

Coleção UAB–UFSCar

Engenharia Ambiental

Selma Helena de Vasconcelos Arenales
José Antonio Salvador

Cálculo Numérico

Uma Abordagem para o Ensino a Distância

Cálculo Numérico

Uma Abordagem para o Ensino a Distância

**Reitor**

Targino de Araújo Filho

Vice-Reitor

Pedro Manoel Galetti Junior

Pró-Reitora de Graduação

Emília Freitas de Lima

**Secretária de Educação a Distância - SEaD**

Aline Maria de Medeiros Rodrigues Reali

Coordenação UAB-UFSCar

Claudia Raimundo Reyes

Daniel Mill

Denise Abreu-e-Lima

Joice Otsuka

Marcia Rozenfeld G. de Oliveira

Sandra Abib

Coordenador do Curso de Engenharia Ambiental

Luiz Márcio Poiani

UAB-UFSCar

Universidade Federal de São Carlos

Rodovia Washington Luís, km 235

13565-905 - São Carlos, SP, Brasil

Telefax (16) 3351-8420

www.uab.ufscar.br

uab@ufscar.br

**Conselho Editorial**

José Eduardo dos Santos

José Renato Coury

Nivaldo Nale

Paulo Reali Nunes

Oswaldo Mário Serra Truzzi (Presidente)

Secretária Executiva

Fernanda do Nascimento

EdUFSCar

Universidade Federal de São Carlos

Rodovia Washington Luís, km 235

13565-905 - São Carlos, SP, Brasil

Telefax (16) 3351-8137

www.editora.ufscar.br

edufscar@ufscar.br

Selma Helena de Vasconcelos Arenales
José Antonio Salvador

Cálculo Numérico

Uma Abordagem para o Ensino a Distância

São Carlos



EdUFSCar

2010

© 2010, dos autores.

Concepção Pedagógica

Daniel Mill

Supervisão

Douglas Henrique Perez Pino

Equipe de Revisão Linguística

Ana Luiza Menezes Baldin
Daniela Silva Guanais Costa
Francimeire Leme Coelho
Jorge Ialanji Filholini
Letícia Moreira Clares
Lorena Gobbi Ismael
Luciana Rugoni Sousa
Marcela Luisa Moreti
Paula Sayuri Yanagiwara
Sara Naime Vidal Vital

Equipe de Editoração Eletrônica

Christhiano Henrique Menezes de Ávila Peres
Izis Cavalcanti

Equipe de Ilustração

Eid Buzalaf
Jorge Luís Alves de Oliveira
Priscila Martins de Alexandre

Capa e Projeto Gráfico

Luís Gustavo Sousa Sguissardi

Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da Biblioteca Comunitária da UFSCar

A681n	Arenales, Selma Helena de Vasconcelos. Cálculo Numérico : Uma Abordagem para o Ensino a Distância / Selma Helena de Vasconcelos Arenales, José Antonio Salvador. -- São Carlos : EdUFSCar, 2010. 166 p. – (Coleção UAB-UFSCar).
	ISBN – 978-85-7600-187-4
	1. Cálculo. 2. Cálculo numérico. 3. Métodos numéricos. 4. Algoritmos. 5. Aspectos computacionais. I. Título.
	CDD – 515 (20ª) CDU – 517

Todos os direitos reservados. Nenhuma parte desta obra pode ser reproduzida ou transmitida por qualquer forma e/ou quaisquer meios (eletrônicos ou mecânicos, incluindo fotocópia e gravação) ou arquivada em qualquer sistema de banco de dados sem permissão escrita do titular do direito autoral.

SUMÁRIO

APRESENTAÇÃO	9
---------------------------	---

UNIDADE 1: Teoria dos Erros em Processos Numéricos

1.1 Introdução	13
1.2 Erros na fase da modelagem	16
1.3 Erros na fase de resolução	16
1.4 Erros na mudança de base	16
1.5 Erro Absoluto e Erro Relativo nos procedimentos numéricos	21
1.6 Propagação dos erros	23
1.7 Mapa Conceitual	23
1.8 Exercícios	25

UNIDADE 2: Solução Numérica de Sistemas de Equações Lineares

2.1 Introdução	29
2.2 Métodos diretos	33
2.2.1 Sistema triangular inferior	33
2.2.2 Sistema triangular superior	35
2.2.3 Método de Decomposição LU	37
2.2.4 Método de Eliminação de Gauss	44

2.3	Inversas de matrizes	51
2.4	Métodos iterativos para resolução de sistemas de equações lineares	55
2.4.1	Método iterativo de Jacobi-Richardson	59
2.5	Exercícios	64

UNIDADE 3: Solução Numérica de Equações

3.1	Introdução	69
3.2	Localização das raízes: Método Gráfico	71
3.3	Métodos numéricos para resolução de equações	72
3.3.1	Método da Bisseção	72
3.3.2	Método de Newton	78
3.3.3	Método das Secantes	81
3.4	Exercícios	85

UNIDADE 4: Interpolação e Aproximação de funções

4.1	Introdução	89
4.2	Interpolação Polinomial	90
4.3	Limitante superior para o erro	93
4.4	Diferenças finitas	94
4.5	Fórmulas Interpolatórias	97
4.5.1	Fórmula Interpolatória de Newton-Gregory	97

4.5.2 Polinômio Interpolador de Newton-Gregory com mudança de variável	98
--	----

4.6 Aproximação de funções: Método dos Mínimos Quadrados	100
--	-----

4.7 Exercícios	109
----------------------	-----

UNIDADE 5: Integração Numérica

5.1 Introdução	115
----------------------	-----

5.2 Integração numérica usando interpolação	117
---	-----

5.3 Fórmulas de Quadratura de Newton-Cotes	117
--	-----

5.3.1 Regra dos Trapézios	119
---------------------------------	-----

5.3.2 Regra dos Trapézios Generalizada	122
--	-----

5.3.3 Regra 1/3 de Simpson	125
----------------------------------	-----

5.3.4 Regra 1/3 de Simpson Generalizada	129
---	-----

5.4 Exercícios	132
----------------------	-----

UNIDADE 6: Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias e Parciais

6.1 Introdução	137
----------------------	-----

6.2 Equação diferencial de primeira ordem com valor inicial	139
---	-----

6.3 Discretização	141
-------------------------	-----

6.4 Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Ordinárias	142
---	-----

6.4.1 Método de Euler	142
-----------------------------	-----

6.4.2. Método de Euler Aperfeiçoado	147
---	-----

6.5 Solução Numérica de Equações Diferenciais Parciais: Uma Introdução	151
---	-----

6.5.1 Método de Diferenças Finitas	154
6.5.2 Método Explícito	155
6.6 Exercícios.....	159
REFERÊNCIAS	163

APRESENTAÇÃO

Este livro foi desenvolvido para dar suporte ao estudo de uma disciplina básica de Cálculo Numérico.

O Cálculo Numérico tem por objetivo o estudo de métodos numéricos para a resolução de problemas em geral e, em particular, destacamos neste texto os problemas ambientais. Os métodos numéricos serão desenvolvidos visando eficiência e estabilidade durante a aplicação em problemas gerais.

Consideramos de fundamental importância o Cálculo Numérico no que se refere à aplicação das disciplinas básicas como Cálculo Diferencial Integral, Geometria Analítica, Álgebra Linear, Introdução à Computação, entre outras, e a utilização dos conceitos e resultados adquiridos nessas disciplinas, bem como a aplicação na resolução numérica de problemas.

Apresentamos métodos numéricos para solução de sistemas de equações lineares, equações algébricas, interpolação e ajuste de funções, integração numérica e equações diferenciais.

Detalhamos alguns aspectos teóricos e computacionais, além da utilização de softwares especializados e reconhecidos na literatura, com a certeza de que estaremos contribuindo com ferramentas importantes para a elaboração de projetos e pesquisas que estarão presentes nas atividades dos profissionais de ciências em geral.

Por fim, agradecemos a Carla Taviani Lucke da Silva Ghidini e Silvia Maria Pereira Grandi dos Santos pela colaboração na revisão deste livro.

UNIDADE 1

Teoria dos Erros em Processos Numéricos

1.1 Introdução

Nas diversas áreas científicas, diante da resolução numérica de um problema, deparamo-nos com a necessidade de tratar com soluções aproximadas, desde a interpretação do problema, a modelagem matemática correspondente, erros nos dados obtidos por meio de medidas experimentais e implementação de dados no computador.

Para melhor entendimento, resumimos alguns passos considerados importantes na resolução de um problema da seguinte forma:

1. Apresentação do problema real, entendimento e levantamento dos dados;
2. Formulação matemática correspondente do problema-modelo matemático;
3. Elaboração de um plano de resolução e a escolha de um método numérico adequado;
4. Implementação computacional do método, linguagem de programação;
5. Análise sobre a coerência dos resultados obtidos e o problema inicial proposto;
6. Reformular o modelo matemático e/ou escolher novo método numérico de resolução, caso o Passo 5 não esteja satisfeito.

A execução dos passos anteriores é chamada de **Validação do Modelo** e as aproximações consideradas nesses passos levam a alguns tipos de erros, conforme exemplo a seguir:

Exemplo 1.1

Considere o problema de transporte de lixo contaminado, conforme exibido na Figura 1:

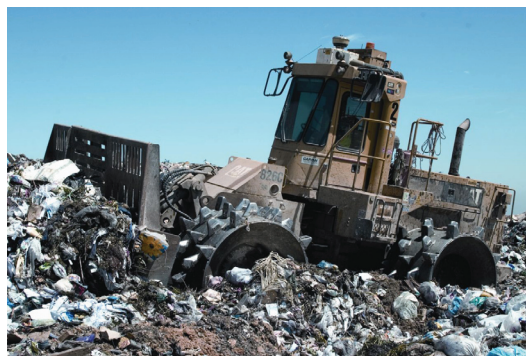


Figura 1 Lixo contaminado.

Uma transportadora possui três tipos de caminhões representados por C_1 , C_2 e C_3 , os quais são equipados para levar três tipos diferentes de materiais contaminados M_1 , M_2 e M_3 para lixões adequados, conforme a Tabela 1.1:

Tabela 1.1

	M1	M2	M3
C1	6.8	1.9	1.7
C2	1.5	2.6	1.4
C3	2.3	1.8	2.3

O caminhão C_1 pode levar 6.8 toneladas do tipo M_1 , 1.9 tonelada do tipo M_2 e 1.7 tonelada do M_3 . Deseja-se saber quantos caminhões de cada tipo devemos enviar para transportar 16 toneladas do tipo M_1 , 7 toneladas do M_2 e 6 toneladas do M_3 ?

Exibiremos a execução de todos os passos citados anteriormente e faremos uma análise final dos resultados obtidos.

- Passo 1

Neste passo, teremos o entendimento do problema observando todos os detalhes, características e condições intrínsecas do mesmo.

- Passo 2

Faremos a formulação matemática do problema, para isso, devemos determinar as variáveis do problema.

Assim, seja o número de caminhões x_j , $j = 1, 2, 3$ a ser determinado para o transporte do lixo contaminado. Dessa forma, observando a tabela de dados vemos que podemos escrever a seguinte equação para o transporte do lixo contaminado M_1 :

$$6.8x_1 + 1.5x_2 + 2.3x_3 = 16$$

Seguindo o mesmo raciocínio, para o transporte dos lixos contaminados M_2 e M_3 , temos o seguinte sistema de equações lineares para ser resolvido, que será estudado nas próximas unidades de estudo.

$$\begin{cases} 6.8x_1 + 1.5x_2 + 2.3x_3 = 16 \\ 1.9x_1 + 2.6x_2 + 1.8x_3 = 7 \\ 1.7x_1 + 1.4x_2 + 2.3x_3 = 6 \end{cases}$$

- Passo 3

Devemos escolher o método adequado de resolução. Neste caso, vamos utilizar o Método de Eliminação de Gauss, o qual será alvo de estudo nas próximas unidades.

- Passo 4

Neste passo, podemos implementar no computador o método de resolução escolhido ou utilizar um software apropriado e teremos a solução do sistema como segue:

$$x_1 = 1.9452, \quad x_2 = 0.7953 \quad \text{e} \quad x_3 = 0.6868$$

- Passo 5

Temos que analisar a solução encontrada, pois o número de caminhões deverá ser um número inteiro positivo. Como temos uma solução aproximada não inteira para o sistema de equações lineares, podemos aproximá-la por um número inteiro mais próximo de tal solução. Dessa forma, tomamos como solução $x_1 = 2.0$, $x_2 = 1.0$ e $x_3 = 1.0$.

