1 \qquad y_0 = 1$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24} \left[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3} \right]$$

$$y_4 = 0.769231 + \frac{0.1}{24} \left[55(-0.591716) - 59(-0.694444) + 37(-0.826446) + \right. \\ \left. + -9(-1) \right] = 0.714436$$

$$y_5 = y_4 + \frac{0.1}{24} \left[55f_4 - 59f_3 + 37f_2 - 9f_1 \right] = 0.666860$$

$$E_{AB} = h^5 y^{(5)}(\xi) \frac{251}{720}; \text{ como } y = \frac{1}{x} \text{ então } y^{(5)}(x) = \frac{5!}{x^6} \leq 120 \\ \text{para } x \in [1; 1.5]$$

$$\Rightarrow E_{AB} \leq \frac{251}{720} (120) 10^{-5} \qquad E_{AB} \approx 0.0004$$

A maior desvantagem das fórmulas de passo múltiplo reside no fato delas não serem auto iniciáveis. Portanto, no método de Adams-Bashforth devemos obter quatro valores sucessivos de $f(x, y)$ em pontos igualmente espaçados, antes de que esta fórmula possa ser usada. Estes valores iniciais devem ser obtidos por algum método independente. Deve-se calculá-los por Runge-Kutta de 4ª ordem para que estes valores tenham uma boa exatidão.

Embora a ordem do erro de truncamento no método de A.B. seja igual a do método de Runge-Kutta, o coeficiente do erro é maior no método de Adams Bashforth, por isso o método de Runge Kutta é geralmente mais exato.

Por outro lado, a fórmula de Adams Bashforth requer somente um cálculo de derivada por intervalo ao invés de quatro cálculos por intervalo exigidos por Runge Kutta, sendo portanto bem mais rápido.

7.6.2 FÓRMULA DE ADAMS MOULTON

Fórmulas corretoras de ordem mais elevada podem ser obtidas usando-se um polinômio que interpole em $x_{n+1}, x_n, \dots, x_{n-m}$ para um inteiro $m > 0$.

E a fórmula de Adams- Moulton é dada por:

$$y_{n+1}^{(1)} = y_n + \frac{h}{24} \left[9f_{n+1}^{(0)} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2} \right] \quad [2]$$

$$\text{com erro } E_{AM} = - \frac{19}{720} h^5 y^{(v)}(\xi) = y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(1)}$$

Esta fórmula de Adams Moulton é de 4ª ordem, é uma fórmula corretora do tipo fechado, uma vez que $f_{n+1} = f(x_{n+1}, y_{n+1})$ envolve a quantidade desconhecida y_{n+1} . Pode ser demonstrado que a iteração baseada em [2] convergirá desde que h seja suficientemente pequeno a ponto de satisfazer a condição

$$\frac{9h}{24} \left| \frac{\partial f}{\partial y} \right| < 1$$

7.6.3 TÉCNICA DE PREDIÇÃO E CORREÇÃO

Para calcular a solução de uma equação diferencial: $y' = f(x, y)$, considera-se y_{n+1} (valor de y calculado por Adams-Bashforth) como uma primeira aproximação de $y(x_{n+1})$.

$y_{n+1}^{(0)}$: valor de predição e usa-se esta primeira aproximação para recalculer $y(x_{n+1})$ que será o valor de correção.

ALGORITMO: Para a EDO $y' = f(x, y)$ com h fixo e $x_n = x_0 + nh$ e dados $(y_0, f_0), (y_1, f_1), (y_2, f_2), (y_3, f_3)$ dados, para cada $n = 3, 4, 5, \dots$

1- Calcular $y_{n+1}^{(0)}$, usando a fórmula:

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + \frac{h}{24} \left[55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3} \right]$$

2- Calcular $f_{n+1}^{(0)} = f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(0)})$

3- Calcular:

$$y_{n+1}^{(k)} = y_n + \frac{h}{24} \left[9f(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k-1)}) + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2} \right] \quad k = 1, 2, \dots$$

4- Iterar para k até que: $\left| \frac{y_{n+1}^{(k)} - y_{n+1}^{(k-1)}}{y_{n+1}^{(k)}} \right| < \varepsilon$ (valor pré determinado)

Na prática, a fórmula corretora deve ser usada somente uma vez, portanto se o erro não for o desejado deve-se diminuir o h .

