

Universidade Federal de Campina Grande - UFCG
Centro de Ciências e Tecnologia Agroalimentar - CCTA
Unidade Acadêmica de Ciências e Tecnologia Ambiental-UACTA

Cálculo Numérico

por

PAULO XAVIER PAMPLONA

UFCG-CCTA
2019

Conteúdo

1	Teoria dos Erros	5
1.1	Introdução	5
1.2	Algarismos Significativos	6
1.3	Erros de Arredondamento	7
1.4	Erros de Truncamento	8
1.5	Fontes de erros	10
1.6	Propagação de erros	11
1.7	Notação Científica e Ordem de Grandeza de uma Medida	11
2	Métodos Iterativos na Resolução de Equações Não Lineares	13
2.1	Introdução	13
2.2	O Método da Bissecção	16
2.3	Iteração Linear ou Método do Ponto Fixo	25
2.4	O Método de Newton-Raphson ou Método da Tangente	28
2.5	Método das Secantes	32
2.6	Método Regula Falsi ou Método da Falsa Posição	37
2.7	Aproximação Linear	41
2.8	Sistemas de Equações Não Lineares	42
2.9	Exercícios	42
3	Métodos Exatos e Iterativos para Resolução de Sistemas Lineares	43
3.1	Introdução	43
3.2	Métodos Exatos	44
3.2.1	Solução de Sistemas Lineares Triangulares	44
3.2.2	Método de Eliminação de Gauss	46
3.2.3	Método de Eliminação de Gauss com Pivotamento Parcial	48
3.2.4	Método de Jordan	51
3.2.5	Decomposição LU	52
3.3	Métodos Iterativos	57
3.3.1	Método de Gauss-Jacobi	57
3.3.2	Método de Gauss-Seidel	62

4	Ajuste de Curvas pelo Método de Interpolação Polinomial	67
4.1	Introdução	67
4.2	Polinômio de Interpolação	68
4.3	Fórmula de Lagrange	69
4.4	Interpolação Linear	72
4.5	Interpolação Quadrática	73
4.6	Fórmula de Lagrange para Pontos Igualmente Espaçados	75
4.7	Fórmula de Newton	77
4.8	Fórmula de Newton-Gregory	78
4.9	Exercícios	79
5	Ajuste de Curvas pelo Método dos Mínimos Quadrados	80
5.1	Introdução	80
5.2	Caso Discreto	81
5.2.1	Aproximação Polinomial	82
5.2.2	Aproximação Trigonométrica	90
5.2.3	Aproximação Exponencial	92
5.3	Caso Contínuo	94
5.3.1	Aproximação Polinomial	95
5.3.2	Aproximação Trigonométrica	98
5.4	Exercícios	99
6	Integração Numérica	103
6.1	Introdução	103
6.2	Método dos Trapézios	103
6.3	Métodos de Simpson	106
6.4	Fórmulas Precisas de Derivação	110
6.5	Extrapolação de Richardson	110
6.6	Derivadas de Dados com Espaçamentos Desiguais	110
6.7	Exercícios	110
7	Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias	111
7.1	Introdução	111
7.2	Método de Euler	112
7.3	Método de Taylor	116
7.4	Métodos de Runge-Kutta	120
7.5	Sistemas de Equações Diferenciais	127
7.6	Problemas de Valor Inicial	130
7.7	Equações Parabólicas	130
7.8	Equações Elípticas	130
7.9	Exercícios	130

8	Aplicações Computacionais em Ambiente Matlab	132
8.1	Introdução ao Matlab	132
8.2	Resoluções de problemas usando o Matlab	134
8.3	Algoritmos no Matlab	140
8.4	O uso do Matlab na resolução de modelos matemáticos	149

Capítulo 1

Teoria dos Erros

1.1 Introdução

Dado um problema, para se chegar a um resultado numérico é necessário percorrer uma sequência pré-estabelecida de passos isolados. Em cada um destes passos pode existir uma parcela de erro que se acumula ao montante final do processo. Estes erros surgem, basicamente, em duas fases: Na fase da modelagem (aqueles inerentes à formulação matemática do problema relacionados à aproximação da situação física e a erros nos dados) e na fase da resolução (aqueles que aparecem no processo de solução numérica). Os erros na fase da resolução são comumente os erros de truncamento e de arredondamento.

Na fase da modelagem, são necessárias várias simplificações do mundo físico para que se tenha um modelo matemático com o qual se possa trabalhar.

Considere por exemplo, o problema de determinar a altura de um edifício e que para isso disponha apenas de uma bolinha de metal e um cronômetro. Para tal problema, usa-se a equação do movimento de um corpo sujeito a uma aceleração constante:

$$s = s_0 + v_0t + \frac{1}{2}at^2,$$

onde s é a distância final, s_0 é a distância inicial, v_0 é a velocidade inicial, a é a aceleração e t é o tempo.

Para solucionar esse problema, uma pessoa sobe ao topo do edifício, solta a bolinha do ponto mais alto do edifício e mede o tempo que a bolinha gasta para tocar o solo. Supondo que esse tempo seja de 3 segundos, considera-se que a altura inicial é $s_0 = 0 \text{ m}$, a velocidade inicial é $v_0 = 0 \text{ m/s}$, a aceleração é $a = 10 \text{ m/s}^2$. Dai, tem-se que a altura do prédio é

$$s = 0 + 0.3 + \frac{1}{2}(10)(3)^2 = 44,1 \text{ m}.$$

Este resultado é confiável? Provavelmente não, pois no modelo matemático não foram consideradas outras forças, como a resistência do ar, a velocidade do vento, etc. Há um outro fator que tem muita influência: a precisão da leitura do cronômetro, pois para uma pequena

variação no tempo medido existe uma grande variação na altura do edifício. Por exemplo, se considerarmos que o tempo de queda é de $t = 3,5$ s, teremos uma altura $s = 60$ m. Ou seja, uma variação de 36%.

Na fase da resolução, os erros de truncamento surgem, em geral, pela substituição de um processo infinito (somadas ou integrais) ou infinitesimal (diferenciação) por outro finito. Já os erros de arredondamento surgem do fato que as operações aritméticas quase nunca podem ser efetuadas com precisão completa, pois a maioria dos números têm representações decimais infinitas que devem ser arredondadas. Mesmo se os dados de um problema podem ser expressos exatamente por representações decimais finitas, a divisão pode introduzir números que devem ser arredondados e a multiplicação pode produzir mais dígitos do que podem ser mantidos.

1.2 Algarismos Significativos

A medida de uma grandeza física é sempre aproximada, por mais experiente que seja o operador e por mais preciso que seja o aparelho utilizado. Esta limitação reflete-se no número de algarismos que se pode utilizar para representar uma medida. O procedimento padrão é a utilização de algarismos que se tem certeza de estarem corretos, admitindo-se geralmente o uso de apenas um algarismo duvidoso. Esses algarismos são denominados de **algarismos significativos** e a sua quantidade estará diretamente relacionada à precisão da medida.

O erro estimado de uma medida deve conter somente o seu algarismo mais significativo. Os algarismos menos significativos devem ser simplesmente desprezados ou no máximo utilizados para efetuar arredondamentos. Por exemplo, suponha que se faça um cálculo da média x e do erro ϵ de medidas de um comprimento de uma peça com a escala dada e que o resultado encontrado foi $x = 9,5423$ cm e $\epsilon = 0,432$ cm. Como o erro da medida encontra-se nos décimos de centímetros, não tem sentido apresentá-lo com algarismos que se referem aos centésimos e milésimos de centímetros. Nesse caso, a maneira correta de apresentar o erro seria simplesmente $\epsilon = 0,4$ cm. No caso da média, o algarismo 9 é exato, no entanto, o algarismo 5 é duvidoso pois este é afetado pelo erro e, conseqüentemente, os algarismos 4, 2 e 3 também são duvidosos. Esses algarismos, resultante de um cálculo, podem ser utilizados para fazer o devido arredondamento. Com esse procedimento, a forma recomendada de apresentar a medida referida, é $9,5 \pm 0,4$ cm.

Durante um processo de medida experimental, é importante ficar atento às seguintes regras associadas aos algarismos significativos:

1. *Zeros à esquerda do primeiro algarismo significativo diferente de zero não são algarismos significativos.*

Por exemplo, tanto $25,3$ cm como $0,253$ m possuem a mesma medida e 3 algarismos significativos. Similarmente, pode-se dizer que $3 = 0,3 \times 10 = 0,03 \times 10^2$ todos

possuem 1 algarismo significativo, $25 = 2,5 \times 10 = 0,25 \times 10^2$ todos tem 2 algarismos significativos, e $0,000531 = 0,531 \times 10^{-3} = 5,31 \times 10^{-4}$ todos tem 3 algarismos significativos.

2. *Zeros à direita de um algarismo significativo são também significativos.*

Por exemplo, $25,3 \text{ cm}$ e $25,30 \text{ cm}$ são medidas diferentes. A primeira tem 3 algarismos significativos e a segunda, de maior precisão, tem 4 algarismos significativos.

3. *Zero situado entre algarismos significativos é também significativo.*

Por exemplo, $25,3 \text{ cm}$ tem 3 algarismos significativos e $2,053 \text{ m}$ tem 4 algarismos significativos.

4. *Número sem vírgula possui o último algarismo à direita, diferente de zero, como o menos significativo.*

Por exemplo, 240 m tem o algarismo 4 como o menos significativo; 20000 cm tem o algarismo 2 como o menos significativo; 35 m tem o algarismo 5 como o menos significativo.

5. *Número com vírgula possui o último algarismo à direita, inclusive zero, como o menos significativo.*

Por exemplo, $24,230 \text{ m}$ tem o algarismo 0 como o menos significativo; $24,231 \text{ m}$ tem o algarismo 1 como o menos significativo.

6. *O primeiro algarismo menos significativo ou duvidoso é o primeiro algarismo após a unidade utilizada*

1.3 Erros de Arredondamento

Para que uma medida seja apresentada com um número de algarismos significativos apropriado, muitas vezes é necessário se fazer um **arredondamento** do resultado. Os tipos de arredondamento mais utilizados são os chamados **arredondamento por corte** e **arredondamento para o número mais próximo**.

No arredondamento por corte as casas em excesso são simplesmente abandonadas. Por exemplo, para escrever o número $0,23487$ com três casas decimais, os dois últimos algarismos são desprezados e escreve-se $0,234$.

No arredondamento para o número mais próximo, trabalha-se com n algarismos significativos analisando o algarismo de ordem $n + 1$ e arredondando o algarismo de ordem n . Esse arredondamento pode ser feito de diversas maneiras, porém há uma norma nacional (ABNT NBR 5891:1977) e uma internacional (ISO 31-0:1992). O arredondamento, de acordo com essas normas, segue as seguintes regras:

1. O último algarismo de um número deve sempre ser mantido caso o algarismo descartado seja inferior a cinco. Por exemplo, arredondamos o número 135,1024 escrevendo 135,102.
2. O último algarismo de um número deve sempre ser acrescido de uma unidade caso o algarismo descartado seja superior a cinco. Por exemplo, arredondamos o número 135,1026 escrevendo 135,103.
3. No caso do algarismo descartado ser igual a cinco, se após o cinco descartado existirem quaisquer outros algarismos diferentes de zero, o último algarismo retido será acrescido de uma unidade. Por exemplo, arredondamos o número 135,0503 escrevendo 135,1.
4. No caso do algarismo descartado ser igual a cinco, se após o cinco descartado só existirem zeros ou não existir outro algarismo, o último algarismo retido será acrescido de uma unidade somente se for ímpar. Por exemplo, arredondamos 4,2500 ou 4,25 escrevendo 4,2. Arredondamos 4,3500 ou 4,35 escrevendo 4,4.

Os dois tipos de arredondamento podem dar o mesmo número ou números diferentes, após o arredondamento. Por exemplo, se desejarmos escrever o número $x = 0,33333\dots$ com 4 algarismos significativos, teremos $x = 0,3333$ tanto pelo arredondamento por corte, como pelo arredondamento para o número mais próximo. No entanto, se $x = 0,77777\dots$ o arredondamento por corte nos dará $x = 0,7777$ e o arredondamento para o número mais próximo nos dará $x = 0,7778$, que são diferentes.

A diferença entre o valor arredondado \bar{x} e o valor exato de um número x pode ser medida pelo erro absoluto ou pelo relativo. O erro absoluto, indicado por E_A , é dado por

$$E_A = |\bar{x} - x|$$

e o erro relativo, indicado por E_R , é

$$E_R = \frac{|\bar{x} - x|}{|\bar{x}|} \quad \text{ou} \quad E_R = \frac{|\bar{x} - x|}{|x|},$$

Por exemplo, usando arredondamento para o número mais próximo para escrever $x = 0,38945376$ com 6 algarismos significativos, teremos $\bar{x} = 0,389454$. Neste caso, teremos os erros

$$E_A = |0,389454 - 0,38945376| = 0,00000024 \quad \text{e} \quad E_R = \frac{0,00000024}{0,38945376} = 6,1625 \times 10^{-7}.$$

1.4 Erros de Truncamento

Os erros de truncamento ou de discretização surgem, em geral, pela substituição de um processo infinito (somas ou integrais) ou infinitesimal (diferenciação) por outro finito ou quando se substitui um processo contínuo por um discreto.

Inúmeros exemplos de erros de truncamento surgem quando usamos as aproximações de Taylor. Essas aproximações são baseadas no seguinte teorema:

Teorema 1.4.1 (Aproximação de Taylor) *Seja f uma função com derivadas contínuas até ordem n num intervalo I que contém x_0 e cuja derivada de ordem $n + 1$ existe em I . Se x é um número diferente de x_0 em I , então existe um número c entre x_0 e x tal que*

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x),$$

onde

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k \quad e \quad R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1}.$$

O termo $P_n(x)$ é dito o polinômio de Taylor de f em x_0 e $R_n(x)$ é denominado Resto de Taylor. Se $x_0 = 0$, $P_n(x)$ é dito o polinômio de Maclaurin de f e $R_n(x)$ é denominado Resto de Maclaurin.

O grande interesse prático deste resultado é que, mediante certas condições, uma função pode ser escrita como a soma de um polinômio com um resto. Escolhendo valores de x e x_0 tais que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R_n(x) = 0,$$

podemos escrever

$$f(x) \approx P_n(x).$$

Logo, a partir de um valor de n suficientemente grande, a função dada pode ser aproximada pelo seu polinômio de Taylor. Assim, qualquer operação a efetuar sobre a função (derivação, integração, etc.) poderá ser feita sobre o polinômio.

Nessa aproximação cometemos um erro de truncamento que satisfaz

$$Erro < |R_n(x)|.$$

Polinômios de Taylor podem ser usados para aproximar valores de funções tais como, $\ln(x)$, e^x , $\text{sen}(x)$ e $\cos(x)$. Por exemplo, a função $\text{sen}(x)$ é dada por

$$\text{sen}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!}.$$

Para obter o valor de $\text{sen}(x)$ por esta série é preciso efetuar o cálculo de várias parcelas e depois parar, ou seja, truncar a série, cometendo então um erro causado pelo abandono das parcelas que não foram somadas. Substituindo $\text{sen}(x)$ pelo polinômio

$$P(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!},$$

é possível calcular o valor numérico de $P(x)$ e usá-lo como aproximação de $\text{sen}(x)$. O erro de truncamento neste caso é definido por

$$E = \text{sen}(x) - P(x)$$

e este erro deve tender a zero à medida que n cresce indefinidamente.

Outros erros de truncamento surgem quando usamos as seguintes aproximações

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \text{ou} \quad e \approx \left(1 + \frac{1}{N}\right)^N.$$

1.5 Fontes de erros

Para a resolução de modelos matemáticos, é necessário o uso de instrumentos de cálculo que realizam aproximações, uma vez que limitam a quantidade de algarismos nos resultados, implicando em erros que devem ser conhecidos, a fim de se ter precisão. Por exemplo, Nos computadores e calculadoras, os dados de entrada são expressos na base dez e neles convertidos para a base binária com a qual se efetuam os cálculos. Estes são novamente convertidos para a base dez para transmissão ao usuário. Essas conversões são outras fontes de erros.

Existem alguns procedimentos inexatos que podem levar a situações de erro, como a soma de grandezas bastante desproporcionais e a subtração de grandezas muito próximas em condições de precisão limitada (precisão definida n). Por exemplo, considere os números $x = 3,91543782$ e $y = 3,91542534$. Arredondando para seis casas decimais, teremos $\bar{x} = 3,915438$ e $\bar{y} = 3,915425$. A diferença entre os números x e y e a diferença entre os números arredondados \bar{x} e \bar{y} são

$$d_{xy} = x - y = 0,00001248 \quad \text{e} \quad d_{\bar{x}\bar{y}} = \bar{x} - \bar{y} = 0,000013.$$

O erro absoluto que se comete na diferença entre os números arredondados é

$$E_A = |d_{xy} - d_{\bar{x}\bar{y}}| = 0,5200 \times 10^{-6}$$

e o erro relativo é

$$E_R = \frac{|d_{xy} - d_{\bar{x}\bar{y}}|}{|d_{xy}|} = 4,16666... \times 10^{-2} \approx 0,0417 \quad \text{ou} \quad 4,17\%.$$

Quando se obtém um resultado de uma expressão aritmética avaliada em uma máquina e se conhece o seu valor exato, é fácil calcular o erro relativo ou o absoluto. Por exemplo, o valor exato da soma

$$S = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3} \quad \text{é} \quad S = 1,$$

mas calculando essa soma com cinco dígitos de precisão, teremos

$$S = 0,33333 + 0,33333 + 0,33333 = 0,99999.$$

Neste caso, verifica-se que o erro de arredondamento, se calculado por qualquer uma das duas maneiras indicadas acima, é igual a $1 - 0,99999 = 0,00001$.

Na prática, quando se obtém um resultado de uma expressão aritmética avaliada em uma máquina e não se conhece o seu valor exato, torna-se complicado calcular o erro relativo ou o absoluto. Por isto, trabalha-se com os dígitos significativos exatos (DIGSE) de um determinado número.

Dado um número \bar{x} aproximado de um valor exato x , diz-se que esta aproximação tem pelo menos n dígitos significativos exatos se

$$|E_R| \leq \frac{1}{2 \times 10^n}.$$

Uma outra maneira de calcular o DIGSE de uma aproximação é usando a fórmula

$$DIGSE(\bar{x}, x) = -\left[0, 3 + \log\left(\mu + \frac{|\bar{x} - x|}{|x|}\right)\right],$$

onde μ é a unidade de arredondamento da máquina. Se o arredondamento for para o número mais próximo, $\mu = \frac{1}{2 \times 10^{1-n}}$, (n é o número de algarismos da mantissa da máquina).

Na prática, geralmente não se conhece o valor exato de x para que as comparações sejam feitas. Convencionando que $x = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k$, pode-se modificar a fórmula acima pondo

$$DIGSE(x_k, x_{k+1}) = -\left[0, 3 + \log\left(\mu + \frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_k|}\right)\right],$$

que fornece o número de dígitos significativos de x_{k+1} em relação a x_k .

Dois conceitos relacionados à qualidade dos resultados obtidos computacionalmente são precisão e exatidão. A precisão de uma máquina digital é definida como o número de dígitos da mantissa desta máquina e exatidão é uma medida da perfeição do resultado. Sendo assim, a precisão é algo claro, não variável de máquina para máquina, mas a exatidão, pelo contrário, depende da precisão da máquina e do método utilizado para obtenção deste resultado.

Por exemplo, para o número irracional $\pi = 3,14159265$, podemos dizer que:

- O número 3,1415926 é mais preciso e mais exato do que o número 3,14159.
- O número 3,1415929 é mais preciso e menos exato do que 3,14159.

1.6 Propagação de erros

Se uma pequena variação nos dados de entrada de um problema levar a uma grande diferença no resultado final, essa operação é mal condicionada (não convergindo para um resultado confiável) e havendo uma grande propagação de erros nessa operação.

Por outro lado, se uma pequena variação nos dados de entrada levar a uma pequena diferença no resultado final, essa operação é bem condicionada (convergindo para o resultado esperado).

1.7 Notação Científica e Ordem de Grandeza de uma Medida

Escrever um número N em notação científica é escrevê-lo como o produto de um número n entre 1 e 10 e uma potência de 10 adequada. Isto é,

$$N = n \times 10^x, \quad 1 < n < 10,$$

para algum x adequado.

A ordem de grandeza de um número é a potência de 10 mais próxima deste número. Para determinar a ordem de grandeza de um número, prosseguimos como se segue:

1 - Coloca-se o número em notação científica $N = n \times 10^x$;

2 - Se $n < 3,16$, então a ordem de grandeza de N será x . Caso contrário, a ordem de grandeza de N será $x + 1$.

Por exemplo, a massa da terra é de 5.980.000.000.000.000.000.000 kg ou $5,98 \times 10^{24} kg$, portanto, possui ordem de grandeza 25, já que $5,98 > 3,16$. O diâmetro do átomo de hidrogênio é de 0,00000000011 m ou $1,1 \times 10^{-10} m$, portanto, possui ordem de grandeza -10, já que $1,1 < 3,16$. O diâmetro do sol é de 1.392.000.000 m ou $1,392 \times 10^9 m$, portanto, possui ordem de grandeza 9, já que $1,392 < 3,16$. A medida de um ser humano possui ordem de grandeza 0.

Capítulo 2

Métodos Iterativos na Resolução de Equações Não Lineares

2.1 Introdução

A modelagem matemática de um problema físico, quase sempre, é dada por uma equação cuja solução deseja-se determinar. Por exemplo, Se quisermos determinar o raio de uma circunferência cuja área é 150 m^2 , basta resolvermos a equação $\pi r^2 - 150 = 0$ e determinar r . Se desejarmos determinar o tempo que um automóvel gastará para partir do repouso até alcançar uma velocidade de 80 m/s e aceleração 8 m/s^2 , basta resolvermos a equação $80 - 8t = 0$ e determinar t .

A solução de uma equação é dita ser uma raiz dessa equação. Em outras palavras, temos o seguinte:

Definição 2.1.1 Dizemos que r é uma raiz (ou zero) da equação $f(x) = 0$ se $f(r) = 0$. Dizemos que r é uma raiz (ou zero) da função f .

Por exemplo, dada a função $f(x) = x^2 - 5x + 6$, temos que $r = 2$ é uma raiz de f , pois $f(2) = 0$. Por outro lado, $r = 4$ não é raiz de f , pois $f(4) = 2 \neq 0$.

Graficamente, a raiz de uma equação $f(x) = 0$ é a abscissa do ponto onde o gráfico de $f(x)$ corta ou tangencia o eixo horizontal.

As raízes de uma função f podem ser fáceis de serem determinadas ou não, dependendo da função f dada. Por exemplo, se f é um polinômio do primeiro grau, isto é, $f(x) = ax + b, a \neq 0$, então a única raiz de f é dada por

$$r = -\frac{b}{a}.$$

Se f é um polinômio do segundo grau, isto é, $f(x) = ax^2 + bx + c, a \neq 0$, então as raízes de f são dadas por

$$r_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad \text{e} \quad r_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Pode-se provar que outra solução alternativa pode ser dada pelas fórmulas

$$r_1 = \frac{2c}{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}} \quad \text{e} \quad r_2 = \frac{2c}{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}.$$

Quando f é um polinômio de grau maior ou igual a três, já não é tão fácil determinar raízes precisas de f . No caso de f ser da forma $f(x) = x^3 + ax^2 + bx + c$, então as raízes de f podem ser dadas por

$$r_1 = A + B - \frac{a}{3}, \quad r_2 = A\alpha + B\beta - \frac{a}{3}, \quad r_3 = A\beta + B\alpha - \frac{a}{3},$$

onde

$$A = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 - \left(\frac{p}{3}\right)^3}}, \quad B = \frac{p}{3A}, \quad p = -\frac{a^2}{3} + b, \quad q = \frac{2a^3}{27} - \frac{ab}{3} + c, \quad \alpha = -\frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}i, \quad \beta = -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2}i.$$

Nem sempre é possível encontrar, analiticamente, as raízes de um polinômio. Neste caso, podemos fazer uso do software Matlab para determinar as raízes desse polinômio. Por exemplo, para determinar as raízes do polinômio

$$p(x) = x^3 - 5x^2 + 9x - 5$$

fazemos no Matlab:

$$p = [1, -5, 9, -5];$$

$$r = \text{roots}(p).$$

No Matlab aparecerá as raízes

$$1, \quad 2 + i \quad 2 - i.$$

Também poderíamos fazer direto:

$$r = \text{roots}([1, -5, 9, -5]).$$

O processo inverso também pode ser feito no Matlab, ou seja, se tivermos as raízes de um polinômio, podemos determinar esse polinômio. Por exemplo, sabendo-se que $-1, 2$ e 1 são as raízes de um polinômio, então podemos determinar esse polinômio fazendo o seguinte procedimento no Matlab:

$$a = \text{poly}([-1, 2, 1]).$$

Neste caso, o Matlab nos dará os números $1, -2, -1$ e 2 que representam os coeficientes do polinômio

$$p(x) = x^3 - 2x^2 - x + 2.$$

Quando f é uma função que envolve funções trigonométricas, exponenciais ou logarítmicas, aí fica bem mais difícil determinar soluções analíticas da equação $f(x) = 0$. Por exemplo, para solucionar as equações

$$x - 4e^{-x} = 0, \quad \ln(x) - x = 0, \quad \sqrt{x} - e^{-x}, \quad x^3 - \text{sen}(x),$$

nem mesmo no Matlab é possível determinar uma solução diretamente. Neste caso, usamos métodos numéricos para encontrar uma solução aproximada da solução exata.

Neste capítulo apresentaremos métodos de resolução de uma equação da forma

$$f(x) = 0. \quad (2.1)$$

Estes métodos permitem determinar, por aproximação, as raízes reais da equação (2.1) para x num intervalo dado. Mais precisamente, desejamos solucionar o seguinte problema:

Sabendo-se que uma função f possui uma raiz real r num intervalo $[a, b]$, determinar uma raiz aproximada de r em $[a, b]$, de modo que o erro cometido nessa aproximação seja o menor possível.

A definição de raiz aproximada é dada a seguir.

Definição 2.1.2 *Se uma função $f(x)$ possui uma raiz r no intervalo $[a, b]$, então uma raiz α é dita aproximada com a precisão ϵ se $|\alpha - r| < \epsilon$, caso a raiz seja conhecida, ou se $\alpha \in [a, b]$ com $b - a < \epsilon$, onde α é qualquer valor em $[a, b]$.*

A justificativa da importância deste problema é que, na maioria dos experimentos, os modelos matemáticos fornecem equações cujas soluções não são exatas e, na maioria das vezes, essas soluções nem são determinadas com precisão. Neste caso, métodos matemáticos são utilizados para a determinação de soluções aproximadas. É claro que na determinação dessas soluções aproximadas, comete-se erros que devem ser levados em consideração.

O procedimento para a determinação das raízes é constituído de duas etapas.

1ª etapa: Isolamento das raízes: determina-se um intervalo (o menor possível) que contenha a raiz.

A escolha do intervalo pode ser feita graficamente ou analiticamente.

Graficamente, pode ser usado qualquer software que possa desenhar o gráfico da função e, a partir do gráfico, pode-se saber qual o intervalo desejado. Por exemplo, usando o software winplot, vemos que o gráfico da função $f(x) = \sqrt{x} - e^{-x}$ é o da Figura 2.1. Nota-se que f possui uma raiz no intervalo $[0, 1]$.

Analiticamente, a determinação do intervalo pode ser feita usando o teorema do valor intermediário. Este teorema nos garante que se f é uma função contínua em $[a, b]$, então existe ao menos um número $x \in [a, b]$ tal que $f(x) = d$, para algum d entre $f(a)$ e $f(b)$. Em particular, se $f(a)$ e $f(b)$ possuem sinais opostos, ou seja, se $f(a)f(b) < 0$, então existe ao menos um $\alpha \in [a, b]$ tal que $f(\alpha) = 0$, ou seja, α é uma solução da equação $f(x) = 0$. Por exemplo, no caso da função $f(x) = \sqrt{x} - e^{-x}$, temos que

$$f(0) = -1 < 0 \quad \text{e} \quad f(1) = 1 - e^{-1} > 0,$$

ou seja, $f(0)$ e $f(1)$ possuem sinais opostos. Isto significa que existe uma raiz de f no intervalo $[0, 1]$ como já tínhamos visto graficamente.

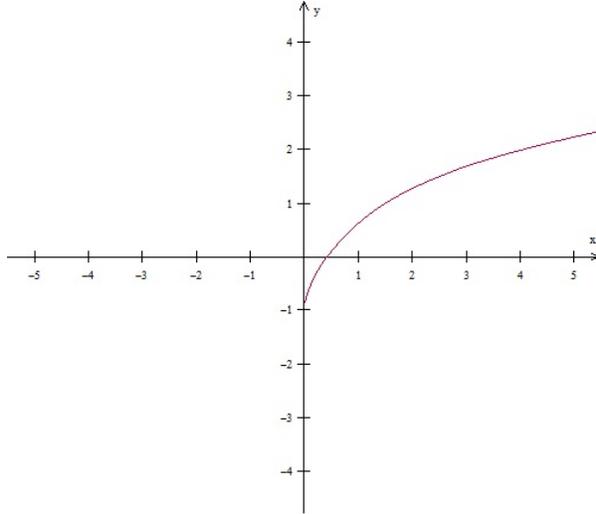


Figura 2.1: Gráfico da função $f(x) = \sqrt{x} - e^{-x}$

Além disso, podemos ver que $f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}} + e^{-x} > 0$ para todo $x > 0$. Portanto f possui uma única raiz em todo seu domínio de definição, localizada no intervalo $[0, 1]$.

2ª etapa: Refinamento das raízes: melhora-se o valor da raiz aproximada refinando até a precisão desejada.

O refinamento da raiz é feito, inicialmente, escolhendo-se uma aproximação inicial no intervalo estabelecido e melhorado a aproximação por processo iterativo (usando a aproximação anterior) até que se obtenha uma raiz dentro da aproximação ou precisão prefixada.

Existem vários métodos de refinamento de raízes onde se torna possível determinar um valor aproximado para uma raiz de uma equação. Em todos esses métodos são feitos procedimentos passo a passo tendo como base o resultado anterior (processos iterativos). O processo deve ser continuado até que se atinja um resultado próximo ao esperado ou cujo erro seja inferior a um valor conhecido. Para isso deve-se determinar um critério de parada.

Esses métodos de aproximações também servem para determinar expressões numéricas não exatas, tais como, $\sqrt{2}$, $\cos(46^\circ)$, $\ln(2)$, e^{-2} e outros. Por exemplo, para determinar $\sqrt{5}$ basta determinar uma solução aproximada para a equação $f(x) = 0$, onde $f(x) = x^2 - 5$.

2.2 O Método da Bisseção

O método da bisseção consiste, inicialmente, em determinar um intervalo $[a, b]$ no qual $f(a)$ e $f(b)$ possuem sinais opostos. A partir daí analisa-se o sinal de f no ponto médio do intervalo $[a, b]$ e guarda apenas a metade do intervalo em que f continua a ter sinais opostos nas extremidades. Repetindo este procedimento, obtém-se uma sucessão de intervalos encaixados, cada vez mais curtos, que contêm uma raiz da função f . Com isso o comprimento do

intervalo obtido converge para zero, quando o número de iterações tende para infinito.

Para diferentes situações concretas, o número de iterações pode ser muito grande ou muito pequeno, por isso é necessário introduzir um critério de parada. Seria conveniente incluir um teste sobre o erro absoluto cometido a cada passo (a cada iteração) e só parar o processo quando o erro for suficientemente pequeno, ou seja, sob uma tolerância aceitável. Uma quantidade que descreve bem o erro absoluto cometido é o comprimento do intervalo corrente $|b - a|$, pois é neste intervalo que a solução exata se encontra. Entretanto, uma quantidade mais precisa que pode ser usada é o erro relativo dado por $\frac{|b - a|}{|b|}$ ou por $\frac{|b - a|}{|a|}$. Para qualquer um dos erros, o processo deve parar quando o erro for menor que a tolerância. O número n de iterações pode ainda ser usado como limite de segurança (só para o algoritmo não entrar num ciclo infinito). Vejamos abaixo como o algoritmo deve ser montado.

Algoritmo para o método da bissecção

Elementos: f função contínua, $a, b \in \mathbb{R}$ com $f(a)$ e $f(b)$ de sinais opostos, $\alpha \in [a, b]$ é a raiz a ser determinada, $\epsilon > 0$ é a tolerância ou precisão pre-fixada, $k = 1, 2, 3, \dots, n$ são as iterações a efetuar.

Passos do algoritmo:

Passo 1: Defina $[a, b]$, como o primeiro intervalo que contém a raiz α ;

Passo 2: Defina a primeira aproximação $x_1 = \frac{a + b}{2}$;

Passo 3: Calcule $f(a)$ e $f(x_1)$ e verifique se $f(a)f(x_1) < 0$ ou $f(a)f(x_1) > 0$;

Passo 4: Defina o intervalo que contém a raiz como sendo $[a, x_1]$ se $f(a)f(x_1) < 0$ ou $[x_1, b]$ se $f(a)f(x_1) > 0$.

Passo 5: Calcule o erro relativo e_r ; Passo 6: Se $e_r > \epsilon$, repita os passos 2-5. Caso contrário, se $e_r \leq \epsilon$, exiba o intervalo que contém a raiz e pare o processo.

Observações:

1. O erro relativo para a raiz em $[a, b]$ é

$$e_r = \frac{|b - a|}{|b|} \quad \text{ou} \quad e_r = \frac{|b - a|}{|a|}.$$

2. Em relação à precisão pré-fixada, normalmente, tomamos $\epsilon = 10^{-n}$, onde n é o número de casas decimais exatas que queremos para a raiz.
3. Outro teste de parada pode ser dado pelo erro absoluto $e_a = |b_{k+1} - a_{k+1}|$. Entretanto, se esses números forem muito grandes e se ϵ for muito pequeno, pode não ser possível calcular a raiz com uma precisão tão exigente.
4. Outro teste de parada bastante usado é o fato de $|f(x_{k+1})| < \epsilon$, onde x_{k+1} é a $k+1$ -ésima aproximação da raiz procurada. Entretanto, nem sempre este teste de parada implica que x_{k+1} esteja próximo da raiz procurada.

5. Quando fazemos um programa computacional, devemos considerar o erro relativo escrito na seguinte forma:

$$\frac{|x_{k+1} - x_k|}{\max\{1, |x_{k+1}|\}} < \epsilon,$$

pois se $|x_{k+1}|$ estiver próximo de zero, o processo não estaciona. Além do teste do erro relativo, devemos colocar um número máximo de iterações, pois se o programa não estiver bem, ou se o método não se aplicar ao problema, o programa entrará em *looping*.

6. O número de iterações necessárias pode ser dada por n , onde

$$n > \frac{\log(b - a) - \log(\epsilon)}{\log(2)}.$$

Exemplo 1 Use o método da bisseção para determinar uma raiz real do polinômio $p(x) = x^3 - x - 1$ com uma tolerância de 0,002.

Solução: O gráfico da função $f(x) = x^3 - x - 1$ está dado na Figura 2.2. Notemos que f possui uma raiz no intervalo $[1, 2]$. Por outro lado,

$$f(1)f(2) = (-1)(5) = -5 < 0,$$

o que justifica a existência da raiz no intervalo $[1, 2]$.

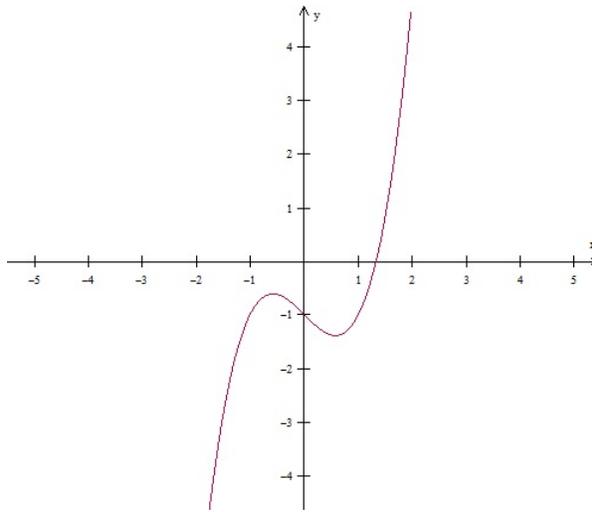


Figura 2.2: Gráfico da função $f(x) = x^3 - x - 1$

Veamos quantas iterações serão necessárias. Temos

$$n > \frac{\log(2 - 1) - \log(0,002)}{\log(2)} = 8,965784285.$$

Logo devemos ter $n = 9$, ou seja, devemos ter 9 iterações.

Seguiremos os passos do algoritmo da biseção para determinar a raiz desejada.

Primeira aproximação.

O intervalo inicial é $[1, 2]$ e a primeira aproximação é

$$x_1 = \frac{1 + 2}{2} = \frac{3}{2} = 1.5.$$

Sendo $f(x_1) = f(1.5) = (1.5)^3 - (1.5) - 1 = 0.875$, segue que

$$f(1)f(1.5) = (-1)(0.875) = -0.875 < 0.$$

Logo o intervalo que contém a raiz é $[1, 1.5]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.5 - 1|}{|1.5|} = 0.3333 > 0.002.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Segunda aproximação.

O segundo intervalo é $[1, 1.5]$ e a segunda aproximação é

$$x_2 = \frac{1 + 1.5}{2} = \frac{2.5}{2} = 1.25.$$

Sendo $f(x_2) = f(1.25) = (1.25)^3 - (1.25) - 1 = -0,296875$, segue que

$$f(1)f(1.25) = (-1)(-0,296875) = 0,296875 > 0.$$

Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.25, 1.5]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.5 - 1.25|}{|1.5|} = 0.1666667 > 0.002.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Terceira aproximação.

O terceiro intervalo é $[1.25, 1.5]$ e a terceira aproximação é

$$x_3 = \frac{1.25 + 1.5}{2} = \frac{2.75}{2} = 1.375.$$

Sendo $f(x_3) = f(1.375) = 0,224609$, segue que

$$f(1.25)f(1.375) = (-0,296875)(0,224609) = -0.0666808 < 0.$$

Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.25, 1.375]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.375 - 1.25|}{|1.375|} = 0.090909091 > 0.002.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Quarta aproximação.

O quarto intervalo é $[1.25, 1.375]$ e a quarta aproximação é

$$x_4 = \frac{1.25 + 1.375}{2} = \frac{2.75}{2} = 1.3125.$$

Sendo $f(x_4) = f(1.3125) = -0,051514$, segue que

$$f(1.25)f(1.3125) = (-0,296875)(-0,051514) = 0.01529321875 > 0.$$

Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.3125, 1.375]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.375 - 1.3125|}{|1.375|} = 0.04545454545 > 0.002.$$

Como o erro ainda é maior que a tolerância, o processo continua.

Quinta aproximação.