Assim, devemos contratar dois caminhões do tipo C_1 , um caminhão do tipo C_2 e um caminhão do tipo C_3 .

Observações

a) Na modelagem matemática do problema, consideramos uma aproximação para o problema dado, uma vez que a capacidade de transporte de cada material em cada caminhão é estimada, isto é, com uma certa margem de erro.

Alguns detalhes foram desconsiderados, como a integralidade da solução e custos envolvidos no processo de transporte.

b) A solução obtida durante a execução do método de resolução foi apresentada com uma aproximação de quatro casas decimais, o que significa que estamos cometendo erros em todas essas aproximações.

Diante das considerações anteriores sobre o tratamento dos problemas com aproximações, desde a modelagem matemática, os erros cometidos durante o processamento dos métodos de resolução no computador, é necessário um entendimento geral sobre tipos de erros existentes, como descreveremos a seguir.

1.2 Erros na fase da modelagem

Devido às simplificações no processo de modelagem matemática de um problema, que muitas vezes são necessárias, podem ocorrer erros na representação do fenômeno da natureza que estivermos analisando.

Os problemas ambientais geralmente são complexos e o modelo matemático é uma aproximação do problema real, representado por expressões matemáticas que muitas vezes necessitam de algumas simplificações para obtermos uma solução aproximada que resultam em erros.

1.3 Erros na fase de resolução

São erros devido ao fato dos equipamentos computacionais terem capacidade limitada para armazenar os dígitos significativos de valores numéricos, utilizados nas operações elementares de adição, multiplicação, subtração, divisão, etc.

1.4 Erros na mudança da base

Considerando que a maioria dos computadores representa os valores numéricos na base binária quando são armazenados, estes são transformados em geral, da base decimal para a base binária ou em outra representação. Essa transformação pode ser acometida de erros, devido à limitação da representação do equipamento computacional que estamos utilizando para o processamento dos dados numéricos.

Dado um número real N , é sempre possível representá-lo em qualquer base b , da seguinte forma:

$$N_b = \sum_{i=n}^m a_i b^i$$

em que $a_i \in \{0, 1, 2, 3, \dots, (b-1)\}$, com n e m inteiros.

Exemplo 1.2

Números escritos na base 2

a) $(1011)_2 = 1*2^0 + 1*2^1 + 0*2^2 + 1*2^3$

b) $(111.01)_2 = 1*2^{-2} + 0*2^{-1} + 1*2^0 + 1*2^1 + 1*2^2$

E, portanto temos:

$$(25)_{10} = (11001)_2$$

Definição 1.1 Erro de Arredondamento

Dizemos que um número \bar{x} foi arredondado na posição n se todos os dígitos de ordem $(n+1)$ são desprezados da seguinte forma:

O dígito de ordem n é acrescido de uma unidade se o de ordem $(n+1)$ for maior ou igual a 5. Caso contrário, o número \bar{x} é representado apenas com os n dígitos iniciais.

Exemplo 1.5

a) O número $\bar{x} = 0.123577$, usando a regra de arredondamento anterior, obtemos o número x' arredondado com 4 casas decimais da seguinte forma:

$$x' = 0.1236$$

b) O número $\bar{x} = 123343$, usando a regra de arredondamento anterior, obtemos o número x' arredondado com 3 casas decimais da seguinte forma:

$$x' = 0.123$$

Definição 1.2 Erro de Truncamento

Quando representamos uma função através de uma série infinita, o erro no valor de $f(x)$ ao truncarmos a série após um número finito de termos é chamado de erro de truncamento.

Exemplo 1.6

a) Consideremos a representação de uma função $f(x)$ utilizando a Série de Taylor, nas vizinhanças do ponto \bar{x} , como segue:

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

em que, $f^{(n)}(\bar{x})$ é o valor da n -ésima derivada da função $f(x)$ no ponto \bar{x} .

Quando truncamos a série no 3º termo, isto é, considerando apenas os termos até a derivada de ordem 2, na expressão acima, temos um erro cometido nessa aproximação, como segue:

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

b) Consideremos o desenvolvimento da função $f(x) = e^x$ em Série de Taylor, nas vizinhanças do ponto $\bar{x} = 0$, isto é:

Como, $f(x) = e^x, f^{(1)}(x) = e^x, f^{(2)}(x) = e^x \dots$

Ainda, $f(0) = 1, f^{(1)}(0) = 1, f^{(2)}(0) = 1 \dots$ temos que:

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

Considerando apenas os quatro primeiros termos da série, temos:

$$e^x \cong 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} = \frac{1}{6} (x^3 + 3x^2 + 6x + 6)$$

Para $x = 2$, temos $e^2 = 6.33333$, que é um valor com erro absoluto bem significativo, quando comparado com o valor $e^2 = 7.38906$ obtido numa calculadora científica que armazena uma quantidade maior de termos da série.

Definição 1.3 Erro Absoluto

Quando substituimos uma solução exata \bar{x} de um problema por uma solução aproximada x' , cometemos um erro chamado Erro Absoluto:

$$E_a = |\bar{x} - x'|$$

Definição 1.4 Erro Relativo

Quando consideramos o Erro Absoluto cometido em relação a uma grandeza numérica, chamamos de Erro Relativo:

$$E_r = \frac{|\bar{x} - x'|}{|\bar{x}|}$$

Exemplo 1.7

a) Consideremos o valor exato $\bar{x} = 2345.713$ e o valor aproximado $x' = 2345.000$.

Nesse caso temos:

$$E_a = |2345.713 - 2345.000| = 0.713 \text{ e,}$$

$$E_r = \frac{|E_a|}{|\bar{x}|} = \frac{0.713}{2345.713} = 0.00030396$$

b) Consideremos o valor exato $\bar{x} = 1.713$ e o valor aproximado $x' = 1.000$.

Então,

$$E_a = |1.713 - 1.000| = 0.713$$

$$E_r = \frac{|E_a|}{|\bar{x}|} = \frac{0.713}{1.713} = 0.416229$$

Observe que nos exemplos anteriores a) e b) o erro absoluto é o mesmo, embora o erro cometido pela aproximação seja muito mais significativo no exemplo b). No exemplo a), o erro relativo é da ordem de 0.03% enquanto no exemplo b) é da ordem de 41,6%.

Exemplo 1.8

Considere as distâncias entre as cidades:

a) São Carlos a Campinas - 170 km

b) São Carlos a Ibaté - 20 km

Ao ser perguntado sobre qual a distância no item a) e b), uma pessoa informa como a seguir:

a) São Carlos a Campinas - 160 km

b) São Carlos a Ibaté - 10 km

Qual o erro cometido nessas informações?

$$E_a = |170 - 160| = 10 \text{ em a)}$$

$$E_a = |20 - 10| = 10 \text{ em b)}$$

$$E_r = \frac{|E_a|}{|170|} = \frac{10}{170} \text{ em a)}$$

$$E_r = \frac{|E_a|}{|20|} = \frac{10}{20} = \frac{1}{2} \text{ em b)}$$

Podemos concluir que o Erro Absoluto em a) ou b) é o mesmo, não fornecendo informações significativas sobre o quanto estamos errando naquela informação.

O Erro Relativo nos informa que ao errar 10 em 170 não foi cometido um erro muito grande na informação, pois a grandeza numérica $10/170 \approx 0.0588 = 5.88\%$, mas ao errar 10 em 20, foi cometido um erro de $10/20 = 0.5 = 50\%$ na informação.

Podemos concluir que o Erro Relativo nos fornece mais informações sobre a qualidade do erro que estamos cometendo num determinado cálculo, uma vez que no Erro Absoluto não é levada em consideração a ordem de grandeza do valor calculado, enquanto que no Erro Relativo essa ordem é contemplada.

1.5 Erro Absoluto e Erro Relativo nos procedimentos numéricos

Como utilizar as definições de Erro Absoluto e Erro Relativo?

Sabemos que nos procedimentos numéricos em geral, quando resolvemos um problema, geramos uma sequência de soluções aproximadas $x_0, x_1, \dots, x_k, x_{k+1}, \dots, \bar{x}$.

Se essa sequência for convergente para a solução \bar{x} , na medida em que k cresce, $k \rightarrow \infty$, as soluções aproximadas x_k e x_{k+1} tendem a ficar próximas.

As definições de E_a e E_r definidas anteriormente serão usadas para medir o quão próximas estão às soluções x_k e x_{k+1} e dessa forma podemos interromper a sequência x_k gerada, utilizando um **Critério de Parada**, com o Erro Absoluto ou o Erro Relativo, como segue:

Dada uma tolerância por um número $\varepsilon > 0$, suficientemente pequeno, consideramos que:

$$E_a = |x_{k+1} - x_k| < \varepsilon$$

e

$$E_r = \frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_{k+1}|} < \varepsilon$$

Caso E_a ou E_r seja menor do que o número ε , entendemos que as soluções x_k e x_{k+1} estão próximas e podemos interromper a sequência tomando o último valor calculado como a solução aproximada do problema.

Exemplo 1.9

Podemos resolver a equação $x^2 - 2 = 0$ utilizando o processo iterativo $x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{2}{x_k} \right)$, $k = 1, 2, \dots$. À medida que variamos $k = 1, 2, \dots$ geramos uma sequência de soluções aproximadas x_0, x_1, \dots que converge para $\bar{x} = \sqrt{2} \cong 1.414213562$.

Para uma tolerância dada $\varepsilon = 0.0001$ e $x_0 = 1$, uma solução inicial, temos a sequência de soluções aproximadas convergente para a solução $\bar{x} = \sqrt{2}$, gerada pelo processo iterativo, isto é:

Tomando $x_0 = 1$, uma solução inicial qualquer e, no processo iterativo dado, variando $k = 1, 2, \dots$ temos:

$$\text{Para } k = 0 \rightarrow x_1 = 1.50000 \rightarrow \frac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 0.33333 > \varepsilon$$

$$\text{Para } k = 1 \rightarrow x_2 = 1.41667 \rightarrow \frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.05882 > \varepsilon$$

$$\text{Para } k = 2 \rightarrow x_3 = 1.41422 \rightarrow \frac{|x_3 - x_2|}{|x_3|} = 0.00173 > \varepsilon$$

$$\text{Para } k = 3 \rightarrow x_4 = 1.41421 \rightarrow \frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} = 0.00001 < \varepsilon$$

Dessa forma, usando o Erro Relativo como o Critério de Parada, e uma vez que este está satisfeito na sequência quando $k = 3$, temos que a solução $\bar{x} \cong x_4 = 1.41421$.

Nota:

Podemos ainda considerar os erros de representação que, em geral, são utilizados nos computadores para representação dos números, chamados de ponto flutuante.

A união de todos os números na representação em ponto flutuante é chamado de Sistema de Ponto Flutuante. Detalhes sobre este tópico podem ser vistos na Referência [1].

1.6 Propagação dos erros

A propagação dos erros pode ser observada quando utilizamos um processo numérico para buscar a solução de um determinado problema. Esse processamento envolve um número muito grande de operações elementares, e os erros acumulados no final dos processos numéricos interferem na qualidade da solução aproximada do problema.

1.7 Mapa Conceitual

Um Mapa Conceitual é um instrumento utilizado no processo de ensino, aprendizagem e avaliação, por meio de uma representação gráfica de um conjunto de significados conceituais, o qual pode vir acompanhado de um pequeno texto explicativo e de símbolos que ajudam a organizar, sistematizar, estudar e detectar as ideias principais do tópico abordado.

Por exemplo, apresentamos a seguir um Mapa Conceitual preliminar sobre os erros em processos numéricos.