ERRO DA FÓRMULA CORRETORA

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(1)} \approx - \frac{1}{14} \left[y_{n+1}^{(1)} - y_{n+1}^{(0)} \right]$$

7.6.4 FÓRMULAS DE MILNE

Existem várias fórmulas de predição-correção, dentre elas as fórmulas devido a Milne são frequentemente usadas.

$$y_{n+1}^{(0)} = y_{n-3} + \frac{4h}{3} \left[2f_n - f_{n-1} + 2f_{n-2} \right] \quad E = \frac{28}{90} h^5 y^{(v)}(\xi_1)$$

$$y_{n+1}^{(1)} = y_{n-1} + \frac{h}{3} \left[f_{n+1}^{(0)} + 4f_n + f_{n-1} \right] \quad E = \frac{-1}{90} h^5 y^{(v)}(\xi_2)$$

A fórmula corretora está baseada na fórmula de Simpson para a integração numérica.

$$E = \frac{-1}{29} \left[y_{n+1}^{(1)} - y_{n+1}^{(0)} \right]$$

Exemplo: A equação diferencial Ordinária $y' + (xy - 1)^{1/2} = 0$ com $y(1) = 2$ tem a solução em $x = 1$ (0.02) 1.06 dada pela tabela abaixo. Calcular $y(1.08)$ e $y(1.1)$ por predição-correção (Adams Bashforth e Moulton)

n	x_n	y_n	$f(x_n, y_n)$	$y_n^{(0)}$	$f^{(0)}(x_n, y_n)$
0	1	2.0000000	-1.0000		
1	1.02	1.97990199	-1.009702941		
2	1.04	1.95961577	-1.018823047		
3	1.06	1.93915284	-1.027376275		
4	1.08	$y_4^{(1)} = 1.91852440$	$f_4^{(1)} = -1.035377396$	1.91852439	-1.035377391

$$y' = -(xy - 1)^{1/2}$$

$$x_4 = 1.08$$

$$y_4^0 = y_3 + \frac{0.02}{24} \left[55f_3 - 59f_2 + 37f_1 - 9f_0 \right]$$

$$y_4^0 = 1.93915284 + \frac{0.02}{24} \left[55(-1.027376275) - 59(-1.018823047) + 37(-1.009702941) - 9(-1) \right]$$

$$y_4^0 = 1.91852439 \quad f_4^{(0)} = -1.035377391$$

$$y_4^{(1)} = 1.93915284 + \frac{0.02}{24} \left[9f_4^0 + 19f_3 - 5f_2 + f_1 \right]$$

$$= 1.93915284 + \frac{0.02}{24} \left[9(-1.03537739) + 19(-1.027376275) - 5(-1.018823047) + (-1.009702941) \right] = 1.91852440$$

$$x_5 = 1.10$$

$$y_5^{(0)} = 1.91852440 + \frac{0.02}{24} \left[55f_4^{(1)} - 59f_3 + 37f_2 - 9f_1 \right]$$

$$f_4^{(1)} = -1.035377396$$

$$y_5^{(0)} = 1.91852440 + \frac{0.02}{24} [\dots\dots\dots] = 1.897741326$$

$$f_5^{(0)} = -1.042840093$$

$$y_5^{(1)} = 1.91852440 + \frac{0.02}{24} [9(-1.042840093) + 19f_4 - 5f_3 + f_2] =$$

$$y_5^{(1)} = 1.897741334$$

7.7 SISTEMAS DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DE 1ª ORDEM COM C.I.

Seja dado o sistema $\begin{cases} y' = f(x, y, z) & y(x_0) = y_0 \\ z' = g(x, y, z) & z(x_0) = z_0 \end{cases}$ [3] a

solução será $y = F(x)$

$$z = G(x) \text{ com } F'(x) = f(x, F(x), G(x)), F(x_0) = y_0 \\ G'(x) = g(x, F(x), G(x)), G(x_0) = z_0$$

Para obtermos sua solução é possível aplicar qualquer um dos métodos já estudados, simplesmente usando-os em cada equação sequencialmente até que uma etapa esteja completada em todas as equações, aí repete-se para a próxima etapa, e assim por diante.

7.7.1 FÓRMULA DE EULER

Para resolver [3] usa-se as fórmulas:

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n, z_n) \quad e \\ z_{n+1} = z_n + h g(x_n, y_n, z_n) \quad \text{com } E \approx O(h^2)$$

Exemplo: Dado o sistema

$$\begin{cases} y' = xz + 1 & \text{com } y(0) = 0 \\ z' = -xy & z(0) = 1 \end{cases}$$