O quinto intervalo é $[1.3125, 1.375]$ e a quinta aproximação é

$$x_5 = \frac{1.3125 + 1.375}{2} = 1.34375.$$

Sendo $f(x_5) = f(1.34375) = 0.082611$, segue que

$$f(1.3125)f(1.34375) = (-0.051514)(0.082611) = -0.004255623054 < 0.$$

Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.3125, 1.34375]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.34375 - 1.3125|}{|1.375|} = 0.02325581395 > 0.002.$$

Como o erro ainda é maior que a tolerância, o processo continua.

Sexta aproximação.

O sexto intervalo é $[1.3125, 1.34375]$ e a sexta aproximação é

$$x_6 = \frac{1.3125 + 1.34375}{2} = 1.328125.$$

Sendo $f(x_6) = f(1.328125) = 0.014576$, segue que

$$f(1.3125)f(1.328125) = (-0.051514)(0.014576) = -0.000750868064 < 0.$$

Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.3125, 1.328125]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.328125 - 1.3125|}{|1.3125|} = 0.011904761904762 > 0.002.$$

Como o erro ainda é maior que a tolerância, o processo continua.

Sétima aproximação.

O sétimo intervalo é $[1.3125, 1.328125]$ e a sétima aproximação é

$$x_7 = \frac{1.3125 + 1.328125}{2} = 1.3203125.$$

Sendo $f(x_7) = f(1.3203125) = -0.018700$, segue que

$$f(1.3125)f(1.3203125) = (-0.051514)(-0.018700) = 0.0009633118 > 0.$$

O intervalo que contém a raiz é $[1.3203125, 1.328125]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.328125 - 1.3203125|}{|1.328125|} = 0.0058823529412 > 0.002.$$

Como o erro ainda é maior que a tolerância, o processo continua.

Oitava aproximação.

O oitavo intervalo é $[1.3203125, 1.328125]$ e a oitava aproximação é

$$x_8 = \frac{1.3203125 + 1.328125}{2} = 1.32421875.$$

Sendo $f(x_8) = f(1.32421875) = -0.002128$, segue que $f(1.3203125)f(1.32421875) > 0$.

Portanto, o intervalo que contém a raiz é $[1.32421875, 1.328125]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.328125 - 1.32421875|}{|1.328125|} = 0.00294117647 > 0.002.$$

Como o erro ainda é maior que a tolerância, o processo continua.

Nona aproximação.

O nono intervalo é $[1.32421875, 1.328125]$ e a nona aproximação é

$$x_9 = \frac{1.32421875 + 1.328125}{2} = 1.32617188.$$

Sendo $f(x_9) = f(1.32617188) = 0.00620883$, segue que $f(1.32421875)f(1.32617188) < 0$.

Portanto, o intervalo que contém a raiz é $[1.32421875, 1.32617188]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|1.32617188 - 1.32421875|}{|1.328125|} = 0.00147276 < 0.002.$$

Como o erro agora é menor que a tolerância, o processo deve parar. A raiz procurada encontra-se no intervalo $[1.32421875, 1.32617188]$ e é dada por

$$x_{10} = \frac{1.32421875 + 1.32617188}{2} = 1.32519532.$$

Logo, a raiz aproximada que estamos procurando é $\alpha = 1.32519532$ com um erro inferior a 0.002.

Observação: No exemplo anterior usamos o teste de parada dado pelo erro relativo e o erro relativo encontrado foi $e_r = 0.00147276$. Notemos que

$$f(\alpha) = f(1.32519532) = (1.32519532)^3 - (1.32519532) - 1 = 0.00203668 \approx 0.$$

Fazendo no Matlab:

```
>> r = roots([1, 0, -1, -1])
```

Teremos as soluções

$$1.3247, \quad -0.6624 + 0.5623i, \quad -0.6624 - 0.5623i.$$

A única solução real é $x = 1.3247$. Notemos que

$$|1, 3247 - 1, 32519532| = 0.00049532.$$

Ou seja, a diferença entre a solução encontrada pelo método da bisseção e a encontrada pelo Matlab é de 0.00049532 que é um erro aceitável.

Exemplo 2 Aplique o algoritmo da bisseção para determinar um valor aproximado de $\sqrt{5}$, com uma tolerância de 0.002.

Solução: Definindo a função $f(x) = x^2 - 5$, devemos determinar α tal que $f(\alpha) = 0$. Analiticamente, a equação $x^2 - 5 = 0$ nos dá $x = \pm\sqrt{5}$. O gráfico da função $f(x) = x^2 - 5$ está dado na Figura 2.3. Notemos que f possui uma raiz no intervalo $[-3, -2]$ e outra no intervalo $[2, 3]$. A raiz α que procuramos é a que está no intervalo $[2, 3]$, pois representa a solução positiva $x = \sqrt{5}$. Notemos que

$$f(2)f(3) = (-1)(4) = -4 < 0,$$

o que justifica a existência da raiz no intervalo $[2, 3]$.

Vejam quantas iterações serão necessárias. Temos

$$n > \frac{\log(3 - 2) - \log(0, 002)}{\log(2)} = 8,965784285.$$

Devemos ter 9 iterações.

Seguiremos os passos do algoritmo da bisseção para determinar a raiz desejada.

Primeira aproximação.

O intervalo inicial é $[2, 3]$ e a primeira aproximação é

$$x_1 = \frac{2 + 3}{2} = 2.5.$$

Sendo $f(x_1) = f(2.5) = (2.5)^2 - 5 = 6.25 - 5 = 1.25 > 0$ e $f(2) = -1 < 0$, segue que $f(2)f(2.5) < 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2, 2.5]$. O erro relativo neste caso é

$$e_r = \frac{|2.5 - 2|}{|2.5|} = 0.2 > 0.002.$$

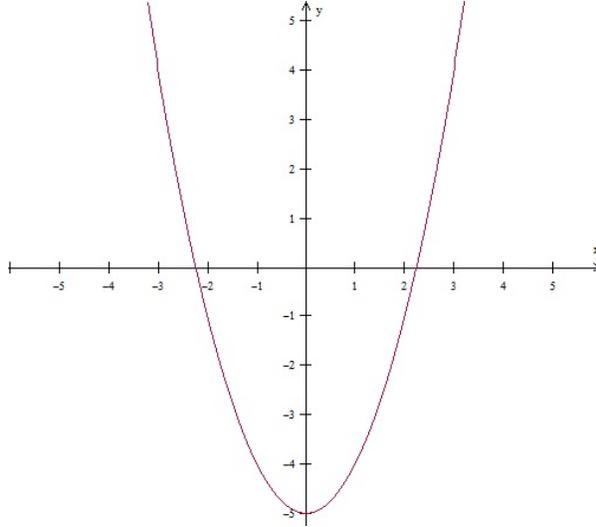


Figura 2.3: Gráfico da função $f(x) = x^2 - 5$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Segunda aproximação.

O segundo intervalo é $[2, 2.5]$ e a segunda aproximação é

$$x_2 = \frac{2 + 2.5}{2} = 2.25.$$

Sendo $f(x_2) = f(2.25) = (2.25)^2 - 5 = 0.0625 > 0$ e $f(2) < 0$, segue que $f(2)f(2.25) < 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2, 2.25]$ e o erro relativo nesta etapa é

$$e_r = \frac{|2.25 - 2|}{|2.25|} = 0.1111111 > 0.002.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Terceira aproximação.

O terceiro intervalo é $[2, 2.25]$ e a terceira aproximação é

$$x_3 = \frac{2 + 2.25}{2} = 2.125.$$

Sendo $f(x_3) = f(2.125) = (2.125)^2 - 5 = -0.484375 < 0$ e $f(2) < 0$, segue que $f(2)f(2.25) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2.125, 2.25]$ e o erro relativo nesta etapa é

$$e_r = \frac{|2.25 - 2.125|}{|2.25|} = 0.0555555 > 0.002.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Quarta aproximação.

O quarto intervalo é $[2.125, 2.25]$ e a quarta aproximação é

$$x_4 = \frac{2.125 + 2.25}{2} = 2.1875.$$

Sendo $f(x_4) = f(2.1875) = (2.1875)^2 - 5 = -0.21484375 < 0$ e $f(2.125) < 0$, segue que $f(2.125)f(2.1875) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2.1875, 2.25]$ e o erro relativo nesta etapa é

$$e_r = \frac{|2.25 - 2.1875|}{|2.25|} = 0.02777778 > 0.002.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Quinta aproximação.

O quinto intervalo é $[2.1875, 2.25]$ e a quinta aproximação é

$$x_5 = \frac{2.1875 + 2.25}{2} = 2.21875.$$

Sendo $f(x_5) = f(2.21875) = (2.21875)^2 - 5 = -0.0771 < 0$ e $f(2.1875) < 0$, segue que $f(2.1875)f(2.21875) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2.21875, 2.25]$ e o erro relativo nesta etapa é

$$e_r = \frac{|2.25 - 2.21875|}{|2.25|} = 0.01388889 > 0.002.$$

O erro ainda é maior que a tolerância. Portanto o processo continua.

Sexta aproximação.

O sexto intervalo é $[2.21875, 2.25]$ e a sexta aproximação é

$$x_6 = \frac{2.21875 + 2.25}{2} = 2.234375.$$

Sendo $f(x_6) = f(2.234375) = -0.0076 < 0$ e $f(2.21875) < 0$, segue que $f(2.21875)f(2.234375) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2.234375, 2.25]$ e o erro relativo nesta etapa é

$$e_r = \frac{|2.25 - 2.234375|}{|2.25|} = 0.00694444 < 0.002.$$

O erro ainda é maior que a tolerância. Portanto o processo continua.

Sétima aproximação.

O sétimo intervalo é $[2.234375, 2.25]$ e a sétima aproximação é

$$x_7 = \frac{2.234375 + 2.25}{2} = 2.2421875.$$

Sendo $f(x_7) = f(2.2421875) = 0.0274 > 0$ e $f(2.234375) < 0$, segue que $f(2.234375)f(2.2421875) < 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2.234375, 2.2421875]$ e o erro relativo nesta etapa é

$$e_r = \frac{|2.2421875 - 2.234375|}{|2.2421875|} = 0.00348432 > 0.002.$$

O erro ainda é maior que a tolerância. Portanto o processo continua.

Oitava aproximação.

O oitavo intervalo é $[2.234375, 2.2421875]$ e a oitava aproximação é

$$x_8 = \frac{2,234375 + 2,2421875}{2} = 2.23828125$$

Sendo $f(x_8) = f(2.23828125) = 0.0099 > 0$ e $f(2.234375) < 0$, segue que $f(2.234375)f(2.23828125) < 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[2.234375, 2.23828125]$ e o erro relativo nesta etapa é

$$e_r = \frac{|2.23828125 - 2.234375|}{|2.23828125|} = 0.00174520 < 0.002.$$

Neste caso, o processo deve parar pois o erro é menor que a tolerância. A raiz aproximada está no intervalo $[2.234375, 2.23828125]$ e é dada por

$$\alpha = x_9 = \frac{2,234375 + 2,23828125}{2} = 2.236328125.$$

Logo, podemos dizer que escrever $\sqrt{5} \in [2.234375, 2.23828125]$, ou que, $\sqrt{5} = 2.236328125$ com um erro que não excede 0.002. A saber, o erro relativo que se comete nessa aproximação é $e_r = 0.00174520$.

O algoritmo da bissecção usado no Matlab para determinar a raiz da função $f(x) = x^2 - 5$ é descrito na Seção 8.3 do Capítulo 8.

2.3 Iteração Linear ou Método do Ponto Fixo

Dada uma função f , contínua num intervalo $[a, b]$ no qual existe uma única raiz de f , então podemos determinar a raiz da equação

$$f(x) = 0, \tag{2.2}$$

resolvendo a equação

$$x = g(x), \tag{2.3}$$

onde a equação (2.3) é obtida a partir da equação (2.2).

Para qualquer função g , qualquer solução de (2.3) é chamada de **ponto fixo** de $g(x)$. Assim, o problema de determinar um zero de $f(x)$ é transformado no problema de determinar um ponto fixo de $g(x)$ sem haver alteração na posição da raiz procurada.

Geometricamente, a equação (2.2) tem como solução a interseção do gráfico de f com o eixo x , enquanto que uma raiz de (2.3) é a interseção da reta $y = x$ com a reta $y = g(x)$.

Dada uma equação do tipo $f(x) = 0$, existe mais de uma função de iteração $g(x)$, tal que $f(x) = 0 \Leftrightarrow x = g(x)$. Por exemplo, para $f(x) = x^2 - 2x + 4 = 0$, temos as seguintes funções

$$g_1(x) = \frac{1}{2}x^2 + 2, \quad g_2(x) = \pm\sqrt{2x - 4}, \quad g_3(x) = 2 - \frac{4}{x}, \quad g_4(x) = \frac{4}{2 - x}$$

que satisfaz $x = g_i(x)$, $i = 1, 2, 3, 4$.

O **método de iteração linear** ou **método do ponto fixo** é usado para determinar uma raiz aproximada da raiz de f no intervalo $[a, b]$. Esse processo é feito da seguinte forma: Tomamos, inicialmente, x_0 como a aproximação da raiz α de f no intervalo $[a, b]$ e depois obtemos as aproximações sucessivas x_k , para a solução procurada α , usando o processo iterativo definido por

$$x_{k+1} = g(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

O erro que usaremos para o método de iteração linear é dado por

$$e_{k+1} = |x_{k+1} - x_k|, \quad k = 0, 1, \dots$$

O processo deve parar quando $e_k < \epsilon$, onde ϵ é a tolerância.

As aproximações sucessivas x_k devem convergir para a solução desejada, senão o método não faz sentido. Essa convergência depende da escolha da função $g(x)$. Por exemplo, se $f(x) = x^2 - x - 2$, então uma raiz de f é $x = 2$ e o método de iteração linear com $x_0 = 2.5$ e $g(x) = x^2 - 2$, nos dá as seguintes aproximações sucessivas:

$$\begin{aligned} x_1 &= g(x_0) = g(2.5) = (2.5)^2 - 2 = 4.25 \\ x_2 &= g(x_1) = g(4.25) = (4.25)^2 - 2 = 16.0625 \\ x_3 &= g(x_2) = g(16.0625) = (16.0625)^2 - 2 = 256.00391 \\ &\vdots \end{aligned}$$

Portanto a sequência das aproximações sucessivas x_k é divergente.

A convergência da sequência das aproximações sucessivas x_k é dada pelo seguinte teorema:

Teorema 2.3.1 *Seja α uma raiz de $f(x) = 0$ que satisfaz a equação $x = g(x)$ e seja $I = (\alpha - h, \alpha + h)$ um intervalo aberto centrado em α . Então a sequência x_k gerada pelo processo iterativo $x_{k+1} = g(x_k)$ convergirá para α se as seguintes condições são satisfeitas:*

- $g(x)$ e $g'(x)$ são contínuas em I ;
- $x_0 \in I$;
- Se existe $M > 0$ tal que $|g'(x)| \leq M < 1, \quad \forall x \in I$.

Exemplo 3 *Use o método de iteração linear para determinar uma raiz aproximada de $f(x) = x^2 - x - 2 = 0$ com $x_0 = 2.5$ e $g(x) = \sqrt{2+x}$ sabendo-se que a raiz α está no intervalo $[0, 3]$.*

Solução: Notemos $x_0 = 2, 5 \in I$ e que as funções $g(x) = \sqrt{2+x}$ e $g'(x) = \frac{1}{2\sqrt{2+x}}$ são contínuas em I . Por outro lado,

$$|g'(x)| = \left| \frac{1}{2\sqrt{2+x}} \right| < 1 \quad \Leftrightarrow \quad x > -1.75.$$

Portanto, existe $M > 0$ tal que $|g'(x)| \leq M < 1$, $\forall x \in I$. Logo a sequência de aproximações sucessivas para a raiz α converge. Neste caso, teremos que

$$\begin{aligned} x_1 &= g(x_0) = \sqrt{2 + 2.5} = \sqrt{4.5} = 2.1213203 \\ x_2 &= g(x_1) = \sqrt{2 + 2.1213203} = \sqrt{4.1213203} = 2.0301035 \\ x_3 &= g(x_2) = \sqrt{2 + 2.0301035} = \sqrt{4.0301035} = 2.0075118 \\ x_4 &= g(x_3) = \sqrt{2 + 2.0075118} = \sqrt{4.0075118} = 2.0018771 \\ x_5 &= g(x_4) = \sqrt{2 + 2.0018771} = \sqrt{4.0018771} = 2.0004692 \\ x_6 &= g(x_5) = \sqrt{2 + 2.0004692} = \sqrt{4.0004692} = 2.0001173 \\ x_7 &= g(x_6) = \sqrt{2 + 2.0001173} = \sqrt{4.0001173} = 2.0000293 \\ &\vdots \end{aligned}$$

A sequência das aproximações convergem claramente para a raiz $x = 2$.

Exemplo 4 Encontre uma solução aproximada para a equação $e^x - 4x = 0$ no intervalo $[0, 1]$ utilizando uma tolerância de 0,002.

Solução: O gráfico de f está dado na Figura 2.4. Notemos que f possui uma solução no intervalo $[0, 1]$ e outra no intervalo $[2, 3]$. Para este exemplo, a solução procurada está no intervalo $[0, 1]$.

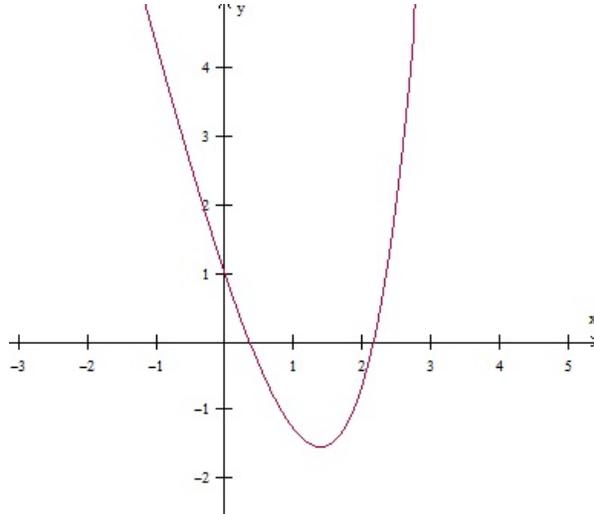


Figura 2.4: Gráfico da função $f(x) = e^x - 4x$

Devemos escrever a equação $e^x - 4x = 0$ na forma $x = g(x)$. Temos as seguintes opções

$$x = \frac{e^x}{4} \quad \text{e} \quad x = \ln(4x).$$

Vamos analisar cada opção de função $g(x)$.

1ª opção: $g(x) = \frac{e^x}{4}$.

Temos que g e $g'(x) = \frac{e^x}{4}$ são contínuas no intervalo $[0, 1]$. Por outro lado, $g'(0) = \frac{1}{4} < 1$ e $g'(1) = \frac{e}{4} < 1$. Logo $|g'(x)| < 1$ para todo $x \in [0, 1]$. Portanto, a função $g(x) = \frac{e^x}{4}$ serve para o método de iteração linear.

2ª opção: $g(x) = \ln(4x)$.

Temos que g e $g'(x) = \frac{1}{x}$ são contínuas num subintervalo de $[0, 1]$ da forma $[\varepsilon, 1 - \varepsilon]$, $\varepsilon \rightarrow 0$, que contém a raiz. Por outro lado, $g'(\varepsilon) < 1$ e $g'(1 - \varepsilon) < 1$. Logo $|g'(x)| < 1$ para todo $x \in [\varepsilon, 1 - \varepsilon]$. Portanto, a função $g(x) = \ln(4x)$ também serve para o método de iteração linear.

Usaremos o método de iteração linear com a função $g(x) = \frac{e^x}{4}$, $x_0 = 0$ e tolerância de 0.002. Neste caso, teremos que

$$\begin{aligned} x_1 = g(x_0) &= \frac{e^0}{4} = 0.25, & \text{com erro} & \quad e_1 = |x_1 - x_0| = 0.25 > 0,002; \\ x_2 = g(x_1) &= \frac{e^{0.25}}{4} = 0.3210, & \text{com erro} & \quad e_2 = |x_2 - x_1| = 0.071 > 0,002; \\ x_3 = g(x_2) &= \frac{e^{0.3210}}{4} = 0.3446, & \text{com erro} & \quad e_3 = |x_3 - x_2| = 0.0236 > 0,002; \\ x_4 = g(x_3) &= \frac{e^{0.3446}}{4} = 0.3529, & \text{com erro} & \quad e_4 = |x_4 - x_3| = 0.0083 > 0,002; \\ x_5 = g(x_4) &= \frac{e^{0.3529}}{4} = 0.3558, & \text{com erro} & \quad e_5 = |x_5 - x_4| = 0.0029 > 0,002; \\ x_6 = g(x_5) &= \frac{e^{0.3558}}{4} = 0.3568, & \text{com erro} & \quad e_6 = |x_6 - x_5| = 0.001 < 0,002. \end{aligned}$$

O processo deve parar na 6ª iteração e a raiz procurada é dada por $\alpha = 0.3568$ com um erro que não ultrapassa 0.002.

O algoritmo para o método do Ponto Fixo usado no Matlab para determinar a raiz da função $f(x) = e^x - 4x$ é descrito na Seção 8.3 do Capítulo 8.

2.4 O Método de Newton-Raphson ou Método da Tangente

Suponha que queiramos determinar as raízes de uma função $f(x)$ num intervalo $[a, b]$ com uma precisão menor ou igual a certo valor dado. O método de Newton-Raphson ou Método da Tangente consiste em usar como raiz aproximada a raiz da equação da tangente à curva $f(x)$, ou seja, a interseção da tangente com o eixo horizontal.

Sabendo-se que α é uma raiz de $f(x)$ em $[a, b]$, o método consiste, inicialmente, em tomar um ponto x_0 no intervalo $[a, b]$ e depois aproximar a função f pela reta tangente a f no ponto x_0 e, em seguida, calcular o zero da reta tangente encontrada que é de grau um. Este valor

será a primeira aproximação x_1 de α . Repetindo o processo para x_1 no lugar de x_0 , obtemos a segunda aproximação x_2 de α . E assim, sucessivamente (ver Figura 2.5). No que segue, veremos como é feito o desenvolvimento do método até chegar em sua fórmula geral.

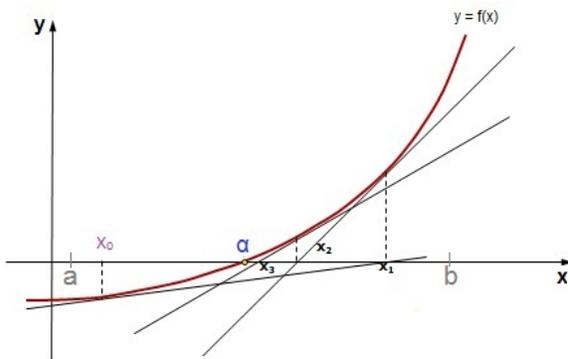


Figura 2.5: Método de Newton

A equação da reta tangente à curva f no ponto $(x_0, f(x_0))$ é

$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0).$$

A primeira aproximação x_1 é dada pela raiz da função acima, ou seja, fazendo $f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) = 0$. Segue que

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

Seguindo o mesmo processo com x_1 no lugar de x_0 , teremos a segunda aproximação x_2 , onde

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}.$$

Seguindo o processo repetidas vezes, obtemos a sequência das aproximações sucessivas $\{x_k\}$, tais que

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Que é a fórmula de Newton-Raphson.

Teste de Parada: A cada iteração, deve ser testado se a aproximação encontrada poderá ser considerada como a solução do problema. Os testes de parada mais usados são:

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \epsilon, \quad \left| \frac{x_{k+1} - x_k}{x_{k+1}} \right| \leq \epsilon \quad \text{e} \quad |f(x_k)| \leq \epsilon,$$

onde ϵ é a tolerância.

Convergência: Se $f(x)$, $f'(x)$ e $f''(x)$ são contínuas num intervalo I que contém uma

raiz α de $f(x) = 0$ e se $f'(\alpha) \neq 0$, então existirá um subintervalo \bar{I} de I contendo a raiz α , tal que se $x_0 \in \bar{I}$, a sequência x_k gerada pela fórmula recursiva

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

converge para α .

Em resumo, o método de Newton obedece os seguintes passos:

- 1º passo: Define-se a função $g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$;
- 2º passo: Escolhe-se um valor qualquer x_0 para x (dentro do intervalo);
- 3º passo: Calcula-se a raiz x_1 fazendo $x_1 = g(x_0)$;
- 4º passo: Faz-se o teste de parada.

Caso o teste de parada não seja satisfeito, repete-se os passos 2,3 e 4.

Exemplo 2.4.1 *Encontrar uma raiz do polinômio $f(x) = x^3 - 3x + 1$ no intervalo $[0, 1]$ com três algarismos exatos e com um erro que não ultrapasse 0,001.*

Solução: O gráfico de f está dado na Figura 2.6. Notemos que f possui três soluções reais: uma no intervalo $[-2, -1]$, outra no intervalo $[0, 1]$ e outra no intervalo $[1, 2]$. A solução que queremos está no intervalo $[0, 1]$.

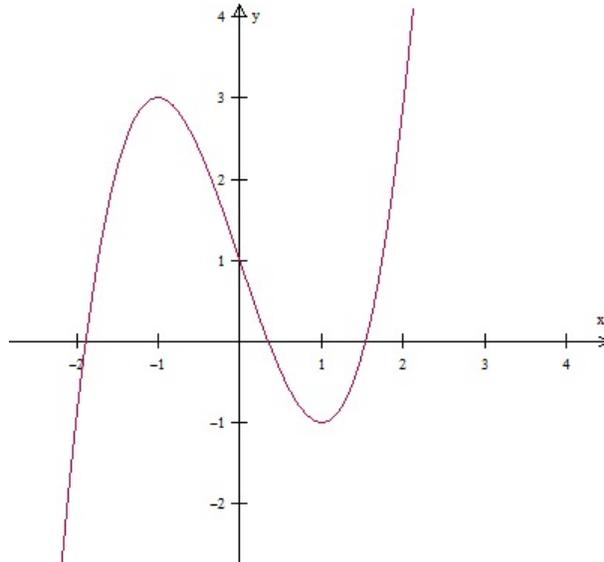


Figura 2.6: Gráfico da função $f(x) = x^3 - 3x + 1$

Notemos que $f(0)f(1) = (1)(-1) = -1 < 0$. Do teorema do valor intermédio, segue que existe $\alpha \in [0, 1]$ tal que $f(\alpha) = 0$, ou seja, $f(x)$ possui ao menos uma raiz no intervalo $[0, 1]$, como vimos graficamente.

Para usar o método de Newton, definamos a função

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} = x - \frac{x^3 - 3x + 1}{3x^2 - 3}$$

e escolhemos como aproximação inicial $x_0 = 0,25$ (a escolha é arbitrária).

Primeira iteração:

Temos

$$x_1 = g(x_0) = g(0,25) = 0,25 - \frac{(0,25)^3 - 3(0,25) + 1}{3(0,25)^2 - 3} = 0,34444.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{0,34444 - 0,25}{0,34444} \right| = 0,2742 > 0,001.$$

O processo continua.

Segunda iteração:

$$x_2 = g(x_1) = g(0,34444) = 0,34444 - \frac{(0,34444)^3 - 3(0,34444) + 1}{3(0,34444)^2 - 3} = 0,34720.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{0,34720 - 0,34444}{0,3472} \right| = 0,00795 > 0,001.$$

Portanto o processo continua.

Terceira iteração:

$$x_3 = g(x_2) = g(0,3472) = 0,3472 - \frac{(0,3472)^3 - 3(0,3472) + 1}{3(0,3472)^2 - 3} = 0,34729.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{0,34729 - 0,34720}{0,34729} \right| = 0,00026 < 0,001.$$

O processo deve parar. A solução com três casa decimais é $\alpha = 0,347$.

Exemplo 2.4.2 Usando o método de Newton, determine a menor raiz positiva da equação

$$4 \cos(x) - e^x = 0,$$

com erro inferior a 0,01.

Solução: Uma solução de $f(x) = 4 \cos(x) - e^x = 0$ é a interseção das curvas $g_1(x) = 4 \cos(x)$ e $g_2(x) = e^x$. Graficamente, podemos ver que a interseção das curvas $g_1(x)$ e $g_2(x)$ e, conseqüentemente, a raiz positiva de $f(x) = 0$ está numa vizinhança de $x = 1$ (Veja Figura 2.7). Portanto, devemos escolher inicialmente a aproximação $x_0 = 1$.

Para usar o método de Newton, definamos a função

$$g(x) = x - \frac{4 \cos(x) - e^x}{-4 \operatorname{sen}(x) - e^x}$$

Primeira iteração:

Temos

$$x_1 = g(x_0) = g(1) = 1 - \frac{(-0,557)}{(-6,084)} = 0,908.$$

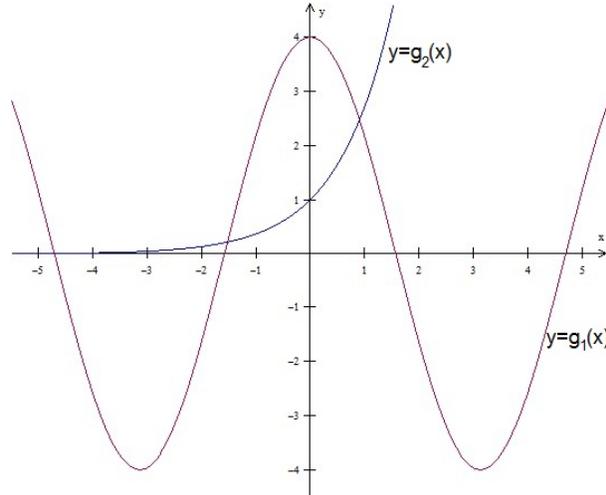


Figura 2.7: Gráfico das funções $g_1(x) = \cos(x)$ e $g_2(x) = e^x$

Teste de parada:

$$\left| \frac{0,908 - 1}{0,908} \right| = 0,101 > 0,01.$$

O processo continua.

Segunda iteração:

$$x_2 = g(x_1) = g(0,908) = 0,908 - \frac{(-0,019)}{(-5,631)} = 0,905.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{0,905 - 0,908}{0,905} \right| = 0,0033 < 0,01.$$

Neste caso o processo deve parar. A solução com duas casa decimais corretas é $\alpha = 0,905$. A saber, a solução com sete casas decimais é $x = 0,9047882$.

O algoritmo para o método de Newton usado no Matlab para determinar a raiz da função $f(x) = 4 \cos(x) - e^x$ é descrito na Seção 8.3 do Capítulo 8.

2.5 Método das Secantes

Uma desvantagem no método de Newton é a necessidade de se obter $f'(x)$ e calcular seu valor numérico em cada passo. Uma maneira de modificar o método de Newton e eliminar essa desvantagem é substituir a derivada $f'(x_k)$ pelo quociente

$$\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}, \quad (2.4)$$

onde x_k e x_{k-1} são duas aproximações quaisquer para a raiz α . Notemos que o limite do quociente (2.4), quando $x_{k-1} \rightarrow x_k$ é justamente $f'(x_k)$. O método de Newton quando modificado desta forma é conhecido como **Método das Secantes**.

Substituindo, na fórmula de Newton, $f'(x_k)$ por (2.4) obtemos

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}}.$$

Desenvolvendo a expressão acima, obtemos a fórmula para o método das secantes dada por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \quad \text{ou} \quad x_{k+1} = \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

O procedimento geométrico para a obtenção da fórmula do método das secantes é apresentado na Figura 2.8 e descrito a seguir:

1ª aproximação:

Tomemos inicialmente os pontos de abscissas $x = x_0$ e $x = x_1$ e tracemos a reta secante S_1 que liga os pontos $(x_0, f(x_0))$ a $(x_1, f(x_1))$.

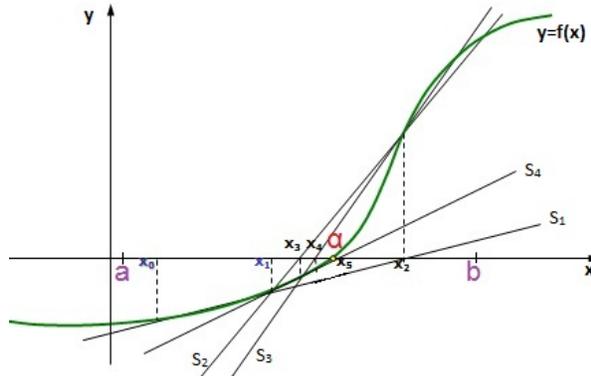


Figura 2.8: Método das Secantes

A equação da reta secante que passa por estes pontos é

$$y - f(x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_1). \quad (2.6)$$

Consideramos como primeira aproximação para a raiz de $f(x)$ o valor x_2 que corresponde à abscissa do ponto onde a secante corta o eixo horizontal. Com isto teremos o ponto $(x_2, 0)$. Substituindo este ponto na equação da secante (2.6), teremos

$$0 - f(x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x_2 - x_1) \quad \Leftrightarrow \quad x_2 = x_1 - f(x_1) \frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)}.$$

2ª aproximação:

Traçando a reta secante S_2 que liga os pontos $(x_1, f(x_1))$ a $(x_2, f(x_2))$ teremos a segunda aproximação $x = x_3$ para a raiz de $f(x)$. De modo análogo, teremos que

$$x_3 = x_2 - f(x_2) \frac{x_2 - x_1}{f(x_2) - f(x_1)}.$$

k-ésima aproximação:

Repetindo o processo, obtemos a sequência das aproximações sucessivas x_k tais que

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Teste de Parada: A cada iteração, deve ser testado se a aproximação encontrada pode ser considerada como a solução do problema. Os testes de parada mais usados são:

$$|x_{k+1} - x_k| \leq \epsilon, \quad \left| \frac{x_{k+1} - x_k}{x_{k+1}} \right| \leq \epsilon \quad \text{e} \quad |f(x_k)| \leq \epsilon,$$

onde ϵ é a tolerância.

Observações:

1 - No método das secantes a equação da tangente, usada no método de Newton, é substituída pela equação da secante que corta a curva da função em dois pontos cujas abscissas definem um intervalo onde está contida a raiz;

2 - Para se usar a fórmula (2.5) é preciso ter disponível duas aproximações iniciais.

3 - Deve-se tomar cuidado na escolha dos pontos para se obter a primeira secante. Por exemplo, considere uma equação cujas raízes são r_1 e r_2 , com $r_1 < r_2$. Para determinar a raiz r_2 , a escolha das abscissas x_0 e x_1 para o traçado da secante, deve ser feito de modo que a secante intercepte o eixo horizontal em um ponto x_2 de tal forma que $x_2 > r_1$. Para determinação de r_1 , a escolha de x_0 e x_1 deve ser feita de tal modo que a secante corte o eixo horizontal em um ponto de abscissa x_2 tal que $x_2 < r_2$. Este procedimento evita a divergência do processo.

Exemplo 2.5.1 Determinar uma raiz para o polinômio $f(x) = x^3 - 3x + 1$ no intervalo $[0, 1]$ com três algarismos exatos e com um erro relativo inferior a 0,002.

Solução: O gráfico de f está dado na Figura 2.6. Tomamos $x_0 = 0,1$ e $x_1 = 0,8$ como aproximações iniciais.

Primeira iteração:

Temos que $f(0,1) = 0,701$ e $f(0,8) = -0,888$ e a primeira aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_2 dado por

$$x_2 = 0,8 - \frac{f(0,8)(0,8 - 0,1)}{f(0,8) - f(0,1)} = 0,8 - \frac{(-0,888)(0,7)}{-0,888 - 0,701} = 0,4088.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_2 - x_1}{x_2} \right| = \left| \frac{0,4088 - 0,8}{0,4088} \right| = 0,95695 > 0,002.$$

O processo continua.

Segunda iteração:

Temos que $f(x_2) = f(0,4088) = -0,1581$ e a segunda aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_3 dado por

$$x_3 = 0,4088 - \frac{(-0,1581)(0,4088 - 0,8)}{-0,1581 + 0,888} = 0,4088 + \frac{(0,1581)(-0,3912)}{0,7299} = 0,3234.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_3 - x_2}{x_3} \right| = \left| \frac{0,3234 - 0,4088}{0,3234} \right| = 0,2641 > 0,002.$$

O processo continua.

Terceira iteração:

Temos que $f(x_3) = f(0,3234) = 0,06362$ e a terceira aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_4 dado por

$$x_4 = 0,3234 - \frac{(0,06362)(0,3234 - 0,4088)}{0,06362 + 0,1581} = 0,3234 - \frac{(0,06362)(-0,0854)}{0,22172} = 0,3479.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_4 - x_3}{x_4} \right| = \left| \frac{0,3479 - 0,3234}{0,3479} \right| = 0,0704 > 0,002.$$

O processo continua.

Quarta iteração:

Temos que $f(x_4) = f(0,3479) = -0,00159$ e a quarta aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_5 dado por

$$x_5 = 0,3479 - \frac{(-0,00159)(0,3479 - 0,3234)}{-0,00159 - 0,06362} = 0,3473.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_5 - x_4}{x_5} \right| = \left| \frac{0,3473 - 0,3479}{0,3473} \right| = 0,0017 < 0,002.$$

Portanto, o processo deve parar e a solução aproximada é dada por $\alpha = 0,3473$.

Exemplo 2.5.2 Use o método das secantes para determinar a raiz positiva da equação

$$5e^{-x} - \sqrt{x} = 0,$$

com um erro relativo inferior a 0,01.

Solução: Uma solução de $f(x) = 5e^{-x} - \sqrt{x} = 0$ é a interseção das curvas $g_1(x) = 5e^{-x}$ e $g_2(x) = \sqrt{x}$. Graficamente, podemos ver que a interseção das curvas $g_1(x)$ e $g_2(x)$ e, conseqüentemente, a raiz de $f(x) = 0$ está numa vizinhança de $x = 1.5$ (ver Figura 2.9).

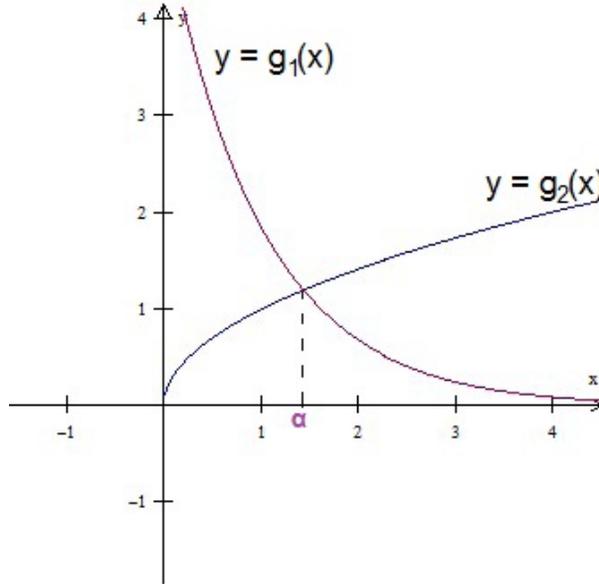


Figura 2.9: Gráfico das funções $g_1(x) = 5e^{-x}$ e $g_2(x) = \sqrt{x}$

Tomamos $x_0 = 1.4$ e $x_1 = 1.5$ como aproximações iniciais.