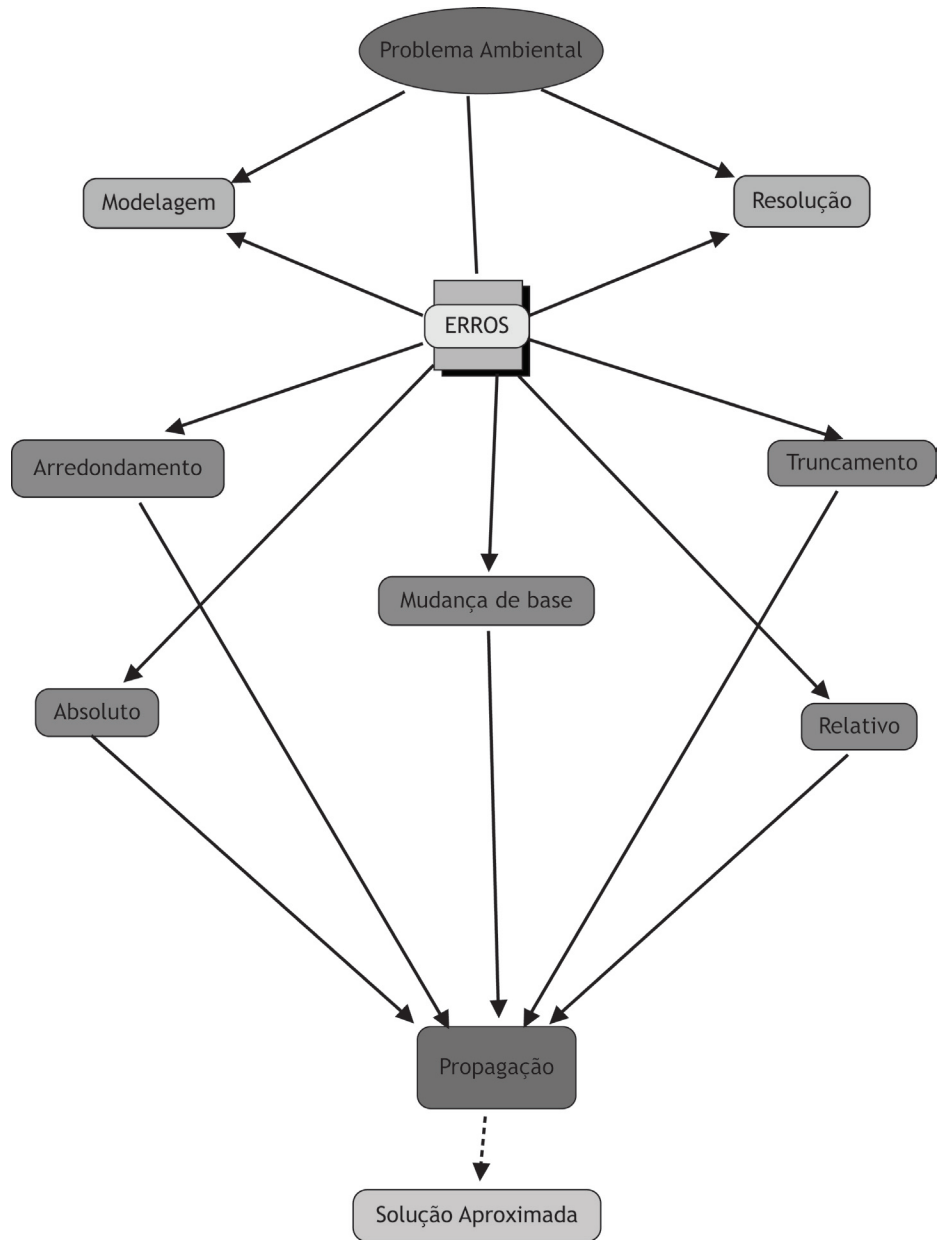


Figura 1.2 Um Mapa Conceitual sobre erros.

1.8 Exercícios

1. Converta os números decimais para a base binária:

- a) 45 b) 2978 c) 7699

2. Resolver a equação $x^2 - 7 = 0$ usando o seguinte processo iterativo:

$$x_{k+1} = \frac{1}{2} \left(x_k + \frac{7}{x_k} \right), \quad k = 0, 1, \dots \text{ com } \varepsilon = 10^{-4} \text{ no critério de parada partindo de}$$

um ponto inicial $x_0 = 1$.

3. Usando a técnica de arredondamento, representar os números abaixo com 4 casas decimais:

- a) 0.4567897 b) 67.456789 c) 12.677777

4. Sabemos hoje que a distância média da Terra à Lua é de 384000 km. A distância da Terra à Lua obtida por cientistas da antiguidade, na segunda metade do séc. II a.C., foi de 402500 km.

- a) Calcule o erro absoluto cometido nessas informações.
b) Calcule o erro relativo cometido. Qual é o valor do erro relativo em porcentagem?

5. Faça um mapa conceitual detalhado sobre os erros em processos numéricos, considerando as definições, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

Observação: Os mapas conceituais podem ser feitos com os softwares disponíveis como: Xmind <<http://www.xmind.net>>, CMAPS <<http://cmap.ihmc.us>> ou mesmo a barra de desenhos do Office, Word ou Powerpoint.

UNIDADE 2

Solução Numérica de Sistemas
de Equações Lineares

2.1 Introdução

O conhecimento de métodos numéricos para resolução de sistemas de equações lineares torna-se necessário devido ao fato de que muitos problemas após sua modelagem matemática correspondente resultam na resolução de um sistema de equações lineares.

Esses sistemas lineares em geral são de grande porte, a matriz A dos coeficientes possui muitas linhas e colunas, e necessitam de métodos numéricos estáveis, isto é, métodos em que os erros de arredondamento não destroem a qualidade da solução aproximada obtida, e com pouco tempo de processamento nos computadores.

Os sistemas de equações lineares podem ser quadrados, quando o número de linhas é igual ao número de colunas, ou retangulares, caso contrário. Denominamos sistemas consistentes quando apresentam pelo menos uma solução, e inconsistentes, caso contrário.

Para ilustrar os sistemas de equações lineares, considere o problema de composição de areias para filtros de purificação de água, conforme Figura 2.1 a seguir:

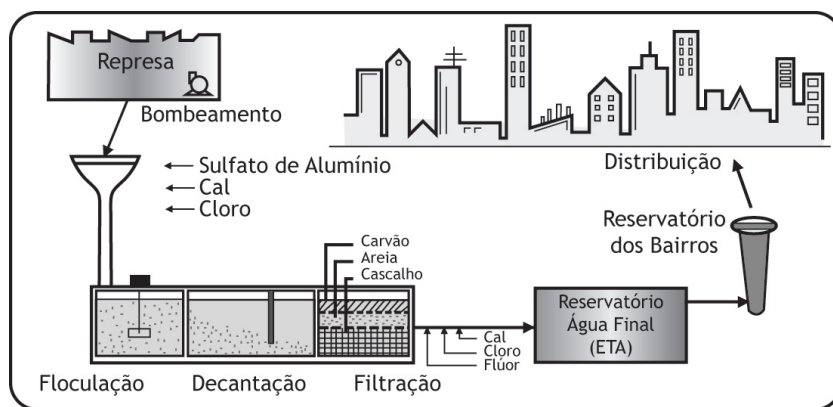


Figura 2.1 Filtros de purificação de água.

Devido a sua propriedade de grande permeabilidade, a areia é usada na constituição de filtros de Estações de Tratamento de Águas de abastecimento (ETA) como meio filtrante, por interceptar as impurezas existentes na água afluenta.

Para construção das unidades de filtração de uma ETA, uma usina de agregados foi contratada para fornecer a areia destinada à filtração. Para atender ao pedido, a usina dispõe de areias brutas provenientes de três portos passíveis de exploração com composições granulométricas distintas, conforme Tabela 2.1:

Tabela 2.1

Faixa granulométrica (mm)	Porto 1	Porto 2	Porto 3
0.42-0.59	0.28	0.10	0.15
0.59-0.71	0.12	0.22	0.10
0.71-0.84	0.14	0.12	0.18

Na Tabela 2.1, tomando 1m^3 da areia bruta proveniente do Porto 1 têm-se 0.28m^3 de grãos na faixa 0.42-0.59mm. As areias brutas são peneiradas para obter as areias nas faixas especificadas.

Essas areias serão dispostas em camadas que deverão obedecer às composições granulométricas estabelecidas por norma, nas quantidades a seguir, conforme Tabela 2.2:

Tabela 2.2

Faixa granulométrica (mm)	Volume de areia (m^3)
0.42-0.59	20
0.59-0.71	10
0.71-0.84	12

Deseja-se determinar quais as quantidades de areia de cada porto devem ser extraídas de forma que atendam a demanda.

Na modelagem matemática do problema, sejam $x_j, j = 1, 2, 3$ as quantidades de areia em m^3 a serem retiradas dos respectivos portos $P_i, i = 1, 2, 3$.

Dessa forma, para obtermos as quantidades de areia de cada porto que devem ser extraídas de forma que atendam a demanda, temos que encontrar a solução do seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{cases} 0.28x_1 + 0.10x_2 + 0.15x_3 = 20 \\ 0.12x_1 + 0.22x_2 + 0.10x_3 = 10 \\ 0.14x_1 + 0.12x_2 + 0.18x_3 = 12 \end{cases}$$

Observações

- Nesse problema algumas simplificações foram feitas, por exemplo, não foram considerados os custos de extração de areia nos portos, e ainda consideramos apenas três portos de extração. À medida que aumentamos o número de portos, os sistemas terão mais equações e mais variáveis.
- A resolução deste sistema de equações, requer o conhecimento de métodos adequados e eficientes de resolução, quais serão apresentados nesta unidade, como segue:

Considere o sistema de equações lineares $Ax = b$, em que $A=(a_{i,j})$, $i, j = 1, \dots, n$ é matriz dos coeficientes, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ o vetor incógnita transposto, e $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^t$ é o vetor dos termos independentes transposto. Consideramos que o determinante de A, $\det(A) \neq 0$, o que nos garante a unicidade da solução para o sistema linear.

Representamos o sistema de equações lineares da seguinte forma:

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

Na forma matricial temos:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

A x b

Resolver o sistema anterior dado consiste em determinar um vetor $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ que satisfaça todas as equações simultaneamente.

Podemos representar graficamente a solução de um sistema no \mathfrak{R}^2 , como no exemplo a seguir:

Exemplo 2.1

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ 2x_1 + x_2 = 3 \end{cases}$$

Observe que $\det(A) = -1 \neq 0$ e que a solução $\bar{x} = (1, 1)^t$ encontra-se na intersecção das duas retas, representando as duas equações lineares, conforme Figura 2.2:

Graficamente temos:

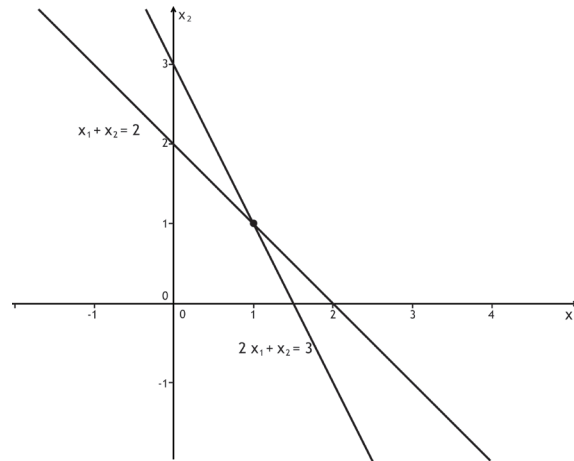


Figura 2.2 Solução de um sistema linear no plano.

Podemos observar na Figura 2.2 que a solução do sistema de equações encontra-se na intersecção das retas, isto é, no ponto $\bar{x} = (1, 1)^t$.

Podemos ainda representar a solução de um sistema de equações no espaço \mathfrak{R}^3 , isto é, um sistema de equações com 3 equações e 3 incógnitas, conforme a seguir:

Exemplo 2.2

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

Nesse caso, a solução $\bar{x} = (1, 1, 0)^t$ do sistema de equações encontra-se na intersecção dos três planos representados pelas equações do sistema dado, conforme ilustrado na Figura 2.3 a seguir:

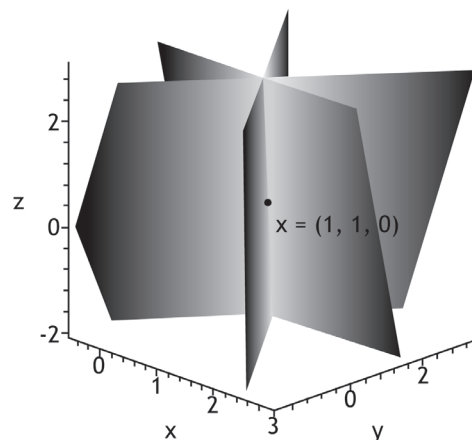


Figura 2.3 Solução de um sistema linear no espaço.

Métodos de Resolução

Na resolução de sistemas de equações lineares, podemos utilizar métodos diretos ou métodos iterativos.

2.2 Métodos diretos

Um método direto para resolver o sistema $Ax = b$, em que $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ com $\det(A) \neq 0$, consiste em determinar exatamente o vetor solução $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$, se não fossem os erros provenientes do processamento de cálculos envolvidos nos algoritmos.