Calcular uma aproximação para a solução para $x = 0 (0.1) 1$

$$y'_n = f(x_n, y_n, z_n) = x_n \cdot z_n + 1$$

$$z'_n = g(x_n, y_n, z_n) = -x_n \cdot y_n$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n, z_n) = y_n + h(x_n \cdot z_n + 1)$$

$$z_{n+1} = z_n + hg(x_n, y_n, z_n) = z_n + h(-x_n \cdot y_n)$$

x_n	y_n	$y'_n = f_n$	z_n	$z'_n = g_n$
0	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000
0.1	0.1000	1.1000	1.0000	-0.0100
0.2	0.2100	1.1998	0.9990	-0.0420
0.3	0.3300	1.2984	0.9948	-0.0990
0.4	0.4598	1.3940	0.9849	-0.1839
0.5	0.5992	1.4833	0.9665	-0.2996
0.6	0.7475	1.5619	0.9365	-0.4485
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
1.0	1.3993	----	0.6322	----

$$x_0 = 0 \quad y_0 = 0 \quad z_0 = 1 \quad h = 0.1$$

$$x_1 = 0.1 \quad y_1 = 0 + 0.1(0 \times 1 + 1) = 0.1$$

$$z_1 = 1 + 0.1(-0 \times 0) = 1$$

$$x_2 = 0.2 \quad y_2 = 0.1 + 0.1(0.1 \times 1 + 1) = 0.21$$

$$z_2 = 1 + 0.1(-0.1 \times 0.1) = 0.999$$

$$x_3 = 0.3 \quad y_3 = 0.21 + 0.1(0.2 \times 0.999 + 1) = 0.3300$$

$$\vdots \quad z_3 = 0.999 + 0.1(-0.2 \times 0.21) = 0.9948$$

7.7.2 FÓRMULA DE RUNGE-KUTTA DE 2ª ORDEM

Seja o sistema de E.D.O.

$$\begin{cases} y' = f(x, y, z) & \text{com } y(x_0) = y_0 \\ z' = g(x, y, z) & \text{com } z(x_0) = z_0 \end{cases}$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{k_1 + k_2}{2}$$

$$k_1 = h f(x_n, y_n, z_n)$$

$$k_2 = h f(x_n + h, y_n + k_1, z_n + l_1)$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{l_1 + l_2}{2}$$

$$l_1 = h g(x_n, y_n, z_n)$$

$$l_2 = h g(x_n + h, y_n + k_1, z_n + l_1)$$

7.7.3 FÓRMULA DE RUNGE KUTTA DE 4ª ORDEM

$$y_{n+1} = y_n + 1/6 (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

$$z_{n+1} = z_n + (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) / 6$$

onde $k_1 = h f(x_n, y_n, z_n)$

$$k_2 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}, z_n + \frac{l_1}{2})$$

$$k_3 = h f(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}, z_n + \frac{l_2}{2})$$

$$k_4 = h f(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3)$$

$$l_1 = h g(x_n, y_n, z_n)$$

$$l_2 = h g(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}, z_n + \frac{l_1}{2})$$

$$l_3 = h g(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}, z_n + \frac{l_2}{2})$$

$$l_4 = h g(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3)$$

Exemplo: Seja o sistema $\begin{cases} y' = xz + 1 & y(0) = 0 \\ z' = -xy & z(0) = 1 \end{cases}$

calcular $y(x) = ?$ para $x = 0 (0.1) 1$

Aplicar o método de Runge Kutta de 4ª ordem.

$$x_0 = 0 \quad y_0 = 0 \quad z_0 = 1 \quad h = 0.1 \quad x_1 = 0.1$$

$$y_1 = y_0 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) / 6 \quad z_1 = z_0 + (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) / 6$$

$$k_1 = 0.1(0 \times 1 + 1) = 0.1 \quad l_1 = 0.1(-0 \times 0) = 0$$

$$k_2 = 0.1(0.05 \times 1 + 1) = 0.105 \quad l_2 = 0.1(-0.05(0 + \frac{0.1}{2})) = -0.00025$$

$$k_3 = 0.1(0.05(1 - \frac{0.00025}{2}) + 1) = 0.105 \quad l_3 = 0.1(-0.05(0 + \frac{0.105}{2})) = -0.0002625$$

$$k_4 = 0.1(0.1(1 - 0.0002625) + 1) = 0.110 \quad l_4 = 0.1(-0.1(0 + 0.105)) = -0.00105$$

$$y_1 = 0 + (0.1 + (0.105 + 0.105)2 + 0.11) / 6 = 0.105$$

$$z_1 = 1 + (0 + 2(-0.00025 - 0.0002625) - 0.00105) / 6 = 0.9996542$$

n	x_n	y_n	z_n
0	0	0	1
1	0.1	0.1049993542	0.9996541677
2	0.2	0.2199774172	0.9971334626
3	0.3	0.3448229592	0.9899897562
4	0.4	0.4792324684	0.9754839794
5	0.5	0.6225936653	0.9506053723
⋮	⋮	⋮	⋮
10	1.0	1.4138098380	0.5536776231