Primeira iteração:

Temos

$$f(x_0) = f(1.4) = 0.0498 \quad \text{e} \quad f(x_1) = f(1.5) = -0.1091.$$

A segunda aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_2 dado por

$$x_2 = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{(1.4)(-0.1091) - (1.5)(0.0498)}{-0.1091 - 0.0498} = \frac{-0.2274}{-0.1589} = 1.4313.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_2 - x_1}{x_2} \right| = \left| \frac{1.4313 - 1.5}{1.4313} \right| = 0.048 > 0.01.$$

O processo continua.

Segunda iteração:

Temos

$$f(x_2) = f(1.4313) = -0.0014.$$

A terceira aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_3 dado por

$$x_3 = \frac{x_1 f(x_2) - x_2 f(x_1)}{f(x_2) - f(x_1)} = \frac{(1.5)(-0.0014) - (1.4313)(-0.1091)}{-0.0014 - (-0.1091)} = \frac{0.1541}{0.1077} = 1.4308.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_3 - x_2}{x_3} \right| = \left| \frac{1.4308 - 1.4313}{1.4308} \right| = 0.0003 < 0.01.$$

Portanto, o processo deve parar e a solução aproximada é dada por $\alpha = 1.4308$.

O algoritmo para o método das Secantes usado no Matlab para determinar a raiz da função $f(x) = 5e^{-x} - \sqrt{x}$ é descrito na Seção 8.3 do Capítulo 8.

2.6 Método Regula Falsi ou Método da Falsa Posição

O método da Falsa Posição é uma variação do método das secantes e possui uma grande semelhança com o método da Bisseção.

Para o desenvolvimento do método da Falsa Posição, considera-se inicialmente, um intervalo $[a, b]$ e uma função f contínua em $[a, b]$ com $f(a)f(b) < 0$, isto é, $f(a)$ e $f(b)$ com sinais opostos. Do Teorema do Valor Intermediário, sabemos da existência de uma raiz α de $f(x) = 0$ em $[a, b]$. O método considera as duas aproximações iniciais como sendo os extremos do intervalo $[a, b]$, isto é, $x_0 = a$ e $x_1 = b$ com $f(x_0)$ e $f(x_1)$ de sinais opostos. Uma nova aproximação x_2 é determinada usando o método das secantes (2.5), ou seja,

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

A aproximação x_2 será a raiz procurada se $f(x_2) = 0$ ou se a condição de parada for satisfeita. Neste caso, a condição de parada é

$$\left| \frac{x_2 - x_1}{x_2} \right| < \epsilon \quad \text{ou} \quad \left| \frac{x_2 - x_0}{x_2} \right| < \epsilon,$$

onde ϵ é a tolerância. Caso x_2 não seja a raiz procurada, deve-se continuar o processo determinando um novo intervalo que contenha a raiz. Esse novo intervalo é determinado como no método da Bisseção, isto é, a raiz estará no intervalo $[x_0, x_2]$ se $f(x_0)f(x_2) < 0$ e estará em $[x_2, x_1]$ se $f(x_0)f(x_2) > 0$. A nova aproximação é determinada usando a fórmula do método das secantes (2.5) a partir do novo intervalo escolhido. O processo deve parar quando as condições de parada forem satisfeitas.

Observações:

1. Geometricamente, o método da Falsa Posição diz que a aproximação da raiz α no intervalo $[a, b]$ é a interseção da reta que liga os pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$ com o eixo x (Ver figura 2.10). Esta interseção é dada por

$$x = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}.$$

2. A diferença entre o método da Bisseção e o método da Falsa Posição é que no primeiro, calcula-se a média aritmética dos limites do intervalo que contém a raiz, enquanto que, no segundo, calcula-se a média ponderada desses limites.
3. Equiparado com o algoritmo do método da Bisseção, o algoritmo do método da Falsa Posição pode ser montado como a seguir.

Elementos: f função contínua, $a, b \in \mathbb{R}$ com $f(a)$ e $f(b)$ de sinais opostos, $\alpha \in [a, b]$ é a raiz a ser determinada, $\epsilon > 0$ é a tolerância ou precisão pre-fixada, $k = 1, 2, 3, \dots, n$

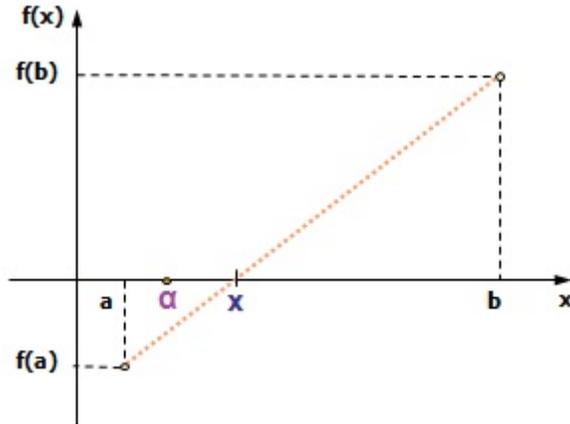


Figura 2.10: Método da Falsa Posição

são as iterações a efetuar.

Passos do algoritmo:

Passo 1: Defina $[a_0, b_0]$, onde $a_0 = a$ e $b_0 = b$ como o primeiro intervalo que contém a raiz;

Passo 2: Defina a primeira aproximação $x_1 = \frac{a_0 f(b_0) - b_0 f(a_0)}{f(b_0) - f(a_0)}$;

Passo 3: Calcule $f(x_1)$;

Passo 4: Se $f(x_1) = 0$ defina x_1 como sendo a raiz procurada. Caso contrário defina o segundo intervalo que contém a raiz como sendo $[a_1, b_1]$, onde $a_1 = a_0$ e $b_1 = x_1$ se $f(a_0)f(x_1) < 0$ ou $a_1 = x_1$ e $b_1 = b_0$ se $f(a_0)f(x_1) > 0$.

Passo 5: Defina o erro $e_r = \frac{|b_1 - a_1|}{|b_1|}$ ou $e_r = \frac{|b_1 - a_1|}{|a_1|}$;

Passo 6: Se $e_r > \epsilon$, repita os passos 2-5. Caso contrário, se $e_r \leq \epsilon$, exiba o intervalo que contém a raiz e pare o processo.

Exemplo 2.6.1 Use o método da falsa posição para determinar uma raiz positiva da equação

$$x - \cos(x) = 0,$$

com um erro relativo inferior a 0,001.

Solução: Uma solução de $f(x) = x - \cos(x) = 0$ é a interseção das curvas $g_1(x) = x$ e $g_2(x) = \cos(x)$. Graficamente, podemos ver que a interseção das curvas $g_1(x)$ e $g_2(x)$ e, conseqüentemente, a raiz de $f(x) = 0$ está numa vizinhança de $x = 0.7$ (ver Figura 2.11).

Assim, podemos tomar $x_0 = 0.7$ e $x_1 = 0.8$ como aproximações iniciais. Notemos que

$$f(x_0) = f(0.7) = -0.0648 \quad \text{e} \quad f(x_1) = f(0.8) = 0.1033.$$

Portanto, $f(x_0)f(x_1) < 0$. Logo existe uma raiz no intervalo $[0.7, 0.8]$ como se ver graficamente.

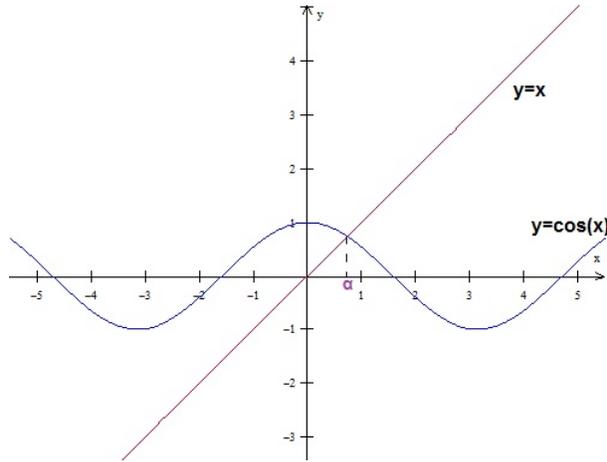


Figura 2.11: Gráfico das funções $g_1(x) = x$ e $g_2(x) = \cos(x)$

Primeira iteração:

A primeira aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_2 dado por

$$x_2 = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{(0.7)(0.1033) - (0.8)(-0.0648)}{0.1033 + 0.0648} = 0.7383.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_2 - x_1}{x_2} \right| = 0.048 > 0.001 \quad \text{e} \quad \left| \frac{x_2 - x_0}{x_2} \right| = 0.052 > 0.001.$$

O processo continua.

Segunda iteração:

Temos que

$$f(x_2) = f(0.7383) = -0.0013.$$

Segue que $f(x_0)f(x_2) > 0$. Portanto, o próximo intervalo será $[x_2, x_1]$. Neste caso, a segunda aproximação para a raiz de $f(x)$ é o valor x_3 dado por

$$x_3 = \frac{x_2 f(x_1) - x_1 f(x_2)}{f(x_1) - f(x_2)} = \frac{(0.7383)(0.1033) - (0.8)(-0.0013)}{0.1033 + 0.0013} = 0.7390.$$

Teste de parada:

$$\left| \frac{x_3 - x_2}{x_3} \right| = 0.00095 < 0.001.$$

Portanto, o processo deve parar e a solução aproximada é dada por $\alpha = 0.7390$.

Exemplo 2.6.2 Use o método da falsa posição para determinar uma raiz real da equação

$$x^3 - x - 1 = 0,$$

com um erro relativo inferior a 0,01 ou usando quatro iterações.

Solução: Definindo a função $f(x) = x^3 - x - 1$, segue que f possui uma raiz real no intervalo $[1, 1.5]$. Isto pode ser visto graficamente ou notando que $f(1)f(1.5) < 0$, já que $f(1) = -1$ e $f(1.5) = 0.875$.

Usaremos o algoritmo do método da Falsa Posição com o intervalo inicial $[1, 1.5]$.

Primeira Iteração.

A primeira aproximação é

$$x_1 = \frac{(1)f(1.5) - (1.5)f(1)}{f(1.5) - f(1)} = \frac{(1)(0.875) - (1.5)(-1)}{0.875 - (-1)} = \frac{2.375}{1.875} = 1.26667.$$

Sendo $f(x_1) = f(1.26667) = -0.23437 > 0$ e $f(1) = -1 < 0$, segue que $f(1)f(1.26667) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.26667, 1.5]$. O erro relativo neste caso é

$$e_1 = \left| \frac{1.5 - 1.26667}{1.5} \right| = 0.15555 > 0.02.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Segunda Iteração.

A segunda aproximação é

$$x_2 = \frac{(1.26667)f(1.5) - (1.5)f(1.26667)}{f(1.5) - f(1.26667)} = \frac{(1.26667)(0.875) - (1.5)(-0.23437)}{0.875 - (-0.23437)} = \frac{1.4598}{1.10937} = 1.3159.$$

Sendo $f(x_2) = f(1.3159) = -0.0373 > 0$ e $f(1) = -1 < 0$, segue que $f(1)f(1.3159) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.3159, 1.5]$. O erro relativo neste caso é

$$e_2 = \left| \frac{1.5 - 1.3159}{1.5} \right| = 0.1227 > 0.02.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Terceira Iteração.

A terceira aproximação é

$$x_3 = \frac{(1.3159)f(1.5) - (1.5)f(1.3159)}{f(1.5) - f(1.3159)} = \frac{(1.3159)(0.875) - (1.5)(-0.0373)}{0.875 - (-0.0373)} = \frac{1.20735}{0.9123} = 1.3234.$$

Sendo $f(x_3) = f(1.3234) = -0.0056 > 0$ e $f(1) = -1 < 0$, segue que $f(1)f(1.3234) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.3234, 1.5]$. O erro relativo neste caso é

$$e_3 = \left| \frac{1.5 - 1.3234}{1.5} \right| = 0.1178 > 0.02.$$

Como o erro é maior que a tolerância, o processo continua.

Quarta Iteração.

A quarta aproximação é

$$x_4 = \frac{(1.3234)f(1.5) - (1.5)f(1.3234)}{f(1.5) - f(1.3234)} = \frac{(1.3234)(0.875) - (1.5)(-0.0056)}{0.875 - (-0.0056)} = \frac{1.166375}{0.8806} = 1.3245.$$

Sendo $f(x_3) = f(1.3245) = -0.00093 > 0$ e $f(1) = -1 < 0$, segue que $f(1)f(1.3245) > 0$. Logo o intervalo que contém a raiz é $[1.3245, 1.5]$. O erro relativo neste caso é

$$e_4 = \left| \frac{1.5 - 1.3245}{1.5} \right| = 0.117 > 0.02.$$

O erro ainda é maior que a tolerância. No entanto, com quatro iterações, a solução procurada é $\alpha \simeq 1.3245$.

O algoritmo para o método da Falsa Posição usado no Matlab para determinar a raiz da função $f(x) = x - \cos(x)$ é descrito na Seção 8.3 do Capítulo 8.

2.7 Aproximação Linear

A equação da reta tangente à uma curva f num ponto $(x_0, f(x_0))$ é dada por

$$y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0).$$

Neste caso, dizemos que a reta tangente é a aproximação linear da função f na vizinhança de $x = x_0$ e escrevemos

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0).$$

O erro cometido nessa aproximação é dado por

$$erro = |\text{valor aproximado} - \text{valor exato}|.$$

Exemplo 2.7.1 Calcular um valor aproximado para $\sqrt{25,4}$.

Solução: Considere a função $f(x) = \sqrt{x}$. Temos que

$$f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}}.$$

Usando aproximação linear, podemos escrever

$$\sqrt{x} \approx \sqrt{x_0} + \frac{1}{2\sqrt{x_0}}(x - x_0). \quad (2.7)$$

Tomemos $x_0 = 25$ (pois 25 é o número mais próximo de 25,4 que possui raiz exata). Substituindo $x = 25,4$ e $x_0 = 25$ em (2.7), segue que

$$\sqrt{25,4} \approx \sqrt{25} + \frac{1}{2\sqrt{25}}(25,4 - 25) = 5 + \frac{1}{10}(0,4) = 5,04.$$

Sabendo-se que $\sqrt{25,4} = 5,039841\dots$, o erro cometido é dado por

$$erro = |5,04 - 5,039841\dots| = 0,000159.$$

2.8 Sistemas de Equações Não Lineares

2.9 Exercícios

1) Encontrar uma raiz do polinômio $f(x) = x^5 - 3x + 1$ no intervalo $[0, 1]$ com três algarismos exatos e com um erro que não ultrapasse 0,001. **Sugestão:** Use o método de Newton-Raphson com $x_0 = 0,5$.

2) Dada a função $f(x) = x^2 + \ln x - 2$, encontrar um número $\alpha \in [1, 2]$ tal que $f(\alpha) = 0$. **Sugestão:** Use o método de Newton-Raphson com $x_0 = 1,2$.

3) Usando aproximação linear, calcule um valor aproximado para os seguintes números:

a) $\sqrt{36,7}$ b) $\sqrt{103}$ c) $\sqrt[4]{15}$ d) $\cos(43^\circ)$ e) $\text{sen}(88^\circ)$ f) $\text{sen}(0,5432)$.

Capítulo 3

Métodos Exatos e Iterativos para Resolução de Sistemas Lineares

3.1 Introdução

Uma equação é dita **linear** se em cada termo da equação possui no máximo uma variável e se cada variável possui no máximo potência um.

Um **sistema de n equações lineares** ou um **sistema linear de ordem n** é um sistema formado por n equações lineares envolvendo n variáveis.

A forma de um sistema de n equações e n incógnitas é

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n & = b_2 \\ \dots & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n & = b_n \end{cases} \quad (3.1)$$

o qual é representado na forma matricial por

$$AX = B, \quad (3.2)$$

onde

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

A matriz A é chamada de matriz dos coeficientes, B de matriz (ou vetor) dos termos independentes e X de matriz (ou vetor) solução.

Uma solução do sistema (3.1) é um vetor $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ que satisfaz esse sistema. Um sistema linear pode ter uma única solução, pode ter infinitas soluções ou pode não possuir solução.

A classificação de um sistema linear é feita em função de seu número de soluções. Quando o sistema possui uma única solução, dizemos que ele é um **sistema possível e determinado**. Quando possui infinitas soluções, dizemos que é um **sistema possível e indeterminado**. E quando o sistema não possui soluções, dizemos que ele é um **sistema impossível**. Por exemplo, dados os sistemas

$$(I) \begin{cases} x + y = 6 \\ x - y = 2 \end{cases} \quad (II) \begin{cases} x + y = 1 \\ 2x + 2y = 2 \end{cases} \quad (III) \begin{cases} x + y = 6 \\ x + y = 4 \end{cases}$$

podemos ver que (I) é um sistema linear possível e determinado, pois possui uma única solução dada por $X = (4, 2)$. O sistema (II) é um sistema linear possível e indeterminado, pois possui infinitas soluções da forma $X = (x, 1 - x)$ para todo x . Já o sistema (III) é linear impossível, pois não possui nenhuma solução.

Nosso objetivo aqui é desenvolver métodos numéricos para resolver sistemas lineares de ordem n que possuem solução única. Tais sistemas satisfazem a condição $\det(A) \neq 0$, onde A é a matriz dos coeficientes do sistema. Esses métodos numéricos se dividem em dois tipos: **Métodos exatos ou diretos**, que fornecem a solução do sistema através de um número finito de operações e **métodos iterativos**, que fornecem a solução do sistema, com uma dada precisão, a partir de uma sequência de aproximações para o valor do vetor solução, até que seja obtido um valor que satisfaça uma precisão pré-estabelecida.

Nos métodos exatos, destacamos o método de Gauss, Método da eliminação de Jordan e o método de decomposição LU. Nos métodos iterativos destacamos o método de Jacobi-Richardson e o método de Gauss-Seidel.

Veremos a seguir como usar cada método numérico para determinar a solução de um sistema linear de ordem n .

3.2 Métodos Exatos

3.2.1 Solução de Sistemas Lineares Triangulares

Um sistema linear de ordem n é dito **triangular inferior** se possui a forma

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 & = b_2 \\ \dots & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n & = b_n \end{cases} \quad (3.4)$$

onde $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, n$. A solução de um sistema linear inferior é obtida por substituição direta, ou seja, primeiro determina-se o valor de x_1 na primeira equação, depois substitui o valor de x_1 na segunda equação e determina-se o valor de x_2 , e assim por diante. Em geral,

3.2.2 Método de Eliminação de Gauss

O **Método de Eliminação de Gauss** ou **Método de Gauss Simples**, consiste em transformar um sistema linear dado num sistema linear triangular superior equivalente, através de operações elementares sobre as linhas do sistema original.

O sistema equivalente é obtido através de repetidas operações. Essas operações, em geral, constitui-se em substituir uma equação pela diferença entre essa mesma equação e uma outra equação multiplicada por uma constante não nula.

Passos para o Método de Eliminação de Gauss

Inicialmente, escrevemos a matriz ampliada do sistema (3.1) cuja forma é

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

Colocaremos a seguir o procedimento para determinar a solução do sistema (3.1) usando o método de eliminação de Gauss.

1º Passo: Zerar os coeficientes de x_1 presentes nas linhas 2, 3, ..., n (ou seja, fazer $a_{21} = a_{31} = \dots = a_{n1} = 0$). Isso é feito da seguinte maneira:

- Substituímos a linha 2 (L_2) pela combinação linear $L_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}L_1$;
- Substituímos a linha 3 (L_3) pela combinação linear $L_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}}L_1$;
- Em geral, substituímos a linha n (L_n) pela combinação linear $L_n - \frac{a_{n1}}{a_{11}}L_1$;

Dizemos que o elemento a_{11} é o pivô.

Caso algum elemento $a_{ii} = 0$, procurar outra linha k onde $a_{ki} \neq 0$ e trocar tais linhas. Caso não exista a linha k , o sistema linear não possui solução.

2º Passo: Zerar os coeficientes de x_2 presentes nas linhas 3, 4, ..., n da nova matriz formada após o 1º passo. Neste caso, o pivô é o elemento a_{22} da nova matriz e o procedimento é feito da seguinte maneira:

- Substituímos a linha 3 da nova matriz pela combinação linear $L_3 - \frac{a_{32}}{a_{22}}L_2$;
- Substituímos a linha 4 pela combinação linear $L_4 - \frac{a_{42}}{a_{22}}L_2$;
- Em geral, substituímos a linha n pela combinação linear $L_n - \frac{a_{n2}}{a_{22}}L_2$.

O procedimento continua até o passo $n - 1$.

(n-1)º Passo: Zerar os coeficientes de x_{n-1} presentes na linha n (ou seja, fazer $a_{nn} = 0$). Neste caso, o pivô é o elemento $a_{n-1,n-1}$ e o procedimento é feito da seguinte maneira:

- Substituímos a linha n pela combinação linear $L_n - \frac{a_{n,n-1}}{a_{n-1,n-1}}L_{n-1}$.

Exemplo 3.2.2 Use o Método de Eliminação de Gauss para resolver o sistema linear

$$\begin{cases} 6x_1 + 2x_2 - x_3 = 7 \\ 2x_1 + 4x_2 + x_3 = 7 \\ 3x_1 + 2x_2 + 8x_3 = 13 \end{cases}$$

Solução: A matriz ampliada é

$$Ma = \begin{pmatrix} 6 & 2 & -1 & 7 \\ 2 & 4 & 1 & 7 \\ 3 & 2 & 8 & 13 \end{pmatrix}$$

1º passo: Como $a_{11} = 6 \neq 0$ podemos usar esse elemento como pivô inicial. Eliminaremos os coeficientes de x_1 que aparecem na 2ª e 3ª linhas (no caso $a_{21} = 2$ e $a_{31} = 3$). Fazemos isto substituimos a linha 2 pela combinação linear $L_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}L_1 = L_2 - \frac{1}{3}L_1$ e substituimos a linha 3 pela combinação linear $L_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}}L_1 = L_3 - \frac{1}{2}L_1$. Fazendo isto, obtemos a matriz equivalente

$$Ma1 = \begin{pmatrix} 6 & 2 & -1 & 7 \\ 0 & \frac{10}{3} & \frac{4}{3} & \frac{14}{3} \\ 0 & 1 & \frac{17}{2} & \frac{19}{2} \end{pmatrix}$$

2º passo: O procedimento agora deve ser feito em relação à matriz $Ma1$. Como $a_{22} = \frac{10}{3} \neq 0$ podemos usar esse elemento como pivô da matriz $Ma1$. Eliminaremos os coeficientes de x_2 que aparecem na 3ª linha da matriz $Ma1$ (no caso $a_{32} = 1$). Fazemos isto substituimos a linha 3 pela combinação linear $L_3 - \frac{a_{32}}{a_{22}}L_2 = L_3 - \frac{3}{10}L_2$. Fazendo isto, obtemos a matriz equivalente

$$Ma2 = \begin{pmatrix} 6 & 2 & -1 & 7 \\ 0 & \frac{10}{3} & \frac{4}{3} & \frac{14}{3} \\ 0 & 0 & \frac{81}{10} & \frac{81}{10} \end{pmatrix}$$

Com isto temos o novo sistema linear equivalente

$$\begin{cases} 6x_1 + 2x_2 - x_3 = 7 \\ \frac{10}{3}x_2 + \frac{4}{3}x_3 = \frac{14}{3} \\ \frac{81}{10}x_3 = \frac{81}{10} \end{cases}$$

Esse novo sistema equivalente ao original é linear e triangular superior cuja solução $x_1 = x_2 = x_3 = 1$. Logo a solução do sistema original é $X = (1, 1, 1)$.

Exemplo 3.2.3 Use o Método de Eliminação de Gauss para resolver o sistema linear

$$\begin{cases} 3x_1 + 3x_2 + x_3 = 7 \\ 2x_1 + 2x_2 - x_3 = 3 \\ x_1 - x_2 + 5x_3 = 5 \end{cases}$$

Solução: A matriz ampliada é

$$Ma = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 & 7 \\ 2 & 2 & -1 & 3 \\ 1 & -1 & 5 & 5 \end{pmatrix}$$

1º passo: Como $a_{11} = 3 \neq 0$ podemos usar esse elemento como pivô inicial. Eliminaremos os coeficientes de x_1 que aparecem na 2ª e 3ª linhas (no caso $a_{21} = 2$ e $a_{31} = 1$). Fazemos isto substituindo a linha 2 pela combinação linear $L_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}L_1 = L_2 - \frac{2}{3}L_1$ e substituimos a linha 3 pela combinação linear $L_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}}L_1 = L_3 - \frac{1}{3}L_1$. Fazendo isto, obtemos a matriz equivalente

$$Ma1 = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & -\frac{5}{3} & -\frac{5}{3} \\ 0 & -2 & \frac{14}{3} & \frac{8}{3} \end{pmatrix}$$

2º passo: Vemos que o elemento a_{22} da matriz $Ma1$ é nulo. Por isto, não podemos usar o método com essa matriz. No entanto, podemos permutar as linhas 2 e 3 da matriz $Ma1$. Com essa permutação teremos a nova matriz

$$Ma2 = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 1 & 7 \\ 0 & -2 & \frac{14}{3} & \frac{8}{3} \\ 0 & 0 & -\frac{5}{3} & -\frac{5}{3} \end{pmatrix}$$

que já está na forma triangular.

Neste caso, o sistema equivalente é

$$\begin{cases} 3x_1 + 3x_2 + x_3 = 7 \\ -2x_2 + \frac{14}{3}x_3 = \frac{8}{3} \\ -\frac{5}{3}x_3 = -\frac{5}{3}, \end{cases}$$

cujas soluções são $x_1 = x_2 = x_3 = 1$. Logo a solução do sistema original é $X = (1, 1, 1)$.

3.2.3 Método de Eliminação de Gauss com Pivotamento Parcial

No método de Eliminação de Gauss, vários produtos com os multiplicadores são efetuados. Analisando a propagação de erros de arredondamentos para o algoritmo de Gauss, percebemos que todos os multiplicadores devem ser menores que 1 em módulo, ou seja, o pivô deve ser o elemento de maior valor absoluto da coluna (inclusive) para baixo.

O **Método de Eliminação de Gauss com Pivotamento Parcial**, consiste em escolher na coluna correspondente, em cada passo, o elemento de maior valor absoluto, da diagonal (inclusive) para baixo, e fazer uma permutação nas equações do sistema, de modo que esse elemento venha a ocupar a posição de pivô.

Exemplo 3.2.4 Use o Método de Eliminação de Gauss com Pivotamento Parcial para resolver o sistema linear

$$\begin{cases} 0.0001x_1 + 1.00x_2 = 1.00 \\ 1.00x_1 + 1.00x_2 = 2.00 \end{cases}$$

usando três dígitos significativos em todas as operações.

Solução: Devemos colocar, na posição de pivô, o elemento de maior valor absoluto da primeira coluna e depois usar o método de eliminação de Gauss. Neste caso, a matriz ampliada modificada é

$$\begin{pmatrix} 1.00 & 1.00 & 2.00 \\ 0.0001 & 1.00 & 1.00 \end{pmatrix}$$

Substituindo a segunda linha (L_2) da matriz ampliada modificada por $L_2 - \frac{0.0001}{1}L_1$, teremos a nova matriz

$$\begin{pmatrix} 1.00 & 1.00 & 2.00 \\ 0.00 & 1.00 & 1.00 \end{pmatrix}$$

que já está na forma triangular. Neste caso, o sistema equivalente é

$$\begin{cases} 1.00x_1 + 1.00x_2 = 2.00 \\ 1.00x_2 = 1.00 \end{cases}$$

cuja solução é

$$X = \begin{pmatrix} 1.00 \\ 1.00 \end{pmatrix}.$$

Essa solução é bem próxima da solução exata que é

$$X = \begin{pmatrix} 1.00010 \\ 0.99990 \end{pmatrix}.$$

Observação:

1. No exemplo anterior, se usarmos o método de eliminação de Gauss com três dígitos significativos, teremos a matriz ampliada

$$\begin{pmatrix} 0.000100 & 1.00 & 1.00 \\ 1.00 & 1.00 & 2.00 \end{pmatrix}$$

Substituindo a segunda linha (L_2) da matriz ampliada por $L_2 - \frac{1.00}{0.000100}L_1$, teremos a nova matriz

$$\begin{pmatrix} 0.000100 & 1.00 & 1.00 \\ 0.00 & -10000 & -10000 \end{pmatrix}$$

que já está na forma triangular. Neste caso, o sistema equivalente é

$$\begin{cases} 0.000100x_1 + 1.00x_2 = 1.00 \\ -10000x_2 = -10000 \end{cases}$$

cuja solução é

$$X = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Neste caso, a solução é bem diferente da solução exata.

2. A Matriz de Hilbert é conhecida por produzir um exemplo de um sistema linear que, se não utilizarmos pivotamento, a solução obtida poderá estar completamente errada. Os elementos desta matriz são dados por

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n.$$

Por exemplo, a matriz de Hilbert de ordem 4 é dada por

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} \end{pmatrix}$$

Exemplo 3.2.5 Use o Método de Eliminação de Gauss com Pivotamento Parcial para resolver o sistema linear

$$\begin{cases} 2x_1 + 5x_2 + 3x_3 = 8 \\ 5x_1 + 2x_2 + x_3 = 7 \\ x_1 + 3x_2 + 6x_3 = 13 \end{cases}$$

Solução: Devemos colocar, na posição de pivô, o elemento de maior valor absoluto da primeira coluna e depois usar o método de eliminação de Gauss. Neste caso, a matriz ampliada modificada é

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 & 7 \\ 2 & 5 & 3 & 8 \\ 1 & 3 & 6 & 13 \end{pmatrix}$$

Substituindo a segunda linha (L_2) da matriz ampliada modificada por $L_2 - \frac{2}{5}L_1$ e a terceira linha (L_3) por $L_3 - \frac{1}{5}L_1$, teremos a nova matriz

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 & 7 \\ 0 & \frac{21}{5} & \frac{13}{5} & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{13}{5} & \frac{29}{5} & \frac{58}{5} \end{pmatrix}$$

Substituindo a terceira linha (L_3) por $L_3 - \frac{13}{21}L_2$, teremos a nova matriz

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 & 7 \\ 0 & \frac{21}{5} & \frac{13}{5} & \frac{26}{5} \\ 0 & 0 & \frac{88}{21} & \frac{176}{21} \end{pmatrix}$$

O sistema triangular equivalente é

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 & = 7 \\ 0x_1 + \frac{21}{5}x_2 + \frac{13}{5}x_3 & = \frac{26}{5} \\ 0x_1 + 0x_2 + \frac{88}{21}x_3 & = \frac{176}{21} \end{cases}$$

cuja solução é

$$x_1 = 1, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = 2.$$

3.2.4 Método de Jordan

Chamamos de **sistema diagonal** ao sistema que possui os elementos a_{ij} da matriz dos coeficientes iguais a zero, para $i \neq j$, $i, j = 1, 2, \dots, n$, ou seja, um sistema cuja matriz dos coeficientes possui a forma

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

O **Método de Jordan** consiste em efetuar operações sobre as equações do sistema original, com a finalidade de obter um sistema diagonal equivalente.

Exemplo 3.2.6 Use o Método de Jordan para resolver o sistema linear

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + 3x_3 & = 1 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 & = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 + 2x_3 & = 4 \end{cases}$$

Solução: A matriz ampliada do sistema é

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 3 & 1 \\ 1 & 5 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

1º Passo: O primeiro pivô é o elemento $a_{11} = 5$. Neste caso, devemos zerar os elementos $a_{21} = 1$ e $a_{31} = 2$. Para isto, substituímos a linha L_2 por $L_2 - \frac{1}{5}L_1$ e a linha L_3 por $L_3 - \frac{2}{5}L_1$. Fazendo isto, teremos a seguinte matriz

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & \frac{23}{5} & \frac{2}{5} & \frac{4}{5} \\ 0 & \frac{11}{5} & \frac{4}{5} & \frac{18}{5} \end{pmatrix}.$$

2º Passo: O pivô agora é o elemento $a_{22} = \frac{23}{5}$. Devemos zerar os elementos $a_{12} = 2$ e $a_{32} = \frac{11}{5}$. Para isto, substituímos a linha L_1 por $L_1 - \frac{10}{23}L_2$ e a linha L_3 por $L_3 - \frac{11}{23}L_2$. Fazendo isto, teremos a seguinte matriz

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 & \frac{65}{23} & \frac{15}{23} \\ 0 & \frac{23}{5} & \frac{2}{5} & \frac{4}{5} \\ 0 & 0 & \frac{14}{23} & \frac{74}{23} \end{pmatrix}.$$

3º Passo: O pivô agora é o elemento $a_{33} = \frac{14}{23}$. Neste caso, devemos zerar os elementos $a_{13} = \frac{65}{23}$ e $a_{23} = \frac{2}{5}$. Para isto, substituímos a linha L_1 por $L_1 - \frac{65}{14}L_3$ e a linha L_2 por $L_2 - \frac{23}{35}L_3$. Fazendo isto, teremos a seguinte matriz

$$\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & -\frac{2300}{161} \\ 0 & \frac{23}{5} & 0 & -\frac{46}{35} \\ 0 & 0 & \frac{14}{23} & \frac{74}{23} \end{pmatrix}.$$

A matriz equivalente está na forma diagonal e o sistema diagonal equivalente é dado por

$$\begin{cases} 5x_1 = -\frac{2300}{161} \\ \frac{23}{5}x_2 = -\frac{46}{35} \\ \frac{14}{23}x_3 = \frac{74}{23}, \end{cases}$$

cuja solução é

$$x_1 = -\frac{460}{161} = -2.8571, \quad x_2 = -\frac{46}{161} = -0.2857 \quad \text{e} \quad x_3 = \frac{37}{7} = 5.2857.$$

3.2.5 Decomposição LU

O **Método de Decomposição LU** consiste em fatorar a matriz dos coeficientes A em um produto de duas matrizes L e U , onde L deve ser uma matriz triangular inferior e U uma matriz triangular superior. Ou seja, dada a matriz

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

a decomposição LU consiste em escrever

$$A = LU,$$

onde

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ L_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ L_{31} & L_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{n1} & L_{n2} & L_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & \dots & U_{1n} \\ 0 & U_{22} & U_{23} & \dots & U_{2n} \\ 0 & 0 & U_{33} & \dots & U_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & U_{nn} \end{pmatrix}.$$

Os elementos das matrizes L e U são obtidos calculando os elementos das linhas de U e os elementos das colunas de L, seguindo a seguinte ordem:

1ª linha de U: é obtida fazendo o produto da 1ª linha de L por todas as colunas de U e igualando aos elementos da 1ª linha de A. Assim, teremos

$$\begin{aligned} 1.U_{11} = a_{11} &\Rightarrow U_{11} = a_{11}, \\ 1.U_{12} = a_{12} &\Rightarrow U_{12} = a_{12}, \\ &\vdots \\ 1.U_{1n} = a_{1n} &\Rightarrow U_{1n} = a_{1n}. \end{aligned}$$

Conclusão: $U_{1j} = a_{1j}$, $j = 1, 2, \dots, n$.

1ª coluna de L: é obtida fazendo o produto de todas as linhas de L (a partir da segunda) pela 1ª coluna de U e igualando aos elementos da 1ª coluna de A (abaixo da diagonal principal). Assim, teremos

$$\begin{aligned} L_{21}.U_{11} = a_{21} &\Rightarrow L_{21} = \frac{a_{21}}{U_{11}}, \\ L_{31}.U_{11} = a_{31} &\Rightarrow L_{31} = \frac{a_{31}}{U_{11}}, \\ &\vdots \\ L_{n1}.U_{11} = a_{n1} &\Rightarrow L_{n1} = \frac{a_{n1}}{U_{11}}. \end{aligned}$$

Conclusão: $L_{i1} = \frac{a_{i1}}{U_{11}}$, $i = 2, 3, \dots, n$.

2ª linha de U: é obtida fazendo o produto da 2ª linha de L por todas as colunas de U (a partir da segunda) e igualando aos elementos da 2ª linha de A (da diagonal principal em diante). Assim, teremos

$$\begin{aligned} L_{21}.U_{12} + U_{22} = a_{22} &\Rightarrow U_{22} = a_{22} - L_{21}U_{12}, \\ L_{21}.U_{13} + U_{23} = a_{23} &\Rightarrow U_{23} = a_{23} - L_{21}U_{13}, \\ &\vdots \\ L_{21}.U_{1n} + U_{2n} = a_{2n} &\Rightarrow U_{2n} = a_{2n} - L_{21}U_{1n}. \end{aligned}$$

Conclusão: $U_{2j} = a_{2j} - L_{21}U_{1j}$, $j = 2, 3, \dots, n$.

2ª coluna de L: é obtida fazendo o produto de todas as linhas de L (a partir da terceira) pela 2ª coluna de U e igualando aos elementos da 2ª coluna de A (abaixo da diagonal

principal). Assim, teremos

$$\begin{aligned} L_{31} \cdot U_{12} + L_{32} \cdot U_{22} = a_{32} &\Rightarrow L_{32} = \frac{a_{32} - L_{31}U_{12}}{U_{22}}, \\ L_{41} \cdot U_{12} + L_{42} \cdot U_{22} = a_{42} &\Rightarrow L_{42} = \frac{a_{42} - L_{41}U_{12}}{U_{22}}, \\ &\vdots \\ L_{n1} \cdot U_{12} + L_{n2} \cdot U_{22} = a_{n2} &\Rightarrow L_{n2} = \frac{a_{n2} - L_{n1}U_{12}}{U_{22}}. \end{aligned}$$

Conclusão: $L_{i2} = \frac{a_{i2} - L_{i1}U_{12}}{U_{22}}$, $i = 3, 4, \dots, n$.

Seguindo com o processo, concluímos que os elementos das matrizes L e U podem ser obtidos a partir das fórmulas:

$$\begin{cases} U_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}U_{kj}, & i \leq j, \\ L_{ij} = \frac{1}{U_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik}U_{kj} \right), & i > j. \end{cases}$$

É necessário saber em que condições podemos decompor a matriz A no produto LU. Essas condições são dadas no Teorema a seguir.

Teorema 3.2.1 *Sejam $A = (a_{ij})$ uma matriz quadrada de ordem n e A_k as sub-matrizes de A formadas pelas k primeiras linhas e k primeiras colunas de A . Se $\det(A_k) \neq 0$ para $k = 1, 2, \dots, n - 1$, então existe uma única matriz triangular inferior $L = (L_{ij})$, com $L_{11} = L_{22} = \dots = L_{nn} = 1$ e uma única matriz triangular superior $U = (U_{ij})$, tal que $A = LU$. Além disso, $\det(A) = U_{11}U_{22}\dots U_{nn}$.*

A aplicação da decomposição LU na resolução de sistemas lineares pode ser feita da seguinte forma: Considere um sistema $AX = B$, de ordem n , de tal forma que este sistema seja possível e determinado e que A satisfaça as condições de decomposição LU. Então podemos escrever o sistema na forma $LUX = B$. Assim, temos transformado um sistema linear $AX = B$ num sistema linear equivalente $LUX = B$, cuja solução é facilmente obtida. Fazendo $UX = Y$, teremos o sistema $LY = B$. Neste caso, a solução do sistema $LUX = B$ é obtido resolvendo dois sistemas triangulares: $LY = B$ e $UX = Y$.