2.2.1 Sistema triangular inferior

Seja $Ax = b$ um sistema de equações lineares, em que $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ é triangular inferior, isto é, os seus coeficientes $(a_{ij}) = 0$ sempre que $i < j$ e com $a_{ii} \neq 0$ para

$$i = 1, \dots, n.$$

Representamos um sistema triangular inferior por:

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

Para construir o algoritmo para resolução do sistema triangular inferior, destacamos a linha genérica (i), isto é:

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \dots + a_{ii}x_i = b_i$$

Considerando $a_{ii} \neq 0$ e isolando a incógnita x_i na equação anterior, temos:

$$x_i = (b_i - a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + a_{i3}x_3 + \dots + a_{ii-1}x_{i-1}) / a_{ii}$$

ou seja,

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j}{a_{ii}}$$

Dessa forma, podemos escrever o algoritmo para resolução de sistema triangular inferior como segue:

Algoritmo 2.1

Faça:

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}}$$

Para $i = 2, \dots, n$, faça:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j}{a_{ii}}$$

Exemplo 2.3

Considere o sistema de equações lineares triangular inferior:

$$\begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 6 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Usando o Algoritmo 2.1 temos:

$$x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} = \frac{6}{6} = 1$$

$$x_2 = \frac{b_2 - a_{21}x_1}{a_{22}} = \frac{6 - 1(1)}{5} = 1$$

$$x_3 = \frac{b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2}{a_{33}} = \frac{1 - 0(1) - 1(1)}{1} = 0$$

Portanto, temos a solução do sistema $\bar{x} = (1, 1, 0)^t$.

2.2.2 Sistema triangular superior

Seja $Ax = b$ um sistema de equações lineares, em que $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ é triangular superior, isto é, os seus coeficientes $(a_{ij}) = 0$ sempre que $i > j$ e com $a_{ii} \neq 0$, para

$$i = 1, \dots, n.$$

Representamos um sistema de equações triangular superior por:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ \quad a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \quad \quad \quad \vdots \\ \quad \quad \quad \quad a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Para a construção do algoritmo destacamos a linha genérica (i), isto é:

$$a_{ii}x_i + a_{i,i+1}x_{i+1} + a_{i,i+2}x_{i+2} + a_{i,i+3}x_{i+3} + \dots + a_{in}x_n = b_i$$

Considerando $a_{ii} \neq 0$ e isolando a incógnita x_i na equação anterior, temos:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j}{a_{ii}}$$

Dessa forma, podemos escrever o algoritmo para resolução de sistema triangular superior da seguinte forma:

Algoritmo 2.2

Faça:

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

Para $i = (n - 1), \dots, 1$, faça:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j}{a_{ii}}$$

Exemplo 2.4

Considere o sistema de equações lineares triangular superior:

$$\begin{bmatrix} 5 & 1 & 0 \\ 0 & 7 & -1 \\ 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 6 \\ 8 \end{bmatrix}$$

Usando o Algoritmo 2.2 temos:

$$x_3 = \frac{b_3}{a_{33}} = \frac{8}{8} = 1$$

$$x_2 = \frac{b_2 - a_{23}x_3}{a_{22}} = \frac{6 - (-1)(1)}{7} = 1$$

$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3}{a_{11}} = \frac{6 - (1)(1) - (0)(1)}{5} = 1$$

Portanto, temos a solução do sistema $\bar{x} = (1, 1, 1)^t$.

Observação

O Esforço Computacional E_c de um Algoritmo é a quantidade de operações elementares envolvidas durante a aplicação do mesmo.

No caso da solução de um sistema de equações triangular superior ou inferior, o esforço computacional dos Algoritmos 2.1 e 2.2 é $E_c = n^2$ operações elementares, sendo n o número de operações de divisão, $\frac{n(n-1)}{2}$ o número de operações de adição (ou subtração) e $\frac{n(n-1)}{2}$ o número de operações de multiplicação.

No exemplo anterior, temos que o esforço computacional $E_c = n^2 = (3)^2 = 9$, em que três operações são de divisão, três operações são de adição ou subtração e três operações são de multiplicação.

Experiências computacionais mostram que o tempo computacional envolvido nessas operações é pequeno, tornando os sistemas triangulares bastante atrativos, os quais serão usados no método de decomposição posteriormente.

Definição 2.1 Menores principais

Seja a matriz $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$. Denominamos menores principais de ordem k da matriz A por:

$$\Delta_k = \det(A_k)$$

em que $A_k = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, k$ é formada pelas k primeiras linhas e k primeiras colunas de matriz A .

Exemplo 2.5

Considere a matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

Cálculo dos menores principais:

$$\Delta_1 = |5| \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} 5 & 0 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 10 \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \end{vmatrix} = 10$$

Métodos de Decomposição

Os métodos de decomposição para resolução dos sistemas de equações lineares $Ax = b$, consistem em decompor de forma única a matriz A do sistema no produto de duas matrizes triangular inferior e superior respectivamente, e resolvermos dois sistemas triangulares inferior e superior respectivamente, os quais são facilmente resolvidos como os exibidos anteriormente.

2.2.3 Método de Decomposição LU

O Método de Decomposição LU consiste na decomposição única da matriz $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ do sistema de equações, no produto de uma matriz $L = (\ell_{ij})$,

$i, j = 1, \dots, n$ triangular inferior, com os elementos da diagonal $\ell_{ii} = 1, i = 1, \dots, n$ por uma matriz $U = (u_{ij}), i, j = 1, \dots, n$ triangular superior.

Dessa forma, enunciamos o seguinte resultado:

Teorema 2.1

Seja uma matriz $A = (a_{ij}), i, j = 1, \dots, n$. Se os menores principais de A, $\Delta_i \neq 0, i = 1, 2, \dots, n - 1$, então A se decompõe, de maneira única, no produto de uma matriz triangular inferior $L = (\ell_{ij}), i, j = 1, \dots, n$, com $\ell_{ii} = 1$, por uma matriz triangular superior $U = (u_{ij}), i, j = 1, \dots, n$.

$$\text{Além disso, } \det(A) = \det(U) = \prod_{i=1}^n u_{ii}.$$

Prova: Referência [1].

Processo de Decomposição LU

Por facilidade de entendimento, vamos decompor uma matriz $A = (a_{ij}), i, j = 1, \dots, 3$, isto é, $n = 3$ e, em seguida, generalizamos os resultados para qualquer dimensão como segue:

Considere $LU = A$:

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

L U A

Dessa forma, temos uma igualdade envolvendo o produto de duas matrizes e determinamos as linhas da matriz U e as colunas da matriz L da seguinte forma:

- 1ª linha de U

$$1u_{11} = a_{11} \rightarrow u_{11} = a_{11}$$

$$1u_{12} = a_{12} \rightarrow u_{12} = a_{12}$$

$$1u_{13} = a_{13} \rightarrow u_{13} = a_{13}$$

- 1ª coluna de L

$$l_{11} = 1$$

$$l_{21}u_{11} = a_{21} \rightarrow l_{21} = a_{21} / u_{11}$$

$$l_{31}u_{11} = a_{31} \rightarrow l_{31} = a_{31} / u_{11}$$

- 2ª linha de U

$$l_{21}u_{12} + u_{22} = a_{22} \rightarrow u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$$

$$l_{21}u_{13} + u_{23} = a_{23} \rightarrow u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}$$

- 2ª coluna de L

$$l_{22} = 1$$

$$l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} = a_{32} \rightarrow l_{32} = (a_{32} - l_{31}u_{12}) / u_{22}$$

- 3ª linha de U

$$l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33} = a_{33} \rightarrow u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}$$

- 3ª coluna de L

$$l_{33} = 1$$

Podemos generalizar esse procedimento para uma matriz $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ e obtemos:

Matriz triangular U

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} \quad i, j = 1, \dots, n \quad i \leq j.$$

Matriz triangular L

$$\ell_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik} u_{kj}}{u_{jj}} \quad i, j = 1, \dots, n \quad i > j.$$

Assim, podemos escrever o Algoritmo de Decomposição, $A = LU$, como segue:

Algoritmo 2.3

Para $m = 1, \dots, n-1$, faça

Para $j = m, m+1, \dots, n$ faça

$$u_{mj} = a_{mj} - \sum_{k=1}^{m-1} \ell_{mk} u_{kj}$$

Para $i = m+1, \dots, n$, faça

$$\ell_{im} = \frac{a_{im} - \sum_{k=1}^{m-1} \ell_{ik} u_{km}}{u_{mm}}$$

$$\ell_{mm} = 1$$

$$u_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} \ell_{nk} u_{kn}$$

$$\ell_{nn} = 1$$

Exemplo 2.6

Considere a matriz A dada por:

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -4 & 2 & 1 \\ 0 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

Como $\Delta_1 = |a_{11}| = 2 \neq 0$, $\Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ -4 & 2 \end{vmatrix} = 8 \neq 0$, podemos escrever

$A = LU$ de forma única e seguindo os passos do Algoritmo 2.3:

- 1ª linha de U

$$u_{11} = a_{11} = 2 \quad u_{12} = a_{12} = 1 \quad u_{13} = a_{13} = 0$$

- 1ª coluna de L

$$l_{11} = 1$$

$$l_{21} = a_{21} / u_{11} = -4 / 2 = -2$$

$$l_{31} = a_{31} / u_{11} = 0 / 2 = 0$$

- 2ª linha de U

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12} = (2) - (-2)(1) = 4$$

$$u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = (1) - (-2)(0) = 1$$

- 2ª coluna de L

$$l_{22} = 1$$

$$l_{32} = (a_{32} - l_{31}u_{12}) / u_{22} = ((4) - (0)(1)) / 4 = 1$$

- 3ª linha de U

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23} = (2) - (0)(0) - (1)(1) = 1$$

- 3ª coluna de L

$$l_{33} = 1$$

Assim, obtemos as matrizes triangular inferior L e superior U:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Aplicação na resolução de sistemas de equações lineares

Seja $Ax = b$ um sistema de equações lineares, em que $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ com $\det(A) \neq 0$.

Considerando que a matriz A do sistema satisfaz às condições do Teorema 2.1, temos que $A = LU$ e, portanto, o sistema $Ax = b$ pode ser escrito:

$$(LU)x = b$$

Nesse caso, denominando $Ux = y$, a solução do sistema dado consiste na resolução de dois sistemas triangulares (inferior) e (superior), respectivamente, como segue:

$$\begin{cases} Ly = b \\ Ux = y \end{cases}$$

Para resolver os sistemas de equações triangulares obtidos, basta usar os Algoritmos 2.1 e 2.2, respectivamente.

Exemplo 2.7

Considere o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -4 & 2 & 1 \\ 0 & 4 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Para aplicação do Método de Decomposição LU, verificamos as condições de existência e unicidade da matriz

$A = LU$, utilizando o Teorema 2.1:

1. Temos que:

$$\Delta_1 = |2| = 2 \neq 0$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ -4 & 2 \end{vmatrix} = 8 \neq 0$$

$$\det(A) = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 \\ -4 & 2 & 1 \\ 0 & 4 & 2 \end{vmatrix} = 8 \neq 0$$

Portanto, a matriz A satisfaz condições do Teorema 2.1 e $\det(A) \neq 0$ e podemos resolver o sistema dado usando o Método de Decomposição LU.

2. Construção das matrizes L e U:

Usando o Algoritmo 2.3 temos a decomposição da matriz $A = LU$ da seguinte forma:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \text{ e } U = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

3. Solução dos sistemas de equações triangulares

a) $Ly = b \rightarrow$ sistema triangular inferior

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema de equações triangular superior obtido, usando o Algoritmo 2.1 temos:

$$\begin{cases} y_1 = 3 \\ -2y_1 + 1y_2 = -2 \rightarrow y_2 = 4 \\ y_2 + y_3 = 4 \rightarrow y_3 = 0 \end{cases}$$

Assim temos $y = (3, 4, 0)^t$

b) $Ux = y \rightarrow$ sistema triangular superior

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 0 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema de equações triangular superior, usando o Algoritmo 2.2 temos:

$$\begin{cases} x_3 = 0 \\ 4x_2 + x_3 = 4 \rightarrow x_2 = 1 \\ 2x_1 + x_2 = 3 \rightarrow x_1 = 1 \end{cases}$$

Portanto, a solução do sistema é dada por $\bar{x} = (1, 1, 0)^t$.