k_1	k_2	k_3	k_4
0.1	0.105	0.104999375	0.109997375
0.1099965417	0.1149869376	0.1149768128	0.1199443355
0.1199426693	0.1248733422	0.1248408526	0.1297021933
0.1296996927	0.1344686094	0.1343987169	0.1390227101
⋮	⋮	⋮	⋮

l_1	l_2	l_3	l_4
0	-0.00025	-0.0002625	-1.04999375E-03
-1.049993542E-03	-2.399964377E-03	-2.437392345E-03	-4.39952334E-03
-4.399548344E-03	-6.998718798E-03	-7.060352208E-03	-1.034454809E-02
-1.034468878E-02	-1.43385482 E-02	-1.442200424E-02	-1.916886704E-02
⋮	⋮	⋮	⋮

7.7.4 FÓRMULAS DE PREDIÇÃO-CORREÇÃO: ADAMS-BASHFORTH E ADAMS-MOULTON

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + \frac{h}{24} \left[55f(x_n, y_n, z_n) - 59f(x_{n-1}, y_{n-1}, z_{n-1}) + \right. \\ \left. + 37f(x_{n-2}, y_{n-2}, z_{n-2}) - 9f(x_{n-3}, y_{n-3}, z_{n-3}) \right]$$

$$z_{n+1}^{(0)} = z_n + \frac{h}{24} \left[55g(x_n, y_n, z_n) - 59g(x_{n-1}, y_{n-1}, z_{n-1}) + \right. \\ \left. + 37g(x_{n-2}, y_{n-2}, z_{n-2}) - 9g(x_{n-3}, y_{n-3}, z_{n-3}) \right]$$

$$y_{n+1}^{(1)} = y_n + \frac{h}{24} \left[9f(x_{n+1}, y_{n+1}^0, z_{n+1}^0) + 19f(x_n, y_n, z_n) - \right. \\ \left. - 5f(x_{n-1}, y_{n-1}, z_{n-1}) + f(x_{n-2}, y_{n-2}, z_{n-2}) \right]$$

$$z_{n+1}^{(1)} = z_n + \frac{h}{24} \left[9g(x_{n+1}, y_{n+1}^0, z_{n+1}^0) + 19g(x_n, y_n, z_n) - \right. \\ \left. - 5g(x_{n-1}, y_{n-1}, z_{n-1}) + g(x_{n-2}, y_{n-2}, z_{n-2}) \right]$$

7.8 SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DE 2ª ORDEM COM VALORES INICIAIS

Seja $y'' = f(x, y, y')$ com $y(x_0) = y_0$
 $y'(x_0) = y'_0$

fazemos a mudança de variável $\begin{cases} y' = u \\ u' = f(x, y, u) \end{cases}$ com $y(x_0) = y_0$
 $u(x_0) = y'_0$

7.8.1 FÓRMULA DE RUNGE-KUTTA DE 4ª ORDEM

$$y_{n+1} = y_n + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) / 6 \text{ e}$$

$$u_{n+1} = u_n + (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) / 6, \text{ onde}$$

$$k_1 = h u_n \qquad l_1 = h f(x_n, y_n, u_n)$$

$$k_2 = h (u_n + l_1/2) \qquad l_2 = h f(x_n + h/2, y_n + k_1/2, u_n + l_1/2)$$

$$k_3 = h (u_n + l_2/2) \qquad l_3 = h f(x_n + h/2, y_n + k_2/2, u_n + l_2/2)$$

$$k_4 = h (u_n + l_3) \qquad l_4 = h f(x_n + h, y_n + k_3, u_n + l_3)$$

7.8.2 FÓRMULAS DE ADAMS-BASHFORTH E ADAMS-MOULTON (ADAPTADAS AO SISTEMA)

$$\begin{cases} y' = u \\ u' = f(x, y, u) \end{cases}, \quad y(x_0) = y_0 \\ u(x_0) = y'_0$$

$$y_{n+1}^{(0)} = y_n + \frac{h}{24} \left[55u_n - 59u_{n-1} + 37u_{n-2} - 9u_{n-3} \right]$$

$$u_{n+1}^{(0)} = u_n + \frac{h}{24} \left[55f(x_n, y_n, u_n) - 59f(x_{n-1}, y_{n-1}, u_{n-1}) + \right. \\ \left. + 37f(x_{n-2}, y_{n-2}, u_{n-2}) - 9f(x_{n-3}, y_{n-3}, u_{n-3}) \right]$$

$$y_{n+1}^{(1)} = y_n + \frac{h}{24} \left[9u_{n+1}^{(0)} + 19u_n - 5u_{n-1} + u_{n-2} \right]$$

$$u_{n+1}^{(1)} = u_n + \frac{h}{24} \left[9f_{n+1}^{(0)} + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2} \right]$$