Exemplo 3.2.7 *Considere a matriz*

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 3 & 1 & 4 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}.$$

- a) Verifique se A satisfaz as condições de decomposição LU;
- b) Decomponha A em LU;

- c) Use a decomposição LU do item b) para calcular o determinante de A;
d) Use a decomposição LU do item b) para resolver o seguinte sistema

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \\ 3x_1 + x_2 + 4x_3 = -7 \\ x_1 + x_2 + 3x_3 = -5. \end{cases}$$

Solução:

a) As sub-matrizes A_k de A são

$$A_1 = \begin{pmatrix} 5 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad A_2 = \begin{pmatrix} 5 & 2 \\ 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

Como $\det(A_1) = 5 \neq 0$ e $\det(A_2) = -1 \neq 0$, a matriz A satisfaz as condições de decomposição LU.

b) Devemos ter a decomposição $A = LU$, onde

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ L_{21} & 1 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad U = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix}.$$

Para obter a 1ª linha de U usamos a fórmula $U_{1j} = a_{1j}$, com $j=1,2,3$. Neste caso, temos

$$U_{11} = a_{11} = 5, \quad U_{12} = a_{12} = 2 \quad \text{e} \quad U_{13} = a_{13} = 1.$$

Para obter a 1ª coluna de L usamos a fórmula $L_{i1} = \frac{a_{i1}}{U_{11}}$, com $i=2,3$. Neste caso, temos

$$L_{21} = \frac{a_{21}}{U_{11}} = \frac{3}{5} \quad \text{e} \quad L_{31} = \frac{a_{31}}{U_{11}} = \frac{1}{5}.$$

Para obter a 2ª linha de U usamos a fórmula $U_{2j} = a_{2j} - L_{21}U_{1j}$, com $j=2,3$. Neste caso, temos

$$U_{22} = a_{22} - L_{21}U_{12} = 1 - \frac{3}{5}(2) = -\frac{1}{5} \quad \text{e} \quad U_{23} = a_{23} - L_{21}U_{13} = 4 - \frac{3}{5}(1) = \frac{17}{5}.$$

Para obter a 2ª coluna de L usamos a fórmula $L_{i2} = \frac{a_{i2} - L_{i1}U_{12}}{U_{22}}$, $i = 3$. Neste caso, temos

$$L_{32} = \frac{a_{32} - L_{31}U_{12}}{U_{22}} = \frac{1 - \frac{1}{5}(2)}{-\frac{1}{5}} = -3$$

Para obter a 3ª linha de U, temos

$$U_{33} = a_{33} - L_{31}U_{13} - L_{32}U_{23} = 3 - \frac{1}{5}(1) - (-3)\frac{17}{5} = 13.$$

Logo, teremos as matrizes

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{3}{5} & 1 & 0 \\ \frac{1}{5} & -3 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad U = \begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 0 & -\frac{1}{5} & \frac{17}{5} \\ 0 & 0 & 13 \end{pmatrix}.$$

c) Temos

$$\det(A) = U_{11}U_{22}U_{33} = (5)\left(-\frac{1}{5}\right)(13) = -13.$$

d) A solução $X = (x_1, x_2, x_3)$ é obtida resolvendo os dois sistemas triangulares: $LY = B$ e $UX = Y$, onde $Y = (y_1, y_2, y_3)$ deve ser determinado.

1º passo: Resolver o sistema $LY = B$.

O sistema $LY = B$ possui a seguinte forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{3}{5} & 1 & 0 \\ \frac{1}{5} & -3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -7 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

Donde obtemos o seguinte sistema equivalente:

$$\begin{cases} y_1 & = 0 \\ \frac{3}{5}y_1 + y_2 & = -7 \\ \frac{1}{5}y_1 - 3y_2 + y_3 & = -5. \end{cases}$$

A solução $y_1 = 0$, $y_2 = -7$ e $y_3 = -26$ é encontrada facilmente resolvendo o sistema triangular inferior.

2º passo: Resolver o sistema $UX = Y$.

O sistema $UX = Y$ possui a seguinte forma matricial:

$$\begin{pmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 0 & -\frac{1}{5} & \frac{17}{5} \\ 0 & 0 & 13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -7 \\ -26 \end{pmatrix}.$$

Donde obtemos o seguinte sistema equivalente:

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + x_3 & = 0 \\ -\frac{1}{5}x_2 + \frac{17}{5}x_3 & = -7 \\ 13x_3 & = -26. \end{cases}$$

A solução $x_1 = 0$, $x_2 = 1$ e $x_3 = -2$ é encontrada facilmente resolvendo o sistema triangular superior.

Logo a solução do sistema é

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

3.3 Métodos Iterativos

Considere um sistema linear da forma $AX = B$, onde A é uma matriz quadrada de ordem n , X é o vetor $n \times 1$ que representa as variáveis e B é o vetor $n \times 1$ que representa os termos independentes, isto é,

Os métodos iterativos tem a função de transformar o sistema $AX = B$ num sistema da forma $X = CX + D$, onde C é uma matriz quadrada de ordem n chamada de matriz de iteração e D é um vetor $n \times 1$ formado após a transformação.

Neste caso, os métodos iterativos consiste em tomar uma aproximação inicial X^0 e, a partir desta, determinar uma sequência de aproximações da forma

$$X^{k+1} = CX^k + D, \quad k = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Dependendo da forma da matriz C a sequência gerada pelo processo iterativo pode ou não convergir para a solução do sistema. Por isso, é necessário, em cada método, utilizar um teste de convergência do processo iterativo usado. Também é necessário ter um critério de parada para que o processo não torne-se infinito.

Aqui, estudaremos o Método Iterativo de Gauss-Jacobi e o Método Iterativo de Gauss-Seidel.

3.3.1 Método de Gauss-Jacobi

Considere o sistema linear $AX = B$ na forma

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n & = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n & = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \dots + a_{3n}x_n & = b_3 \\ \vdots & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{nn}x_n & = b_n \end{cases} \quad (3.6)$$

onde os $a_{ii} \neq 0$ para $i = 1, 2, \dots, n$. Isolando os x_i em cada equação, obtemos

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \dots - a_{1n}x_n) \\ x_2 &= \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \dots - a_{2n}x_n) \\ x_3 &= \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2 - \dots - a_{3n}x_n) \\ &\vdots \\ x_n &= \frac{1}{a_{nn}}(b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}). \end{aligned}$$

Este novo sistema pode ser escrito na forma matricial

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \dots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \dots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 & \dots & -\frac{a_{3n}}{a_{33}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n3}}{a_{nn}} & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \frac{b_3}{a_{33}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

Assim, transformamos o sistema linear $AX = B$ no sistema $X = CX + D$.

Dado o sistema (3.6), o **Método Iterativo de Gauss-Jacobi** consiste em determinar uma sequência

$$X^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}), \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

a partir de valores iniciais

$$X^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}),$$

usando o processo iterativo

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

Critério de Parada

Dada uma tolerância $\epsilon > 0$, o processo iterativo de Gauss-Jacobi deve parar quando o seguinte teste for satisfeito:

$$\frac{\max(|X^{(k+1)} - X^{(k)}|)}{\max(|X^{(k+1)}|)} < \epsilon, \quad (3.8)$$

onde ϵ é uma precisão prefixada, $X^{(k)}$ e $X^{(k+1)}$ são duas aproximações consecutivas para a solução do sistema.

Critérios de Convergência

Vejamos abaixo alguns critérios de convergência para o método de Gauss-Jacobi.

Teorema 3.3.1 (Critério das Linhas) *Considere o sistema linear $AX = B$ como em (3.6). Se*

$$\max_{1 \leq k \leq n} \left\{ \frac{1}{|a_{kk}|} \sum_{j=1, j \neq k}^n |a_{kj}| \right\} < 1,$$

então o Método de Gauss-Jacobi gera uma sequência $X^{(k)}$ que converge para a solução do sistema.

Teorema 3.3.2 (Critério das Colunas) Considere o sistema linear $AX = B$ como em (3.6). Se

$$\max_{1 \leq k \leq n} \left\{ \frac{1}{|a_{kk}|} \sum_{i=1, i \neq k}^n |a_{ik}| \right\} < 1,$$

então o Método de Gauss-Jacobi gera uma sequência $X^{(k)}$ que converge para a solução do sistema.

Teorema 3.3.3 (Critério da Matriz Estritamente Diagonalmente Dominante) Considere o sistema linear $AX = B$ como em (3.6). Se A é uma matriz estritamente diagonalmente dominante, isto é, se

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

então o Método de Gauss-Jacobi gera uma sequência $X^{(k)}$ que converge para a solução do sistema.

Exemplo 3.3.1 Resolver o sistema

$$\begin{cases} 10x_1 + 2x_2 + x_3 & = 7 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 & = -8 \\ 2x_1 + 3x_2 + 10x_3 & = 6 \end{cases}$$

pelo método de Gauss-Jacobi, com $X^{(0)} = \left(\frac{7}{10}, -\frac{8}{5}, \frac{3}{5}\right)$ e uma tolerância $\epsilon = 0.01$.

Solução: Vejamos que a matriz dos coeficientes do sistema é estritamente diagonalmente dominante. De fato, temos

$$|a_{12}| + |a_{13}| = |2| + |1| = 3 < |10| = |a_{11}|;$$

$$|a_{21}| + |a_{23}| = |1| + |1| = 2 < |5| = |a_{22}|;$$

$$|a_{31}| + |a_{32}| = |2| + |3| = 5 < |10| = |a_{33}|.$$

Logo, o processo iterativo de Gauss-Jacobi é convergente.

O processo iterativo é montado isolando as variáveis x_1, x_2 e x_3 das três equações do sistema, respectivamente. Neste caso, teremos

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{10}(7 - 2x_2^{(k)} - x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{5}(-8 - x_1^{(k)} - x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{10}(6 - 2x_1^{(k)} - 3x_2^{(k)}). \end{aligned} \tag{3.9}$$

A aproximação inicial é $X^{(0)} = (\frac{7}{10}, -\frac{8}{5}, \frac{3}{5})$ e a tolerância é $\epsilon = 0.01$.

1ª Aproximação

Fazendo $k = 0$ em (3.9), teremos a 1ª aproximação $X^{(1)} = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)})$, onde

$$\begin{aligned} x_1^{(1)} &= \frac{1}{10}(7 - 2x_2^{(0)} - x_3^{(0)}) = \frac{1}{10}(7 + \frac{16}{5} - \frac{3}{5}) = \frac{24}{25} = 0.96 \\ x_2^{(1)} &= \frac{1}{5}(-8 - x_1^{(0)} - x_3^{(0)}) = \frac{1}{5}(-8 - \frac{7}{10} - \frac{3}{5}) = -\frac{93}{50} = -1.86 \\ x_3^{(1)} &= \frac{1}{10}(6 - 2x_1^{(0)} - 3x_2^{(0)}) = \frac{1}{10}(6 - \frac{7}{5} + \frac{24}{5}) = \frac{47}{50} = 0.94. \end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(1)} - X^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{24}{25} \\ -\frac{93}{50} \\ \frac{47}{50} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{7}{10} \\ -\frac{8}{5} \\ \frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{13}{50} \\ -\frac{13}{50} \\ \frac{17}{50} \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.8), temos

$$\frac{\max(|X^{(1)} - X^{(0)}|)}{\max(|X^{(1)}|)} = \frac{\frac{17}{50}}{\frac{93}{50}} = \frac{17}{93} = 0.1828 > \epsilon.$$

O processo continua.

2ª Aproximação

Fazendo $k = 1$ em (3.9), teremos a 2ª aproximação $X^{(2)} = (x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, x_3^{(2)})$, onde

$$\begin{aligned} x_1^{(2)} &= \frac{1}{10}(7 - 2x_2^{(1)} - x_3^{(1)}) = \frac{1}{10}(7 + \frac{93}{25} - \frac{47}{50}) = \frac{489}{500} = 0.978 \\ x_2^{(2)} &= \frac{1}{5}(-8 - x_1^{(1)} - x_3^{(1)}) = \frac{1}{5}(-8 - \frac{24}{25} - \frac{47}{50}) = -\frac{99}{50} = -1.98 \\ x_3^{(2)} &= \frac{1}{10}(6 - 2x_1^{(1)} - 3x_2^{(1)}) = \frac{1}{10}(6 - \frac{48}{25} + \frac{279}{50}) = \frac{483}{500} = 0.966. \end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(2)} - X^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{489}{500} \\ -\frac{99}{50} \\ \frac{483}{500} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{24}{25} \\ -\frac{93}{50} \\ \frac{47}{50} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{9}{500} \\ -\frac{3}{25} \\ \frac{13}{500} \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.8), temos

$$\frac{\max(|X^{(2)} - X^{(1)}|)}{\max(|X^{(2)}|)} = \frac{\frac{3}{25}}{\frac{99}{50}} = \frac{2}{33} = 0.0606 > \epsilon.$$

O processo continua.

3ª Aproximação

Fazendo $k = 2$ em (3.9), teremos a 3ª aproximação $X^{(3)} = (x_1^{(3)}, x_2^{(3)}, x_3^{(3)})$, onde

$$\begin{aligned} x_1^{(3)} &= \frac{1}{10}(7 - 2x_2^{(2)} - x_3^{(2)}) = \frac{1}{10}\left(7 + \frac{99}{25} - \frac{483}{500}\right) = \frac{4997}{5000} = 0.9994 \\ x_2^{(3)} &= \frac{1}{5}(-8 - x_1^{(2)} - x_3^{(2)}) = \frac{1}{5}\left(-8 - \frac{489}{500} - \frac{483}{500}\right) = -\frac{1243}{625} = -1.9888 \\ x_3^{(3)} &= \frac{1}{10}(6 - 2x_1^{(2)} - 3x_2^{(2)}) = \frac{1}{10}\left(6 - \frac{489}{250} + \frac{297}{50}\right) = \frac{624}{625} = 0.9984. \end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(3)} - X^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{4997}{5000} \\ -\frac{1243}{625} \\ \frac{624}{625} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{489}{500} \\ -\frac{99}{50} \\ \frac{483}{500} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{107}{5000} \\ -\frac{11}{1250} \\ \frac{81}{2500} \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.8), temos

$$\frac{\max(|X^{(3)} - X^{(2)}|)}{\max(|X^{(3)}|)} = \frac{\frac{81}{2500}}{\frac{1243}{625}} = \frac{81}{4972} = 0.0163 > \epsilon.$$

O processo continua.

4ª Aproximação

Fazendo $k = 3$ em (3.9), teremos a 4ª aproximação $X^{(4)} = (x_1^{(4)}, x_2^{(4)}, x_3^{(4)})$, onde

$$\begin{aligned} x_1^{(4)} &= \frac{1}{10}(7 - 2x_2^{(3)} - x_3^{(3)}) = \frac{1}{10}\left(7 + \frac{2486}{625} - \frac{624}{625}\right) = \frac{6237}{6250} = 0.9979 \\ x_2^{(4)} &= \frac{1}{5}(-8 - x_1^{(3)} - x_3^{(3)}) = \frac{1}{5}\left(-8 - \frac{4997}{5000} - \frac{624}{625}\right) = -\frac{49989}{25000} = -1.9996 \\ x_3^{(4)} &= \frac{1}{10}(6 - 2x_1^{(3)} - 3x_2^{(3)}) = \frac{1}{10}\left(6 - \frac{4997}{2500} + \frac{3729}{625}\right) = \frac{24919}{25000} = 0.9968. \end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(4)} - X^{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{6237}{6250} \\ -\frac{49989}{25000} \\ \frac{24919}{25000} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \frac{4997}{5000} \\ -\frac{1243}{625} \\ \frac{624}{625} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{37}{25000} \\ -\frac{269}{25000} \\ -\frac{41}{25000} \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.8), temos

$$\frac{\max(|X^{(4)} - X^{(3)}|)}{\max(|X^{(4)}|)} = \frac{\frac{269}{25000}}{\frac{49989}{25000}} = \frac{269}{49989} = 0.0054 < \epsilon.$$

Neste caso, o processo deve parar. A solução aproximada do sistema, com erro relativo inferior a 0.01, é dada por

$$X = \begin{pmatrix} 0.9979 \\ -1.9996 \\ 0.9978 \end{pmatrix}$$

A solução exata pode ser calculada diretamente no Matlab e é dada por

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

Exercício: Resolver o sistema

$$\begin{cases} -7x_1 + 3x_2 + 2x_3 & = -2 \\ x_1 + 3x_2 - x_3 & = 3 \\ x_1 + x_2 - 3x_3 & = -1 \end{cases}$$

pelo método de Gauss-Jacobi, com $X^{(0)} = (0.5, 0.5, 0.5)$ e uma tolerância $\epsilon = 0.1$.

3.3.2 Método de Gauss-Seidel

Dado o sistema linear (3.6), o **Método Iterativo de Gauss-Seidel** consiste em determinar uma sequência

$$X^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}), \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

a partir de valores iniciais

$$X^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}),$$

usando o processo iterativo

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

Notemos que, no processo iterativo de Gauss-Seidel, calcula-se o valor da aproximação $x_i^{(k+1)}$ utilizando os valores das aproximações $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \dots, x_{i-1}^{(k+1)}$ já calculadas. Por este motivo, o método de Gauss-Seidel é também chamado de **Método dos Deslocamentos Sucessivos**.

Critério de Parada

Dada uma tolerância $\epsilon > 0$, o processo iterativo de Gauss-Seidel deve parar quando o seguinte teste for satisfeito:

$$\frac{\max(|x^{(k+1)} - x^{(k)}|)}{\max(|x^{(k+1)}|)} < \epsilon, \quad (3.10)$$

onde ϵ é uma precisão prefixada, $x^{(k)}$ e $x^{(k+1)}$ são duas aproximações consecutivas para a solução do sistema.

Critérios de Convergência

Para a convergência do método de Gauss-Seidel, podemos usar o critério das linhas e o critério da matriz estritamente diagonalmente dominante usado no método de Gauss-Jacobi. Entretanto, se esses critérios não forem satisfeitos, podemos utilizar o critério de Sassenfeld que será dado abaixo.

Teorema 3.3.4 (Critério de Sassenfeld) *Considere o sistema linear $AX = B$ como em (3.6). O Método de Gauss-Seidel gera uma sequência $X^{(k)}$ que converge para a solução do sistema se*

$$\max_{1 \leq k \leq n} \beta_k < 1,$$

onde os β_k são calculados por recorrência através da fórmula

$$\beta_k = \frac{1}{|a_{kk}|} \left(\sum_{j=1}^{k-1} |a_{kj}| \beta_j + \sum_{j=k+1}^n |a_{kj}| \right) < 1, \quad k = 1, 2, 3, \dots, n.$$

Exemplo 3.3.2 *Resolver o sistema*

$$\begin{cases} 5x_1 + x_2 + x_3 & = 5 \\ 3x_1 + 4x_2 + x_3 & = 6 \\ 3x_1 + 3x_2 + 6x_3 & = 0 \end{cases}$$

pelos método de Gauss-Seidel, com $X^{(0)} = (0, 0, 0)$ e uma tolerância $\epsilon = 0.01$.

Solução: A matriz dos coeficientes do sistema não é estritamente diagonalmente dominante, pois

$$|a_{21}| + |a_{23}| = |3| + |1| = 4 = |a_{22}|.$$

Vejamos agora se o critério de Sassenfeld é satisfeito. Temos

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{1}{|a_{11}|} (|a_{12}| + |a_{13}|) = \frac{1}{|5|} (|1| + |1|) = \frac{2}{5} = 0.4 < 1 \\ \beta_2 &= \frac{1}{|a_{22}|} (|a_{21}| \beta_1 + |a_{23}|) = \frac{1}{|4|} (|3|(0.4) + |1|) = 0.55 < 1 \\ \beta_3 &= \frac{1}{|a_{33}|} (|a_{31}| \beta_1 + |a_{32}| \beta_2) = \frac{1}{|6|} (|3|(0.4) + |3|(0.55)) = 0.475 < 1. \end{aligned}$$

Segue que

$$\max_{1 \leq k \leq 3} \beta_k = 0.55 < 1.$$

Portanto, pelo critério de Sassenfeld, o processo iterativo de Gauss-Seidel é convergente.

O processo iterativo é montado isolando as variáveis x_1, x_2 e x_3 das três equações do sistema, respectivamente. Neste caso, teremos

$$\begin{aligned}x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{5}(5 - x_2^{(k)} - x_3^{(k)}) \\x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{4}(6 - 3x_1^{(k+1)} - x_3^{(k)}) \\x_3^{(k+1)} &= \frac{1}{6}(-3x_1^{(k+1)} - 3x_2^{(k+1)}).\end{aligned}\tag{3.11}$$

Tomemos $X^{(0)} = (0, 0, 0)$ como aproximação inicial e como tolerância $\epsilon = 0.01$.

1ª Aproximação

Fazendo $k = 0$ em (3.11), teremos a 1ª aproximação $X^{(1)} = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)})$, onde

$$\begin{aligned}x_1^{(1)} &= \frac{1}{5}(5 - x_2^{(0)} - x_3^{(0)}) = \frac{1}{5}(5 - 0 - 0) = \frac{5}{5} = 1 \\x_2^{(1)} &= \frac{1}{4}(6 - 3x_1^{(1)} - x_3^{(0)}) = \frac{1}{4}(6 - 3(1) - 0) = \frac{3}{4} = 0.75 \\x_3^{(1)} &= \frac{1}{6}(-3x_1^{(1)} - 3x_2^{(1)}) = \frac{1}{6}(-3(1) - 3(0.75)) = -\frac{7}{8} = -0.875.\end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(1)} - X^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.75 \\ -0.875 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.75 \\ -0.875 \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.10), temos

$$\frac{\max(|X^{(1)} - X^{(0)}|)}{\max(|X^{(1)}|)} = \frac{1}{1} = 1 > \epsilon.$$

O processo continua.

2ª Aproximação

Fazendo $k = 1$ em (3.11), teremos a 2ª aproximação $X^{(2)} = (x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, x_3^{(2)})$, onde

$$\begin{aligned}x_1^{(2)} &= \frac{1}{5}(5 - x_2^{(1)} - x_3^{(1)}) = \frac{1}{5}(5 - 0.75 + 0.875) = 1.025 \\x_2^{(2)} &= \frac{1}{4}(6 - 3x_1^{(2)} - x_3^{(1)}) = \frac{1}{4}(6 - 3(1.025) + 0.875) = 0.95 \\x_3^{(2)} &= \frac{1}{6}(-3x_1^{(2)} - 3x_2^{(2)}) = \frac{1}{6}(-3(1.025) - 3(0.95)) = -0.9875.\end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(2)} - X^{(1)} = \begin{pmatrix} 1.025 \\ 0.95 \\ -0.9875 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0.75 \\ -0.875 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.025 \\ 0.2 \\ -0.1125 \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.10), temos

$$\frac{\max(|X^{(2)} - X^{(1)}|)}{\max(|X^{(2)}|)} = \frac{0.2}{1.025} = 0.1951 > \epsilon.$$

O processo continua.

3ª Aproximação

Fazendo $k = 2$ em (3.11), teremos a 3ª aproximação $X^{(3)} = (x_1^{(3)}, x_2^{(3)}, x_3^{(3)})$, onde

$$\begin{aligned} x_1^{(3)} &= \frac{1}{5} \left(5 - x_2^{(2)} - x_3^{(2)} \right) = \frac{1}{5} \left(5 - 0.95 + 0.9875 \right) = 1.0075 \\ x_2^{(3)} &= \frac{1}{4} \left(6 - 3x_1^{(3)} - x_3^{(2)} \right) = \frac{1}{4} \left(6 - 3(1.0075) + 0.9875 \right) = 0.9913 \\ x_3^{(3)} &= \frac{1}{6} \left(-3x_1^{(3)} - 3x_2^{(3)} \right) = \frac{1}{6} \left(-3(1.0075) - 3(0.9913) \right) = -0.9994. \end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(3)} - X^{(2)} = \begin{pmatrix} 1.0075 \\ 0.9913 \\ -0.9994 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1.025 \\ 0.95 \\ -0.9875 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.0175 \\ 0.0413 \\ -0.0119 \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.10), temos

$$\frac{\max(|X^{(3)} - X^{(2)}|)}{\max(|X^{(3)}|)} = \frac{0.0413}{1.0075} = 0.041 > \epsilon.$$

O processo continua.

4ª Aproximação

Fazendo $k = 3$ em (3.11), teremos a 4ª aproximação $X^{(4)} = (x_1^{(4)}, x_2^{(4)}, x_3^{(4)})$, onde

$$\begin{aligned} x_1^{(4)} &= \frac{1}{5} \left(5 - x_2^{(3)} - x_3^{(3)} \right) = \frac{1}{5} \left(5 - 0.9913 + 0.9994 \right) = 1.0016 \\ x_2^{(4)} &= \frac{1}{4} \left(6 - 3x_1^{(4)} - x_3^{(3)} \right) = \frac{1}{4} \left(6 - 3(1.0016) + 0.9994 \right) = 0.9986 \\ x_3^{(4)} &= \frac{1}{6} \left(-3x_1^{(4)} - 3x_2^{(4)} \right) = \frac{1}{6} \left(-3(1.0016) - 3(0.9986) \right) = -1.0001. \end{aligned}$$

Para verificar o critério de parada, vejamos que

$$X^{(4)} - X^{(3)} = \begin{pmatrix} 1.0016 \\ 0.9986 \\ -1.0001 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1.0075 \\ 0.9913 \\ -0.9994 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.0059 \\ 0.0073 \\ -0.0007 \end{pmatrix}$$

Portanto, usando (3.10), temos

$$\frac{\max(|X^{(4)} - X^{(3)}|)}{\max(|X^{(4)}|)} = \frac{0.0073}{1.0016} = 0.0073 < \epsilon.$$

Neste caso, o processo deve parar. A solução aproximada do sistema, com erro relativo inferior a 0.01, é dada por

$$X = \begin{pmatrix} 1.0016 \\ 0.9986 \\ -1.0001 \end{pmatrix}.$$

Exercício: Resolver o sistema

$$\begin{cases} -7x_1 + 3x_2 + 2x_3 & = -2 \\ x_1 + 2x_2 - x_3 & = 2 \\ x_1 + x_2 - 2x_3 & = 0 \end{cases}$$

pelo método de Gauss-Seidel, com $X^{(0)} = (0.5, 0.5, 0.5)$ e uma tolerância $\epsilon = 0.1$.

Capítulo 4

Ajuste de Curvas pelo Método de Interpolação Polinomial

4.1 Introdução

Quando se trabalha com dados experimentais ou tabelas estatísticas, ocorre a necessidade de obter um valor intermediário que não consta na tabela. A solução para isto, é o uso de métodos numéricos de ajuste de curvas.

Como as funções polinomiais são fáceis de serem manipuladas, pois suas derivadas e integrais são também polinômios e suas raízes são fáceis de serem determinadas, elas são as mais usadas em métodos de aproximação de funções. A aproximação polinomial é feita usando diversos métodos numéricos, dentre os quais destacamos: Interpolação, Método dos Mínimos Quadrados, Osculação, Mini-Max, etc. Neste capítulo estudaremos o Método de Interpolação Polinomial e, no próximo capítulo, o Método dos Mínimos Quadrados.

A interpolação é uma forma de determinar uma função que assume valores conhecidos em certos pontos denominados nós de interpolação. A classe de funções escolhida para a interpolação deve ser adequada às características que a função possui. Em geral, escolhemos a função polinomial para a interpolação.

Os métodos de interpolação polinomial são utilizados para obter aproximações de uma função $f(x)$, nos seguintes casos:

- a) Quando não conhecemos a forma analítica de $f(x)$. Neste caso, conhecemos apenas o valor de $f(x)$ em pontos discretos x_0, x_1, \dots, x_n e desejamos determinar uma fórmula para $f(x)$, para que se possa, por exemplo, determinar o valor de f em qualquer ponto x dado, determinar a integral de f em um dado intervalo, etc;
- b) Quando $f(x)$ é uma função complicada e difícil de ser manipulada. Neste caso, faz-se necessário sacrificar a precisão dos resultados em função da simplicidade dos cálculos;
- c) Quando a função $f(x)$ não é conhecida explicitamente.

4.2 Polinômio de Interpolação

Definição 4.2.1 Chama-se **Polinômio de Interpolação** de uma função $y = f(x)$ sobre um conjunto de pontos distintos x_0, x_1, \dots, x_n ao polinômio de grau menor ou igual a n que coincide com $f(x)$ nos pontos x_0, x_1, \dots, x_n , isto é, é o polinômio $P_n(x)$ que satisfaz

$$P_n(x_0) = f(x_0), \quad P_n(x_1) = f(x_1), \dots, P_n(x_n) = f(x_n).$$

Denotaremos o polinômio de interpolação por $P_n(f; x)$ ou, simplesmente, por $P_n(x)$.

O problema geral de interpolação por meio de polinômios baseia-se no seguinte teorema:

Teorema 4.2.1 Dados os pontos x_0, x_1, \dots, x_n (reais ou complexos) e y_0, y_1, \dots, y_n , existe um único polinômio $P_n(x)$, de grau menor ou igual a n , tal que

$$P_n(x_k) = y_k, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Prova: (Ver [?], pág. 288).

Exemplo 4.2.2 Determinar o polinômio de interpolação para a função $f(x)$ definida pelo conjunto de pontos da tabela abaixo:

x	-1	0	3
f(x)	15	8	-1

Solução: Temos

$$x_0 = -1, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = 3, \quad y_0 = 15 = f(x_0), \quad y_1 = 8 = f(x_1) \quad \text{e} \quad y_2 = -1 = f(x_2).$$

O polinômio interpolador deve ter grau menor ou igual a 2 (pois $n=2$). Neste caso, o polinômio terá a forma $P_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ e deve satisfazer a seguinte fórmula:

$$P_2(x_k) = y_k, \quad k = 0, 1, 2.$$

Logo, devemos ter

$$a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 = y_0, \quad a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 = y_1 \quad \text{e} \quad a_0 + a_1x_2 + a_2x_2^2 = y_2.$$

Substituindo os valores de x_k e y_k , $k = 0, 1, 2$, obtemos o seguinte sistema de equações na variável a_k , $k = 0, 1, 2$:

$$\begin{cases} a_0 - a_1 + a_2 & = 15 \\ a_0 & = 8 \\ a_0 + 3a_1 + 9a_2 & = -1, \end{cases}$$

cuja solução é: $a_0 = 8$, $a_1 = -6$ e $a_2 = 1$. Logo, o polinômio interpolador possui a forma

$$P_2(x) = 8 - 6x + x^2.$$

Em muitos casos, a interpolação polinomial depara-se com sistemas lineares cuja solução é difícil de ser encontrada ou exige muito trabalho. Além disso, pode ocorrer erros de arredondamento no processo de determinação da solução do sistema, o que pode acarretar na obtenção de uma solução irreal. Por isto, vamos usar outros métodos de determinação do polinômio interpolador. Veremos alguns desses métodos a seguir.

4.3 Fórmula de Lagrange

Dado um conjunto de pontos distintos x_0, x_1, \dots, x_n , consideremos os polinômios $L_k(x)$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$ de grau n da forma:

$$L_k(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_n)}.$$

Notemos que

$$L_k(x_j) = \delta_{kj} = \begin{cases} 1, & \text{se } k = j, \\ 0, & \text{se } k \neq j. \end{cases}$$

Se $y = f(x)$ é uma função que toma valores em x_0, x_1, \dots, x_n , definimos o polinômio interpolador $P_n(x)$, de grau menor ou igual a n , como sendo

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k)L_k(x). \quad (4.1)$$

Segue que

$$P_n(x_k) = f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n.$$

A fórmula (4.1) é denominada **Fórmula de Lagrange do Polinômio de Interpolação**.

Exemplo 4.3.1 Usando a Fórmula de Lagrange, determinar o polinômio de interpolação para a função $f(x)$ definida pelo conjunto de pontos da tabela abaixo:

x	-1	0	3
f(x)	15	8	-1

Solução: Temos

$$x_0 = -1, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = 3, \quad f(x_0) = 15, \quad f(x_1) = 8 \quad \text{e} \quad f(x_2) = -1.$$

O polinômio interpolador deve ter grau menor ou igual a 2 (pois $n=2$). Neste caso, o polinômio terá a forma $P_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ e deve satisfazer a seguinte fórmula:

$$P_2(x) = \sum_{k=0}^2 f(x_k)L_k(x), \quad k = 0, 1, 2.$$

Os polinômios $L_k(x)$ para $k = 0, 1, 2$ são dados a seguir:

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 0)(x - 3)}{(-1 - 0)(-1 - 3)} = \frac{x^2 - 3x}{4},$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x + 1)(x - 3)}{(0 + 1)(0 - 3)} = \frac{x^2 - 2x - 3}{-3},$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x + 1)(x - 0)}{(3 + 1)(3 - 0)} = \frac{x^2 + x}{12}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} P_2(x) &= f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x) \\ &= (15)\left(\frac{x^2 - 3x}{4}\right) + (8)\left(\frac{x^2 - 2x - 3}{-3}\right) + (-1)\left(\frac{x^2 + x}{12}\right) \\ &= x^2 - 6x + 8. \end{aligned}$$

Logo, o polinômio interpolador possui a forma

$$P_2(x) = x^2 - 6x + 8.$$

Observe que o polinômio interpolador encontrado através da Fórmula de Lagrange é o mesmo obtido no exemplo anterior quando utilizamos a resolução de sistema. Isto já era esperado, pois o polinômio interpolador é único.

Exemplo 4.3.2 Dada a tabela abaixo, use a Fórmula de Lagrange para determinar o polinômio interpolador para a função $f(x) = xe^{3x}$ e, em seguida, determine uma aproximação de $f(0.25)$.

x	0.2	0.3	0.4
xe^{3x}	0.3644	0.7379	1.3280

Solução: Temos

$$x_0 = 0.2, \quad x_1 = 0.3, \quad x_2 = 0.4, \quad f(x_0) = 0.3644, \quad f(x_1) = 0.7379 \quad \text{e} \quad f(x_2) = 1.3280.$$

O polinômio interpolador deve ter grau menor ou igual a 2 (pois $n=2$). Neste caso, o polinômio terá a forma $P_2(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$ e deve satisfazer a seguinte fórmula:

$$P_2(x) = \sum_{k=0}^2 f(x_k)L_k(x), \quad k = 0, 1, 2.$$

Os polinômios $L_k(x)$ para $k = 0, 1, 2$ são dados a seguir:

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 0.3)(x - 0.4)}{(0.2 - 0.3)(0.2 - 0.4)} = \frac{x^2 - 0.7x + 0.12}{0.02},$$

$$L_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x - 0.2)(x - 0.4)}{(0.3 - 0.2)(0.3 - 0.4)} = \frac{x^2 - 0.6x + 0.08}{-0.01},$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 0.2)(x - 0.3)}{(0.4 - 0.2)(0.4 - 0.3)} = \frac{x^2 - 0.5x + 0.06}{0.02}.$$

Logo,

$$\begin{aligned} P_2(x) &= f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x) \\ &= (0.3644)\left(\frac{x^2 - 0.7x + 0.12}{0.02}\right) + (0.7379)\left(\frac{x^2 - 0.6x + 0.08}{-0.01}\right) + (1.3280)\left(\frac{x^2 - 0.5x + 0.06}{0.02}\right) \\ &= 10.83x^2 - 1.68x + 0.2672. \end{aligned}$$

Logo, o polinômio interpolador possui a forma

$$P_2(x) = 10.83x^2 - 1.68x + 0.2672.$$

Uma aproximação de $f(0.25)$ é dada por $P_2(0.25)$. Neste caso, teremos

$$f(0.25) \simeq P_2(0.25) = 0.5241.$$

Usando uma máquina de calcular, obtemos $f(0.25) = (0.25)e^{3(0.25)} \simeq 0.5293$. Neste caso, encontramos um valor para $f(0.25)$ com dois algarismos significativos, usando polinômio de interpolação.

Erro na Interpolação

Quando aproximamos uma função $f(x)$ por um polinômio de interpolação cometemos um erro de truncamento. A seguir veremos um resultado que fornece uma expressão para este erro.

Teorema 4.3.1 *Seja $f(x)$ uma função contínua em $[a, b]$ e suponhamos que $f^{(n+1)}(x)$ exista em cada ponto de (a, b) . Se $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$, então o erro de truncamento $R_n(x)$, que se comete na aproximação de $f(x)$ por seu polinômio interpolador $P_n(x)$, satisfaz*

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)}{(n + 1)!} f^{(n+1)}(\xi),$$

onde $\xi \in [\min\{x, x_0, x_1, \dots, x_n\}, \max\{x, x_0, x_1, \dots, x_n\}]$ depende de x . Além disso, se $f(x)$ e suas derivadas até ordem $n+1$ são contínuas em $[a, b]$, então

$$|R_n(x)| \leq \frac{|x - x_0||x - x_1|\dots|x - x_n|}{(n + 1)!} M_n,$$

onde $M_n = \max_{a \leq t \leq b} |f^{(n+1)}(t)|$ é um limitante superior para f no intervalo $[a, b]$.

Prova: (Ver [?], págs. 295,296)

4.4 Interpolação Linear

Suponhamos que temos dois pontos distintos x_0 e x_1 e $f(x)$ uma função que toma valores nestes pontos. Usando a Fórmula de Lagrange, obtemos um polinômio interpolador $P_1(x)$ de grau 1 que satisfaz:

$$P_1(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) = f(x_0)\frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + f(x_1)\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

Logo, teremos

$$P_1(x) = \left(\frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\right)f(x_1) - \left(\frac{x - x_1}{x_1 - x_0}\right)f(x_0) = \frac{1}{x_1 - x_0} \det \begin{pmatrix} f(x_1) & x - x_1 \\ f(x_0) & x - x_0 \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

A fórmula (4.2) é denominada **Fórmula de Interpolação Linear** para os pontos x_0 e x_1 e $P_1(x)$ é o polinômio interpolador linear. Neste caso, usamos o polinômio de interpolação para ajustar a curva $y = f(x)$ a uma reta $y = ax + b$.