Métodos de Eliminação

Os métodos de eliminação para resolução de um sistema de equações lineares $Ax = b$ consistem em transformá-lo num sistema equivalente triangular superior aplicando operações elementares sobre linhas como multiplicar uma linha por constante diferente de zero e subtrair de outra linha, as quais serão exibidas no método a seguir.

2.2.4 Método de Eliminação de Gauss

Considere o sistema de equações lineares $Ax = b$, em que $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ é matriz dos coeficientes, com $\det(A) \neq 0$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ é o vetor incógnita transposto e $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^t$ é o vetor dos termos independentes transposto.

Representamos o sistema de equações lineares da seguinte forma:

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

O Método de Eliminação de Gauss, com pivotamento sobre os elementos da diagonal da matriz A, consiste em transformar o sistema dado por meio de operações elementares sobre as linhas, em um sistema equivalente triangular superior, tomando, em cada passo, como pivô, os elementos diferentes de zero da diagonal da matriz A.

$$(A, b) \longrightarrow (A^{(n-1)}, b^{(n-1)})$$

em que $A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}$ é um sistema triangular superior depois de aplicados $n-1$ passos.

Consideremos o sistema dado, escrito na seguinte forma:

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

Considere a matriz aumentada, isto é, acoplamos o vetor b dos termos independentes juntamente com a matriz A do sistema, para que este também sofra simultaneamente todas as operações de pivotamento, de forma a obter no final dessas operações um sistema triangular superior equivalente ao sistema dado inicialmente.

Assim, podemos escrever a matriz aumentada da seguinte forma:

$$(A, b) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} & \cdot & a_{1n+1}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} & \cdot & a_{2n+1}^{(1)} \\ \vdots & & & & & \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} & \cdot & a_{nn+1}^{(1)} \end{bmatrix}$$

em que $a_{ij}^{(1)} = a_{ij}$, $i, j = 1, \dots, n+1$ e $a_{in+1}^{(1)} = b_i$, $i = 1, \dots, n$.

Para facilidade de entendimento no procedimento de aplicações de operações elementares no sistema de equações, também chamado de processo de pivotamento sobre linhas, consideramos um sistema de equações com dimensão $n = 3$ e, finalmente, generalizamos operações para um sistema de equações de qualquer dimensão.

Considere a matriz aumentada de um sistema de equações lineares $Ax = b$ com dimensão $n = 3$:

Assim, podemos escrever:

$$(A, b) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdot & a_{14}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdot & a_{24}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdot & a_{34}^{(1)} \end{bmatrix}$$

em que $a_{ij}^{(1)} = a_{ij}$, $i, j = 1, \dots, 4$ e $a_{i4}^{(1)} = b_i$, $i = 1, \dots, 3$.

Passos do processo de eliminação

- Passo 1

Nesse passo, considere o elemento pivô $a_{11}^{(1)} \neq 0$. Caso este seja igual a zero, troca-se as linhas na matriz aumentada, de forma a obter um elemento diferente de zero como pivô.

Considere os multiplicadores do 1º passo:

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, i = 2, 3$$

e as operações de pivotamento sobre as linhas de $\begin{pmatrix} (1) & (1) \\ A, b \end{pmatrix}$ do tipo:

a) Multiplica-se a 1ª linha fixa da matriz aumentada pela constante $\frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$ e subtrai da 2ª linha; faz-se a substituição na 2ª linha por esta modificada dessas operações.

b) Multiplica-se a 1ª linha pela constante $\frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$ e subtrai da 3ª linha; faz-se a substituição na 3ª linha por esta modificada dessas operações.

Dessa forma, conservamos a 1ª linha e tornamos nulos todos os elementos da 1ª coluna abaixo da diagonal na matriz aumentada $(A^{(1)}, b^{(1)})$, pois ao efetuar essas operações de pivotamento temos:

$$a_{21}^{(1)} - \frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{11}^{(1)} = 0 \quad \text{e} \quad a_{31}^{(1)} - \frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} a_{11}^{(1)} = 0$$

Efetuada o mesmo cálculo para toda a linha, obtemos os elementos modificados, os quais são marcados como $a_{ij}^{(1)}$, e realizamos o mesmo procedimento para os elementos das linhas abaixo da diagonal:

Assim, escrevemos a matriz aumentada modificada como segue:

$$(A^{(1)}, b^{(1)}) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdot & a_{14}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdot & a_{24}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(3)} & a_{33}^{(3)} & \cdot & a_{34}^{(3)} \end{bmatrix}$$

De forma geral, para um sistema $Ax = b$, em que $A = (a_{ij}), i, j = 1, \dots, n$ temos $a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)}$, $m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$, $i = 2, \dots, n, j = 1, 2, \dots, n + 1$.

- Passo 2

Considere agora o coeficiente $a_{22}^{(2)} \neq 0$ como elemento pivô. Caso $a_{22}^{(2)} = 0$, troca-se com as linhas seguintes até que o coeficiente $a_{22}^{(2)}$ que ocupa a segunda linha e segunda coluna seja diferente de zero.

Considere os multiplicadores do 2º passo:

$$m_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \quad i = 3$$

e faça as operações sobre as linhas na nova matriz aumentada $(A^{(1)}, b^{(1)})$ modificada com as operações de pivotamento do 1º passo:

a) Multiplica-se a 2ª linha fixa por $\frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$ e subtrai da 3ª linha; faz-se a substituição na 3ª linha por esta modificada dessas operações.

Dessa forma, tornamos nulos todos os elementos da 2ª coluna abaixo da diagonal na matriz $(A^{(2)}, b^{(2)})$, pois ao efetuar essas operações nessa matriz temos:

$$a_{32}^{(2)} - \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} a_{22}^{(2)} = 0$$

Efetuada o mesmo cálculo para toda a linha, temos os elementos modificados, os quais serão marcados como $a_{ij}^{(3)}$, e procedemos igualmente para as linhas abaixo da diagonal:

Assim, podemos escrever a matriz modificada da seguinte forma:

$$(A^{(2)}, b^{(2)}) = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdot & a_{14}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \cdot & a_{24}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \cdot & a_{34}^{(3)} \end{bmatrix}$$

De forma geral, para um sistema $Ax = b$, em que $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$, temos:

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} - m_{i2} a_{2j}^{(2)}, \quad m_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad i = 3, \dots, n \quad j = 2, \dots, n+1$$

Assim, depois de executados 2 passos, obtemos o sistema inicial dado $Ax = b$ na forma equivalente triangular superior, da seguinte maneira:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + a_{13}^{(1)} x_3 = a_{14}^{(1)} \\ a_{22}^{(2)} x_2 + a_{23}^{(2)} x_3 = a_{24}^{(2)} \\ a_{33}^{(3)} x_3 = a_{34}^{(3)} \end{cases}$$

A solução é dada, conforme anteriormente, usando a expressão geral para a solução de um sistema triangular superior:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j}{a_{ii}} \quad i = 3, \dots, 1$$

Generalizando essas operações para um sistema com n linhas e n colunas, necessitamos de $n-1$ passos para transformá-lo em sistema equivalente triangular superior. Essas operações são detalhadas no Algoritmo de Eliminação de Gauss, descrito como segue:

Algoritmo 2.4

a) Construção do sistema triangular superior equivalente

Para $k = 1, \dots, n-1$, faça

Para $i = k+1, \dots, n$, faça

$$m_{ik}^{(k)} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

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

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik}^{(k)} a_{kj}^{(k)}$$

b) Calcular a solução do sistema triangular superior

Usar o Algoritmo 2.2 para resolução de sistemas de equações triangular superior.

Exemplo 2.8

Considere o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Como $\det(A) = \begin{vmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{vmatrix} = 1 \neq 0$, o sistema possui uma única solução,

usando o Método de Eliminação de Gauss, temos:

Considere a matriz aumentada, conforme a seguir:

$$(A, b) = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & \cdot & 4 \\ 1 & 1 & 1 & \cdot & 1 \\ 2 & 1 & 1 & \cdot & 2 \end{bmatrix}$$

Executando o **Passo 1** e o **Passo 2**, respectivamente, temos:

- Passo 1

Considerando que o pivô $a_{11}^{(1)} = 3 \neq 0$, podemos calcular os multiplicadores:

$$m_{11} = \frac{a_{21}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = \frac{1}{3} \quad \text{e} \quad m_{21} = \frac{a_{31}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} = \frac{2}{3}$$

Multiplica-se a 1ª linha por 1/3 e subtrai da 2ª linha; faz-se a substituição na 2ª linha, em seguida multiplica-se a 1ª linha por 2/3 e subtrai da 3ª linha e, novamente, faz-se a substituição na 3ª linha.

Assim temos a matriz aumentada modificada da seguinte forma:

$$(A^{(1)}, b^{(1)}) = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & \cdot & 4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 & \cdot & -1/3 \\ 0 & -1/3 & 1/3 & \cdot & -2/3 \end{bmatrix}$$

- Passo 2

Como o pivô $a_{22}^{(2)} = 1/3 \neq 0$, calculamos os multiplicadores como segue:

$$m_{32} = \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} = \frac{-1/3}{1/3} = -1$$

Multiplica-se a 2ª linha por -1 , subtrai da 3ª linha e faz-se a substituição na 3ª linha. Temos a matriz aumentada modificada como segue:

$$(A^{(2)}, b^{(2)}) = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 & \cdot & 4 \\ 0 & 1/3 & 2/3 & \cdot & -1/3 \\ 0 & 0 & 1 & \cdot & -1 \end{bmatrix}$$

Assim, obtemos um sistema de equações triangular superior, o qual pode ser reescrito da seguinte forma:

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

Resolvendo o sistema triangular superior equivalente, usando o Algoritmo 2.2, temos:

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

Portanto, a solução do sistema é dada por $\bar{x} = (1, 1, -1)^t$.

Observação

Para verificar-se que a solução obtida é solução do sistema original dado, basta substituí-la nas equações do sistema e verificar a igualdade.

Aplicação

Uma aplicação de resolução de sistemas de equações lineares é quando calculamos a matriz inversa de uma matriz A , em que $A = (a_{i,j}), i, j = 1, \dots, n$. Nesse caso necessitamos da resolução de n sistemas de equações lineares, em que usamos os métodos diretos vistos anteriormente.

2.3 Inversas de matrizes

Considere $A = (a_{i,j}), i, j = 1, \dots, n$ uma matriz não singular, isto é, $\det(A) \neq 0$. Então existe uma única matriz A^{-1} chamada de inversa de A , de tal modo que $AA^{-1} = I$, em que a matriz I é uma matriz diagonal, conhecida como a matriz identidade, cujos elementos da diagonal são todos iguais ao número 1.

Dessa forma temos:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \vdots & & & \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Portanto, para determinar as n colunas da matriz inversa A^{-1} , temos que resolver n sistemas de equações lineares, usando qualquer um dos métodos diretos vistos anteriormente.

Para calcular a 1ª coluna da matriz inversa A^{-1} , resolvemos o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{21} \\ \vdots \\ x_{n1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Assim sucessivamente, calculamos a n-ésima coluna da matriz A^{-1} , resolvendo o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1n} \\ x_{2n} \\ \vdots \\ x_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

Exemplo 2.9

Considere a matriz A dada por:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Temos que a matriz inversa de A pode ser escrita como:

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix}$$

Usando o Método de Eliminação de Gauss, podemos calcular a inversa da matriz A dada, como segue:

$$\text{Como } \det(A) = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{vmatrix} = 2 \neq 0 \text{ temos que a matriz inversa existe e é única.}$$

Considerando que $AA^{-1} = I$, podemos escrever:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Temos três sistemas de equações lineares para serem resolvidos, como seguem:

1ª coluna da matriz inversa de A,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{21} \\ x_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

2ª coluna da matriz inversa de A,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{12} \\ x_{22} \\ x_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

3ª coluna da matriz inversa de A,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{13} \\ x_{23} \\ x_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Construímos inicialmente a matriz aumentada (A, I) formada pela matriz A e os termos independentes dos sistemas obtidos anteriormente. Aplicamos as operações do Método de Eliminação de Gauss, transformando a matriz dada na forma triangular superior, e os vetores dos termos independentes são modificados, como segue:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & \cdot & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \cdot & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \cdot & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & \cdot & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \cdot & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \cdot & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Assim, podemos resolver os sistemas triangulares obtidos:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{21} \\ x_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Resolvendo o sistema de equações triangular superior obtido, temos a solução da 1ª coluna da matriz inversa de A, dada por:

$$(x_{11} \ x_{21} \ x_{31})^t = (1, -1, 0)^t$$

Para determinar a 2ª coluna da matriz inversa de A, resolvemos o sistema de equações triangular superior obtido:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{12} \\ x_{22} \\ x_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

cuja solução é dada por:

$$(x_{12} \ x_{22} \ x_{32})^t = (0, 1, 0)^t$$

Finalmente para determinar a 3ª coluna da matriz inversa de A, resolvemos o sistema de equações triangular obtido como segue:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{13} \\ x_{23} \\ x_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

cuja solução é dada por:

$$(x_{13} \ x_{23} \ x_{33})^t = (-1, 1, 1/2)^t$$

Portanto, temos a matriz inversa A^{-1} da matriz dada por:

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{bmatrix}$$

Observação

Quando usamos o Método de Decomposição LU no cálculo da matriz inversa, transformamos a matriz A no produto de duas matrizes triangulares, inferior e superior respectivamente. Nesse caso, teremos três sistemas de equações lineares para serem resolvidos e, conseqüentemente, dois sistemas de equações triangulares inferiores e superiores em cada um deles.