Erro da fórmula Corretora

$$y(x_{n+1}) - y_{n+1}^{(1)} = \frac{-19}{270} \left(y_{n+1}^{(1)} - y_{n+1}^{(0)} \right) \approx \frac{-1}{14} \left(y_{n+1}^{(1)} - y_{n+1}^{(0)} \right)$$

7.9 EXEMPLOS

1 -Dada a equação diferencial:
$$\begin{cases} y'' + 2y^2 = e^x \\ y(0) = 0 \\ y'(0) = 0 \end{cases}$$

Determinar $y(0.5)$ por Runge-Kutta de 4ª ordem

$$y'' = e^x - 2y^2, \text{ fazendo } y' = u \Rightarrow u' = y''$$

$$\begin{cases} y' = u \\ u' = e^x - 2y^2 \\ y(0) = 0 \\ u(0) = 0 \end{cases}$$

$$x_0 = 0 \quad y_0 = 0 \quad u_0 = 0 \quad h = 0.5$$

$$y(0.5) \approx y_1 = y_0 + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) / 6$$

$$k_1 = 0.5 * u_0 = 0.5 * 0 = 0$$

$$k_2 = 0.5 * (u_0 + 1/2) = 0.5 (0 + 0.5/2) = 0.125$$

$$k_3 = 0.5 * (u_0 + 1/2) = 0.5 (0 + 0.642013 / 2) = 0.160503$$

$$k_4 = 0.5 * (u_0 + 1/2) = 0.5 (0.638106) = 0.319053$$

$$l_1 = 0.5 * (e^0 - 2(0)^2) = 0.5$$

$$l_2 = 0.5 * (e^{0.25} - 2(0 + 0/2)^2) = 0.642013$$

$$l_3 = 0.5 * (e^{0.25} - 2(0 + 0.125/2)^2) = 0.638106$$

$$l_4 = 0.5 * (e^{0.5} - 2(0 + 0.160503)^2) = 0.798599$$

$$y_1 = 0 + (0 + 2(0.125 + 0.160503) + 0.319053) / 6 = 0.148343 \sim y(0.5)$$

2- Dada a EDO $y'' + 10y = 0$ com $y(0) = 1$ e $y'(0) = 1$.

a) Calcular uma aproximação para $y(0.1)$, $y(0.2)$ e $y(0.3)$

b) Calcular a exatidão das aproximações para $x = 0.1$; 0.2 e 0.3

c) Compare os resultados obtidos com os da solução exata

cálculo com $h=0.1$

METODO DE R.KUTTA-4 P/EDO ORDEN 2

X0= 0
Y0= 1
YL0= 1
h= 0.1

K	L
0.1	-1
0.05	-1.05
0.0475	-1.025
-0.0025	-1.0475

X= 0.1	U
1.04875	-3.291666666E-02

K	L
-3.291666666E-03	-1.04875
-5.572516667E-02	-1.047104167
-5.564887502E-02	-1.020885417
-1.053802004E-01	-0.993103125

X= 0.2	U
9.935126736E-01	-1.062555382

K	L
-1.062555382E-01	-9.935126736E-01
-1.559311719E-01	-9.403049045E-01
-1.532747834E-01	-9.155470077E-01
-0.187810247	-8.402378902E-01

X= 0.3	U
0.839766391	-1.986824473

cálculo com $h=0.05$

METODO DE R.KUTTA-4 P/EDO ORDEN 2

X0= 0
Y0= 1
YL0= 1
h= 0.05

K	L
0.05	-0.5
0.0375	-0.5125
0.0371875	-0.509375
0.02453125	-0.51859375

X= 0.05	U
1.037312708	0.489609375

K	L
2.440046075E-02	-0.518658054
1.15139974E-02	-0.524728971
1.136039440E-02	-5.215373535E-01
-1.596398925E-03	-0.524339351

X= 0.1	U
1.048756717	-3.299576733E-02

K	L
-1.649708367E-03	-5.243783585E-01
-1.475924733E-02	-5.239659115E-01
-1.474893616E-02	-5.206885465E-01
-2.768421569E-02	-5.170038905E-01

X= 0.15

1.034031655	-5.547276282E-01
-------------	------------------

K	L
-2.773888141E-02	-5.170158275E-01
-4.06642771E-02	-0.510081107
-4.049090909E-02	-0.506849758
-5.30013693E-02	-0.496770373

X= 0.2

9.935098845E-01	-1.06271895
-----------------	-------------

K	L
-5.31359475E-02	-4.967549423E-01
-6.555482105E-02	-4.83470554E-01
-6.52227214E-02	-0.480366237
-7.715425935E-02	-4.641435816E-01