Se $f(x)$ é contínua em $[x_0, x_1]$ e $f''(x)$ existe em cada ponto (x_0, x_1) , então o erro de truncamento $R_1(x)$ que se comete na aproximação de $f(x)$ pelo polinômio interpolador linear é dado por

$$R_1(x) = f(x) - P_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!} f''(\xi), \quad x_0 \leq \xi \leq x_1.$$

Se tivermos ainda que $f''(x)$ é contínua em $[x_0, x_1]$, então o polinômio $|(x - x_0)(x - x_1)|$ atinge seu máximo no intervalo $[x_0, x_1]$ em $x = \frac{x_0 + x_1}{2}$ e este máximo é $\frac{(x_1 - x_0)^2}{4}$. Assim, podemos escrever

$$|R_1(x)| \leq \frac{1}{8}(x_1 - x_0)^2 M_1, \quad (4.3)$$

onde $M_1 = \max_{x_0 \leq t \leq x_1} |f''(t)|$ é um limitante superior para f no intervalo $[x_0, x_1]$.

Exemplo 4.4.1 Dada a tabela abaixo, calcular $f(0.25)$ usando interpolação linear e depois encontre um limitante superior para o erro de truncamento.

x	0.2	0.3
xe^{3x}	0.3644	0.7379

Solução: Temos

$$x_0 = 0.2, \quad x_1 = 0.3, \quad f(x_0) = 0.3644 \quad \text{e} \quad f(x_1) = 0.7379.$$

Usando a fórmula (4.2), segue que

$$\begin{aligned} P_1(x) &= \left(\frac{x-0.2}{0.3-0.2}\right)f(0.3) - \left(\frac{x-0.3}{0.3-0.2}\right)f(0.2) \\ &= \left(\frac{x-0.2}{0.1}\right)(0.7379) - \left(\frac{x-0.3}{0.1}\right)(0.3644) = 3.735x - 0.3826. \end{aligned}$$

Logo,

$$f(0.25) \simeq P_1(0.25) = 0.5512.$$

Como $f(t) = te^{3t}$, segue que

$$f'(t) = e^{3t}(1+3t) \quad \text{e} \quad f''(t) = 3e^{3t}(2+3t).$$

Um limitante superior para f no intervalo $[0.2, 0.3]$ é

$$M_1 = \max_{0.2 \leq t \leq 0.3} |f''(t)| = \max_{0.2 \leq t \leq 0.3} |3e^{3t}(2+3t)| = 3e^{3(0.3)}(2+3(0.3)) = 3(2.4596)(2.9) = 21.3985.$$

Usando a fórmula (4.3), segue que o erro de truncamento satisfaz

$$|R_1(x)| \leq \frac{1}{8}(x_1 - x_0)^2 M_1 = \frac{1}{8}(0.2 - 0.2)^2 (21.3985) \simeq 0.0267.$$

Como o erro apresenta um zero após o ponto decimal, isso significa que o resultado encontrado na aproximação de $f(0.25)$ possui um algarismo significativo correto. De fato, usando uma máquina de calcular veremos que $f(0.25) = 0.52925$ e na aproximação polinomial linear encontramos $f(0.25) = 0.5512$, portanto, uma casa decimal correta na aproximação.

4.5 Interpolação Quadrática

Consideremos três pontos distintos x_0, x_1 e x_2 e $f(x)$ uma função que toma valores nestes pontos. Usando a Fórmula de Lagrange, obtemos um polinômio interpolador $P_2(x)$ de grau 2 que satisfaz:

$$P_2(x) = f(x_0) \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2) \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}. \quad (4.4)$$

A fórmula (4.4) é denominada **Fórmula de Interpolação Quadrática** para os pontos x_0, x_1 e x_2 e $P_2(x)$ é o polinômio interpolador quadrático. Neste caso, usamos um polinômio de interpolação para ajustar a curva $y = f(x)$ a uma parábola $y = ax^2 + bx + c$.

Se $f(x)$ é contínua em $[x_0, x_2]$ e $f'''(x)$ existe em cada ponto (x_0, x_2) , então o erro de truncamento $R_2(x)$ que se comete na aproximação de $f(x)$ pelo polinômio interpolador quadrático é dado por

$$R_2(x) = f(x) - P_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{3!} f'''(\xi), \quad x_0 \leq \xi \leq x_2.$$

Neste caso, o erro de truncamento satisfaz

$$|R_2(x)| \leq \frac{1}{6} (|x - x_0||x - x_1||x - x_2|) M_2, \quad (4.5)$$

onde $M_2 = \max_{x_0 \leq t \leq x_2} |f'''(t)|$ é um limitante superior para f no intervalo $[x_0, x_2]$.

Exemplo 4.5.1 Dada a tabela abaixo, calcular $f(0.25)$ usando interpolação quadrática e depois encontre um limitante superior para o erro de truncamento.

x	0.2	0.3	0.4
xe^{3x}	0.3644	0.7379	1.3280

Solução: Temos

$$x_0 = 0.2, \quad x_1 = 0.3, \quad x_2 = 0.4, \quad f(x_0) = 0.3644, \quad f(x_1) = 0.7379 \quad \text{e} \quad f(x_2) = 1.3280.$$

Como já vimos antes, o polinômio quadrático é

$$P_2(x) = 10.83x^2 - 1.68x + 0.2672$$

e

$$f(0.25) \simeq P_2(0.25) = 0.5241.$$

Como $f(t) = te^{3t}$, segue que

$$f'(t) = e^{3t}(1 + 3t), \quad f''(t) = 3e^{3t}(2 + 3t) \quad \text{e} \quad f'''(t) = 27e^{3t}(1 + t).$$

Um limitante superior para f no intervalo $[0.2, 0.4]$ é

$$M_2 = \max_{0.2 \leq t \leq 0.4} |f'''(t)| = \max_{0.2 \leq t \leq 0.4} |27e^{3t}(1 + t)| = 27e^{3(0.4)}(1 + 0.4) = 125.4998.$$

Usando a fórmula (4.5), segue que o erro de truncamento satisfaz

$$|R_2(x)| \leq \frac{1}{6} (|0.25 - 0.2||0.25 - 0.3||0.25 - 0.4|)(125.4998) \simeq 0.0078.$$

Como o erro apresenta dois zeros após o ponto decimal, isso significa que o resultado encontrado na aproximação de $f(0.25)$ possui dois algarismos significativos corretos. De fato, usando uma máquina de calcular veremos que $f(0.25) = 0.52925$ e na aproximação polinomial quadrática encontramos $f(0.25) = 0.5241$, portanto, temos duas casas decimais corretas na aproximação.

4.6 Fórmula de Lagrange para Pontos Igualmente Espaçados

Suponhamos que os pontos x_0, x_1, \dots, x_n são igualmente espaçados, isto é, $x_{i+1} - x_i = h, h \neq 0$ para $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$. Definindo uma nova variável u por

$$u = \frac{x - x_0}{h}, \quad (4.6)$$

segue que

$$x - x_r = (u - r)h \quad \text{e} \quad x_r - x_s = (r - s)h,$$

para r e s inteiros não negativos.

Usando a mudança de variável (4.6) na fórmula de Lagrange (4.1), teremos

$$P_n(u) = P_n(x_0 + uh) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L_k(u), \quad (4.7)$$

onde

$$L_k(u) = \frac{u(u-1)(u-2)\dots(u-(k-1))(u-(k+1))\dots(u-n)}{k(k-1)(k-2)\dots(k-(k-1))(k-(k+1))\dots(k-n)},$$

para $k = 0, 1, 2, \dots, n$. A fórmula (4.7) é denominada **Fórmula de Lagrange para Pontos Igualmente Espaçados**.

A vantagem de se utilizar a fórmula (4.7) é que os polinômios $L_k(u)$ independem dos pontos tabelados, isto é, para os pontos x_0, x_1, \dots, x_n igualmente espaçados, os $L_k(u)$ são sempre os mesmos.

O erro é dado por

$$R_n(u) = R_n(x_0 + uh) = u(u-1)\dots(u-n) \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi),$$

onde $\xi \in [\min\{x, x_0, x_1, \dots, x_n\}, \max\{x, x_0, x_1, \dots, x_n\}]$. Segue que

$$|R_n(u)| \leq |u(u-1)\dots(u-n)| \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} M_n,$$

onde $M_n = \max_{x_0 \leq t \leq x_n} |f^{(n+1)}(t)|$ é um limitante superior para f no intervalo $[x_0, x_n]$.

Exemplo 4.6.1 Dada a tabela abaixo, calcular $f(0.25)$ usando a fórmula de Lagrange para pontos espaçados e depois encontre um limitante superior para o erro de truncamento.

x	0.2	0.3	0.4
xe^{3x}	0.3644	0.7379	1.3280

Solução: Temos

$x_0 = 0.2$, $x_1 = 0.3$, $x_2 = 0.4$, $f(x_0) = 0.3644$, $f(x_1) = 0.7379$, $f(x_2) = 1.3280$ e $h = 0.1$.

Consideremos a mudança de variáveis $u = \frac{x - x_0}{h}$. Segue de (4.7) que o polinômio de interpolação é

$$P_2(u) = P_2(x_0 + uh) = \sum_{k=0}^2 f(x_k)L_k(u), k = 0, 1, 2,$$

onde

$$\begin{aligned}L_0(u) &= \frac{(u-1)(u-2)}{(0-1)(0-2)} = \frac{u^2 - 3u + 2}{2}, \\L_1(u) &= \frac{u(u-2)}{1(1-2)} = \frac{u^2 - 2u}{-1}, \\L_2(u) &= \frac{u(u-1)}{2(2-1)} = \frac{u^2 - u}{2}.\end{aligned}$$

Assim,

$$\begin{aligned}P_2(u) &= f(x_0)L_0(u) + f(x_1)L_1(u) + f(x_2)L_2(u) \\&= (0.3644)\left(\frac{u^2 - 3u + 2}{2}\right) + (0.7379)\left(\frac{u^2 - 2u}{-1}\right) + (1.3280)\left(\frac{u^2 - u}{2}\right) \\&= 0.1083u^2 + 0.2652u + 0.3644.\end{aligned}$$

Logo, o polinômio de Lagrange para pontos igualmente espaçados é

$$P_2(u) = 0.1083u^2 + 0.2652u + 0.3644.$$

Para calcular o valor de $f(0.25)$, primeiro vamos calcular o valor de u para $x = 0.25$. Temos

$$u = \frac{x - x_0}{h} = \frac{0.25 - 0.2}{0.1} = 0.5.$$

Logo,

$$f(0.25) \simeq P_2(0.5) = 0.1083(0.5)^2 + 0.2652(0.5) + 0.3644 = 0.5241.$$

Como $f(t) = te^{3t}$, segue que $f'''(t) = 27e^{3t}(1+t)$. Um limitante superior para f no intervalo $[0.2, 0.4]$ é

$$M_2 = \max_{0.2 \leq t \leq 0.4} |f'''(t)| = \max_{0.2 \leq t \leq 0.4} |27e^{3t}(1+t)| = 27e^{3(0.4)}(1+0.4) = 125.4998.$$

Para $u = 0.5$ e $h = 0.1$, o erro de truncamento satisfaz

$$|R_2(u)| \leq |(0.5)(0.5-1)(0.5-2)| \frac{(0.1)^3}{3!} (125.4998) \simeq 0.0078.$$

4.7 Fórmula de Newton

Para a obtenção da fórmula de Newton, precisamos da definição de diferença dividida de uma função.

Definição 4.7.1 *Sejam x_0, x_1, \dots, x_n pontos distintos num intervalo $[a, b]$ e seja $y = f(x)$ uma função que assume valores nos $x_k, k = 0, 1, \dots, n$. Define-se a **diferença dividida** de ordem n da função $f(x)$ sobre os pontos x_0, x_1, \dots, x_n como sendo o termo $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$, onde*

$$f[x_k] = f(x_k) \quad e \quad f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Se $y = f(x)$ é uma função que toma valores em x_0, x_1, \dots, x_n , definimos o polinômio interpolador $P_n(x)$, de grau menor ou igual a n , como sendo

$$P_n(x) = f[x_0] + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \dots + (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})f[x_0, x_1, \dots, x_n] \quad (4.8)$$

A fórmula (4.8) é denominada **Fórmula de Newton do Polinômio de Interpolação**.

O erro de truncamento é dado por

$$R_n(x) = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)f[x_0, x_1, \dots, x_n, x] \quad (4.9)$$

Exemplo 4.7.2 *Dada a tabela abaixo, calcular $f(1)$ usando a fórmula de Newton do polinômio de interpolação. Depois encontre um limitante superior para o erro de truncamento.*

x	-1	0	3
f(x)	15	8	-1

Solução: Temos

$$x_0 = -1, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = 3, \quad f(x_0) = 15, \quad f(x_1) = 8 \quad e \quad f(x_2) = -1.$$

O polinômio de interpolação na forma de Newton é dado por

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

onde,

$$\begin{aligned} f[x_0] &= f(x_0) = 15 \\ f[x_0, x_1] &= \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{8 - 15}{0 + 1} = -7 \\ f[x_1, x_2] &= \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{-1 - 8}{3 - 0} = -3 \\ f[x_0, x_1, x_2] &= \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{-3 + 7}{3 + 1} = \frac{4}{4} = 1. \end{aligned}$$

Assim,

$$P_2(x) = (15) + (x + 1)(-7) + (x + 1)(x - 0)(1) = x^2 - 6x + 8.$$

Portanto,

$$f(1) \simeq P_2(1) = 3.$$

4.8 Fórmula de Newton-Gregory

Para a obtenção da fórmula de Newton-Gregory, precisamos da definição de diferenças ordinárias de uma função.

Definição 4.8.1 *Sejam x_0, x_1, \dots, x_n pontos distintos, igualmente espaçados, num intervalo $[a, b]$ com $x_{i+1} - x_i = h$, $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ e seja $y = f(x)$ uma função que assume valores em $x = x_k, k = 0, 1, \dots, n$. Define-se a **diferença ordinária** de ordem r da função $f(x)$ em $x = x_k$ como sendo o termo $\Delta^r f(x_k)$, onde*

$$\Delta^0 f(x_k) = f(x_k) \quad e \quad \Delta^r f(x_k) = \Delta^{r-1} f(x_k + h) - \Delta^{r-1} f(x_k), \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Usando o fato que os pontos x_0, x_1, \dots, x_n são igualmente espaçados com $x_{i+1} - x_i = h$, $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$, segue que $f(x_k + h) = f(x_{k+1})$, $k = 0, 1, \dots, n$. Assim, podemos escrever a diferença ordinária de ordem r da função $f(x)$ na forma:

$$\Delta^r f(x_k) = \Delta^{r-1} f(x_{k+1}) - \Delta^{r-1} f(x_k), \quad k = 0, 1, \dots, n. \quad (4.10)$$

Outra forma de escrever a diferença ordinária de ordem r da função $f(x)$ é:

$$\Delta^r f(x_k) = \sum_{i=0}^r (-1)^i \binom{r}{i} f(x_k + (r - i)h),$$

onde

$$\binom{r}{p} = \frac{r!}{p!(r - p)!}.$$

Consideremos uma função $y = f(x)$ no intervalo $[x_0, x_n]$, com valores nos pontos x_0, x_1, \dots, x_n igualmente espaçados. Definimos o polinômio interpolador $P_n(x)$, de grau menor ou igual a n , em função da diferença ordinária de f , como sendo

$$\begin{aligned} P_n(x) = & f(x_0) + (x - x_0) \frac{\Delta^1 f(x_0)}{h} + (x - x_0)(x - x_1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{h^2 2!} \\ & + \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \frac{\Delta^n f(x_0)}{h^n n!}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

A fórmula (4.11) é denominada **Fórmula de Newton-Gregory do Polinômio de Interpolação**.

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

Exemplo 4.8.2 Dada a tabela abaixo, determinar o polinômio de interpolação de ordem 3 usando a fórmula de Newton-Gregory.

Solução: Temos

$$x_0 = -1, \quad x_1 = 0, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = 2, \quad f(x_0) = 3, \quad f(x_1) = 1, \quad f(x_2) = -1 \quad \text{e} \quad f(x_3) = 0.$$

O polinômio de interpolação de ordem 3, na forma de Newton-Gregory, é dado por

$$P_3(x) = f(x_0) + (x-x_0)\frac{\Delta^1 f(x_0)}{h} + (x-x_0)(x-x_1)\frac{\Delta^2 f(x_0)}{h^2 2!} + (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\frac{\Delta^3 f(x_0)}{h^3 3!}.$$

Usando a fórmula (4.10), segue que

$$\begin{aligned} \Delta^1 f(x_0) &= \Delta^0 f(x_1) - \Delta^0 f(x_0) = f(x_1) - f(x_0) = 1 - 3 = -2, \\ \Delta^1 f(x_1) &= \Delta^0 f(x_2) - \Delta^0 f(x_1) = f(x_2) - f(x_1) = -1 - 1 = -2, \\ \Delta^1 f(x_2) &= \Delta^0 f(x_3) - \Delta^0 f(x_2) = f(x_3) - f(x_2) = 0 - (-1) = 1, \\ \Delta^2 f(x_0) &= \Delta^1 f(x_1) - \Delta^1 f(x_0) = (-2) - (-2) = 0, \\ \Delta^2 f(x_1) &= \Delta^1 f(x_2) - \Delta^1 f(x_1) = 1 - (-2) = 3, \\ \Delta^3 f(x_0) &= \Delta^2 f(x_1) - \Delta^2 f(x_0) = 3 - 0 = 3. \end{aligned}$$

Substituindo em $P_3(x)$, teremos

$$P_3(x) = (3) + (x+1)\frac{-2}{1} + (x+1)(x-0)\frac{0}{(1)^2 2!} + (x+1)(x-0)(x-1)\frac{3}{(1)^3 3!}.$$

Donde segue que

$$P_3(x) = \frac{1}{2}x^2 - \frac{5}{2}x + 1,$$

que é o polinômio de interpolação de grau 3 dado pela fórmula de Newton-Gregory.

4.9 Exercícios

Capítulo 5

Ajuste de Curvas pelo Método dos Mínimos Quadrados

5.1 Introdução

Nos métodos de interpolação estudados no capítulo anterior, vimos como aproximar uma função por um polinômio, quando esta função era dada apenas em alguns pontos de um intervalo. No entanto, se desejamos obter um valor aproximado de uma função em algum ponto fora do intervalo de dados (caso de extrapolação), ou quando já se sabe qual a função que melhor ajusta os dados tabelados ou quando os valores tabelados contém erros (pois são resultados de algum experimento), a interpolação não é adequada. Neste caso, recorreremos ao **Método dos Mínimos Quadrados**.

O método dos mínimos quadrados surge quando estudamos o seguinte problema: aproximar uma função $y = f(x)$ (real e de variável real) por uma função $F(x)$ que seja combinação linear de funções conhecidas, isto é,

$$f(x) \simeq a_1g_1(x) + a_2g_2(x) + \cdots + a_n g_n(x) = F(x)$$

de tal modo que a distância de $f(x)$ a $F(x)$ seja a menor possível. A função $y = f(x)$ a ser aproximada pode ser dada no caso discreto e no caso contínuo.

No **caso discreto**, a função referente a distribuição dos pontos não é conhecida e é dada por uma tabela de pontos da forma (x_k, y_k) onde $y_k = f(x_k)$. O número de pontos é finito e a função de referência é estabelecida a partir de um modelo matemático suposto para as relações existentes entre as grandezas ($y_k = f(x_k)$). A exigência em tal situação é que a soma dos quadrados dos desvios seja mínima.

No **caso contínuo** a função f é conhecida e se deseja uma nova função que se aproxime suficientemente da função f . Neste caso, o número de pontos é infinito pois podem ser obtidos a partir da própria função. Veremos os dois casos a seguir.

5.2 Caso Discreto

Considere os dados de uma amostragem $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)\}$ e $f(x)$ uma função obtida a partir destes dados, isto é, $y_k = f(x_k), k = 1, 2, \dots, m$. Procuramos uma função $F(x)$ que melhor se ajusta aos pontos $(x_k, y_k), k = 1, 2, \dots, m$. Por exemplo, $F(x)$ pode ser uma reta, uma parábola, uma função polinomial qualquer, uma função exponencial, uma função trigonométrica, etc.

Sejam $g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x)$ funções conhecidas para $n \leq m$. O método dos mínimos quadrados, no caso discreto, consiste em determinar os coeficientes a_1, a_2, \dots, a_n , de modo que

$$F(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \dots + a_n g_n(x)$$

seja a função que melhor se aproxime de $f(x)$, isto é, $F(x) \simeq f(x)$.

Como procuramos ajustar os dados (x_k, y_k) da amostragem à uma curva $F(x)$ pré-definida, a diferença entre os valores $y_k = f(x_k)$ medidos e os valores $y_k = F(x_k)$ calculados pela curva aproximada, deve ser mínima. A condição imposta para que isso aconteça no método dos mínimos quadrados é que a soma dos quadrados dos desvios para cada uma das medidas seja mínima. Ou seja,

$$\sum_{k=1}^m d_k^2 = \sum_{k=1}^m [f(x_k) - F(x)]^2$$

deve ser mínima. Logo, deve-se minimizar a função

$$G(a_1, a_2, \dots, a_n) = \sum_{k=1}^m [f(x_k) - a_1 g_1(x) - a_2 g_2(x) - \dots - a_n g_n(x)]^2.$$

Diferenciando a função G em relação aos $a_i, i = 1, 2, \dots, n$ e igualando a zero, encontramos

$$\begin{cases} a_{11}a_1 + a_{12}a_2 + a_{13}a_3 + \dots + a_{1n}a_n & = b_1 \\ a_{21}a_1 + a_{22}a_2 + a_{23}a_3 + \dots + a_{2n}a_n & = b_2 \\ a_{31}a_1 + a_{32}a_2 + a_{33}a_3 + \dots + a_{3n}a_n & = b_3 \\ \vdots & \vdots \\ a_{n1}a_1 + a_{n2}a_2 + a_{n3}a_3 + \dots + a_{nn}a_n & = b_n \end{cases} \quad (5.1)$$

onde

$$a_{ij} = a_{ji} = \sum_{k=1}^m g_i(x_k) g_j(x_k), \quad i, j = 1, 2, 3, \dots, n \quad (5.2)$$

e

$$b_i = \sum_{k=1}^m f(x_k) g_i(x_k), \quad i = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (5.3)$$

Observações:

1. No ajuste de curvas por interpolação (visto no capítulo anterior) o polinômio de interpolação de grau $m - 1$ passa por todos os m pontos dados. No ajuste de curvas pelo método dos mínimos quadrados, é possível escolher um polinômio de qualquer grau para se ajustar aos m pontos dados sem que, necessariamente, o polinômio passe por esses pontos.
2. Se m é o número de pontos da amostragem e n é o número de coeficientes da função aproximada, então teremos:
 - Se $m < n$, o sistema é indeterminado;
 - Se $m > n$, não se pode garantir que a solução seja única para todas as famílias de soluções. No entanto, pode-se provar a unicidade para famílias de funções polinomiais.

5.2.1 Aproximação Polinomial

Veremos aqui os casos em que uma função $f(x)$, dada por um conjunto de pontos x_0, x_1, \dots, x_n (caso discreto) se ajusta melhor a uma função polinomial. Daremos exemplos onde a função polinomial aproximada é uma reta e uma parábola.

Aproximação através de uma reta

O caso mais simples é quando tomamos $n = 2$, $g_1(x) = x$, $g_2(x) = 1$, $a_1 = a$ e $a_2 = b$. Neste caso, a função F é a reta $y = ax + b$ denominada **reta de regressão linear**. O sistema (5.1) torna-se

$$\begin{cases} a_{11}a + a_{12}b = b_1 \\ a_{21}a + a_{22}b = b_2, \end{cases}$$

onde

$$a_{11} = \sum_{k=1}^m [g_1(x_k)]^2 = \sum_{k=1}^m x_k^2;$$

$$a_{12} = a_{21} = \sum_{k=1}^m g_1(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m x_k(1) = \sum_{k=1}^m x_k;$$

$$a_{22} = \sum_{k=1}^m g_2(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m (1)(1) = m;$$

$$b_1 = \sum_{k=1}^m f(x_k)g_1(x_k) = \sum_{k=1}^m y_k x_k \quad \text{e} \quad b_2 = \sum_{k=1}^m f(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m y_k(1) = \sum_{k=1}^m y_k.$$

Portanto, para determinar a reta de regressão linear $y = ax + b$ que melhor se ajusta aos pontos de uma amostragem $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)\}$, basta determinar a e b solução

do sistema

$$\begin{cases} \left(\sum_{k=1}^m x_k^2 \right) a + \left(\sum_{k=1}^m x_k \right) b = \left(\sum_{k=1}^m x_k y_k \right) \\ \left(\sum_{k=1}^m x_k \right) a + (m)b = \left(\sum_{k=1}^m y_k \right), \end{cases} \quad (5.4)$$

onde m é o número total de pontos (x_k, y_k) da amostragem.

Outra forma de determinar os coeficientes a e b é usando as fórmulas

$$a = \frac{\sum_{k=1}^m (x_k - \bar{x}) y_k}{\sum_{k=1}^m (x_k - \bar{x})^2} \quad \text{e} \quad b = \bar{y} - a\bar{x}, \quad (5.5)$$

onde (\bar{x}, \bar{y}) é o centro de gravidade dos pontos experimentais e são dados por

$$\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m x_k, \quad \bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_k.$$

As dispersões dos coeficientes angular a e linear b podem ser estimadas a partir da definição de erro padrão e são dadas por

$$D_a = \frac{S}{\sqrt{\sum_{k=1}^m (x_k - \bar{x})^2}}, \quad D_b = S \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum_{k=1}^m (x_k - \bar{x})^2}},$$

onde

$$S^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{k=1}^m (y_k - ax_k - b)^2.$$

O método dos mínimos quadrados pode ser aplicado desde que os valores de x_i sejam medidos sem erros e que todos os valores de y_i tenham a mesma distribuição (por exemplo, Gaussiana), com o mesmo desvio padrão. Isso, em princípio, poderia significar uma séria limitação para a utilização do método. Entretanto, na prática, a variável dependente x , geralmente pode ser adotada como um dado de referência cujo erro é regulado por um instrumento de precisão e a variável independente y como o parâmetro estatístico do processo de medida.

Exemplo 5.2.1 *Numa determinada fábrica, a receita total anual de suas vendas durante os seus primeiros 4 anos de operação, são dados na tabela abaixo.*

Número de anos em operação	1	2	3	4
Número de milhões em vendas anuais	5	8	7	12

- a) Determine a reta de regressão linear que melhor se ajusta aos dados da tabela;
 b) Use a reta de regressão linear para estimar a receita anual após 6 anos.

Solução:

a) Considerando x_k o número de anos em operação e y_k o número de milhões em vendas anuais, teremos os pontos

$$\{(1, 5), (2, 8), (3, 7), (4, 12)\}$$

que representam os dados da amostragem. Temos $m = 4$ e

$$\sum_{k=1}^4 x_k = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 + 2 + 3 + 4 = 10;$$

$$\sum_{k=1}^4 y_k = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 = 5 + 8 + 7 + 12 = 32;$$

$$\sum_{k=1}^4 x_k^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 = 1 + 4 + 9 + 16 = 30;$$

$$\sum_{k=1}^4 x_k y_k = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3 + x_4 y_4 = 5 + 16 + 21 + 48 = 90.$$

Logo, a reta de regressão linear é dada por $y = ax + b$, onde (a, b) é a solução do sistema

$$\begin{cases} 30a + 10b = 90 \\ 10a + 4b = 32. \end{cases}$$

Resolvendo o sistema anterior, encontramos $a = 2$ e $b = 3$. Portanto, a reta de regressão linear é $y = 2x + 3$.

Observação: Poderíamos ter encontrado a e b pelas fórmulas

$$a = \frac{\sum_{k=1}^4 (x_k - \bar{x})y_k}{\sum_{k=1}^4 (x_k - \bar{x})^2} \quad \text{e} \quad b = \bar{y} - a\bar{x},$$

como dadas em (5.5). Neste caso, o centro de gravidade (\bar{x}, \bar{y}) é tal que

$$\bar{x} = \frac{1}{n}(x_1 + x_2 + x_3 + x_4) = \frac{1}{4}(1 + 2 + 3 + 4) = \frac{5}{2}$$

e

$$\bar{y} = \frac{1}{n}(y_1 + y_2 + y_3 + y_4) = \frac{1}{4}(5 + 8 + 7 + 12) = 8.$$

Assim,

$$a = \frac{(x_1 - \bar{x})y_1 + (x_2 - \bar{x})y_2 + (x_3 - \bar{x})y_3 + (x_4 - \bar{x})y_4}{(x_1 - \bar{x})^2 + (x_2 - \bar{x})^2 + (x_3 - \bar{x})^2 + (x_4 - \bar{x})^2}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{(1 - \frac{5}{2})5 + (2 - \frac{5}{2})8 + (3 - \frac{5}{2})7 + (4 - \frac{5}{2})12}{(1 - \frac{5}{2})^2 + (2 - \frac{5}{2})^2 + (3 - \frac{5}{2})^2 + (4 - \frac{5}{2})^2} \\
&= \frac{-\frac{15}{2} - \frac{8}{2} + \frac{7}{2} + \frac{36}{2}}{\frac{9}{4} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} + \frac{9}{4}} = \frac{10}{5} = 2
\end{aligned}$$

e

$$b = \bar{y} - a\bar{x} = 8 - 2\left(\frac{5}{2}\right) = 3.$$

Portanto, a reta de regressão linear é dada por $y = 2x + 3$ que é a mesma encontrada anteriormente.

b) A receita após 6 anos pode ser estimada pela reta de regressão linear $y = 2x + 3$. Neste caso, teremos

$$y_6 = 2(6) + 3 = 18.$$

Logo a receita estimada após 6 anos é de aproximadamente 18 milhões em vendas.

Exemplo 5.2.2 Na tabela abaixo estão colocados os dados colhidos pelo Censo dos Estados Unidos determinando sua população (em milhões) desde 1790 até 1840.

Ano	1790	1800	1810	1820	1830	1840
População	3.929	5.308	7.240	9.638	12.866	17.069

a) Determine a reta de regressão linear que melhor se ajusta aos dados obtidos;

b) Use a reta encontrada no item a) para estimar a população nos anos de 1850, 1900, 1950 e 1990.

Solução:

a) Consideremos x o número de anos após o início da pesquisa e y o número de habitantes (em milhões). Neste caso, o ano 1790 representa $x = 0$, o ano 1800 representa $x = 10$, e assim por diante. Desta forma, teremos os dados experimentais

$$(0, 3.929), (10, 5.308), (20, 7.240), (30, 9.638), (40, 12.866), (50, 17.069).$$

Como temos seis pontos experimentais, segue que $m = 6$ e

$$\sum_{k=1}^6 x_k = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 = 0 + 10 + 20 + 30 + 40 + 50 = 150;$$

$$\sum_{k=1}^6 y_k = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 = 3.929 + 5.308 + 7.240 + 9.638 + 12.866 + 17.069 = 56.050;$$

$$\sum_{k=1}^6 x_k^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2 + x_5^2 + x_6^2 = 0 + 100 + 400 + 900 + 1600 + 2500 = 5500;$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^6 x_k y_k &= x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3 + x_4 y_4 + x_5 y_5 + x_6 y_6 \\ &= (0)(3.929) + (10)(5.308) + (20)(7.240) + (30)(9.638) + (40)(12.866) + (50)(17.069) \\ &= 0 + 53.08 + 144.8 + 289.14 + 514.64 + 853.45 = 1855.11 \end{aligned}$$

Assim, teremos o seguinte sistema

$$\begin{cases} 5500a + 150b = 1855.11 \\ 150a + 6b = 56.050, \end{cases}$$

cuja solução é $a = 0,25935$ e $b = 2,858$. Portanto, a reta de regressão linear é $y = 0.25935x + 2.858$.

Observação: Outra maneira de determinar a reta de regressão linear é usando a fórmula (5.5). Neste caso, o centro de gravidade é o ponto (\bar{x}, \bar{y}) , onde

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \frac{1}{n}(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6) \\ &= \frac{1}{6}(0 + 10 + 20 + 30 + 40 + 50) = \frac{150}{6} = 25 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \bar{y} &= \frac{1}{6}(y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6) \\ &= \frac{1}{6}(3.929 + 5.308 + 7.240 + 9.638 + 12.866 + 17.069) = \frac{56.050}{6} = 9.342. \end{aligned}$$

A reta de regressão linear é dada por $y = ax + b$, onde

$$\begin{aligned} a &= \frac{(x_1 - \bar{x})y_1 + (x_2 - \bar{x})y_2 + (x_3 - \bar{x})y_3 + (x_4 - \bar{x})y_4 + (x_5 - \bar{x})y_5}{(x_1 - \bar{x})^2 + (x_2 - \bar{x})^2 + (x_3 - \bar{x})^2 + (x_4 - \bar{x})^2 + (x_5 - \bar{x})^2} \\ &= \frac{(-25)(3.929) + (-15)(5.308) + (-5)(7.240) + (5)(9.638) + (15)(12.866) + (25)(17.069)}{(0 - 25)^2 + (10 - 25)^2 + (20 - 25)^2 + (30 - 25)^2 + (40 - 25)^2 + (50 - 25)^2} \\ &= \frac{-98.225 - 79.62 - 36.2 + 48.19 + 192.99 + 426.725}{625 + 225 + 25 + 25 + 225 + 625} = \frac{453.86}{1750} = 0.25935 \end{aligned}$$

e

$$b = \bar{y} - a\bar{x} = 9.342 - (0.25935)(25) = 9.342 - 6.484 = 2.858.$$

Logo, a reta de regressão linear é dada por $y = 0.25935x + 2.858$.

b) Para saber a população em 1850, tomemos $x = 60$ na reta de regressão linear. Assim, teremos

$$y_{60} = 0.25935(60) + 2.858 = 18.419.$$

Em 1900, tomemos $x = 110$ na reta de regressão linear e teremos

$$y_{110} = 0.25935(110) + 2.858 = 31.3865.$$

Em 1950, tomemos $x = 160$ na reta de regressão linear e teremos

$$y_{160} = 0.25935(160) + 2.858 = 44.354.$$

Observação: Os dados encontrados através da reta de regressão linear $y = 0.25935x + 2.858$ divergem bastante dos dados reais. Isso acontece porque os dados do problema se ajustam melhor a uma função exponencial e não a uma reta. Ainda neste capítulo veremos a função exponencial que melhor se aproxima dos dados da tabela dada neste exemplo.

Aproximação através de uma parábola

Se os pontos de uma amostragem se ajustam a uma parábola, então devemos tomar $n = 3$, $g_1(x) = x^2$, $g_2(x) = x$, $g_3(x) = 1$, $a_1 = a$, $a_2 = b$ e $a_3 = c$ no sistema (5.1). Neste caso, a função F que melhor se aproxima dos dados do problema é a parábola $y = ax^2 + bx + c$, onde a , b e c satisfazem o sistema

$$\begin{cases} a_{11}a + a_{12}b + a_{13}c = b_1 \\ a_{21}a + a_{22}b + a_{23}c = b_2 \\ a_{31}a + a_{32}b + a_{33}c = b_3, \end{cases}$$

onde

$$\begin{aligned} a_{11} &= \sum_{k=1}^m [g_1(x_k)]^2 = \sum_{k=1}^m x_k^4; \\ a_{12} = a_{21} &= \sum_{k=1}^m g_1(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m x_k^3; \\ a_{13} = a_{31} &= \sum_{k=1}^m g_1(x_k)g_3(x_k) = \sum_{k=1}^m x_k^2; \\ a_{22} &= \sum_{k=1}^m g_2(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m x_k^2; \\ a_{23} = a_{32} &= \sum_{k=1}^m g_2(x_k)g_3(x_k) = \sum_{k=1}^m x_k; \\ a_{33} &= \sum_{k=1}^m g_3(x_k)g_3(x_k) = \sum_{k=1}^m 1 = m; \\ b_1 &= \sum_{k=1}^m f(x_k)g_1(x_k) = \sum_{k=1}^m y_k x_k^2 \\ b_2 &= \sum_{k=1}^m f(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m y_k x_k \end{aligned}$$

e

$$b_3 = \sum_{k=1}^m f(x_k)g_3(x_k) = \sum_{k=1}^m y_k(1) = \sum_{k=1}^m y_k.$$

Portanto, para determinar a parábola que melhor se ajusta aos pontos de uma amostragem $\{(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)\}$, devemos determinar a, b e c solução do sistema

$$\begin{cases} \left(\sum_{k=1}^m x_k^4 \right) a + \left(\sum_{k=1}^m x_k^3 \right) b + \left(\sum_{k=1}^m x_k^2 \right) c = \left(\sum_{k=1}^m y_k x_k^2 \right) \\ \left(\sum_{k=1}^m x_k^3 \right) a + \left(\sum_{k=1}^m x_k^2 \right) b + \left(\sum_{k=1}^m x_k \right) c = \left(\sum_{k=1}^m y_k x_k \right) \\ \left(\sum_{k=1}^m x_k^2 \right) a + \left(\sum_{k=1}^m x_k \right) b + (m)c = \left(\sum_{k=1}^m y_k \right), \end{cases} \quad (5.6)$$

onde m é o número total de pontos (x_k, y_k) da amostragem.

Exemplo 5.2.3 Uma função $y = f(x)$ é dada pela Tabela 5.1. Ajuste esta função a um polinômio do segundo grau.

x	-1	0	1	2
y	0	-1	0	7

Tabela 5.1: Dados da amostragem

Solução: A curva que melhor se ajusta aos dados da tabela é uma parábola da forma $y = ax^2 + bx + c$, onde a, b e c satisfazem o sistema (5.6). Temos $m = 4$ e

$$\sum_{k=1}^4 x_k^4 = (-1)^4 + (0)^4 + (1)^4 + (2)^4 = 18;$$

$$\sum_{k=1}^m x_k^3 = (-1)^3 + (0)^3 + (1)^3 + (2)^3 = 8;$$

$$\sum_{k=1}^m x_k^2 = (-1)^2 + (0)^2 + (1)^2 + (2)^2 = 6;$$

$$\sum_{k=1}^m x_k = (-1) + (0) + (1) + (2) = 2;$$

e

$$\sum_{k=1}^4 y_k x_k^2 = (0)(-1)^2 + (-1)(0)^2 + (0)(1)^2 + (7)(2)^2 = 28;$$

$$\sum_{k=1}^4 y_k x_k = (0)(-1) + (-1)(0) + (0)(1) + (7)(2) = 14;$$

$$\sum_{k=1}^4 y_k = (0) + (-1) + (0) + (7) = 6;$$

Logo, a, b e c satisfazem o sistema

$$\begin{cases} 18a + 8b + 6c = 28 \\ 8a + 6b + 2c = 14 \\ 6a + 2b + 4c = 6, \end{cases}$$

cuja solução é

$$a = 2, b = \frac{1}{5}, c = -\frac{8}{5}.$$

Logo a curva que melhor se ajusta aos dados da tabela é

$$y = 2x^2 + \frac{1}{5}x - \frac{8}{5}.$$

Exemplo 5.2.4 Na Tabela 5.2, estão colocados os dados de uma amostragem. Determine a curva que melhor se ajusta a esta tabela.

x	-1	-0,7	-0,5	-0,3	0	0,2	0,5	0,7	1
y	2,1	1,2	0,4	0,5	0	0,3	0,6	1,2	2,1

Tabela 5.2: Dados da amostragem

Solução: Analisando o gráfico de dispersão, constatamos que a curva que melhor se ajusta aos dados da amostragem é uma parábola da forma $y = ax^2$ (Ver Figura 5.1).