2.4 Métodos iterativos para resolução de sistemas de equações lineares

Podemos resolver um sistema de equações lineares $Ax = b$ utilizando para isto métodos iterativos, os quais consistem em determinar uma sequência de soluções aproximadas, em que cada solução obtida depende da solução anterior pela aplicação do mesmo procedimento.

Para construir um método iterativo, escrevemos o sistema de equações lineares $Ax = b$, na forma equivalente $x = Hx + g$. Essa forma equivalente será detalhada no Método iterativo de Jacobi-Richardson, conforme segue.

De maneira geral, obtida a forma equivalente $x = Hx + g$, a partir de uma solução aproximada inicial $x^{(0)}$, determinamos a sequência de soluções aproximadas considerando o processo iterativo:

$$x^{(1)} = Hx^{(0)} + g$$

$$x^{(2)} = Hx^{(1)} + g$$

⋮

$$x^{(k+1)} = Hx^{(k)} + g, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Nesse caso, temos $H = (h_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ chamada de matriz iterativa e um vetor $g = (g_j)$, $i = 1, \dots, n$.

Assim, a partir de uma solução aproximada inicial $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ para a solução exata $\bar{x} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n)$ do sistema $Ax = b$, determina-se uma sequência de vetores $x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, \dots$ e espera-se que seja convergente para a solução \bar{x} , isto é,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = \bar{x}$$

Apresentamos a seguir alguns resultados e definições necessários para entendimento do Método iterativo de Jacobi, como seguem:

Definição 2.2 Norma de vetores

A norma de um vetor $x \in V$ (espaço vetorial) é uma função $\| \cdot \| : V \rightarrow \mathfrak{R}^+$, satisfazendo às seguintes condições:

a) $\| x \| \geq 0; \| x \| = 0 \Leftrightarrow x = 0, \forall x \in V$

$$b) \|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|; \forall \alpha \in \mathfrak{R}, \forall x \in V$$

$$c) \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|; \forall x, y \in V$$

Exemplos de normas:

Considere o espaço \mathfrak{R}^n formado pelos vetores $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$:

Temos as seguintes normas de vetores:

$$\|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n| = \sum_{i=1}^n |x_i|$$

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2}$$

$$\|x\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|\} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$$

Essas normas são chamadas de norma 1, norma 2 ou Euclidiana e norma infinita, respectivamente.

Observação

Podemos interpretar as normas definidas anteriormente no \mathfrak{R}^2 , bastando, para isso, representar o ponto $x = (x_1, x_2)^t$ no plano e observar, por exemplo, que a norma 2 é a distância entre o ponto x e a origem do sistema de coordenadas.

Exemplo 2.10

Considere $x = (x_1, x_2, x_3) = (-1, 2, -4) \in \mathfrak{R}^3$.

Calculando as normas do vetor x , obtemos:

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^3 |x_i| = |-1| + |2| + |-4| = 7$$

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^3 |x_i|^2 \right)^{1/2} = \sqrt{1^2 + 2^2 + 4^2} = \sqrt{21}$$

$$\|x\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, |x_3|\} = \max\{1, 2, 4\} = 4$$

Definição 2.3 Sequência convergente

Dizemos que uma sequência de vetores $x^{(i)} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^{(i)} \in \mathfrak{R}^n$ con-

verge para o vetor $\bar{x} = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \dots, \bar{x}_n) \in \mathfrak{R}^n$ se

$$\|x^{(i)} - \bar{x}\| \rightarrow 0, \text{ quando } i \rightarrow \infty, \text{ para qualquer norma em } \mathfrak{R}^n.$$

Exemplo 2.11

Considere a sequência $x^{(i)} = \left(\frac{1}{i}, 0, 0, \dots, 0\right) \in \mathfrak{R}^n, i = 1, 2, \dots$

Temos que, à medida que $i \rightarrow \infty$, a sequência converge para o vetor $\bar{x} = (0, 0, \dots, 0)$.

Ou ainda,

Como $\|x^{(i)} - \bar{x}\| = \frac{1}{i}$, temos $\|x^{(i)} - \bar{x}\| \rightarrow 0$, quando $i \rightarrow \infty$.

Definição 2.4 Norma de matriz

Considere o espaço $\mathfrak{R}(n, n)$ das matrizes quadradas $A = (a_{i,j})$ $i, j = 1, \dots, n$.

Definimos as seguintes normas de matrizes:

$$\|A\|_1 = \|A\|_C = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$$

$$\|A\|_\infty = \|A\|_L = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

Essas normas são chamadas norma coluna e norma linha, respectivamente.

Exemplo 2.12

Considere a matriz A:

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

Então,

$$\|A\|_1 = \|A\|_C = \max_{1 \leq j \leq 3} \sum_{i=1}^3 |a_{ij}| = \max_{1 \leq j \leq 3} \{3, 5, 8\} = 8$$

$$\|A\|_{\infty} = \|A\|_L = \max_{1 \leq i \leq 3} \sum_{j=1}^3 |a_{ij}| = \max_{1 \leq i \leq 3} \{6, 3, 7\} = 7$$

Definição 2.5 Normas consistentes

Considere uma norma de um vetor $x \in \mathfrak{R}^n$ e uma norma de uma matriz $A \in \mathfrak{R}(n, n)$. Dizemos que essas normas são consistentes se:

$$\|Ax\| \leq \|A\| \|x\|, \forall A \in \mathfrak{R}(n, n) \text{ e } \forall x \in \mathfrak{R}^n.$$

Propriedade

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|, \forall A, B \in \mathfrak{R}(n, n).$$

Definição 2.6 Matriz estritamente diagonalmente dominante

Dizemos que uma matriz $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ é estritamente diagonalmente dominante se:

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}|,$$

Exemplo 2.13

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

Usando a definição 2.6, temos que:

$$i = 1 \rightarrow |-4| > |1| + |0|$$

$$i = 2 \rightarrow |-2| > |1| + |0|$$

$$i = 3 \rightarrow |3| > |1| + |1|$$

Portanto, concluímos que a matriz dada é estritamente diagonalmente dominante.

2.4.1 Método iterativo de Jacobi-Richardson

Considere o sistema de equações lineares $Ax = b$, em que $A = (a_{ij})$, $i, j = 1, \dots, n$ é a matriz dos coeficientes com $\det(A) \neq 0$ e com os elementos da diagonal principal $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \dots, n$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ é o vetor incógnita transposto e $b = (b_1, b_2, \dots, b_n)^t$ é o vetor dos termos independentes transposto.

Representamos o sistema dado na seguinte forma:

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

O Método iterativo de Jacobi consiste em escrevermos o sistema $Ax = b$ na forma equivalente $x = Hx + g$, como segue:

Dividindo cada linha pelo elemento da diagonal e explicitando x_1 na 1ª equação, x_2 na 2ª equação, x_3 na 3ª equação e até x_n na n-ésima equação, temos:

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

Na forma matricial temos:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{21}}{a_{11}} & -\frac{a_{31}}{a_{11}} & \dots & -\frac{a_{n1}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \dots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

Assim, podemos escrever $x = Hx + g$, em que

$$h_{ij} = \begin{cases} 0, & i = j \\ -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}, & i \neq j \end{cases}$$

é chamada de matriz iterativa e $g_i = \frac{b_i}{a_{ii}}, i = 1, \dots, n$

Podemos escrever o processo iterativo de Jacobi como segue:

$$x^{(k+1)} = Hx^{(k)} + g \quad k = 1, 2, \dots$$

Assim:

$$\begin{pmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{21}}{a_{11}} & -\frac{a_{31}}{a_{11}} & \dots & -\frac{a_{n1}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \dots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & & & & \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}$$

Podemos, ainda, escrevê-lo na seguinte forma:

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

Estudo da convergência

Teorema 2.2

Seja uma norma matricial consistente com alguma norma vetorial e $x^{(0)} \in \mathfrak{R}^n$ uma solução aproximada inicial qualquer para o sistema de equações. Se $\|H\| < 1$, então a sequência de soluções aproximadas definida pelo processo iterativo $x^{(k+1)} = Hx^{(k)} + g, k = 0, 1, 2, \dots$ converge para a solução \bar{x} do sistema de equações $Ax = b$.

Prova: Referência [1].

Resultado:

É possível provar que se a matriz A do sistema $Ax = b$ for estritamente diagonalmente dominante, então o Método de Jacobi-Richardson gera uma sequência de soluções aproximadas convergente para a solução do sistema, pois sempre temos $\|H\|_{\infty} < 1$.

Apresentamos de forma detalhada o Algoritmo do Método de Jacobi-Richardson, observando que o critério de parada na sequência gerada de vetores é o erro relativo visto anteriormente, apenas usamos a notação de norma, pois estamos trabalhando com sequência de vetores.

Algoritmo 2.5

a) Forneça uma solução inicial aproximada $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})$ e $\varepsilon > 0$ uma tolerância fixa.

Faça $k = 0$ e PARE = FALSO

b) Construção da sequência de soluções aproximadas:

Enquanto PARE = FALSO, faça:

Para $i = 1, \dots, n$ faça:

$$x_i^{(k+1)} = \left(\sum_{j=1}^{i-1} -a_{ij} x_j^{(k)} + \sum_{j=i+1}^n -a_{ij} x_j^{(k)} \right) / a_{ii} + \frac{b_i}{a_{ii}}$$

Se $\frac{\|x^{(k+1)} - x^{(k)}\|}{\|x^{(k+1)}\|} \leq \varepsilon$, então PARE = VERDADE

Senão $k = k + 1$

Exemplo 2.14

Considere o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 1 \\ 1 & 4 & 1 \\ 1 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ -4 \end{bmatrix}$$

Usando o Método iterativo de Jacobi, podemos a partir de uma solução aproximada inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)})^t = (0, 0, 0)^t$ calcular uma solução aproximada para o sistema dado com uma precisão $\varepsilon = 10^{-1}$.

Assim, a construção da matriz iterativa H é dada por:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & -1/4 \\ -1/4 & 0 & -1/4 \\ -1/5 & -1/5 & 0 \end{bmatrix}$$

e para verificar a condição de convergência temos:

$$\|H\|_L = \|H\|_\infty = \max_i \sum_{j=1}^3 |h_{ij}| = \max_i \{2/4, 2/4, 2/5\} = 0.5 < 1$$

Portanto, a sequência de soluções aproximadas é convergente para a solução do sistema dado.