X= 0.25

9.282023359E-01	-1.544147768
-----------------	--------------

K	L
-7.72073884E-02	-0.464101168
-8.08099176E-02	-4.44793209E-01
-8.83273714E-02	-4.418986886E-01
-9.930232285E-02	-4.199374823E-01

X= 0.3

8.397382877E-01	-1.987053546
-----------------	--------------

A solução exata é: $y = e^{ax} (c_1 \cos bx + c_2 \sin bx)$

3- Dada a EDO $y'' = (1 - y^2)y'$ - y com $y(0) = 0.5$ e $y'(0) = 0$
Calcular y para $x = 0(0.1)0.5$

x_i	y_i	u_i
0	0.5	0
0.1	0.4974383575	-0.05183964991
0.2	0.4895137602	-1.072281994
0.3	0.4758798195	-0.1660039404
0.4	0.4562035859	-0.2280618466
0.5	0.4301593991	-0.293361781

4- Dada a EDO $y'' - 9y' - 10y = 0$ Calcular $y(1)$ por Runge Kutta de 4ª ordem, iniciando com $h = 0.2$, $h = 0.1$, $h = 0.05$, ... até obter a melhor exatidão possível.

h	$y_1 \sim y(1)$
0.2	3.678852381E-01
0.1	3.678797745E-01
0.05	3.678794611E-01
0.025	3.678794424E-01
0.0125	3.678794414E-01
0.00625	3.678794413E-01
0.003125	3.678794412E-01
0.0015625	3.678784415E-01
0.00078125	3.67879442E-01

Solução Exata:

$$y(1) = 0.3678794412$$

Observe que a exatidão diminuiu.

7.10 SOLUÇÃO NUMÉRICA DE EQUAÇÕES DIFERENCIAIS DE 2ª ORDEM COM VALORES NO CONTORNO

Seja a equação diferencial:

$F(x, y, y', y'') = 0$ com $y(x_0) = y_0$ e $y(x_N) = y_N$
onde é dado o valor da solução para dois pontos diferentes do intervalo.

7.10.1 MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS (PARA EQUAÇÕES DE 2ª ORDEM LINEAR)

Consideremos uma equação diferencial linear de 2ª ordem com condição no contorno, isto é, são especificadas condições nos pontos finais de um intervalo $[a ; b]$. Dividamos o intervalo $[a ; b]$ em N partes iguais de amplitude h .

Estabelecendo $x_0 = a$ e $x_N = b$ definimos:

$x_n = x_0 + nh$ $n = 1, 2, \dots, N-1$, como sendo os pontos interiores do intervalo. Os correspondentes valores de y nestes pontos serão: $y_n = y(x_0 + nh)$ $n = 1, 2, \dots, N-1$

Cada derivada que aparece na equação, é aproximada por diferenças finitas. Diferenças centrais são usualmente preferidas em virtude de conduzirem a uma maior exatidão no cálculo da derivada.

Seja a equação diferencial linear de 2ª ordem dada na forma:

$$y''(x) + f(x) y'(x) + g(x) y(x) = q(x) \quad [1]$$

com as condições $y(x_0) = y_0$ e $y(x_N) = y_N$

$$h = \frac{x_N - x_0}{N} \quad \text{e} \quad x_n = x_0 + nh, \quad n = 0, 1, 2, \dots, N$$

$$y'(x_n) \approx y'_n = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} \quad y'(x_n) = y'_n + O(h^2)$$

$$y''(x_n) \approx y''_n = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} \quad y''(x_n) = y''_n + O(h^2)$$

Substituindo as derivadas em [1] pelas expressões obtidas por derivação numérica, obtem-se:

$$[2] \quad \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} + f(x_n) * \frac{(y_{n+1} - y_{n-1})}{2h} + g(x_n) * y_n = q(x_n)$$

$$n = 1, 2, \dots, N-1$$

uma vez que y_0 e y_N são dados pela condição de contorno, a equação [2] é um sistema linear de $N-1$ equações com $N-1$ incógnitas: y_n ($n = 1, 2, \dots, N-1$). Este sistema pode ser

resolvido por qualquer método de resolução de sistemas lineares.