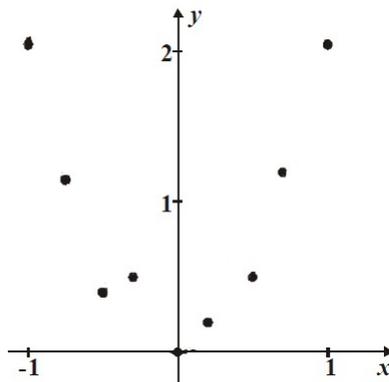


Figura 5.1: Gráfico de Dispersão

Neste caso, temos $b = c = 0$ e $m = 11$. O sistema (5.6) torna-se

$$\begin{cases} \left(\sum_{k=1}^9 x_k^4 \right) a = \left(\sum_{k=1}^9 y_k x_k^2 \right) \\ \left(\sum_{k=1}^9 x_k^3 \right) a = \left(\sum_{k=1}^9 y_k x_k \right) \\ \left(\sum_{k=1}^9 x_k^2 \right) a = \left(\sum_{k=1}^9 y_k \right) \end{cases}$$

Podemos determinar o valor de a através de quaisquer uma das três equações do sistema acima. Temos

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^9 x_k^4 &= (-1)^4 + (-0,7)^4 + (-0,5)^4 + (-0,3)^4 + (0)^4 + (0,2)^4 + (0,5)^4 + (0,7)^4 + (1)^4 \\ &= 1 + 0,4201 + 0,0625 + 0,0081 + 0 + 0,0016 + 0,0625 + 0,4201 + 1 = 2,9749 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^9 y_k x_k^2 &= (2,1)(-1)^2 + (1,2)(-0,7)^2 + (0,4)(-0,5)^2 + (0,5)(-0,3)^2 \\ &\quad + (0)(0)^2 + (0,3)(0,2)^2 + (0,6)(0,5)^2 + (1,2)(0,7)^2 + (2,1)(1)^2 \\ &= 2,1 + 0,588 + 0,1 + 0,045 + 0 + 0,012 + 0,15 + 0,588 + 2,1 = 5,683. \end{aligned}$$

A primeira equação do sistema nos dará

$$2,9749a = 5,683 \quad \Rightarrow \quad a = 1,91.$$

Portanto, a curva que melhor se ajusta aos pontos dados é a parábola

$$y = 1,91x^2.$$

5.2.2 Aproximação Trigonométrica

Suponha que uma função $y = f(x)$ possua características de periodicidade e que queremos aproximar a função f por outra função mais simples. Neste caso, a aproximação polinomial não é uma boa escolha, visto que, os polinômios não possuem características de periodicidade. A opção é usar aproximação trigonométrica, já que, as funções trigonométricas são funções periódicas.

Consideremos uma função $y = f(x)$ dada por um conjunto de pontos x_1, x_2, \dots, x_N e que esta função se ajusta melhor a uma função trigonométrica e os N pontos são do tipo

$$x_k = \frac{2k\pi}{N}, \quad k = 1, 2, \dots, N.$$

Desejamos aproximar $f(x)$ por uma função do tipo

$$F_L(x) = a_0 + a_1 \cos(x) + b_1 \operatorname{sen}(x) + a_2 \cos(2x) + b_2 \operatorname{sen}(2x) + \dots + a_L \cos(Lx) + b_L \operatorname{sen}(Lx), \quad (5.7)$$

com $L \leq \frac{N}{2}$, de tal forma que a distância entre f e F_L seja mínima. A aproximação $F_L(x)$ é chamada **aproximação trigonométrica** de ordem m , para $f(x)$.

Adotando o produto escalar

$$(f, g) = \sum_{k=1}^N f(x_k)g(x_k)$$

e usando os mesmos argumentos do caso de aproximação polinomial, chegamos que os coeficientes $a_0, a_1, b_1, \dots, a_L, b_L$ são dados por

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(x_k), \\ a_i &= \frac{2}{N} \sum_{k=1}^N f(x_k) \cos(ix_k), \quad i = 1, 2, \dots, L \\ b_i &= \frac{2}{N} \sum_{k=1}^N f(x_k) \operatorname{sen}(ix_k), \quad i = 1, 2, \dots, L. \end{aligned}$$

Exemplo 5.2.5 Use o método dos mínimos quadrados para determinar a aproximação trigonométrica de ordem 1 para a função dada pela Tabela 5.3.

x	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{3\pi}{4}$	π	$\frac{5\pi}{4}$	$\frac{3\pi}{2}$	$\frac{7\pi}{4}$	2π
f(x)	126	159	191	178	183	179	176	149

Tabela 5.3:

Solução: Notemos que os pontos da tabela possuem a forma $x_k = \frac{2k\pi}{8}, k = 1, 2, \dots, 8$. A função trigonométrica aproximada de ordem 1 é $F_1(x)$ dada por

$$F_1(x) = a_0 + a_1 \cos(x) + b_1 \operatorname{sen}(x),$$

onde

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{8} \sum_{k=1}^8 f(x_k) = 167.625, \\ a_1 &= \frac{2}{8} \sum_{k=1}^8 f(x_k) \cos(x_k) = -19.978, \\ b_1 &= \frac{2}{8} \sum_{k=1}^8 f(x_k) \operatorname{sen}(x_k) = -12.425. \end{aligned}$$

Logo, a aproximação trigonométrica de ordem 1 para a função dada é

$$F_1(x) = 167.625 - 19.978 \cos(x) - 12.425 \operatorname{sen}(x).$$

5.2.3 Aproximação Exponencial

A forma geral de uma função exponencial é

$$f(x) = Ce^{rx}, \quad (5.8)$$

onde C, r e $e \simeq 2,71828182818\dots$ são constantes. Aplicando a função logaritmo natural a ambos os lados da equação (5.8), obtém-se:

$$\ln(f(x)) = \ln(C) + rx.$$

Fazendo a substituição $F(x) = \ln(f(x))$, $B = \ln(C)$ e $A = r$, obtemos

$$F(x) = B + Ax. \quad (5.9)$$

Dizemos que $F(x)$ é a linearização da função exponencial $f(x) = Ce^{rx}$.

Se os dados (x_k, y_k) de uma amostragem se ajustam a uma função exponencial da forma (5.8), então usamos o método dos mínimos quadrados para aproximar a função linearizada $F(x)$ pela função $g(x) = a_1g_1(x) + a_2g_2(x)$. Neste caso, elabora-se uma outra tabela com os dados $(x_k, \ln(y_k))$ e ajusta os novos dados à curva $g(x) = a_1g_1(x) + a_2g_2(x)$, onde

$$a_1 = A = r, \quad a_2 = B = \ln(C), \quad g_1(x) = x \quad \text{e} \quad g_2(x) = 1.$$

Portanto, deve-se resolver o sistema

$$\begin{cases} a_{11}A + a_{12}B = b_1 \\ a_{21}A + a_{22}B = b_2, \end{cases}$$

onde

$$\begin{aligned} a_{11} &= \sum_{k=1}^m [g_1(x_k)]^2 = \sum_{k=1}^m x_k^2; \\ a_{12} &= a_{21} = \sum_{k=1}^m g_1(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m x_k(1) = \sum_{k=1}^m x_k; \\ a_{22} &= \sum_{k=1}^m g_2(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m (1)(1) = m; \\ b_1 &= \sum_{k=1}^m F(x_k)g_1(x_k) = \sum_{k=1}^m \ln(y_k)x_k \end{aligned}$$

e

$$b_2 = \sum_{k=1}^m F(x_k)g_2(x_k) = \sum_{k=1}^m \ln(y_k)(1) = \sum_{k=1}^m \ln(y_k).$$

Após obter os valores de A e B , estes são usados para determinar os valores de C e r através das substituições $r = A$ e $C = e^B$. Com isso, teremos a forma da função exponencial desejada.

Tempo (t)	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
Intensidade (I)	3.16	2.38	1.75	1.34	1.00	0.74	0.56

Tabela 5.4: Dados de uma amostragem

Exemplo 5.2.6 Observando a intensidade de uma fonte radioativa, obteve-se os dados da Tabela 5.4. Determine a função que melhor se ajusta aos dados obtidos.

Solução: A curva que melhor se ajusta aos dados do problema é a curva

$$I(t) = Ce^{rt},$$

onde $C > 0$ e $r < 0$ são constantes a serem determinadas. As constantes C e r podem ser determinadas linearizando a função $I(t)$ e aplicando o método dos mínimos quadrados à função linearizada. Neste caso, a função linearizada é

$$F(t) = B + At,$$

onde $F(t) = \ln(I(t))$, $B = \ln(C)$ e $A = r$. Por outro lado, temos

$$\ln(3.16) = 1.15, \quad \ln(2.38) = 0.87, \quad \ln(1.75) = 0.56, \quad \ln(1.34) = 0.29,$$

$$\ln(1) = 0, \quad \ln(0.74) = -0.3, \quad \ln(0.56) = -0.58.$$

Uma nova tabela com os dados linearizados é dado na Tabela 5.5.

Tempo (t)	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8
$\ln(I(t))$	1.15	0.87	0.56	0.29	0	-0.3	-0.58

Tabela 5.5: Dados linearizados

Os dados $(t_k, \ln(I_k))$ se ajustam à curva $g(t) = a_1g_1(t) + a_2g_2(t)$, onde

$$a_1 = A = r, \quad a_2 = B = \ln(C), \quad g_1(t) = t \quad \text{e} \quad g_2(t) = 1.$$

Os valores de A e B são encontrados resolvendo o sistema

$$\begin{cases} a_{11}A + a_{12}B = b_1 \\ a_{21}A + a_{22}B = b_2, \end{cases}$$

onde

$$a_{11} = \sum_{k=1}^7 [g_1(t_k)]^2 = \sum_{k=1}^7 t_k^2 = (0.2)^2 + (0.3)^2 + (0.4)^2 + (0.5)^2 + (0.6)^2 + (0.7)^2 + (0.8)^2 = 2,03;$$

$$a_{12} = a_{21} = \sum_{k=1}^7 g_1(t_k)g_2(t_k) = \sum_{k=1}^7 t_k(1) = \sum_{k=1}^7 t_k = 0.2 + 0.3 + 0.4 + 0.5 + 0.6 + 0.7 + 0.8 = 3,5;$$

$$\begin{aligned}
a_{22} &= \sum_{k=1}^7 g_2(t_k)g_2(t_k) = \sum_{k=1}^7 (1)(1) = 7; \\
b_1 &= \sum_{k=1}^7 F(t_k)g_1(t_k) = \sum_{k=1}^7 \ln(I_k)t_k \\
&= (1.15)(0.2) + (0.87)(0.3) + (0.56)(0.4) + (0.29)(0.5) + (0)(0.6) + (-0.3)(0.7) + (-0.58)(0.8) \\
&= 0.23 + 0.261 + 0.224 + 0.145 + 0 - 0.21 - 0.464 = 0.186
\end{aligned}$$

e

$$b_2 = \sum_{k=1}^7 F(t_k)g_2(t_k) = \sum_{k=1}^7 \ln(I_k) = 1.15 + 0.87 + 0.56 + 0.29 + 0 - 0.3 - 0.58 = 1.99.$$

Logo, A e B satisfazem o sistema

$$\begin{cases} 2.03A + 3.5B = 0.186 \\ 3.5A + 7B = 1.99, \end{cases}$$

cuja solução é $A = -2.8893$ e $B = 1.7289$. Logo, a função exponencial linearizada é

$$F(t) = -2.8893t + 1.7289.$$

Para determinar a função exponencial $I(t) = Ce^{rt}$, basta ver que

$$r = A = -2.8893 \text{ e que } C = e^B = e^{1.7289} = 5.634.$$

Logo, a função que melhor se ajusta aos dados do problema é a função exponencial

$$I(t) = 5.634e^{-2.8893t}.$$

5.3 Caso Contínuo

Nosso objetivo nesta seção é aproximar uma função $f(x)$, contínua num intervalo $[a, b]$, por uma função polinomial ou por uma função trigonométrica.

O método dos mínimos quadrados no caso contínuo consiste no seguinte problema: Dada $f(x)$ uma função contínua para todo x num intervalo $[a, b]$ e $g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x)$ funções contínuas em $[a, b]$ escolhidas, determinar as constantes a_1, a_2, \dots, a_n de tal forma que a função

$$F(x) = a_1g_1(x) + a_2g_2(x) + \dots + a_n g_n(x)$$

se aproxime ao máximo da função $f(x)$ no intervalo $[a, b]$.

Neste caso, deve-se determinar as constantes a_1, a_2, \dots, a_n de modo que

$$\int_a^b [f(x) - F(x)]^2 dx$$

seja o menor possível. Logo, deve-se minimizar a função

$$G(a_1, a_2, \dots, a_n) = \int_a^b [f(x) - g(x)]^2 dx = \int_a^b [f(x) - a_1 g_1(x) - a_2 g_2(x) - \dots - a_n g_n(x)]^2 dx.$$

Diferenciando a função G em relação aos $a_i, i = 1, 2, \dots, n$ e igualando a zero, encontramos

$$\begin{cases} a_{11}a_1 + a_{12}a_2 + a_{13}a_3 + \dots + a_{1n}a_n & = b_1 \\ a_{21}a_1 + a_{22}a_2 + a_{23}a_3 + \dots + a_{2n}a_n & = b_2 \\ a_{31}a_1 + a_{32}a_2 + a_{33}a_3 + \dots + a_{3n}a_n & = b_3 \\ \vdots & \vdots \\ a_{n1}a_1 + a_{n2}a_2 + a_{n3}a_3 + \dots + a_{nn}a_n & = b_n \end{cases} \quad (5.10)$$

onde

$$a_{ij} = a_{ji} = \int_a^b g_i(x)g_j(x)dx, \quad i, j = 1, 2, 3, \dots, n \quad (5.11)$$

e

$$b_i = \int_a^b f(x)g_i(x)dx, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (5.12)$$

5.3.1 Aproximação Polinomial

Veremos a seguir como aproximar uma função $f(x)$, contínua num intervalo $[a, b]$, por uma função polinomial. Analisaremos o caso em que a função polinomial é uma reta ou uma parábola.

Aproximação através de uma reta

No caso de aproximação por uma reta, escolhemos

$$n = 2, g_1(x) = x, g_2(x) = 1, a_1 = a \text{ e } a_2 = b,$$

onde a e b devem ser determinados. O sistema (5.10) torna-se

$$\begin{cases} a_{11}a + a_{12}b & = b_1 \\ a_{21}a + a_{22}b & = b_2 \end{cases} \quad (5.13)$$

onde

$$\begin{aligned} a_{11} &= \int_a^b [g_1(x)]^2 dx = \int_a^b x^2 dx = \frac{1}{3}(b^3 - a^3), \\ a_{12} = a_{21} &= \int_a^b [g_1(x)g_2(x)] dx = \int_a^b x dx = \frac{1}{2}(b^2 - a^2), \\ a_{22} &= \int_a^b [g_2(x)]^2 dx = \int_a^b dx = (b - a), \\ b_1 &= \int_a^b f(x)g_1(x)dx = \int_a^b xf(x)dx \text{ e } b_2 = \int_a^b f(x)g_2(x)dx = \int_a^b f(x)dx. \end{aligned}$$

Exemplo 5.3.1 Aproximar a função $f(x) = x^3$ no intervalo $[0, 1]$ por uma reta.

Solução: A função g que aproxima $f(x) = x^3$ em $[0, 1]$ é a reta $y = ax + b$, com a e b solução do sistema

$$\begin{cases} a_{11}a + a_{12}b = b_1 \\ a_{21}a + a_{22}b = b_2, \end{cases} \quad (5.14)$$

onde

$$a_{11} = \frac{1}{3}(1^3 - 0^3) = \frac{1}{3}, \quad a_{12} = a_{21} = \frac{1}{2}(1^2 - 0^2) = \frac{1}{2}, \quad a_{22} = (1 - 0) = 1;$$

$$b_1 = \int_0^1 f(x)g_1(x)dx = \int_0^1 x^4 dx = \left(\frac{x^4}{4}\right)\Big|_0^1 = \frac{1}{4}$$

e

$$b_2 = \int_0^1 f(x)g_2(x)dx = \int_0^1 x^3 dx = \left(\frac{x^3}{3}\right)\Big|_0^1 = \frac{1}{3}.$$

Logo, a e b satisfazem o sistema

$$\begin{cases} \frac{1}{3}a + \frac{1}{2}b = \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2}a + b = \frac{1}{3} \end{cases}$$

ou, equivalentemente,

$$\begin{cases} 4a + 6b = 3 \\ 3a + 6b = 2 \end{cases}$$

cuja solução é $a = 1$ e $b = -\frac{1}{6}$. Portanto, a reta que melhor aproxima a função $f(x) = x^3$ em $[0, 1]$ é $y = x - \frac{1}{6}$.

Aproximação através de uma parábola

No caso de aproximação por uma parábola, escolhemos

$$n = 3, g_1(x) = x^2, g_2(x) = x, g_3(x) = 1, a_1 = a, a_2 = b \text{ e } a_3 = c,$$

onde a, b e c devem ser determinados. O sistema (5.10) torna-se

$$\begin{cases} a_{11}a + a_{12}b + a_{13}c = b_1 \\ a_{21}a + a_{22}b + a_{23}c = b_2 \\ a_{31}a + a_{32}b + a_{33}c = b_3 \end{cases} \quad (5.15)$$

onde

$$a_{11} = \int_a^b [g_1(x)]^2 dx = \int_a^b x^4 dx = \frac{1}{5}(b^5 - a^5),$$

$$a_{12} = a_{21} = \int_a^b [g_1(x)g_2(x)] dx = \int_a^b x^3 dx = \frac{1}{4}(b^4 - a^4),$$

$$\begin{aligned}
a_{13} = a_{31} &= \int_a^b [g_1(x)g_3(x)]dx = \int_a^b x^2 dx = \frac{1}{3}(b^3 - a^3), \\
a_{23} = a_{32} &= \int_a^b [g_2(x)g_3(x)]dx = \int_a^b x dx = \frac{1}{2}(b^2 - a^2), \\
a_{22} &= \int_a^b [g_2(x)]^2 dx = \int_a^b x^2 dx = \frac{1}{3}(b^3 - a^3), \\
a_{33} &= \int_a^b [g_3(x)]^2 dx = \int_a^b dx = (b - a), \\
b_1 &= \int_a^b [f(x)g_1(x)]dx = \int_a^b x^2 f(x) dx, \\
b_2 &= \int_a^b [f(x)g_2(x)]dx = \int_a^b x f(x) dx, \\
b_3 &= \int_a^b [f(x)g_3(x)]dx = \int_a^b f(x) dx.
\end{aligned}$$

Exemplo 5.3.2 Aproximar a função $f(x) = x^4 - 5x$ por um polinômio do segundo grau no intervalo $[-1, 1]$.

Solução: O polinômio do segundo grau que aproxima $f(x) = x^4 - 5x$ em $[-1, 1]$ é $p(x) = ax^2 + bx + c$, com a, b e c solução do sistema

$$\begin{cases} a_{11}a + a_{12}b + a_{13}c = b_1 \\ a_{21}a + a_{22}b + a_{23}c = b_2 \\ a_{31}a + a_{32}b + a_{33}c = b_3 \end{cases}$$

onde

$$\begin{aligned}
a_{11} &= \frac{1}{5}[1^5 - (-1)^5] = \frac{2}{5}, \\
a_{12} = a_{21} &= \frac{1}{4}[1^4 - (-1)^4] = 0, \\
a_{13} = a_{31} = a_{22} &= \frac{1}{3}[1^3 - (-1)^3] = \frac{2}{3}, \\
a_{23} = a_{32} &= \frac{1}{2}[1^2 - (-1)^2] = 0, \\
a_{33} &= (1 - (-1)) = 2, \\
b_1 &= \int_{-1}^1 x^2(x^4 - 5x)dx = \int_{-1}^1 (x^6 - 5x^3)dx = \left(\frac{x^7}{7} - 5\frac{x^4}{4}\right)\Big|_{-1}^1 = \frac{1}{7} - \frac{5}{4} + \frac{1}{7} + \frac{5}{4} = \frac{2}{7}, \\
b_2 &= \int_{-1}^1 x(x^4 - 5x)dx = \int_{-1}^1 (x^5 - 5x^2)dx = \left(\frac{x^6}{6} - 5\frac{x^3}{3}\right)\Big|_{-1}^1 = \frac{1}{6} - \frac{5}{3} - \frac{1}{6} - \frac{5}{3} = -\frac{10}{3} \\
b_3 &= \int_{-1}^1 (x^4 - 5x)dx = \left(\frac{x^5}{5} - 5\frac{x^2}{2}\right)\Big|_{-1}^1 = \frac{1}{5} - \frac{5}{2} + \frac{1}{5} + \frac{5}{2} = \frac{2}{5}.
\end{aligned}$$

Logo, a, b e c satisfazem o seguinte sistema

$$\begin{cases} \frac{2}{5}a + 0b + \frac{2}{3}c = \frac{2}{7} \\ 0a + \frac{2}{3}b + 0c = -\frac{10}{3} \\ \frac{2}{3}a + 0b + 2c = \frac{2}{5} \end{cases}$$

cuja solução é $a = \frac{6}{7} = 0,8571, b = -5$ e $c = -\frac{3}{35} = -0,0857$. Portanto o polinômio procurado é

$$p(x) = \frac{6}{7}x^2 - 5x - \frac{3}{35} \quad \text{ou} \quad p(x) = 0,8571x^2 - 5x - 0,0857.$$

5.3.2 Aproximação Trigonométrica

Consideremos uma função $y = f(x)$ periódica e integrável no intervalo $[0, 2\pi]$. Desejamos aproximar $f(x)$, com $x \in [0, 2\pi]$, por uma função do tipo

$$F(x) = a_0 + a_1 \cos(x) + b_1 \operatorname{sen}(x) + a_2 \cos(2x) + b_2 \operatorname{sen}(2x) + \dots + a_m \cos(mx) + b_m \operatorname{sen}(mx), \quad (5.16)$$

de tal forma que a distância entre f e F seja mínima.

Adotando o produto escalar

$$(f, g) = \int_0^{2\pi} f(x)g(x)dx \quad (5.17)$$

e usando os mesmos argumentos do caso de aproximação polinomial, chegamos que os coeficientes $a_0, a_1, b_1, \dots, a_m, b_m$ são dados por

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x)dx, \\ a_k &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos(kx)dx, \quad k = 1, 2, \dots, m, \\ b_k &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \operatorname{sen}(kx)dx, \quad k = 1, 2, \dots, m. \end{aligned}$$

Observações:

1. Se a função dada é uma função par, então

$$F(x) = a_0 + \sum_{k=1}^m a_k \cos(kx).$$

2. Se a função dada é uma função ímpar, então

$$F(x) = \sum_{k=1}^m b_k \operatorname{sen}(kx).$$

3. A aproximação de $f(x)$ no intervalo $[0, \pi]$ dada por (5.16), usando o produto escalar (5.17), pelo método dos mínimos quadrados, é também conhecida como **Análise Harmônica**. Notemos que

$$a_k \cos(kx) + b_k \operatorname{sen}(kx) = A_k \operatorname{sen}(kx + \psi_k),$$

onde

$$A_k = \sqrt{(a_k)^2 + (b_k)^2} \quad \text{e} \quad \tan(\psi_k) = \frac{a_k}{b_k},$$

são chamados harmônicos de ordem k . Os termos A_k e ψ_k são denominados amplitude e ângulo de fase, respectivamente.

Exemplo 5.3.3 Use o método dos mínimos quadrados para determinar a aproximação trigonométrica de ordem 1 para a função

$$f(x) = |x|, \quad -\pi \leq x \leq \pi.$$

Solução: Prolongando a função f , vemos que esta é uma função periódica de período 2π . A função trigonométrica aproximada de ordem 1 é $F_1(x)$ dada por

$$F_1(x) = a_0 + a_1 \cos(x) + b_1 \operatorname{sen}(x),$$

onde

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(x) dx = \frac{2}{2\pi} \int_0^\pi x dx = \frac{\pi}{2}, \\ a_1 &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \cos(x) dx = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi x \cos(x) dx = -\frac{4}{\pi}, \\ b_1 &= \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(x) \operatorname{sen}(x) dx = 0. \end{aligned}$$

Logo, a aproximação trigonométrica de ordem 1 para a função dada é

$$F_1(x) = \frac{\pi}{2} - \frac{4}{\pi} \cos(x).$$

5.4 Exercícios

1) Uma empresa localizada na cidade de São Paulo, produtora de pneumáticos, possui uma rede distribuidora por todo o interior do estado. Na tabela 5.6 estão colocados os preços desse produto em relação a cada distância do mercado consumidor até a sede da empresa.

a) Determine a reta de regressão linear;

b) A empresa tem uma filial no Rio de Janeiro, e o preço de venda do pneumático produzido numa cidade B do Rio de Janeiro, é de R\$ 160,00. Sabendo-se que a distância entre São Paulo e a cidade B é de 250 km, o produto a ser vendido na cidade B deve ser produzido no

Preço	36	48	50	70	42	58	91	69
Distância	50	240	150	350	100	175	485	335

Tabela 5.6: Dados de uma amostragem

Rio de Janeiro ou em São Paulo?

2) Na tabela 5.7, x representa o número de dias após o aparecimento de certa doença, e y representa o número de novos casos da doença no x -ésimo dia. Ache a reta de regressão linear para os pontos dados e use-a para estimar o número de novos casos da doença no sexto dia. **Resposta:** $y = 5,5x + 13,7$; $y(6) = 47$.

x	1	2	3	4	5
y	20	24	30	35	42

Tabela 5.7: Dados de uma amostragem

3) O preço de um quadro varia com o tempo de acordo com os dados da tabela 5.8. Determine a reta de regressão linear que melhor se ajusta aos dados do problema e use esta reta para estimar o valor do quadro em 1990. **Resposta:** $y = 152x + 1110$, 4910.

Ano	1965	1970	1975	1980
Preço do quadro	1200	1800	2500	3500

Tabela 5.8: Dados de uma amostragem

4) Determine a reta de regressão linear para os dados de uma amostragem colocados na tabela 5.9: **Resposta:** $y = \frac{3}{7}x + \frac{65}{21}$.

5) Determine a parábola $y = ax^2 + bx + c$ que melhor se ajusta aos dados de uma amostragem colocados na Tabela 5.10:

x	1	3	5	7	9	11
y	3	5	6	5	7	8

Tabela 5.9: Dados de uma amostragem

x	-2	-1	1	2
y	1	-3	1	9

Tabela 5.10: Dados de uma amostragem

6) Na tabela abaixo estão colocados os dados dos 6 últimos recenseamentos realizados no Brasil. Determine a função exponencial que melhor se ajusta aos dados da tabela e use esta função para estimar a população brasileira em 2012 e em 2020.

Ano	1950	1960	1970	1980	1991	2000
População (em milhões)	52	70	93	119	149	170

Tabela 5.11: População brasileira

7) Os dados da Tabela 5.12 representam a população aproximada do mundo, desde 1850 até 2000. Determine a função exponencial que melhor se ajusta aos dados da tabela e use esta função para estimar a população mundial em 2012 e em 2020.

x (anos)	1850	1900	1950	1980	2000
y (população em bilhões)	1,3	1,6	3	4,4	6

Tabela 5.12: População mundial em bilhões

Capítulo 6

Integração Numérica

6.1 Introdução

Além de existir diversas técnicas de integração, ainda existem integrais que não se pode calcular usando essas técnicas. Por exemplo, as integrais

$$\int e^{x^2} dx \quad \int \cos(x^2) dx \quad \int \text{sen}(x^2) dx,$$

não podem ser calculadas usando as técnicas de integração conhecidas. Daí a necessidade de conhecer métodos numéricos que aproximem estas integrais quando elas são definidas num intervalo fechado.

Neste capítulo, apresentaremos alguns métodos numéricos para estimar o valor de uma integral definida $\int_a^b f(x) dx$ por fórmulas que usam o valor de $f(x)$ em apenas um número finito de pontos do intervalo $[a, b]$.

A integração numérica de uma função $y = f(x)$, definida num intervalo $[a, b]$, é feita através da integração de um polinômio $P_n(x)$ que aproxima f em $[a, b]$. Por exemplo, quando $y = f(x)$ é dada por um conjunto de pontos $(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))$ com $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, então o polinômio a ser integrado é o polinômio de interpolação de f .

A vantagem de se integrar o polinômio que aproxima f ao invés de f , é que, em muitos casos, a função f não possui primitiva e sua integração é impossível. Noutros casos, a função f é de difícil integração. Também há casos em que a função só é conhecida em pontos discretos através de experimentos e, neste caso, a integração do polinômio aproximador é necessário.

Veremos a seguir alguns métodos de integração numérica.

6.2 Método dos Trapézios

Considere um intervalo $[a, b]$ e x_0, x_1, \dots, x_n pontos desse intervalo. Seja $y = f(x)$ uma função cujos valores $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ são conhecidos.

Teorema 6.2.1 *Seja f uma função contínua num intervalo fechado $[a, b]$. Suponhamos que o intervalo $[a, b]$ é dividido em N sub-intervalos de amplitudes iguais a $h = \frac{b-a}{N}$ de tal forma que $a = x_0 < x_1 < \dots < x_N = b$. Então,*

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2(f(x_1) + f(x_2) + \dots + f(x_{N-1})) + f(x_N) \right]. \quad (6.1)$$

A fórmula (6.1) é uma fórmula de Newton-Cotes, conhecida como **Regra do Trapézio Generalizada**.

No caso de $N = 1$, a fórmula (6.1) é conhecida como **Regra do Trapézio** e é dada por

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

Exemplo 6.2.2 *Usando a Regra do Trapézio com $N = 6$, determine uma aproximação, com 3 casas decimais, para a integral definida*

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x)dx.$$

Solução: Temos

$$f(x) = e^x \cos(x), \quad a = 0, \quad b = 1.2 \quad N = 6 \quad \text{e} \quad h = \frac{1.2 - 0}{6} = 0.2.$$

Usando a Regra do Trapézio com $N = 6$, teremos

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x)dx \approx \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2(f(x_1) + f(x_2) + f(x_3) + f(x_4) + f(x_5)) + f(x_6) \right]. \quad (6.2)$$

Usando o fato que $h = 0.2$, temos

$$x_0 = 0, \quad x_1 = 0.2, \quad x_2 = 0.4, \quad x_3 = 0.6, \quad x_4 = 0.8, \quad x_5 = 1.0 \quad \text{e} \quad x_6 = 1.2$$

e

$$f(x_0) = f(0) = 1, \quad f(x_1) = f(0.2) = 1.197, \quad f(x_2) = f(0.4) = 1.374, \quad f(x_3) = f(0.6) = 1.503,$$

$$f(x_4) = f(0.8) = 1.552, \quad f(x_5) = f(1.0) = 1.468 \quad \text{e} \quad f(x_6) = f(1.2) = 1.202.$$

Substituindo esses valores em (6.2), obtemos

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x)dx \approx \frac{0.2}{2} \left[1 + 2(1.197 + 1.374 + 1.503 + 1.552 + 1.468) + 1.202 \right] = 1.639.$$

Exemplo 6.2.3 *Ache uma aproximação para a integral $\int_0^3 \frac{1}{16 + x^2} dx$ usando a regra do trapézio com $n = 6$. Expresse o resultado com 3 casas decimais.*

Solução: Temos

$$f(x) = \frac{1}{16 + x^2}, \quad a = 0, \quad b = 3 \quad N = 6 \quad \text{e} \quad h = \frac{3 - 0}{6} = \frac{1}{2}.$$

Usando a Regra do Trapézio com $N = 6$, teremos

$$\int_0^3 \frac{1}{16 + x^2} dx \approx \frac{1}{4} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_5) + f(x_6)]. \quad (6.3)$$

Usando o fato que $h = \frac{1}{2}$, temos

$$x_0 = 0, \quad x_1 = \frac{1}{2}, \quad x_2 = 1, \quad x_3 = \frac{3}{2}, \quad x_4 = 2, \quad x_5 = \frac{5}{2} \quad \text{e} \quad x_6 = 3$$

e

$$f(x_0) = \frac{1}{16}, \quad f(x_1) = \frac{4}{65}, \quad f(x_2) = \frac{1}{17}, \quad f(x_3) = \frac{4}{73}, \quad f(x_4) = \frac{1}{20}, \quad f(x_5) = \frac{4}{89}, \quad f(x_6) = \frac{1}{25}.$$

Substituindo esses valores em (6.3), obtemos

$$\int_0^3 \frac{1}{16 + x^2} dx \approx \frac{1}{4} \left(\frac{1}{16} + \frac{8}{65} + \frac{2}{17} + \frac{8}{73} + \frac{1}{10} + \frac{8}{89} + \frac{1}{25} \right) \approx 0,1606751.$$

Com 3 casas decimais, temos

$$\int_0^3 \frac{1}{16 + x^2} dx \approx 0,161.$$

Exemplo 6.2.4 Use a regra do Trapézio com $n = 10$ para obter uma aproximação da integral

$$\int_1^2 \frac{1}{x} dx.$$

Solução: Temos $f(x) = \frac{1}{x}$, $a = 1$, $b = 2$ e $n = 10$. Devemos dividir o intervalo $[1, 2]$ em 10 partes iguais onde cada parte deve ter amplitude $h = \frac{1}{10}$. Neste caso teremos

$$x_0 = 1; \quad x_1 = \frac{11}{10}; \quad x_2 = \frac{12}{10}; \quad x_3 = \frac{13}{10}; \quad x_4 = \frac{14}{10}; \quad x_5 = \frac{15}{10}; \\ x_6 = \frac{16}{10}; \quad x_7 = \frac{17}{10}; \quad x_8 = \frac{18}{10}; \quad x_9 = \frac{19}{10}; \quad x_{10} = 2.$$

Portanto,

$$f(x_0) = 1; \quad f(x_1) = \frac{10}{11}; \quad f(x_2) = \frac{10}{12}; \quad f(x_3) = \frac{10}{13}; \quad f(x_4) = \frac{10}{14}; \\ f(x_5) = \frac{10}{15}; \quad f(x_6) = \frac{10}{16}; \quad f(x_7) = \frac{10}{17}; \quad f(x_8) = \frac{10}{18}; \quad f(x_9) = \frac{10}{19}; \quad f(x_{10}) = \frac{1}{2}.$$

Pela regra do trapézio, temos

$$\int_1^2 \frac{1}{x} dx \approx \frac{1}{20} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_9) + f(x_{10})] \approx 0,6937713..$$

Observação: Usando o teorema fundamental do cálculo, temos que $\int_1^2 \frac{1}{x} dx = \ln(2)$. Pelo exemplo anterior, segue que $\ln(2) \approx 0,6937713$.

Exemplo 6.2.5 Use a regra do Trapézio com $n = 10$ para obter uma aproximação da integral

$$\int_0^1 e^{x^2} dx.$$

Solução: Temos $f(x) = e^{x^2}$, $a = 0$, $b = 1$ e $h = \frac{1}{10} = 0.1$. Neste caso teremos

$$\begin{aligned} x_0 = 0; \quad x_1 = 0.1; \quad x_2 = 0.2; \quad x_3 = 0.3; \quad x_4 = 0.4; \quad x_5 = 0.5; \\ x_6 = 0.6; \quad x_7 = 0.7; \quad x_8 = 0.8; \quad x_9 = 0.9; \quad x_{10} = 1. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned} f(x_0) = 1; \quad f(x_1) = 1.01005; \quad f(x_2) = 1.04081; \quad f(x_3) = 1.09417; \\ f(x_4) = 1.17351; \quad f(x_5) = 1.28402; \quad f(x_6) = 1.43333; \quad f(x_7) = 1.63232; \\ f(x_8) = 1.89648; \quad f(x_9) = 2.24781; \quad f(x_{10}) = 2.71828. \end{aligned}$$

Pela regra do trapézio, temos

$$\int_0^1 e^{x^2} dx \approx \frac{1}{20} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_9) + f(x_{10})] \approx 1.46265...$$

6.3 Métodos de Simpson

Considere um intervalo $[a, b]$ e x_0, x_1, \dots, x_n pontos desse intervalo. Seja $y = f(x)$ uma função cujos valores $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ são conhecidos.

Teorema 6.3.1 Suponhamos que o intervalo $[a, b]$ é dividido em $2N$ sub-intervalos de amplitudes iguais a $h = \frac{b-a}{2N}$ de tal forma que $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{2N} = b$. Então,

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_{2N}} f(x) dx = \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) \right. \\ \left. + \dots + 2f(x_{2N-2}) + 4f(x_{2N-1}) + f(x_{2N}) \right]. \end{aligned} \tag{6.4}$$

A fórmula (6.4) é uma fórmula de Newton-Cotes, conhecida como **Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson Generalizada**.