Cálculo das iterações:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -\frac{1}{4}x_2^{(k)} - \frac{1}{4}x_3^{(k)} + \frac{3}{4} \\ x_2^{(k+1)} = -\frac{1}{4}x_1^{(k)} - \frac{1}{4}x_3^{(k)} + 0 \\ x_3^{(k+1)} = -\frac{1}{5}x_1^{(k)} - \frac{1}{5}x_2^{(k)} - \frac{4}{5} \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Para $k = 0$ e tomando $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0, 0)^t$, temos $\mathbf{x}^{(1)} = \left(\frac{3}{4}, 0, -\frac{4}{5}\right)^t$

Teste de parada: $\frac{\|\mathbf{x}^{(1)} - \mathbf{x}^{(0)}\|_\infty}{\|\mathbf{x}^{(1)}\|_\infty} = 1 > 10^{-1}$

Para $k=1$, temos:

$$\begin{cases} x_1^{(2)} = -\frac{1}{4}x_2^{(1)} - \frac{1}{4}x_3^{(1)} + \frac{3}{4} \rightarrow x_1^{(2)} = 0.9500 \\ x_2^{(2)} = -\frac{1}{4}x_1^{(1)} - \frac{1}{4}x_3^{(1)} + 0 \rightarrow x_2^{(2)} = 0.0125 \\ x_3^{(2)} = -\frac{1}{5}x_1^{(1)} - \frac{1}{5}x_2^{(1)} - \frac{4}{5} \rightarrow x_3^{(2)} = -0.9500 \end{cases}$$

Portanto,

$$x^{(2)} = (0.9500, 0.0125, -0.9500)^t$$

$$\frac{\|x^{(2)} - x^{(1)}\|_{\infty}}{\|x^{(2)}\|_{\infty}} = 0.2000 > 10^{-1}$$

Assim, sucessivamente, calculamos:

Para $k=3$, temos:

$$\begin{cases} x_1^{(3)} = -\frac{1}{4}x_2^{(2)} - \frac{1}{4}x_3^{(2)} + \frac{3}{4} \rightarrow x_1^{(3)} = 0.9844 \\ x_2^{(3)} = -\frac{1}{4}x_1^{(2)} - \frac{1}{4}x_3^{(2)} + 0 \rightarrow x_2^{(3)} = 0.0000 \\ x_3^{(3)} = -\frac{1}{5}x_1^{(2)} - \frac{1}{5}x_2^{(2)} - \frac{4}{5} \rightarrow x_3^{(3)} = -0.9925 \end{cases}$$

Portanto,

$$x^{(3)} = (0.9844, 0.0000, -0.9925)^t$$

$$\frac{\|x^{(3)} - x^{(2)}\|_{\infty}}{\|x^{(3)}\|_{\infty}} = 0.0400 < 10^{-1}, \text{ então pare.}$$

Logo, $\bar{x} \cong x^{(3)} = (0.9844, 0.0000, -0.9925)^t$ é a solução aproximada para o sistema dado com a precisão $\varepsilon = 10^{-1}$.

Observação

Podemos observar que a sequência de soluções aproximadas $x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}, \dots$ converge para a solução do sistema de equações $\bar{x} = (1, 0, -1)^t$.

Observação

Os métodos iterativos devem ser aplicados na resolução de um sistema de equações lineares $Ax = b$ quando este apresentar a matriz A de grande porte e esparsa, isto é, uma matriz com muitos elementos em que a maioria deles são nulos.

Nesse caso, quando determinamos a matriz iterativa H , esta contém muitos elementos nulos, o que diminui o esforço computacional. Caso contrário, devemos utilizar os métodos diretos vistos anteriormente.

2.5 Exercícios

1. Considere o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} -5 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 5 \end{bmatrix}$$

- Verifique as condições de aplicabilidade do Método de Decomposição LU para o sistema dado.
- Caso possível, resolvê-lo usando o Método de Decomposição LU.

2. Determinar a inversa da matriz A do exercício 1), usando o Método de Decomposição LU.

3. Resolver o seguinte sistema de equações lineares usando o Método de Eliminação de Gauss.

$$\begin{bmatrix} 0 & 6 & -1 & 2 \\ 0 & 5 & -1 & 1 \\ 2 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

4. Desenvolva o Método de Gauss-Jordan para resolução de sistemas de equações lineares e faça um exemplo. Referência [1].

5. Considere o sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 0 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Faça trocas de linhas e, caso possível, resolva o sistema usando o Método de Decomposição LU.
- Determinar a inversa de A, usando o Método de Gauss-Jordan.
- Faça trocas de linhas e, em caso de convergência garantida, resolva o sistema usando o Método Iterativo de Jacobi com uma solução inicial dada e $\varepsilon = 0.1$.

6. Considere o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} -9 & 2 & 2 \\ 1 & 3 & 0 \\ -1 & 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -5 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Caso haja convergência garantida para o Método Iterativo de Jacobi, resolva o sistema dado a partir da solução inicial $x^{(0)} = (0 \ 0 \ 0)$ e $\varepsilon = 0.1$.

7. Mostre que $\|x\|_{\infty} \leq \|x\|_1 \leq n\|x\|_{\infty}$, $x \in R^n$.

8. Considere duas cidades C_1 e C_2 com produções de lixo de 8 e 5 toneladas, respectivamente. Numa área apropriada existem dois aterros A_1 e A_2 com capacidades de processar 7 e 6 toneladas de lixo, respectivamente. Deseja-se saber quais as quantidades de lixo devem ser enviadas das cidades C_1 e C_2 para os aterros A_1 e A_2 de forma que todo o lixo seja transportado.

- Escreva a formulação matemática correspondente do problema dado.
- Resolvê-lo usando o Método de Eliminação de Gauss.
- Interprete os resultados obtidos.
- Resolva o problema dado, com o Software Matlab, usando o Método de Gauss-Jordan.
- Resolva o problema dado, com o Software Numérico, usando o Método de Eliminação de Gauss – Referência [1].

9. Faça um mapa conceitual detalhado sobre solução numérica de sistemas de equações lineares, considerando os métodos vistos, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

UNIDADE 3

Solução Numérica de Equações

3.1 Introdução

Nas diversas áreas científicas, frequentemente deparamo-nos com problemas reais envolvendo a resolução de equações, isto é, dada a equação $f(x) = 0$, desejamos determinar a solução (ou soluções) real \bar{x} , tal que $f(\bar{x}) = 0$. Por exemplo, consideremos a equação $f(x) = \text{sen}(x) - \ln(x) + 2 = 0$, desejamos determinar a solução real \bar{x} , tal que $f(\bar{x}) = \text{sen}(\bar{x}) - \ln(\bar{x}) + 2 = 0$.

Métodos iterativos são desenvolvidos para determinar aproximadamente essa solução real \bar{x} , embora tenhamos métodos iterativos específicos para determinar a solução \bar{x} , quando esta é um número complexo.

Métodos iterativos são apresentados para determinar a solução \bar{x} , quando esta é um valor real, e para isso, necessitamos de uma solução aproximada inicial x_0 , a partir da qual geramos uma sequência $\{x_n\}$, $n = 1, 2, \dots$ de soluções aproximadas, que sob determinadas condições teóricas converge para a solução desejada \bar{x} .

A solução inicial x_0 pode ser obtida através de recursos gráficos, no qual localizamos uma vizinhança ou um intervalo $[a, b]$ em que encontra-se a solução \bar{x} , conforme exibimos na Figura 3.1:

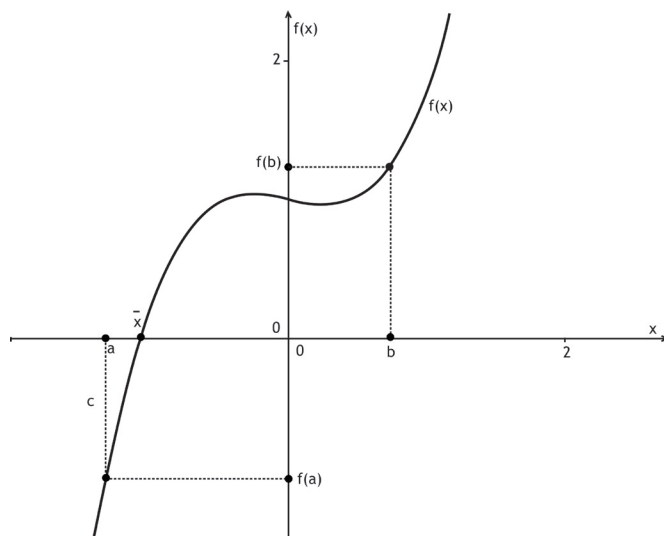


Figura 3.1 Raiz de uma função.

Observando a Figura 3.1, vemos que a solução \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = 0$ encontra-se onde a função $f(x)$ corta o eixo das abscissas, isto é, um intervalo em que os valores da função possui sinais opostos.

Podemos, então, tomar uma solução inicial x_0 nas vizinhanças dessa raiz, isto é, no intervalo $[a, b]$, para inicializar a sequência de soluções aproximadas durante aplicação dos métodos iterativos que serão apresentados posteriormente.

Para ilustrar a solução numérica de equações, considere o problema de nível de oxigênio em um rio, conforme Figura 3.2



Figura 3.2 Rio contaminado.

Sabendo-se que para calcular o nível de oxigênio N (mg/L) em um rio a jusante de uma carga de esgoto, podemos usar a seguinte função:

$$N(x) = 10 - 20(e^{-0.15x} - e^{-0.5x})$$

em que x é a distância a jusante em quilômetros, conforme Figura 3.3:

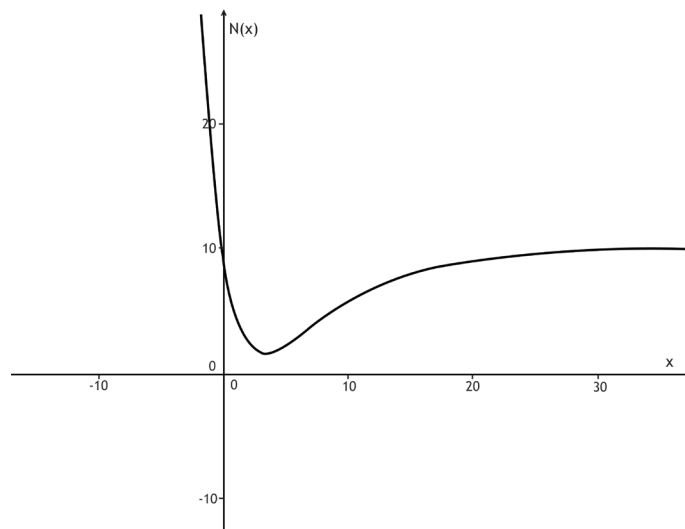


Figura 3.3 Nível de oxigênio de um rio.

- Deseja-se determinar a jusante em que o nível do oxigênio cai pela primeira vez até uma leitura de 5 mg/L, observando-se quais níveis de oxigênio abaixo de 5 mg/L são prejudiciais aos peixes e ao ecossistema aquático.
- Deseja-se determinar a distância a jusante na qual o oxigênio está no valor mínimo. Qual a concentração de oxigênio nessa posição?

Definição 3.1

Dizemos que \bar{x} é uma raiz, ou um zero, da função $f(x)$ se $f(\bar{x}) = 0$.

Exemplo 3.1

Seja $f(x) = x^2 - 5 = 0$. Temos que as raízes da equação $x^2 - 5 = 0$ são: $\bar{x} = \pm\sqrt{5} \cong 2.236067977$, e nesse caso $f(\bar{x}) \cong 0$.

3.2 Localização das raízes: Método Gráfico

Para localizar uma vizinhança para a raiz de $f(x)$, traçamos o gráfico de $f(x)$; assim, os pontos em que este corta o eixo das abscissas nos informam a raiz (as raízes) de $f(x)$.

Considere o exemplo anterior, $f(x) = x^2 - 5$, e temos as raízes $\bar{x} = \pm\sqrt{5}$, conforme gráfico ilustrado na Figura 3.4:

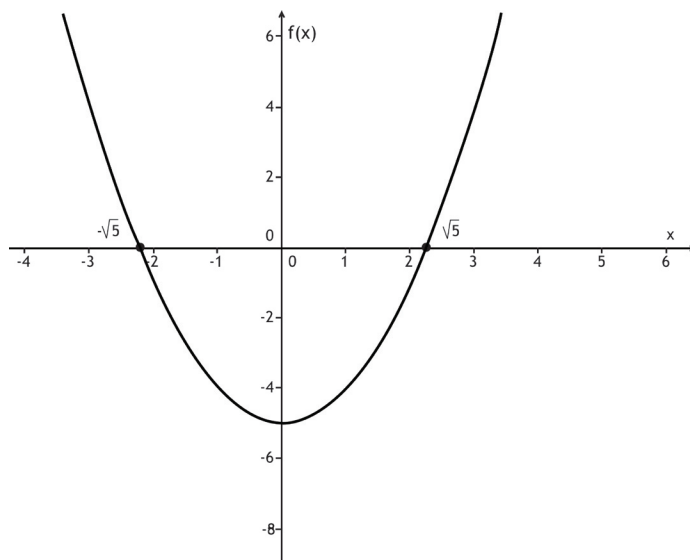


Figura 3.4 Raízes de uma função.

Observando a Figura 3.4, vemos que o gráfico de $f(x)$ permite identificar onde estão aproximadamente as raízes de $f(x)$. Nesse caso, temos as raízes $\bar{x} = \pm\sqrt{5} \cong 2.236067977$ com $f(\bar{x}) \cong 0$.