A matriz do sistema é uma matriz tridiagonal e de ordem $(N-1)$.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & & & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & \\ & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \\ & \dots & \dots & a_{nn-1} & a_{nn} \end{pmatrix}$$

7.10.2 EXEMPLOS

1) Calcular a solução da equação diferencial com valores no contorno, em quatro pontos internos do intervalo $[0 ; 1]$

$$\begin{cases} y'' + xy' + y = 2x \\ y(0) = 1 \\ y(1) = 0 \\ N = 5 \end{cases} \quad \begin{aligned} h &= \frac{1-0}{5} = 0.2 \\ x_n &= x_0 + nh, \quad n = 1, \dots, 4 \\ &\text{(pontos interiores do intervalo [0 ; 1])} \end{aligned}$$

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{(0.2)^2} + x_n \left(\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2(0.2)} \right) + y_n = 2x_n$$

$$\frac{1}{0.04} \left(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} \right) + \frac{x_n}{0.4} \left(y_{n+1} - y_{n-1} \right) + y_n = 2x_n$$

$$y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} + 0.1x_n \left(y_{n+1} - y_{n-1} \right) + 0.04y_n = 0.08x_n$$

$$(1 + 0.1x_n) y_{n+1} - 1.96y_n + (1 - 0.1x_n) y_{n-1} = 0.08x_n, \quad n = 1, 2, 3, 4$$

$$\begin{aligned} n=1 \quad & (1 + 0.1(0.2))y_2 - 1.96y_1 + (1 - 0.1(0.2))y_0 = 0.08(0.2) \\ & 1.02y_2 - 1.96y_1 = -0.964 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n=2 \quad & (1 + 0.1(0.4))y_3 - 1.96y_2 + (1 - 0.1(0.4))y_1 = 0.08(0.4) \\ & 1.04y_3 - 1.96y_2 + 0.96y_1 = 0.032 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n=3 \quad & (1 + 0.1(0.6))y_4 - 1.96y_3 + (1 - 0.1(0.6))y_2 = 0.08(0.6) \\ & 1.06y_4 - 1.96y_3 + 0.94y_2 = 0.048 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} n=4 \quad & (1 + 0.1(0.8))y_5 - 1.96y_4 + (1 - 0.1(0.8))y_3 = 0.08(0.8) \\ & 1.08y_5 - 1.96y_4 + 0.92y_3 = 0.064 \end{aligned}$$

como $y_5 = 0$ então $-1.96 y_4 + 0.92 y_3 = 0.064$

$$\begin{cases} -1.96y_1 + 1.02y_2 = -0.964 \\ 0.96y_1 - 1.96y_2 + 1.04y_3 = 0.032 \\ 0.94y_2 - 1.96y_3 + 1.06y_4 = 0.048 \\ 0.92y_3 - 1.96y_4 = 0.064 \end{cases}$$

$$2) \begin{cases} xy'' + (1 - x^2) y' + x^2 = 0 & y_0 = 1 & x_0 = 1 \\ y(1) = 1 & & \\ y(5) = -1 & y_4 = -1 & x_4 = 5 \\ h = 1 & & \end{cases}$$

$$x_n \left(\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{(1)^2} \right) + (1 - x_n^2) * \left(\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2(1)} \right) + x_n^2 = 0$$

$$x_n \left(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1} \right) + 0.5 (1 - x_n^2) (y_{n+1} - y_{n-1}) + x_n^2 = 0$$

$$(x_n + 0.5 - 0.5 x_n^2) y_{n+1} - 2x_n y_n + (x_n - 0.5 + 0.5 x_n^2) y_{n-1} + x_n^2 = 0$$

$$n = 1 \quad x_1 = 2 \quad 0.5y_2 - 4y_1 = -7.5$$

$$n = 2 \quad x_2 = 3 \quad -1.0y_3 - 6y_2 + 7y_1 = -9$$

$$n = 3 \quad x_3 = 4 \quad -8y_3 + 11.5y_2 = -19.5$$

$$\begin{cases} -4y_1 + 0.5y_2 = -7.5 \\ 7y_1 - 6y_2 - y_3 = -9.0 \\ 11.5y_2 - 8y_3 = -19.5 \end{cases}$$

7.11 EXERCÍCIOS

1- Seja a equação diferencial: $5 \frac{dy}{dx} + 2y = 10$ com $y(0) = 0$

Calcular uma aproximação para $y(x)$ para $x = 0(0.1)10$, pelo método de Euler e por Runge Kutta de 4ª ordem.

i	x_i	Euler	Runge kutta 4- ordem y_i	solução exata $y(x_i)$	
0	0.0	0.00000	0.00000	0.00000	Solução Exata: $y = 5(1 - e^{(-2/5)x})$
10	1.0	1.67584	1.64839974	1.64840	
20	2.0	2.78999	2.753355140	2.75336	
30	3.0	3.53071	3.494028900	3.49403	
40	4.0	4.02317	3.990517374	3.99052	
50	5.0	4.35057	4.323323554	4.32332	
60	6.0	4.56824	4.5464102096	4.54641	
70	7.0	4.71295	4.6959496681	4.69595	
80	8.0	4.80916	4.7961889657	4.79619	
90	9.0	4.87312	4.8633813769	4.86338	
100	10.0	4.91565	4.9084217975	4.90842	