No caso de $N = 1$, a fórmula (6.4) é conhecida como **Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson** e é dada por

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]}{3}.$$

Exemplo 6.3.2 Usando a Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson com $N = 3$, determine uma aproximação, com 3 casas decimais, para a integral definida

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x)dx.$$

Solução: Temos

$$f(x) = e^x \cos(x), \quad a = 0, \quad b = 1.2 \quad N = 3 \quad \text{e} \quad h = \frac{1.2 - 0}{(2)(3)} = 0.2.$$

Usando a Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson com $N = 3$, teremos

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x)dx \approx \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + 4f(x_5) + f(x_6)]. \quad (6.5)$$

Novamente, temos

$$x_0 = 0, \quad x_1 = 0.2, \quad x_2 = 0.4, \quad x_3 = 0.6, \quad x_4 = 0.8, \quad x_5 = 1.0 \quad \text{e} \quad x_6 = 1.2$$

e

$$f(x_0) = 1, \quad f(x_1) = 1.197, \quad f(x_2) = 1.374, \quad f(x_3) = 1.503, \\ f(x_4) = 1.552, \quad f(x_5) = 1.468 \quad \text{e} \quad f(x_6) = 1.202.$$

Substituindo esses valores em (6.5), obtemos

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x)dx \approx \frac{0.2}{3} [1 + 4(1.197) + 2(1.374) + 4(1.503) + 2(1.552) + 4(1.468) + 1.202] = 1.6484.$$

Exemplo 6.3.3 Usando a Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson com $N = 5$, determine uma aproximação, com 3 casas decimais, para a integral definida

$$\int_1^2 \frac{1}{x} dx.$$

Solução: Temos

$$f(x) = \frac{1}{x}, \quad a = 1, \quad b = 2 \quad N = 5 \quad \text{e} \quad h = \frac{2 - 1}{(2)(5)} = 0.1.$$

Usando a Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson com $N = 5$, teremos

$$\int_1^2 \frac{1}{x} dx \approx \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + 4f(x_5) + 2f(x_6) + 4f(x_7) + 2f(x_8) + 4f(x_9) + f(x_{10}) \right]. \quad (6.6)$$

Novamente, temos

$$x_0 = 1; \quad x_1 = \frac{11}{10}; \quad x_2 = \frac{12}{10}; \quad x_3 = \frac{13}{10}; \quad x_4 = \frac{14}{10}; \quad x_5 = \frac{15}{10};$$

$$x_6 = \frac{16}{10}; \quad x_7 = \frac{17}{10}; \quad x_8 = \frac{18}{10}; \quad x_9 = \frac{19}{10}; \quad x_{10} = 2.$$

e

$$f(x_0) = 1; \quad f(x_1) = \frac{10}{11}; \quad f(x_2) = \frac{10}{12}; \quad f(x_3) = \frac{10}{13}; \quad f(x_4) = \frac{10}{14};$$

$$f(x_5) = \frac{10}{15}; \quad f(x_6) = \frac{10}{16}; \quad f(x_7) = \frac{10}{17}; \quad f(x_8) = \frac{10}{18}; \quad f(x_9) = \frac{10}{19}; \quad f(x_{10}) = \frac{1}{2}.$$

Substituindo esses valores em (6.6), obtemos

$$\int_1^2 \frac{1}{x} dx \approx \frac{1}{30} \left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + 4f(x_9) + f(x_{10}) \right) \approx 0,693150231.$$

Teorema 6.3.4 *Suponhamos agora que o intervalo $[a, b]$ é dividido em $3N$ sub-intervalos de amplitudes iguais a $h = \frac{b-a}{3N}$ de tal forma que $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{3N} = b$. Neste caso, temos*

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_{3N}} f(x) dx \simeq \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3 \left(f(x_1) + f(x_2) \right) + 2f(x_3) + 3 \left(f(x_4) + f(x_5) \right) + \dots + 2f(x_{3N-3}) + 3 \left(f(x_{3N-2}) + f(x_{3N-1}) \right) + f(x_{3N}) \right]. \quad (6.7)$$

A fórmula (6.7) é uma fórmula de Newton-Cotes, conhecida como **Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson Generalizada**. No caso de $N = 1$, a fórmula (6.7) é conhecida como **Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson**.

Exemplo 6.3.5 *Usando a Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson com $N = 2$, determine uma aproximação, com 3 casas decimais, para a integral definida*

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x) dx.$$

Solução: Temos

$$f(x) = e^x \cos(x), \quad a = 0, \quad b = 1.2 \quad N = 2 \quad \text{e} \quad h = \frac{1.2 - 0}{(3)(2)} = 0.2.$$

Usando a Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson com $N = 2$, teremos

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x) dx \approx \frac{3h}{8} \left[f(x_0) + 3(f(x_1) + f(x_2)) + 2f(x_3) + 3(f(x_4) + f(x_5)) + f(x_6) \right]. \quad (6.8)$$

Novamente, temos

$$x_0 = 0, \quad x_1 = 0.2, \quad x_2 = 0.4, \quad x_3 = 0.6, \quad x_4 = 0.8, \quad x_5 = 1.0 \quad \text{e} \quad x_6 = 1.2$$

e

$$f(x_0) = 1, \quad f(x_1) = 1.197, \quad f(x_2) = 1.374, \quad f(x_3) = 1.503, \\ f(x_4) = 1.552, \quad f(x_5) = 1.468 \quad \text{e} \quad f(x_6) = 1.202.$$

Substituindo esses valores em (6.8), obtemos

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x) dx \approx \frac{3(0.2)}{8} \left[1 + 3(1.197 + 1.374) + 2(1.503) + 3(1.552 + 1.468) + 1.202 \right] = 1.648575.$$

Observação: Usando integração por partes, conseguimos

$$\int_0^{1.2} e^x \cos(x) dx = \frac{e^x}{2} (\operatorname{sen}(x) + \cos(x)) \Big|_0^{1.2} \simeq 1.6487747.$$

Comparando esse resultado com os resultados obtidos nos exemplos anteriores, vemos que a regra do Trapézio dá a solução aproximada com uma casa decimal correta e as regras de Simpson dão a solução aproximada com três casas decimais corretas.

Podemos usar a Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson e a Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson para calcular a solução aproximada de uma integral indefinida. Vejamos isto no exemplo abaixo.

Exemplo 6.3.6 Usando a Regra de Simpson, determine uma aproximação para a integral definida

$$\int_0^1 e^x \cos(x) dx.$$

Solução: Podemos usar a Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson no intervalo $[0, 0.4]$ e a Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson no intervalo $[0.4, 1]$ ou usar a Regra $\frac{3}{8}$ de Simpson no intervalo $[0, 0.6]$ e a Regra $\frac{1}{3}$ de Simpson no intervalo $[0.6, 1]$. Usando a primeira possibilidade, tem-se

$$\int_0^1 e^x \cos(x) dx \simeq \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right] + \frac{3h}{8} \left[f(x_2) + 3(f(x_3) + f(x_4)) + f(x_5) \right] \\ = \frac{0.2}{3} \left[1 + 4(1.197) + 1.374 \right] + \frac{3(0.2)}{8} \left[1.374 + 3(1.503 + 1.552) + 1.468 \right] = 1.377992.$$

6.4 Fórmulas Precisas de Derivação

6.5 Extrapolação de Richardson

6.6 Derivadas de Dados com Espaçamentos Desiguais

6.7 Exercícios

Capítulo 7

Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias

7.1 Introdução

Neste capítulo, faremos uso das ferramentas do cálculo numérico para resolver equações diferenciais ordinárias. Apresentaremos métodos numéricos que podem ser aplicados na resolução de equações diferenciais de primeira ordem ou de ordem mais elevada e na resolução de sistemas de equações diferenciais de primeira ordem.

Lembramos que uma equação diferencial de primeira ordem é uma equação da forma

$$y' = f(x, y), \quad (7.1)$$

onde f é uma função real nas variáveis x e y com y sendo a função incógnita na variável independente x . No caso de y e f serem vetores, dizemos que (7.1) é um sistema de equações diferenciais de primeira ordem.

Uma solução da equação (7.1) é uma função $y = y(x)$ diferenciável em $x \in [a, b]$ tal que $y'(x) = f(x, y(x))$. A equação (7.1) possui infinitas soluções. Para obtermos uma solução particular é preciso especificar um valor da solução $y(x)$ num ponto x dado, por exemplo, $y(x_0) = y_0$. Esse valor particular da solução é denominado condição inicial do problema. A equação (7.1) juntamente com uma condição inicial gera um **problema de valor inicial** (PVI). Assim, um problema de valor inicial possui a seguinte forma:

$$\begin{cases} y' & = f(x, y) \\ y(x_0) & = y_0. \end{cases} \quad (7.2)$$

O teorema a seguir estabelece condições que garante a existência e unicidade de um PVI na forma de (7.2).

Teorema 7.1.1 *Seja $f(x, y)$ definida e contínua no conjunto*

$$D = \{(x, y); a \leq x \leq b, -\infty < y < \infty, a, b \text{ finitos}\}.$$

Suponha que exista uma constante $L > 0$ tal que

$$|f(x, y) - f(x, y^*)| < L|y - y^*|, \quad \forall (x, y), (x, y^*) \in D.$$

Se y_0 é um número dado, então existe única solução do PVI (7.2), contínua e diferenciável para todo $(x, y) \in D$.

Para os métodos numéricos que desenvolveremos neste capítulo, assumiremos que o PVI (7.2) possui solução única, ou seja, f sempre satisfaz as condições do teorema anterior. Com o uso dos métodos numéricos, devemos encontrar soluções aproximadas dos PVIs do tipo (7.2), num conjunto discreto de pontos $\{x_k, k = 0, 1, 2, \dots, N\}$. É o que chamamos de **discretização**. A sequência de pontos $\{x_k\}$ é definida por

$$x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N,$$

onde $x_0 = a$, $x_N = b$ e $N = \frac{b-a}{h}$.

O valor da função no ponto x_k é aproximado por y_k e é obtido em função dos valores anteriores $y_{k-1}, y_{k-2}, \dots, y_1, y_0$. A partir disso, classificamos os métodos em duas classes: **Métodos de Passo Simples**, aqueles em que o cálculo de y_k depende apenas de y_{k-1} , e **Métodos de Passo Múltiplo** ou **Método de m-passos**, aqueles em que o cálculo de y_k depende dos m valores $y_{k-1}, y_{k-2}, \dots, y_{k-m}$ calculados anteriores. Dizemos que o comprimento do intervalo, h , é o **tamanho do passo**, os pontos x_k são os **pontos da malha** e N é o **número de passos**.

7.2 Método de Euler

A primeira tentativa de resolução numérica de uma equação diferencial foi provavelmente feita por Euler, aproximadamente em 1768. Ele usou o que se chama hoje de método da tangente ou método de Euler. O método de Euler serve atualmente como base para o entendimento de métodos mais elaborados. Seu uso é limitado, pois o erro acumulado à medida que o processo se desenvolve é grande. A descrição do método é dado abaixo.

Considere o problema de valor inicial (7.2). Dados x_0 e $y_0 = y(x_0)$, o Método de Euler consiste em determinar uma sequência de aproximações $\{y_k\}, k = 1, 2, \dots, n$, para as soluções exatas $y(x_k)$.

A primeira aproximação y_1 é determinada traçando a reta tangente T_1 à curva $y = y(x)$ no ponto (x_0, y_0) (ver Figura 7.1). A equação de T_1 é

$$y(x) = y_0 + y'(x_0)(x - x_0).$$

Fazendo $x = x_1$ e lembrando que $y'(x_0) = f(x_0, y_0)$, tem-se a primeira aproximação $y_1 \simeq y(x_1)$ dada por

$$y_1 \simeq y(x_1) = y_0 + f(x_0, y_0)(x_1 - x_0).$$

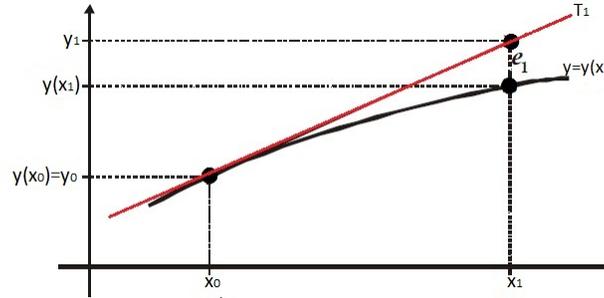


Figura 7.1:

A segunda aproximação y_2 é determinada traçando a reta tangente T_2 à curva $y = y(x)$ no ponto $(x_1, y(x_1))$. A equação de T_2 é

$$y(x) = y_1 + y'(x_1)(x - x_1).$$

Fazendo $x = x_2$ e lembrando que $y'(x_1) = f(x_1, y_1)$, tem-se a segunda aproximação $y_2 \simeq y(x_2)$ dada por

$$y_2 \simeq y(x_2) = y_1 + f(x_1, y_1)(x_2 - x_1).$$

Continuando o processo obtemos a fórmula geral do método de Euler

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)(x_{n+1} - x_n).$$

Admitindo que o espaçamento h entre os pontos x_0, x_1, \dots seja uniforme, então $x_{n+1} - x_n = h$ e a fórmula de Euler pode ser escrita como:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

O erro absoluto cometido em cada aproximação, é dado por

$$e_n = |y(x_n) - y_n|.$$

Exemplo 7.2.1 Considere o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= 4y + 1 - x, \\ y(0) &= 1. \end{cases}$$

a) Use o método de Euler, com espaçamento $h = 0.1$, para determinar uma aproximação da solução no ponto $x = 0.2$.

b) Determine o erro nessa aproximação.

Solução:

a) Os dados para se usar a fórmula de Euler são:

$$f(x, y) = 4y + 1 - x, \quad x_0 = 0, \quad y_0 = 1 \quad \text{e} \quad h = 0.1.$$

Sendo $x_k = x_0 + kh$, a sequência $\{x_k\}$ é tal que

$$x_0 = 0, \quad x_1 = 0.1, \quad x_2 = 0.2, \quad x_3 = 0.3, \dots$$

Uma aproximação da solução no ponto $x = 0.2$ é dada por $y_2 \simeq y(x_2) = y(0.2)$. Assim, desejamos determinar a segunda aproximação y_2 .

A primeira aproximação $y_1 \simeq y(x_1) = y(0.1)$ é dada por

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0) = 1 + (0.1)f(0, 1) = 1 + (0.1)(5) = 1.5.$$

A segunda aproximação $y_2 \simeq y(x_2)$ é dada por

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1) = 1.5 + (0.1)f(0.1, 1.5) = 1.5 + (0.1)(6.9) = 2.19.$$

b) A equação dada é do tipo diferencial linear de primeira ordem. A solução desta equação que satisfaz a condição inicial $y(0) = 1$ é a função

$$y = y(x) = \frac{1}{4}x + \frac{19}{16}e^{4x} - \frac{3}{16}.$$

O valor exato da solução $y = y(x)$, no ponto $x = 0.2$, é

$$y(0.2) = 2,5053299.$$

Portanto, o erro é

$$e_2 = |2,51 - 2,19| = 0,32.$$

Um erro desta grandeza (de 12%) não é normalmente aceitável.

Erros no Método de Euler

Há duas fontes fundamentais de erro na resolução numérica de um problema de valor inicial: erro de truncamento e erro de arredondamento.

O erro de truncamento se divide em **erro de truncamento global**, que é a diferença entre a solução exata $y(x_k)$ e a solução aproximada y_k , dada por $E_k = |y(x_k) - y_k|$, e o **erro de truncamento local**, que é obtido com o uso de uma fórmula aproximada quando se avança cada passo do processo.

O erro de arredondamento ocorre por que os cálculos são feitos em aritmética com apenas um número finito de dígitos. Esse erro é dado por

$$R_k = y_k - Y_k,$$

onde Y_k é o valor calculado pelo procedimento numérico dado. O valor absoluto do erro total no cálculo de $y(x_k)$ é dado por

$$|y(x_k) - Y_k| \leq |E_k| + |R_k|.$$

Os erros de arredondamento têm natureza mais aleatória do que os de truncamento, pois dependem do tipo de computador utilizado, da sequência de execução dos cálculos, do método de arredondamento, etc.

Erro de truncamento para o método de Euler: Quando a fórmula de Euler é obtida usando a idéia da tangente, na verdade alguns termos são desprezados em cada passo, dando origem ao erro de truncamento local, de forma que:

$$|e_k| \leq \frac{h^2}{2} M,$$

onde $M = \max_{t \in I} y''(t)$. Se o único erro cometido a cada passo é o de truncamento local, então depois de m passos o erro acumulado, ou seja, o erro de truncamento global, no intervalo $I = [a, b]$ considerado é

$$|E_k| = y(b) - y_m \quad \text{e} \quad |E_k| \leq Ch,$$

onde C é uma constante. Isto mostra que, se o espaçamento h no método de Euler é dividido pela metade, pode-se esperar que o erro de truncamento global do método também seja reduzido pela metade.

Por exemplo, considerando o problema de valor inicial

$$y' = 4y + 1 - x, \quad y(0) = 1.$$

no intervalo $[0, 1]$, a solução $y = y(x)$ é dada por

$$y(x) = \frac{1}{4}x + \frac{19}{16}e^{4x} - \frac{3}{16}.$$

Logo,

$$y''(x) = 19e^{4x}.$$

O erro no primeiro passo (para $h = 0,1$) é dado por

$$|e_1| \leq \frac{19e^{0,4}(0,1)^2}{2}.$$

Isto mostra que o erro aumenta progressivamente com x .

A tabela abaixo fornece o erro de truncamento global quando o método de Euler é empregado para resolver o problema de valor inicial

$$y' = \frac{x - y}{2}, \quad y(0) = 1,$$

no intervalo $[0, 3]$ com $h = 1, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{64}$.

A tabela fornece o erro de truncamento global para vários espaçamentos e mostra que o erro na aproximação de $y(3)$ é dividido pela metade quando o espaçamento é dividido pela metade.

h	m	y_m	$ y(3) - y_m $
1	3	1,375	0,294390
$\frac{1}{2}$	6	1,533936	0,135454
$\frac{1}{4}$	12	1,604252	0,065138
$\frac{1}{8}$	24	1,637429	0,031961
$\frac{1}{16}$	48	1,653557	0,015833
$\frac{1}{32}$	96	1,661510	0,007880
$\frac{1}{64}$	192	1,665459	0,003931

7.3 Método de Taylor

O método de Taylor é bem geral e fornece uma maneira de comparar os vários métodos numéricos existentes para a solução de um problema de valor inicial. Ele pode ser construído de maneira a ter um alto grau de precisão. Descreveremos este método a seguir.

Seja $y(x)$ a solução do problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= f(x, y) \\ y(x_0) &= y_0. \end{cases} \quad (7.3)$$

Considere a sequência de pontos $\{x_k\}$ com espaçamentos iguais a h . A expansão de Taylor para $y(x_n + h)$ em torno do ponto x_n é dada por

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hy'(x_n) + \frac{h^2}{2!}y''(x_n) + \dots + \frac{h^N}{N!}y^{(N)}(x_n) + R_N,$$

onde R_N é o **erro de truncamento local** dado por

$$R_N = \frac{h^{N+1}}{(N+1)!}y^{(N+1)}(\xi_n), \quad x_n < \xi_n < x_n + h.$$

Truncando a expansão acima após $(N+1)$ termos, podemos encontrar uma relação exata entre valores aproximados da solução do problema (7.3). De fato, usando que $y' = f(x_n, y(x_n))$, obtemos

$$y(x_n + h) = y(x_n) + hf(x_n, y(x_n)) + \frac{h^2}{2!}f'(x_n, y(x_n)) + \dots + \frac{h^N}{N!}f^{(N-1)}(x_n, y(x_n)).$$

Escrevendo $y(x_n) \simeq y_n$ e notando que $y(x_n + h) = y(x_{n+1}) \simeq y_{n+1}$, segue que

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}f'(x_n, y_n) + \dots + \frac{h^N}{N!}f^{(N-1)}(x_n, y_n). \quad (7.4)$$

A fórmula (7.4) é conhecida como **Método de Taylor de Ordem N**.

Exemplo 7.3.1 Use o método de Taylor de ordem 3 para resolver o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= -y + x + 2 \\ y(0) &= 2, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 0.3]$ e espaçamento $h = 0.1$.

Solução: O método de Taylor de ordem 3 é

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!}f'(x_n, y_n) + \frac{h^3}{3!}f''(x_n, y_n). \quad (7.5)$$

Sendo $f(x, y) = -y + x + 2$, segue que

$$f'(x, y) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} = (1) + (-1)y' = 1 + (-1)(-y + x + 2) = y - x - 1$$

e

$$f''(x, y) = \frac{\partial f'}{\partial x} + \frac{\partial f'}{\partial y} \frac{dy}{dx} = (-1) + (1)y' = -1 + (1)(-y + x + 2) = -y + x + 1.$$

Dos dados do problema, temos

$$x_0 = 0, \quad y_0 = 2, \quad h = 0.1, \quad x_1 = 0.1, \quad x_2 = 0.2 \quad \text{e} \quad x_3 = 0.3.$$

A primeira aproximação $y_1 \simeq y(x_1) = y(0.1)$ é obtida fazendo $n = 0$ em (7.5). Neste caso, teremos

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) + \frac{h^2}{2!}f'(x_0, y_0) + \frac{h^3}{3!}f''(x_0, y_0) \\ &= (2) + (0.1)f(0, 2) + \frac{(0.1)^2}{2!}f'(0, 2) + \frac{(0.1)^3}{3!}f''(0, 2) \\ &= 2 + (0.1)(0) + \frac{(0.1)^2}{2!}(1) + \frac{(0.1)^3}{3!}(-1) \\ &= 2.0048. \end{aligned}$$

A segunda aproximação $y_2 \simeq y(x_2) = y(0.2)$ é obtida fazendo $n = 1$ em (7.5). Neste caso, teremos

$$\begin{aligned} y_2 &= y_1 + hf(x_1, y_1) + \frac{h^2}{2!}f'(x_1, y_1) + \frac{h^3}{3!}f''(x_1, y_1) \\ &= (2.0048) + (0.1)f(0.1, 2.0048) + \frac{(0.1)^2}{2!}f'(0.1, 2.0048) + \frac{(0.1)^3}{3!}f''(0.1, 2.0048) \\ &= (2.0048) + (0.1)(0.0952) + \frac{(0.1)^2}{2!}(0.9048) + \frac{(0.1)^3}{3!}(-0.9048) \\ &= 2.0186. \end{aligned}$$

A terceira aproximação $y_3 \simeq y(x_3) = y(0.3)$ é obtida fazendo $n = 2$ em (7.5). Neste caso, teremos

$$\begin{aligned} y_3 &= y_2 + hf(x_2, y_2) + \frac{h^2}{2!}f'(x_2, y_2) + \frac{h^3}{3!}f''(x_2, y_2) \\ &= (2.0186) + (0.1)f(0.1, 2.0048) + \frac{(0.1)^2}{2!}f'(0.1, 2.0048) + \frac{(0.1)^3}{3!}f''(0.1, 2.0048) \\ &= (2.0186) + (0.1)(0.1814) + \frac{(0.1)^2}{2!}(0.8186) + \frac{(0.1)^3}{3!}(-0.8186) \\ &= 2.0406. \end{aligned}$$

A solução do problema de valor inicial dado é $y(x) = e^{-x} + x + 1$. Assim, as soluções exatas nos pontos 0, 0.1, 0.2 e 0.3 são dadas por:

$$y(0) = 2, \quad y(0.1) = 2.00484, \quad y(0.2) = 2.01873 \quad \text{e} \quad y(0.3) = 2.04082.$$

Exemplo 7.3.2 Use o método de Taylor de ordem 4 para resolver o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= \frac{x-y}{2} \\ y(0) &= 1, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 0.5]$ e espaçamento $h = 0.25$.

Solução: O método de Taylor de ordem 4 é

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} f'(x_n, y_n) + \frac{h^3}{3!} f''(x_n, y_n) + \frac{h^4}{4!} f'''(x_n, y_n). \quad (7.6)$$

Considerando $y = y(x)$, teremos

$$y'(x) = \frac{x-y}{2}, \quad y''(x) = \frac{2-x+y}{4}, \quad y^{(3)}(x) = \frac{-2+x-y}{8}, \quad y^{(4)}(x) = \frac{2-x+y}{16}.$$

Usando o fato que $y' = f(x, y)$, teremos

$$f(x_k, y_k) = y'(x_k), \quad f'(x_k, y_k) = y''(x_k), \quad f''(x_k, y_k) = y'''(x_k) \quad \text{e} \quad f'''(x_k, y_k) = y^{(4)}(x_k), \quad k = 0, 1.$$

Dos dados do problema, temos

$$x_0 = 0, \quad y_0 = 1, \quad h = 0.25, \quad x_1 = 0.25 \quad \text{e} \quad x_2 = 0.5.$$

Para determinar y_1 , devemos calcular as derivadas de f no ponto $(x_0, y_0) = (0, 1)$. Temos

$$f(0, 1) = y'(0) = -0,5, \quad f'(0, 1) = y''(0) = 0,75, \quad f''(0, 1) = y^{(3)}(0) = -0,375 \quad \text{e} \quad f^{(3)}(0, 1) = y^{(4)}(0) = 0,1875.$$

Substituindo esses valores na fórmula (7.7), temos

$$y_1 = 0,8974915.$$

Para calcular y_2 , as derivadas de y devem ser calculadas no ponto $(x_1, y_1) = (0.25, 0.8974915)$.

Neste caso, teremos

$$y_2 = 0,8364037.$$

Observações

1. A fórmula de Taylor (7.4) para $N=1$ é, justamente, a fórmula de Euler.
2. O método de Taylor é um método de 1-passo, pois no cálculo da solução aproximada no ponto x_{n+1} , o método requer informação apenas sobre o último ponto calculado, no caso, sobre x_n . O método de Taylor é um método explícito, pois (7.4) é uma equação explícita para y_{n+1} , uma vez que os termos do lado direito dependem apenas de y_n .

3. Em alguns casos, o método de Taylor de ordem N não pode ser usado, mas pode-se usar o método de Taylor para uma ordem mais baixa. Por exemplo, para o problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= y^{\frac{1}{3}} \\ y(0) &= 0, \end{cases}$$

o método de Taylor de ordem 3 não se aplica, pois a derivada de segunda ordem de y não existe em $x=0$. De fato, pois $y'' = \frac{1}{3}y^{-\frac{2}{3}}$ e $y''(0) = \frac{1}{3}y_0^{-\frac{2}{3}}$ não existe para $y_0 = 0$. Entretanto, o método de Euler pode ser aplicado neste caso.

4. A partir do desenvolvendo de $y(x_n + h)$ e $y(x_n - h)$ em séries de Taylor em torno do ponto x_n , obtemos a fórmula

$$y_{n+2} = y_n + 2hf^{(n+1)}(x_n, y_n),$$

chamada **Regra do Ponto Médio** que é um método explícito de 2-passos. Para o uso deste método é necessário conhecer os valores iniciais de y_0 e y_1 . Neste caso, o valor de y_1 pode ser obtido, por exemplo, usando um método numérico de 1-passo.

5. Integrando a equação diferencial de primeira ordem do problema de valor inicial (7.3) de x_n até x_{n+k} , obtemos

$$y(x_{n+k}) - y(x_n) = \int_{x_n}^{x_{n+k}} f(x, y(x))dx. \quad (7.7)$$

Fazendo $k = 1$ em (7.7) e aplicando a regra do trapézio, obtemos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \left(f^{(n)}(x_n, y_n) + f^{(n+1)}(x_n, y_n) \right),$$

que é um método implícito de 1-passo chamado **Método do Trapézio**.

Fazendo $k = 2$ em (7.7) e aplicando a regra $\frac{1}{3}$ de Simpson, obtemos

$$y_{n+2} = y_n + \frac{h}{3} \left(f^{(n)}(x_n, y_n) + 4f^{(n+1)}(x_n, y_n) + f^{(n+2)}(x_n, y_n) \right),$$

que é um método implícito de 2-passos chamado **Método de Simpson**.

Fazendo $k = 3$ em (7.7) e aplicando a regra $\frac{3}{8}$ de Simpson, obtemos

$$y_{n+3} = y_n + \frac{3h}{8} \left[f^{(n)}(x_n, y_n) + 3 \left(f^{(n+1)}(x_n, y_n) + f^{(n+2)}(x_n, y_n) \right) + f^{(n+3)}(x_n, y_n) \right],$$

que é um método implícito de 3-passos chamado **Método $\frac{3}{8}$ de Simpson**.

6. Usando a forma de Newton-Gregory para o polinômio de interpolação da função $f(x, y)$ sobre os pontos $(x_n, f^{(n)}(x_n, y_n))$, $(x_{n+1}, f^{(n+1)}(x_n, y_n))$ e $(x_{n+2}, f^{(n+2)}(x_n, y_n))$, obtemos a fórmula

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{12} \left(-f^{(n)}(x_n, y_n) + 8f^{(n+1)}(x_n, y_n) + 5f^{(n+2)}(x_n, y_n) \right),$$

que é um método implícito de 2-passos chamado **Método de Adams-Moulton**.

7. Usando a forma de Newton-Gregory para o polinômio de interpolação da função $f(x, y)$ sobre os pontos $(x_n, f^{(n)}(x_n, y_n))$ e $(x_{n+1}, f^{(n+1)}(x_n, y_n))$, obtemos a fórmula

$$y_{n+2} = y_{n+1} + \frac{h}{2} \left(-f^{(n)}(x_n, y_n) + 3f^{(n+1)}(x_n, y_n) \right),$$

que é um método implícito de 2-passos chamado **Método de Adams-Bashforth**.

7.4 Métodos de Runge-Kutta

Os métodos de Taylor de ordem N possuem a vantagem de poder minimizar o erro de truncamento global escolhendo N grande o bastante. Entretanto, o problema destes métodos é a necessidade de cálculo de derivadas de ordem mais alta, as quais podem ser complicadas.

Os métodos de Runge-Kutta, que descreveremos nesta seção, são derivados de um método de Taylor apropriado de tal maneira que possa eliminar o cálculo das derivadas fazendo várias avaliações da função f a cada passo. Estes métodos podem ser construídos para qualquer ordem N .

O método geral de Runge-Kutta de R estágios é definido por

$$y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h),$$

onde

$$\begin{aligned} \varphi(x, y, h) &= \sum_{r=1}^R c_r k_r, \\ k_1 &= f(x, y), \\ k_r &= f\left(x + h \sum_{s=1}^{r-1} b_{rs}, y + h \sum_{s=1}^{r-1} b_{rs} k_s\right), \quad r = 2, 3, \dots, R. \end{aligned}$$

Os métodos de Runge-Kutta de determinada ordem são obtidos comparando a expansão da função $\varphi(x, y, h)$, em potências de h , com a função $\varphi_T(x, y, h)$ do método de Taylor.

Método de Runge-Kutta de ordem 2

Existem infinitos métodos de Runge-Kutta de 2 estágios e ordem 2. Os dois mais usados são dados a seguir.

Método de Euler Modificado: dado pela fórmula

$$y_{n+1} = y_n + hk_2, \quad (7.8)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n) \quad \text{e} \quad k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right).$$

Método de Euler Melhorado: dado pela fórmula

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2), \quad (7.9)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n) \quad \text{e} \quad k_2 = f(x_n + h, y_n + hk_1).$$

Exemplo 7.4.1 Use o método de Euler Modificado para calcular a solução aproximada do seguinte problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= -y + x + 2 \\ y(0) &= 2, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 0.3]$ com $h = 0.1$.

Solução: Dos dados do problema, temos

$$f(x, y) = -y + x + 2, \quad x_0 = 0, \quad y_0 = 2 \quad \text{e} \quad h = 0.1.$$

A primeira aproximação $y_1 \simeq y(x_1) = y(0.1)$ é obtida fazendo $n = 0$ no método de Euler Modificado. Neste caso, teremos

$$y_1 = y_0 + hk_2,$$

onde

$$k_1 = f(x_0, y_0) = f(0, 2) = 0$$

e

$$k_2 = f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}k_1\right) = f\left(0 + \frac{0.1}{2}, 2 + \frac{0.1}{2}(0)\right) = f(0.05, 2) = 0.05.$$

Logo, a primeira aproximação é

$$y_1 = 2 + (0.1)(0.05) = 2.005.$$

A segunda aproximação $y_2 \simeq y(x_2) = y(0.2)$ é obtida fazendo $n = 1$ no método de Euler Modificado. Neste caso, teremos

$$y_2 = y_1 + hk_2,$$

onde

$$k_1 = f(x_1, y_1) = f(0.1, 2.005) = 0.095,$$

e

$$k_2 = f\left(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{h}{2}k_1\right) = f\left(0.1 + \frac{0.1}{2}, 2.005 + \frac{0.1}{2}(0.095)\right) = f(0.15, 2.0098) = 0.1403.$$

Logo, a segunda aproximação é

$$y_2 = 2.005 + (0.1)(0.1403) = 2.0190.$$

A terceira aproximação $y_3 \simeq y(x_3) = y(0.3)$ é obtida fazendo $n = 2$ no método de Euler Modificado. Neste caso, teremos

$$y_3 = y_2 + hk_2,$$

onde

$$k_1 = f(x_2, y_2) = f(0.2, 2.0190) = 0.1810,$$

e

$$k_2 = f\left(x_2 + \frac{h}{2}, y_2 + \frac{h}{2}k_1\right) = f\left(0.2 + \frac{0.1}{2}, 2.0190 + \frac{0.1}{2}(0.1810)\right) = f(0.25, 2.0281) = 0.2220.$$

Logo, a terceira aproximação é

$$y_3 = 2.0190 + (0.1)(0.2220) = 2.0412.$$

Exemplo 7.4.2 Use o método de Euler Melhorado para calcular a solução aproximada do seguinte problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= -xy \\ y(0) &= 1, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 1]$ com $h = 0.1$.

Solução: Usando o método de Euler Melhorado, temos que

$$y_{n+1} = y_n + \frac{0.1}{2}(k_1 + k_2),$$

onde

$$k_1 = -x_n y_n \quad \text{e} \quad k_2 = -(x_n + 0.1)(y_n + (0.1)k_1).$$

Como $x_0 = 0$ e $y_0 = 1$, os dados obtidos estão colocados na tabela 7.1 abaixo.

n	x_n	y_n	k_1	k_2	y_{n+1}
0	0	1	0	-0.1	0.995
1	0.1	0.995	-0.0995	-0.19701	0.9801745
2	0.2	0.9801745	-0.1960349	-0.288171303	0.95596419
3	0.3	0.95596419	-0.286789257	-0.370914106	0.923079022
4	0.4	0.923079022	-0.369231609	0.443077930	0.882463545
5	0.5	0.882463545	-0.441231772	-0.503004221	0.835251745

Tabela 7.1: Resultados via método de Runge-Kutta de ordem 2

Método de Runge-Kutta de ordem 3

Existem infinitos métodos de Runge-Kutta de 3 estágios e ordem 3. Os dois mais usados são dados a seguir.

Método de Heun: dado pela fórmula

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_3), \quad (7.10)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n), \quad k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{h}{3}k_1\right) \quad \text{e} \quad k_3 = f\left(x_n + \frac{2h}{3}, y_n + \frac{2h}{3}k_2\right).$$

Método de Nystrom: dado pela fórmula

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{4}\left[k_1 + \frac{3}{2}(k_2 + k_3)\right], \quad (7.11)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n), \quad k_2 = f\left(x_n + \frac{2h}{3}, y_n + \frac{2h}{3}k_1\right) \quad \text{e} \quad k_3 = f\left(x_n + \frac{2h}{3}, y_n + \frac{2h}{3}k_2\right).$$

Exemplo 7.4.3 Use o método de Heun para calcular a solução aproximada do seguinte problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= -y + x + 2 \\ y(0) &= 2, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 0.3]$ com $h = 0.1$.

Solução: Dos dados do problema, temos

$$f(x, y) = -y + x + 2, \quad x_0 = 0, \quad y_0 = 2 \quad \text{e} \quad h = 0.1.$$

A primeira aproximação $y_1 \simeq y(x_1) = y(0.1)$ é obtida fazendo $n = 0$ no método de Heun. Neste caso, teremos

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{4}(k_1 + 3k_3),$$

onde

$$k_1 = f(x_0, y_0) = f(0, 2) = 0,$$
$$k_2 = f\left(x_0 + \frac{h}{3}, y_0 + \frac{h}{3}k_1\right) = f(0.0333, 2) = 0.0333.$$

e

$$k_3 = f\left(x_0 + \frac{2h}{3}, y_0 + \frac{2h}{3}k_2\right) = f(0.0667, 2.0022) = 0.0645.$$

Logo, a primeira aproximação é

$$y_1 = 2 + \frac{0.1}{4}(0 + 3(0.0645)) = 2.0048.$$

De modo análogo, encontramos y_2 e y_3 .

Método de Runge-Kutta de ordem 4

O método de Runge-Kutta de ordem 4 se constitui num dos métodos clássicos e mais usados na prática. Ele é em geral uma boa escolha, pois é bastante preciso, estável e fácil de programar.

Existem infinitos métodos de Runge-Kutta de 4 estágios e ordem 4. Um desses métodos é dado pela fórmula:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4), \quad (7.12)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n), \quad k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_1\right), \quad k_3 = f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2}k_2\right) \quad \text{e} \quad k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3).$$

Outro método de Runge-Kutta de ordem 4 é dado pela fórmula:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{8}(k_1 + 3(k_2 + k_3) + k_4), \quad (7.13)$$

onde

$$k_1 = f(x_n, y_n), \quad k_2 = f\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{h}{3}k_1\right), \quad k_3 = f\left(x_n + \frac{2h}{3}, y_n - \frac{h}{3}k_1 + hk_2\right) \quad \text{e}$$
$$k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_1 - hk_2 + hk_3).$$

Exemplo 7.4.4 Use o método de Runge-Kutta de ordem 4 dado pela fórmula (7.12) para calcular a solução aproximada do seguinte problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= -y + x + 2 \\ y(0) &= 2, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 0.3]$ com $h = 0.1$.

Solução: Dos dados do problema, temos

$$f(x, y) = -y + x + 2, \quad x_0 = 0, \quad y_0 = 2 \quad \text{e} \quad h = 0.1.$$

A primeira aproximação $y_1 \simeq y(x_1) = y(0.1)$ é obtida fazendo $n = 0$ em (7.12). Neste caso, teremos

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{6} \left(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4 \right),$$

onde

$$k_1 = f(x_0, y_0) = f(0, 2) = 0,$$

$$k_2 = f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}k_1\right) = f(0.05, 2) = 0.05,$$

$$k_3 = f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y_0 + \frac{h}{2}k_2\right) = f(0.05, 2.0025) = 0.0475$$

e

$$k_4 = f(x_0 + h, y_0 + hk_3) = f(0.1, 2.0048) = 0.0952.$$

Logo, a primeira aproximação é

$$y_1 = 2 + \frac{0.1}{6} \left(0 + 2(0.05 + 0.0475) + 0.0952 \right) = 2.00484.$$

A segunda aproximação $y_2 \simeq y(x_2) = y(0.2)$ é obtida fazendo $n = 1$ em (7.12). Neste caso, teremos

$$y_2 = y_1 + \frac{h}{6} \left(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4 \right),$$

onde

$$k_1 = f(x_1, y_1) = f(0.1, 2.00484) = 0.0952,$$

$$k_2 = f\left(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{h}{2}k_1\right) = f(0.15, 2.0096) = 0.1404,$$

$$k_3 = f\left(x_1 + \frac{h}{2}, y_1 + \frac{h}{2}k_2\right) = f(0.15, 2.0119) = 0.1381$$

e

$$k_4 = f(x_1 + h, y_1 + hk_3) = f(0.2, 2.0187) = 0.1813.$$

Logo, a segunda aproximação é

$$y_2 = 2.00484 + \frac{0.1}{6} \left(0.0952 + 2(0.1404 + 0.1381) + 0.1813 \right) = 2.01873.$$

A terceira aproximação $y_3 \simeq y(x_3) = y(0.3)$ é obtida fazendo $n = 2$ em (7.12). Neste caso, teremos

$$y_3 = y_2 + \frac{h}{6} \left(k_1 + 2(k_2 + k_3) + k_4 \right),$$

onde

$$k_1 = f(x_2, y_2) = f(0.2, 2.01873) = 0.1813,$$

$$k_2 = f\left(x_2 + \frac{h}{2}, y_2 + \frac{h}{2}k_1\right) = f(0.25, 2.0278) = 0.2222,$$

$$k_3 = f\left(x_2 + \frac{h}{2}, y_2 + \frac{h}{2}k_2\right) = f(0.25, 2.0298) = 0.2202$$

e

$$k_4 = f(x_2 + h, y_2 + hk_3) = f(0.3, 2.0408) = 0.2592.$$

Logo, a terceira aproximação é

$$y_3 = 2.01873 + \frac{0.1}{6} \left(0.1813 + 2(0.2222 + 0.2202) + 0.2592 \right) = 2.04082.$$

Exemplo 7.4.5 Use o método de Runge-Kutta de ordem 4 dado pela fórmula (7.12) para calcular a solução aproximada do seguinte problema de valor inicial

$$\begin{cases} y' &= -xy \\ y(0) &= 1, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 1]$ com $h = 0.1$.