Exercício extraído de: Minicomputadores e Minicalculadoras
Seu uso em Ciências e Engenharia

Autores : DALCÍDIO M. CLAUDIO e JOSE A. R. SANTOS

2- Seja a equação
$$\begin{cases} 5x y' + y^2 - 2 = 0 \\ y(4) = 1 \end{cases}$$

Calcular por Runge Kutta de 4ª ordem uma aproximação para a solução $y(x)$, para $x = 4(0.1) 4.5$

x_i	y_i
4	1.0000
4.1	1.004914
4.2	1.009663
4.3	1.014256
4.4	1.018701
4.5	1.023006

3- $y'' - \frac{x}{y} - y' = 0$ com $y(1) = 1$ e $y'(1) = 0$

Calcular $y(x)$ para $x = 1(0.2) 2$. Aplicar Runge Kutta de 4ª ordem e para $y(2.0)$ aplicar predição e correção.

i	x_i	y_i	y'_i	$y''_i = f$
0	1	1.000	0.0000	1.00000
1	1.2	1.022727	0.241064	1.414398
2	1.4	1.102057	0.566273	1.836625
3	1.6	1.254820	0.975099	2.250182
4	1.8	1.497605	1.466654	2.668575
5	2.0	1.846919 = $y_5^{(0)}$	2.043624	3.126509
		1.847187 = $y_5^{(1)}$	2.045214	

BIBLIOGRAFIA

- [1] - Claudio, Dalcídio M. e Marins, Jussara M. - Cálculo Numérico Computacional (Teoria e Prática)
Editora Atlas. São Paulo, 1989.
- [2] - Ruggiero, Márcia A. G. e Lopes, Vera Lúcia R. - Cálculo Numérico, Aspectos Teóricos e Computacionais.
Editora McGraw-Hill - São Paulo, 1988.
- [3] - Barroso, Leônidas et alli - Cálculo Numérico (com aplicações) 2ª edição.
Editora Harbra Ltda. São Paulo, 1987.
- [4] - Conte, S. D. and C. de Boor - Elementary Numerical Analysis an Algorithmic Approach.
Third edition - McGraw-Hill Book Company- 1980.
- [5] - Dorn, William S. e McCracken, Daniel D. - Cálculo Numérico com Estudos de Casos em Fortran IV
Editora Campus - Rio de Janeiro - 1978
- [6] - Ralston, Anthony. A First course in Numerical Analysis.
New York, McGraw-Hill, 1965.
- [7] - Stark, Peter A. - Introdução aos Métodos Numéricos
- [8] - Claudio, Dalcídio M. e Santos, José Abel R. dos -
Microcomputadores e Minicalculadoras seu uso em ciências e engenharia.
Editora Edgard Blücher Ltda. São Paulo, 1983.
- [9] - Conte, S. D. - Elementos de Análise Numérica.
Editora Globo, Porto Alegre, 1971.

Publicações do Instituto de Matemática da UFRGS
Cadernos de Matemática e Estatística

Série B: Trabalho de Apoio Didático

1. Elsa Mundstock - Curso Básico Sobre Wordstar 3.45 - MAR/89.
2. Jaime B. Ripoll - Introdução ao Cálculo Diferencial Via Funções de Uma Variável Real - OUT/89.
3. Edmund R. Puczyłowski - Dimension of Modular Lattices - JUN/90
4. Marcos Sebastiani - Geometrias Não Euclidianas - JUL/90.
5. Sandra R. C. Pizzatto - Cálculo Numérico - MAR/91.

Universidade Federal do Rio Grande Sul
Reitor: Professor Tuiskon Dick

Instituto de Matemática
Diretor: Professor Aron Taitelbaum
Núcleo de Atividades Extra Curriculares
Coordenador: Professora Jandyra G. Fachel
Secretária: Rosaura Monteiro Pinheiro

Os Cadernos de Matemática e Estatística publicam as seguintes séries:

- Série A: Trabalho de Pesquisa
- Série B: Trabalho de Apoio Didático
- Série C: Colóquio de Matemática SBM/UFRGS
- Série D: Trabalho de Graduação
- Série E: Dissertações de Mestrado
- Série F: Trabalho de Divulgação
- Série G: Textos para Discussão

Toda correspondência com solicitação de números publicados e demais informações deverá ser enviada para:

NAEC - Núcleo de Atividades Extra Curriculares
Instituto de Matemática - UFRGS
Av. Bento Gonçalves, 9500
91.500 - Agronomia - POA/RS
Telefone: 36.11.59 ou 36.17.85 Ramal: 252