Solução: Usando o método de Runge-Kutta de ordem 4 dado pela fórmula (7.12), temos

$$y_{n+1} = y_n + \frac{0.1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4),$$

onde

$$\begin{aligned} k_1 &= -x_n y_n, & k_2 &= -(x_n + 0.05)(y_n + 0.05k_1), \\ k_3 &= -(x_n + 0.05)(y_n + 0.05k_2) & \text{e} & \quad k_4 = -(x_n + 0.1)(y_n + 0.1k_3). \end{aligned}$$

Como $x_0 = 0$ e $y_0 = 1$, os dados obtidos estão colocados na tabela 7.2.

n	x_n	y_n	k_1	k_2	k_3	k_4	y_{n+1}
0	0	1	0	-0.05	-0.049875	-0.09950125	0.995012479
1	0.1	0.995012479	-0.099501248	-0.148505613	-0.14813808	-0.196039734	0.980198673
2	0.2	0.980198673	-0.196039735	-0.24259917	-0.242017199	-0.286799087	0.955997481
3	0.3	0.955997481	-0.286799244	-0.329580132	-0.328831466	-0.369245734	0.923116345
4	0.4	0.923116345	-0.36924654	-0.407094308	-0.406242733	0.441246036	0.882496901
5	0.5	0.882496901	-0.44124845	-0.473223896	-0.472359224	-0.501156587	0.83527021

Tabela 7.2: Resultados via método de Runge-Kutta de ordem 4

7.5 Sistemas de Equações Diferenciais

Consideremos o seguinte sistema de n equações de primeira ordem

$$\begin{cases} y_1' &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ y_2' &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ y_n' &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n). \end{cases} \quad (7.14)$$

O sistema (7.14) pode ser escrito na forma

$$Y' = F(x, Y), \quad (7.15)$$

onde Y, Y' e F são vetores com componentes y_i, y_i' e $f_i, i = 1, 2, \dots, n$, respectivamente.

Para que o sistema (7.15) tenha única solução, consideremos uma condição inicial sobre Y . Esta condição será dada por

$$Y(x_0) = Y_0, \quad (7.16)$$

onde x_0 é um número dado e Y_0 é um vetor.

Os métodos numéricos, utilizados na resolução de problemas de valor inicial, podem ser usados na resolução do problema de valor inicial dado por (7.15) e (7.16) e, conseqüentemente, na resolução do sistema (7.14) com uma condição inicial dada.

Por simplicidade, e sem perda de generalidade, consideraremos aqui, apenas sistemas contendo duas equações diferenciais de primeira ordem. Neste caso, procuramos determinar a solução do sistema

$$\begin{cases} y' &= f(x, y, z) \\ z' &= g(x, y, z) \\ y(x_0) &= y_0, \quad z(x_0) = z_0, \quad x \in [a, b]. \end{cases} \quad (7.17)$$

Método de Euler

O método de Euler para a solução do sistema (7.17) é fácil de formular. O intervalo $[a, b]$ é dividido em M subintervalos de tamanho $h = \frac{b-a}{M}$, onde $x_{n+1} = x_n + h$. Neste caso, as fórmulas recursivas são dadas por

$$Y_{n+1} = \begin{pmatrix} y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n + hf(x_n, y_n, z_n) \\ z_n + hg(x_n, y_n, z_n) \end{pmatrix}, \quad n = 0, 1, \dots, M-1. \quad (7.18)$$

Exemplo 7.5.1 Use o método de Euler para resolver o seguinte sistema:

$$\begin{cases} y' &= z, \\ z' &= y + e^x, \\ y(0) &= 1, \quad z(0) = 0, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 0.2]$ com espaçamento $h = 0.1$.

Solução: Como $h = 0.1$, temos

$$x_0 = 0, \quad x_1 = 0.1 \quad \text{e} \quad x_2 = 0.2.$$

A condição inicial é

$$Y_0 = \begin{pmatrix} y_0 \\ z_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(x_0) \\ z(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0) \\ z(0) \end{pmatrix}.$$

Fazendo $f(x, y, z) = z$ e $g(x, y, z) = y + e^x$ na fórmula de Euler, teremos

$$Y_{n+1} = \begin{pmatrix} y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n + hz_n \\ z_n + h(y_n + e^{x_n}) \end{pmatrix}, \quad n = 0, 1. \quad (7.19)$$

A primeira aproximação Y_1 é obtida fazendo $n = 0$ em (7.19). Neste caso, teremos

$$Y_1 = \begin{pmatrix} y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 + hz_0 \\ z_0 + h(y_0 + e^{x_0}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + (0.1)(0) \\ (0) + (0.1)(1 + e^0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.2 \end{pmatrix}.$$

Logo,

$$Y_1 = \begin{pmatrix} y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.2 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} y(x_1) \\ z(x_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0.1) \\ z(0.1) \end{pmatrix}.$$

A segunda aproximação Y_2 é obtida fazendo $n = 1$ em (7.19). Neste caso, teremos

$$Y_2 = \begin{pmatrix} y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 + hz_1 \\ z_1 + h(y_1 + e^{x_1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + (0.1)(0.2) \\ (0.2) + (0.1)(1 + e^{0.1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.02 \\ 0.4105 \end{pmatrix}.$$

Logo,

$$Y_2 = \begin{pmatrix} y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.02 \\ 0.4105 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} y(x_2) \\ z(x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0.2) \\ z(0.2) \end{pmatrix}.$$

As soluções aproximadas para $n = 0, 1, 2$ são, respectivamente, dadas por

$$(0, 1, 0), \quad (0.1, 1, 0.2) \quad \text{e} \quad (0.2, 1.02, 0.4105).$$

Métodos de Runge-Kutta

Para se ter um nível razoável de precisão, na solução aproximada do sistema (7.17), podemos usar o método de Runge-Kutta de ordem 4, por exemplo, o método de Euler Melhorado, que é dado por

$$Y_{n+1} = \begin{pmatrix} y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ z_n + \frac{h}{2}(d_1 + d_2) \end{pmatrix}, \quad n = 0, 1, \dots, M - 1, \quad (7.20)$$

onde,

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n, z_n), & k_2 &= f(x_n + h, y_n + hk_1, z_n + hk_1), \\ d_1 &= g(x_n, y_n, z_n), & d_2 &= g(x_n + h, y_n + hd_1, z_n + hd_1). \end{aligned}$$

Exemplo 7.5.2 Use o método de Euler Melhorado para resolver o seguinte sistema:

$$\begin{cases} y' &= z, \\ z' &= y + e^x, \\ y(0) &= 1, \quad z(0) = 0, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 0.2]$ com espaçamento $h = 0.1$.

Solução: Como $h = 0.1$, temos

$$x_0 = 0, \quad x_1 = 0.1 \quad \text{e} \quad x_2 = 0.2.$$

A condição inicial é

$$Y_0 = \begin{pmatrix} y_0 \\ z_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(x_0) \\ z(x_0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0) \\ z(0) \end{pmatrix}.$$

Fazendo $f(x, y, z) = z$ e $g(x, y, z) = y + e^x$ na fórmula de Euler Melhorado, teremos

$$Y_{n+1} = \begin{pmatrix} y_{n+1} \\ z_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ z_n + \frac{h}{2}(d_1 + d_2) \end{pmatrix}, \quad (7.21)$$

onde

$$k_1 = z_n, \quad k_2 = z_n + hk_1, \quad d_1 = y_n + e^{x_n} \quad \text{e} \quad d_2 = (y_n + hd_1) + e^{x_n+h}.$$

A primeira aproximação Y_1 é obtida fazendo $n = 0$ em (7.21). Neste caso, teremos

$$Y_1 = \begin{pmatrix} y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ z_0 + \frac{h}{2}(d_1 + d_2) \end{pmatrix},$$

onde,

$$\begin{aligned} k_1 &= z_0 = 0, \\ k_2 &= z_0 + hk_1 = 0 + (0.1)(0) = 0, \\ d_1 &= y_0 + e^{x_0} = 1 + e^0 = 2, \\ d_2 &= (y_0 + hd_1) + e^{x_0+h} = 1 + (0.1)(2) + e^{0+0.1} = 2.3052. \end{aligned}$$

Substituindo, teremos

$$Y_1 = \begin{pmatrix} y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{0.1}{2}(0 + 0) \\ 0 + \frac{0.1}{2}(2 + 2.3052) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0.2153 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} y(x_1) \\ z(x_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0.1) \\ z(0.1) \end{pmatrix}.$$

A segunda aproximação Y_2 é obtida fazendo $n = 1$ em (7.21). Neste caso, teremos

$$Y_2 = \begin{pmatrix} y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ z_1 + \frac{h}{2}(d_1 + d_2) \end{pmatrix},$$

onde,

$$\begin{aligned}k_1 &= z_1 = 0.2153, \\k_2 &= z_1 + hk_1 = 0.2153 + (0.1)(0.2153) = 0.2368, \\d_1 &= y_1 + e^{x_1} = 1 + e^{0.1} = 2.1052, \\d_2 &= (y_1 + hd_1) + e^{x_1+h} = 1 + (0.1)(2.1052) + e^{0.1+0.1} = 2.4319.\end{aligned}$$

Substituindo, teremos

$$Y_1 = \begin{pmatrix} y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 + \frac{0.1}{2}(0.2153 + 0.2368) \\ 0.2153 + \frac{0.1}{2}(2.1052 + 2.4319) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.0226 \\ 0.4422 \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} y(x_2) \\ z(x_2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y(0.2) \\ z(0.2) \end{pmatrix}.$$

As soluções aproximadas para $n = 0, 1, 2$ são, respectivamente, dadas por

$$(0, 1, 0), \quad (0.1, 1, 0.2153) \quad \text{e} \quad (0.2, 1.0226, 0.4422).$$

7.6 Problemas de Valor Inicial

7.7 Equações Parabólicas

7.8 Equações Elípticas

7.9 Exercícios

1) Considere que o decaimento radioativo de uma substância segue a equação diferencial

$$Q'(t) = -0,0525Q(t).$$

Se 50 mg desta substância estiverem presentes numa amostra no dia de hoje, determine quanto existirá daqui a 2 anos. Considere $h = 1$ e $0,5$. Discuta os resultados.

2) Assuma que a curva $P(t)$ para uma determinada população obedece a equação diferencial

$$P' = aP - bP^2.$$

Seja t o tempo em anos e $h = 10$ o passo. Os valores $a = 0,02$ e $b = 0,00004$ produzem um modelo para a população. Considerando que no ano de 1990 a população era de 76,1 milhões, obtenha, usando o método de Taylor de segunda ordem, uma estimativa para esta população no ano de 2010.

2) Um exemplo de um sistema de equações diferenciais não lineares é o modelo presa-predador. Seja $x(t)$ a população de coelhos no tempo t e $y(t)$ a de raposas. O modelo presa-predador exige que $x(t)$ e $y(t)$ satisfaçam as equações

$$x' = Ax - Bxy, \quad y' = Cxy - Dy.$$

Para fins de simulação numérica, pode-se considerar os coeficientes:

$$A = 2 \quad B = 0,02 \quad C = 0,0002 \quad D = 0,8.$$

Use o método de Runge-Kutta para resolver a equação diferencial no intervalo $[0, 5]$ em cada caso abaixo:

a) Inicialmente, existem 3000 coelhos e 120 raposas.

b) Inicialmente, existem 5000 coelhos e 100 raposas.

2) Use o método de Euler ou o método de Euler Melhorado para resolver o seguinte sistema:

$$\begin{cases} y' &= y + 2z, \\ z' &= 3y + 2z, \\ y(0) &= 6, \quad z(0) = 4, \end{cases}$$

no intervalo $[0, 1]$ com espaçamento $h = 0.5$. Depois compare os resultados calculando o valor exato da solução sabendo-se que a solução do sistema é

$$y(x) = 4e^{4x} + 2e^{-x}, \quad z(x) = 6e^{4x} - 2e^{-x}.$$

Capítulo 8

Aplicações Computacionais em Ambiente Matlab

8.1 Introdução ao Matlab

Matlab é um "software" interativo de alta performance voltado para o cálculo numérico. O Matlab integra análise numérica, cálculo com matrizes, processamento de sinais e construção de gráficos em ambiente fácil de usar onde problemas e soluções são expressos somente como eles são escritos matematicamente, ao contrário da programação tradicional.

O Matlab é um sistema interativo cujo elemento básico de informação é uma matriz que não requer dimensionamento. Esse sistema permite a resolução de muitos problemas numéricos em apenas uma fração do tempo que se gastaria para escrever um programa semelhante em linguagem Fortran, Basic ou C. Além disso, as soluções dos problemas são expressas no Matlab quase exatamente como elas são escritas matematicamente.

Carregando o Matlab

No Gerenciador de Programas do Microsoft Windows deve-se abrir o grupo de programas do Matlab for Windows, que contém o ícone do aplicativo Matlab. Um duplo clique no ícone Matlab carrega o aplicativo.

Quando o Matlab é carregado, duas janelas são exibidas: a Janela de Comando (Command Windows) e Janela Gráfica (Graphic Windows). A Janela de Comando é ativada quando se inicializa o Matlab, e o "prompt" padrão (`>>`) é exibido na tela.

A partir desse ponto, o Matlab espera as instruções do usuário.

Alguns Comandos

Para entrar com uma matriz pequena, coloca-se colchetes em volta dos dados e separa as linhas por ponto e vírgula. Por exemplo

```
>> A = [1 2 3 ; 4 5 6 ; 7 8 9]
```

Quando se pressiona a tecla enter, o Matlab responde com

```
A =  
1 2 3  
4 5 6  
7 8 9
```

Para inverter esta matriz usa-se o comando

```
>> B = inv(A)
```

e o Matlab responde com o resultado.

Para resolver o sistema

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

basta usar o comando:

```
>> [x, y] = solve('x + 2 * y = 1', '2 * x - y = 2')
```

No matlab aparecerá:

```
>> [x, y] = solve('x + 2 * y = 1', '2 * x - y = 2')
```

x=

1

y=

0

Para determinar o desenvolvimento em série de Taylor para a função $f(x) = \cos(x)$ com 8 termos, usamos os seguintes comandos:

```
>> syms x
```

```
>> taylor(cos(x), 8)
```

No matlab aparecerá:

```
>> syms x
```

```
>> taylor(cos(x), 8)
```

ans=

```
-x^6/720 + x^4/24 - x^2/2 + 1
```

8.2 Resoluções de problemas usando o Matlab

Considere o sistema:

$$\begin{cases} 5500a + 150b = 1855,11 \\ 150a + 6b = 56,050. \end{cases}$$

A solução encontrada com o Matlab é $a = 0,2593$ e $b = 2,858$. Veja na Figura 8.1 como é feito o procedimento para encontrar essa solução usando o Matlab.

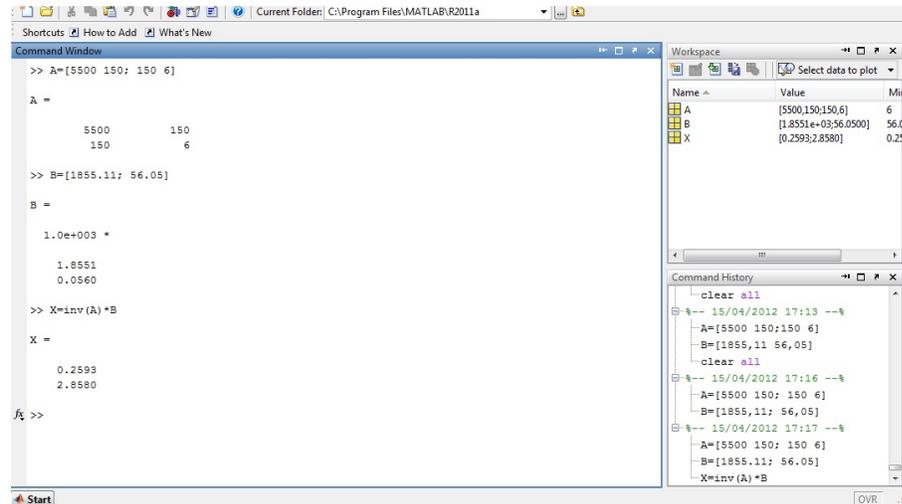


Figura 8.1: Resolução de Sistema com o Matlab

Considere o seguinte sistema:

$$\begin{cases} 4a + 6b = 3 \\ 3a + 6b = 2. \end{cases}$$

A solução encontrada com o Matlab é $a = 1$ e $b = -0,1667 = -\frac{1}{6}$. Veja na Figura 8.2 como é feito o procedimento para encontrar essa solução usando o Matlab.

Considere o seguinte sistema:

$$\begin{cases} \frac{2}{5}a + \frac{2}{3}c = \frac{2}{7} \\ \frac{2}{3}b = -\frac{10}{3} \\ \frac{2}{3}a + 2c = \frac{2}{5}. \end{cases}$$

A solução encontrada com o Matlab é $a = 0,8571 = \frac{6}{7}$, $b = -5$ e $c = -0,0857 = -\frac{3}{35}$. Veja na Figura 8.3 como é feito o procedimento no Matlab.

Raízes de Polinômios

No matlab podemos calcular raízes de polinômios. Por exemplo, para determinar as raízes do polinômio

$$p(x) = x^3 - 5x^2 + 9x - 5$$

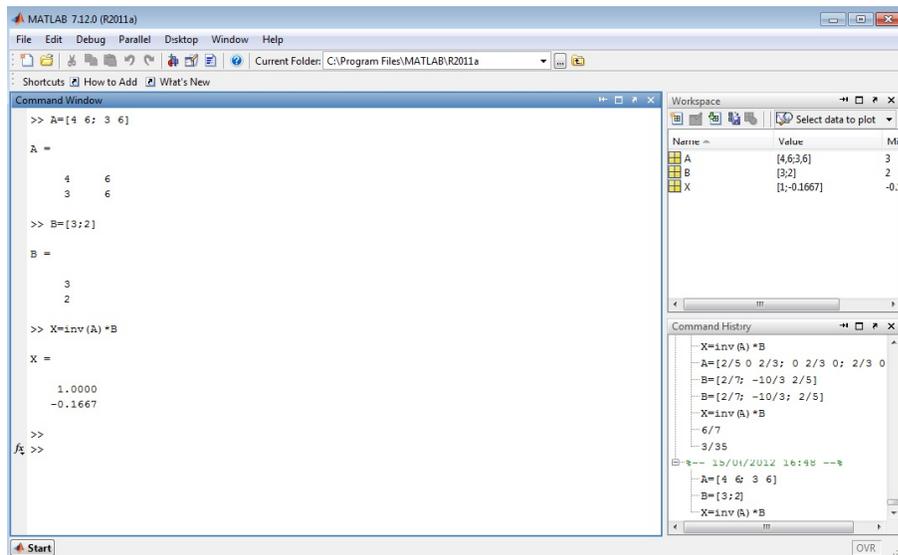


Figura 8.2: Resolução de Sistema com o Matlab

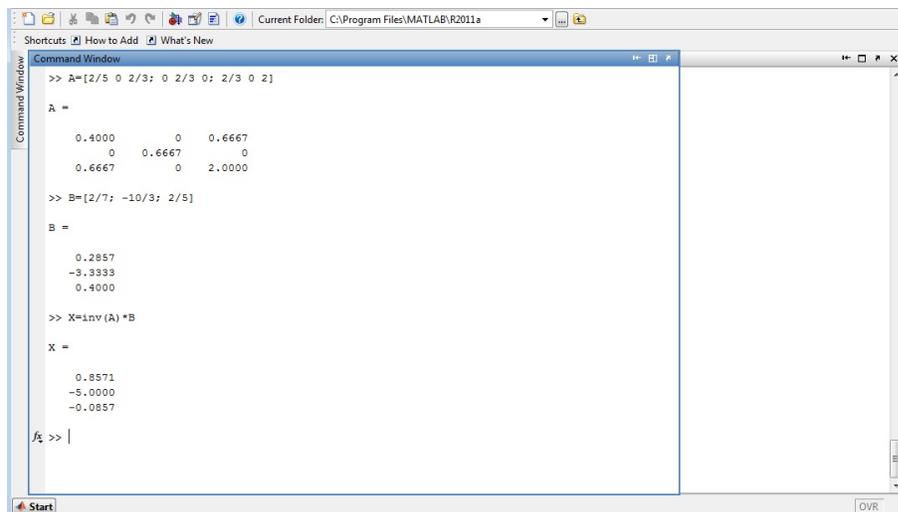


Figura 8.3: Resolução de Sistema com o Matlab

fazemos no matlab:

```
p = [1, -5, 9, -5];
```

```
r = roots(p),
```

ou fazemos direto:

```
r = roots([1, -5, 9, -5]).
```

No matlab aparecerá as raízes

$$1, 2 + i \quad 2 - i.$$

O processo inverso também pode ser feito no matlab, ou seja, se tivermos as raízes de um polinômio, podemos determinar esse polinômio. Por exemplo, sabendo-se que $-1, 2$ e 1 são as raízes de um polinômio, então podemos determinar esse polinômio fazendo o seguinte procedimento no matlab:

$$a = poly([-1, 2, 1]).$$

Neste caso, o matlab nos dará os números $1, -2, -1$ e 2 que representam os coeficientes do polinômio

$$p(x) = x^3 - 2x^2 - x + 2.$$

Derivada

Para derivar a função $f(x) = x^3 - 2x^2 + 3x - 1$, fazemos no matlab:

$$diff('x^3 - 2 * x^2 + 3 * x - 1').$$

O matlab nos dará a resposta

$$3 * x^2 - 4 * x + 3.$$

Para derivar a função $f(x) = x^n$ em relação a x , fazemos

$$diff('x^n').$$

Para derivar a função $f(x) = x^n$ em relação a n , fazemos

$$diff('x^n', 'n').$$

Integral

Gráficos

Para plotar o gráfico de uma função f que depende da variável x , devemos criar dois vetores de mesma dimensão x e f , onde x corresponde aos valores do eixo x e f os valores da função nestes pontos. O gráfico é gerado pelo comando $plot(x,f)$. Por exemplo, para plotar o gráfico da função $f(x) = \cos(x)$ no intervalo $[-\pi, \pi]$ devemos proceder da seguinte forma:

```
>> x = -pi : 0.01 : pi;
```

```
>> f = cos(x);
```

```
>> plot(x, f)
```

O passo 0.01 determina a quantidade de pontos que o comando plot usa para gerar o gráfico. Quanto mais pontos mais perfeito será o gráfico.

O comando mais básico para plotar um gráfico em 2 dimensões é:

$$plot(x, y)$$

onde x e y são vetores que contém as coordenadas dos pontos do gráfico. Para acrescentar título, legendas, unidades e linhas de grade, colocamos os seguintes comandos:

Title - adiciona um título ao gráfico;

Xlabel - inclui uma descrição na direção do eixo x;

Ylabel - inclui uma descrição na direção do eixo y;

Grid - adiciona linhas de grade ao gráfico;

Whitebg - muda a cor de fundo do gráfico para branco.

Por exemplo, se os pontos (0,50), (1,53), (2,49), (3,62), (4,71), (5,69), (6,76), (7,85), (8,90), (9,88), (10,91), representam a temperatura em graus Celsius de um determinado objeto medida em 10 segundos, então podemos plotar esses pontos num gráfico da seguinte forma:

```
x = [0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10];
y = [50, 53, 49, 62, 71, 69, 76, 85, 90, 88, 91];
plot(x, y), ...
title('Gráfico Temperatura versus tempo'),...
xlabel('tempo(s)'),...
ylabel('temperatura(graus celsius)'),...
grid
whitebg.
```

No matlab aparecerá o Gráfico da figura 8.4.

Se quisermos um gráfico com estilos, usamos o comando:

$$plot(x, y, 'opções de estilos')$$

onde opções de estilos é um argumento adicional que serve para especificar a cor, o estilo de linha e o estilo da marcação dos pontos e devem ser colocados nessa ordem. Na tabela abaixo estão colocados algumas opções de estilo.

Cores		Estilo de linhas	Estilo de pontos		
y	yellow	-	contínuo	+	sinal de mais
m	magenta	- -	tracejado	o	círculo
c	cyan	..	pontilhado	*	asterisco
r	red	-.	traço ponto	x	marcação com x
g	green	none	sem linha	.	marcação de ponto
W	white			square	quadrado
K	black			diamond	losango
B	blue			^	circunflexo

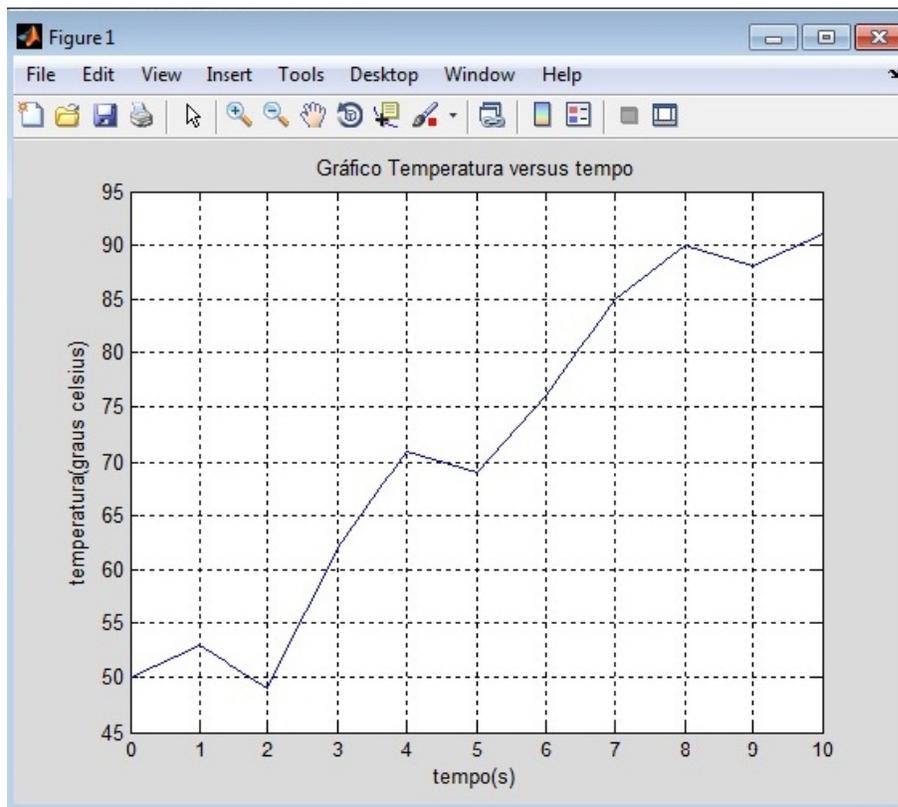


Figura 8.4: Gráfico no Matlab

Por exemplo, para plotar os pontos (1,2), (2,3), (3,4), (4,5), (5,6), escolhendo a cor verde o estilo de linha contínuo e o estilo de pontos como losangos, escrevemos no matlab:

```
x = [1, 2, 3, 4, 5];
```

```
y = [2, 3, 4, 5, 6];
```

```
plot(x, y, 'g - diamond')
```

ou diretamente:

```
plot([1, 2, 3, 4, 5], [2, 3, 4, 5, 6], 'g - diamond').
```

8.3 Algoritmos no Matlab

Para usarmos algoritmos no matlab é preciso conhecer um pouco sobre controle de fluxo. O controle de fluxo é um recurso que permite que resultados anteriores influenciem operações futuras. No matlab aparece as estruturas de loops **for**, loops **while** e **if-else-end**. A forma geral do loop **for** é

```
for x=vetor  
comandos...  
end
```

O loop **for** executa um grupo de comandos um número fixo de vezes. Ao contrário, o loop **while** executa um grupo de comandos quantas vezes forem necessárias para que uma condição seja negada. Sua forma geral é

```
while expressão  
comandos...  
end
```

O grupo de comandos entre while e end são executados até que a expressão assuma um valor falso.

A estrutura **if-else-end** permite que grupos de comandos sejam executados por um teste relacional. A forma geral é

```
if expressão  
comandos 1...  
else  
comandos 2...  
end
```

Se a expressão for verdadeira é executado o grupo de comandos 1, caso contrário é executado o grupo de comandos 2.

Exemplo de um Algoritmo

Um exemplo de algoritmo é dado para calcular raízes de funções quadráticas da forma $y = ax^2 + bx + c$. Podemos criar um algoritmo da forma:

```
%Programa para encontrar as raizes de uma equação do quadrática  
clear all  
clc  
  
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')  
disp('Cálculo de Raízes de Equações do Segundo Grau')  
disp('Paulo Pamplona')  
  
disp('Dados de Entrada:')  
a = input ('Entre com o valor de a:');  
b = input ('Entre com o valor de b:');
```

```

c = input ('Entre com o valor de c:');

delta = b^2-4*a*c;
if delta<0
disp('A equação não possui raízes reais')
else
if delta==0
x=(-b)/(2*a);
disp('Raiz'), disp(x)
else
if delta>0
x1 = (-b+sqrt(delta))/(2*a);
x2 = (-b-sqrt(delta))/(2*a);
disp('Raizes'), disp(x1), disp(x2)
end
end
end

```

Algoritmos para os Métodos Numéricos Estudados no Capítulo 2

A seguir veremos alguns algoritmos usados no Matlab para resolução de problemas de métodos numéricos.

Algoritmo para o método da Bissecção

O algoritmo da Bissecção usado no Matlab para determinar a solução da equação $f(x) = x^2 - 5$ é descrito a seguir:

```

%Programa para encontrar uma raiz utilizando o método da Bissecção
clear all
clc

disp('Método da Bissecção')
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')
disp('Paulo Pamplona')

disp('Dados de Entrada:')
a = input ('Entre com o valor de a:');
b = input ('Entre com o valor de b:');
tol = input ('Entre com o valor da tolerância:');
itermax = input ('Entre com o número máximo de iterações:');
iter = 1;

```

```

erro = 1;

while erro>tol && iter<=itermax
x = (a + b)/2;
fa = a2 - 5;
fb = b2 - 5;
fx = x2 - 5;
erro = abs((b-a)/b);

if fa*fb>0
disp('A raiz não pertence ao intervalo')
iter = itermax + 1;
else
if fa*fx<0;
a = a;
b = x;
else
a = x;
b = b;
end
iter = iter + 1;
end
end

if fa*fb<=0
disp('Raiz'), disp(x)
disp('Numero de Iterações'), disp(iter)
end

```

Algoritmo para o método de Iteração Linear ou Ponto Fixo

O algoritmo para o método de Iteração Linear ou Ponto Fixo usado no Matlab para determinar a raiz a função $f(x) = e^x - 4x$ é descrito a seguir:

```
%Programa para encontrar uma raiz utilizando o método do Ponto Fixo
```

```
clear all clc
```

```
disp('Método do Ponto Fixo')
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')
disp('Paulo Pamplona')
```

```
disp('Dados de Entrada:')
```

```

x0 = input ('Entre com o valor de uma estimativa inicial:');
tol = input ('Entre com o valor da tolerância:');
itermax = input ('Entre com o número máximo de iterações:');
iter = 1;
erro = 1;

while erro>tol && iter<=itermax
gx = (exp(x0))/4;
erro = abs(gx-x0);
if erro>tol
x0=gx;
end
iter = iter + 1;
end
disp('Raiz'), disp(gx)
disp('Numero de Iterações'), disp(iter)
end

```

Algoritmo para o método de Newton

O algoritmo para o método de Newton usado no Matlab para determinar a raiz a função $f(x) = 4 \cos(x) - e^x$ é descrito a seguir:

%Programa para encontrar uma raiz utilizando o método de Newton

```
clear all clc
```

```
disp('Método de Newton')
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')
disp('Paulo Pamplona')
```

```
disp('Dados de Entrada:')
```

```

x0 = input ('Entre com o valor de uma estimativa inicial:');
tol = input ('Entre com o valor da tolerância:');
itermax = input ('Entre com o número máximo de iterações:');
iter = 0;
erro = 1;

```

```

while erro>tol && iter<itermax
fx0 = 4 * cos(x0) - exp(x0);
dfx0 = -4 * sin(x0) - exp(x0);

```

```

x = x0 - (fx0/dfx0);
fx = 4 * cos(x) - exp(x);
erro = abs((x-x0)/x);
if erro>tol
x0=x;
end
iter = iter + 1;
end
disp('Raiz'), disp(x)
disp('Numero de Iterações'), disp(iter)

```

Algoritmo para o método das Secantes

O algoritmo para o método das Secantes usado no Matlab para determinar a raiz a função $f(x) = 5e^{-x} - \sqrt{x}$ é descrito a seguir:

%Programa para encontrar uma raiz utilizando o método das Secantes

```
clear all clc
```

```
disp('Método das Secantes')
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')
disp('Paulo Pamplona')
```

```
disp('Dados de Entrada:')
```

```
x0 = input ('Entre com o valor de x0:');
x1 = input ('Entre com o valor de x1:');
tol = input ('Entre com o valor da tolerância:');
itermax = input ('Entre com o número máximo de iterações:');
iter = 1;
erro = 1;
```

```
while erro>tol && iter<=itermax
fx0 = 5 * exp(-x0) - sqrt(x0);
fx1 = 5 * exp(-x1) - sqrt(x1);
x2 = (x0 * fx1 - x1 * fx0)/(fx1 - fx0);
erro = abs((x2-x1)/x2);
if erro > tol
x0 = x1;
x1 = x2;
end

```

```
iter = iter + 1;
```

```
end
```

```
disp('raiz'),disp(x2)
```

```
disp('número de iterações'),disp(iter)
```

Algoritmo para o método da Falsa Posição

O algoritmo para o método da Falsa Posição usado no Matlab para determinar a raiz a função $f(x) = x - \cos(x)$ é descrito a seguir:

```
%Programa para encontrar uma raiz utilizando o método da Falsa Posição
```

```
clear all
```

```
clc
```

```
disp('Método da Falsa Posição')
```

```
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')
```

```
disp('Paulo Pamplona')
```

```
disp('Dados de Entrada:')
```

```
a = input ('Entre com o valor de a:');
```

```
b = input ('Entre com o valor de b:');
```

```
tol = input ('Entre com o valor da tolerância:');
```

```
itermax = input ('Entre com o número máximo de iterações:');
```

```
iter = 1;
```

```
erro = 1;
```

```
while erro>tol && iter<=itermax
```

```
fa = a - cos(a);
```

```
fb = b - cos(b);
```

```
x = (a * fb - b * fa)/(fb - fa);
```

```
fx = x - cos(x);
```

```
erro = abs((b-a)/b);
```

```
if fa*fx<0;
```

```
a = a;
```

```
b = x;
```

```
else
```

```
a = x;
```

```
b = b;
```

```
end
```

```
iter = iter + 1;
```

```
end
```

```
disp('Raiz'), disp(x)
```

```
disp('Numero de Iterações'), disp(iter)
```

Algoritmo para o método de Gauss-Jacobi

O algoritmo para o método de Gauss-Jacobi usado no Matlab para determinar a solução aproximada do sistema de equações lineares

$$\begin{cases} 10x_1 + 2x_2 + x_3 & = 7 \\ x_1 + 5x_2 + x_3 & = -8 \\ 2x_1 + 3x_2 + 10x_3 & = 6 \end{cases}$$

é descrito a seguir:

%Programa para encontrar uma solução aproximada de um sistema de equações lineares usando o método de Gauss-Jacobi.

```
clear all
```

```
clc
```

```
disp('Método de Gauss-Jacobi')
```

```
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')
```

```
disp('Paulo Pamplona')
```

```
%Entrando com os valores iniciais de x0;
```

```
disp('Dados de Entrada:')
```

```
x10 = input ('Entre com o valor de x10:');
```

```
x20 = input ('Entre com o valor de x20:');
```

```
x30 = input ('Entre com o valor de x30:');
```

```
tol = input ('Entre com o valor da tolerância:');
```

```
itermax = input ('Entre com o número máximo de iterações:');
```

```
iter = 1;
```

```
erro = 1;
```

```
while erro>tol && iter<=itermax
```

```
  x1f = (7 - 2 * x20 - x30)/10;
```

```
  x2f = (-8 - x10 - x30)/5;
```

```
  x3f = (6 - 2 * x10 - 3 * x20)/10;
```

```
  erro = max([abs(x1f-x10); abs(x2f-x20); abs(x3f-x30)])/max([abs(x1f); abs(x2f); abs(x3f)]);
```

```
  if erro > tol
```

```
    x10 = x1f;
```

```
    x20 = x2f;
```

```
    x30 = x3f;
```

```
  end
```

```
  iter = iter + 1;
```

```
end
```

```
disp('Solução'),disp([x1f;x2f;x3f])
disp('Numero de Iterações'),disp(iter)
```

Algoritmo para o método de Gauss-Seidel

O algoritmo para o método de Gauss-Seidel usado no Matlab para determinar a solução aproximada do sistema de equações lineares

$$\begin{cases} 9x_1 - 2x_2 + 3x_3 + 2x_4 & = 54.5 \\ 2x_1 + 8x_2 - 2x_3 + 3x_4 & = -14 \\ -3x_1 + 2x_2 + 11x_3 - 4x_4 & = 12.5 \\ -2x_1 + 3x_2 + 2x_3 + 10x_4 & = -21 \end{cases}$$

é descrito a seguir:

%Programa para encontrar uma solução aproximada de um sistema de equações lineares usando o método de Gauss-Seidel.

```
clear all
clc
```

```
disp('Método de Gauss-Seidel')
disp('Cálculo Numérico - 2013.1')
disp('Paulo Pamplona')
```

```
%Entrando com os valores iniciais de x0;
disp('Dados de Entrada:');
x10 = input ('Entre com o valor de x10:');
x20 = input ('Entre com o valor de x20:');
x30 = input ('Entre com o valor de x30:');
x40 = input ('Entre com o valor de x40:');
tol = input ('Entre com o valor da tolerância:');
itermax = input ('Entre com o número máximo de iterações:');
iter = 1;
erro = 1;
```

```
while erro>tol && iter<=itermax
x1f = (54.5 + 2 * x20 - 3 * x30 - 2 * x40)/9;
x2f = (-14 - 2 * x1f + 2 * x30 - 3 * x40)/8;
x3f = (12.5 + 3 * x1f - 2 * x2f + 4 * x40)/11;
x4f = (-21 + 2 * x1f - 3 * x2f - 2 * x3f)/10;
erro = max([abs(x1f - x10);abs(x2f - x20);abs(x3f - x30);abs(x4f - x40)]);
if erro > tol
x10 = x1f;
x20 = x2f;
```

```
 $x_{30} = x_{3f};$   
 $x_{40} = x_{4f};$   
end  
iter = iter + 1;  
end  
disp('Solução'),disp([x1f;x2f;x3f;x4f])  
disp('Numero de Iterações'),disp(iter)
```

8.4 O uso do Matlab na resolução de modelos matemáticos