Podemos ainda transformar a equação $f(x) = 0$ na forma equivalente, na igualdade de outras funções $f_1(x) = f_2(x)$. Os pontos de interseção dos gráficos $f_1(x)$ e $f_2(x)$ serão as raízes procuradas, conforme exemplo a seguir:

Exemplo 3.2

Considere a equação $f(x) = 4x - e^x = 0$.

Podemos escrever a equação dada na forma equivalente $4x = e^x$, isto é, $f_1(x) = f_2(x)$, com $f_1(x) = 4x$ e $f_2(x) = e^x$, conforme gráfico da Figura 3.5:

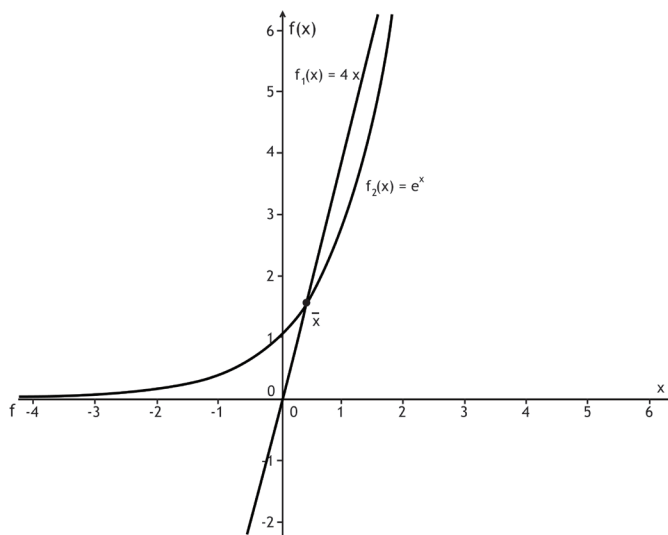


Figura 3.5 Intersecção de gráficos de funções.

Observando a Figura 3.5, vemos que a raiz \bar{x} encontra-se na intersecção dos gráficos de $f_1(x)$ e $f_2(x)$.

3.3 Métodos numéricos para resolução de equações

Nesta unidade apresentaremos alguns dos principais métodos para resolver numericamente uma equação.

3.3.1 Método da Bisseção

Considere a função $f: \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R}$ uma função contínua. Desejamos resolver a equação $f(x) = 0$, isto é, determinar uma solução \bar{x} real tal que $f(\bar{x}) = 0$.

O Método da Bisseção é baseado no Teorema do Valor Intermediário, o qual afirma que se uma função é contínua no intervalo $[a, b]$, e satisfaz a condição $f(a)f(b) < 0$, valores de $f(a)$ e $f(b)$ com sinais opostos, então existe $\bar{x} \in (a, b)$ tal que $f(\bar{x}) = 0$, isto é, existe ao menos uma raiz no intervalo $[a, b]$, conforme ilustrado na Figura 3.6.

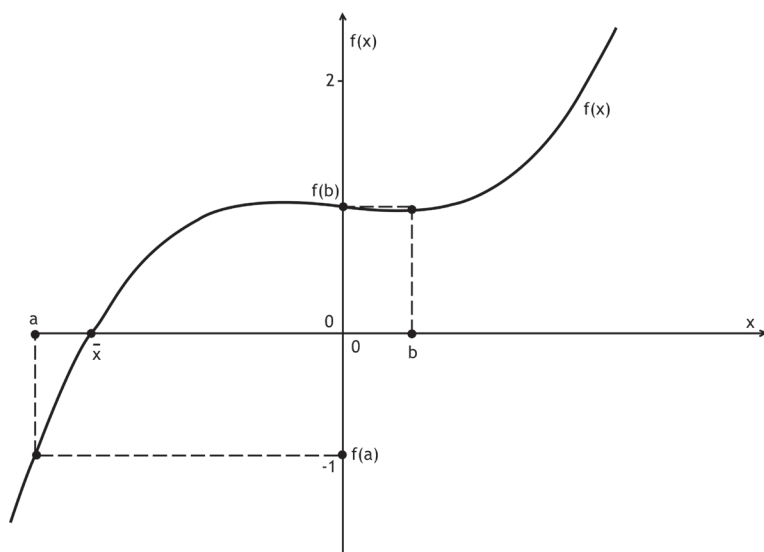


Figura 3.6 Intervalo contendo uma raiz da função $f(x)$.

O Método da Bisseção consiste em localizar inicialmente um intervalo $[a, b]$, em que se encontra a raiz \bar{x} , e determinar uma sequência de intervalos $[r_i, s_i], i = 0, 1, \dots$, em que $r_0 = a$ e $s_0 = b$, de forma que a amplitude do intervalo numa iteração seja igual à metade da amplitude do intervalo anterior e que sempre contenha a raiz \bar{x} .

A sequência de intervalos será calculada até que a amplitude do intervalo seja menor do que uma tolerância ε preestabelecida.

As sequências r_i, s_i e x_i são construídas a partir de um intervalo inicial $[r_0, s_0]$ tal que $f(r_0)f(s_0) < 0$, conforme Figura 3.7:

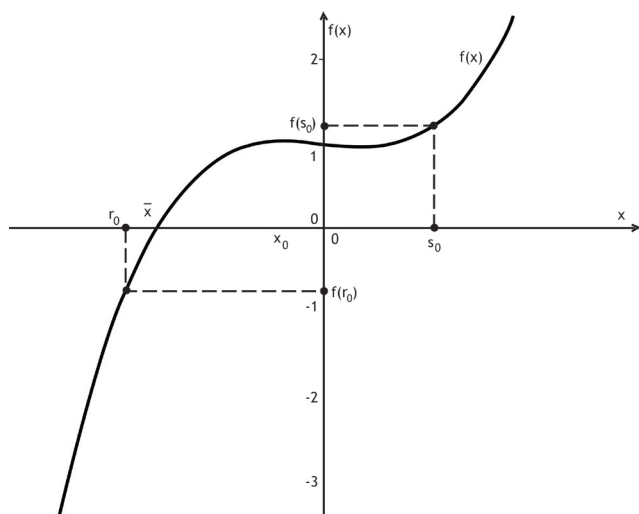


Figura 3.7 Intervalo inicial contendo uma raiz da função $f(x)$.

Determina-se o ponto médio do intervalo $[r_0, s_0]$, dado por:

$$x_0 = (r_0 + s_0) / 2$$

A partir da solução aproximada obtida x_0 , fazemos a seguinte verificação:

Se $f(x_0) = 0$, então x_0 é uma raiz de $f(x)$

Se $f(r_0)f(x_0) < 0$, então $r_1 = r_0$ e $s_1 = x_0$

Se $f(r_0)f(x_0) > 0$, então $r_1 = x_0$ e $s_1 = s_0$

Neste momento, temos o novo intervalo $[r_1, s_1]$, cuja amplitude é igual à metade da amplitude do intervalo $[r_0, s_0]$ e que contém a raiz desejada \bar{x} .

O procedimento é repetido novamente, isto é, calcula-se o ponto médio do intervalo $[r_1, s_1]$ dado por $x_1 = (r_1 + s_1) / 2$, conforme observado na Figura 3.8.

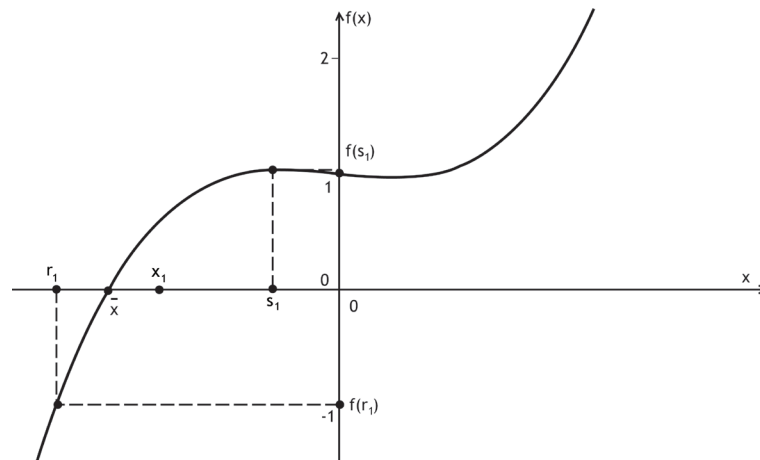


Figura 3.8 Intervalo contendo o ponto médio.

A partir da solução aproximada obtida x_1 , fazemos a seguinte verificação:

Se $f(x_1) = 0$, então x_1 é uma raiz de $f(x)$

Se $f(r_1)f(x_1) < 0$, então $r_2 = r_1$ e $s_2 = x_1$

Se $f(r_1)f(x_1) > 0$, então $r_2 = x_1$ e $s_2 = s_1$

Assim sucessivamente, temos um intervalo genérico $[r_i, s_i]$, em que calcula-se o ponto médio deste intervalo, dado por $x_i = (r_i + s_i) / 2$:

Se $f(x_i) = 0$, então x_i é uma raiz de $f(x)$

Se $f(r_i)f(x_i) < 0$, então $r_{i+1} = r_i$ e $s_{i+1} = x_i$

Se $f(r_i)f(x_i) > 0$, então $r_{i+1} = x_i$ e $s_{i+1} = s_i$

Convergência

Podemos observar que no Método da Bisseção determinamos uma raiz da equação, construindo sequências de intervalos r_i e s_i e uma sequência de soluções aproximadas $x_i, i = 0, 1, \dots$

Essa sequência de soluções aproximadas é convergente para a solução desejada, uma vez que os intervalos são divididos pelos pontos médios correspondentes e são renomeados de forma que a raiz permaneça dentro do intervalo. Ver mais detalhes na Referência [1].

Estimativa do número de iterações

O número de iterações necessárias para se obter uma raiz \bar{x} da equação $f(x) = 0$, pelo Método da Bisseção com uma precisão $\varepsilon > 0$, previamente fixada, decorre do seguinte:

Supondo-se que \bar{x} está entre x_n e s_n , temos:

$$|x_n - \bar{x}| \leq (x_n - r_n) = \frac{(s_n - r_n)}{2} = \frac{(s_0 - r_0)}{2^{n+1}}$$

Impondo que $\frac{s_0 - r_0}{2^{n+1}} < \varepsilon$, para garantir que $|x_n - \bar{x}| < \varepsilon$ temos:

$$\log\left(\frac{s_0 - r_0}{2^{n+1}}\right) < \log(\varepsilon)$$

ou ainda,

$$n > \frac{\log(s_0 - r_0) - \log(\varepsilon)}{\log 2} - 1$$

Logo, n é o número mínimo de iterações que devem ser realizadas para obter \bar{x} com uma precisão ε .

Algoritmo 3.1

1. Dados $\varepsilon > 0$, o intervalo inicial $[r_0, s_0]$ que contenha a raiz, isto é, $f(r_0)f(s_0) < 0$. Faça Pare = Falso, $i = 0$
2. Enquanto Pare = Falso faça:
 - 2.1 Determine $x_i = (r_i + s_i)/2$

2.2 Se $|f(x_i)| \leq \varepsilon$, então Pare = Verdade

Senão

Se $f(r_i)f(x_i) < 0$, então $r_{i+1} = r_i$ e $s_{i+1} = x_i$

Senão $r_{i+1} = x_i$ e $s_{i+1} = s_i$

2.3 Se $\frac{|x_{i+1} - x_i|}{|x_{i+1}|} < \varepsilon < \varepsilon$ então Pare = Verdade

Senão $i = i + 1$

Exemplo 3.3

Considere a seguinte função $f(x) = 4x - e^x$.

Usando o Método da Bisseção, podemos determinar \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = 0$ com uma precisão $\varepsilon = 0.01$, conforme segue:

a) Inicialmente determinamos graficamente uma vizinhança para a raiz, consideramos a forma equivalente $4x = e^x$, ou seja, $f_1(x) = 4x$ e $f_2(x) = e^x$, conforme ilustrado anteriormente na Figura 3.5.

Observando a Figura 3.5, podemos concluir que a raiz \bar{x} encontra-se na intersecção dos gráficos $f_1(x)$ e $f_2(x)$, e pertence ao intervalo $[0, 1]$.

b) Considerando o intervalo inicial $r_0 = 0$ e $s_0 = 1$, temos $f(0)f(1) < 0$, pois $f(0) = -1$ e $f(1) = 1.2817$ e, portanto, temos realmente uma raiz no intervalo $[0, 1]$. Observe que a função $f(x) = 4x - e^x$ é contínua no intervalo dado.

c) Construindo a sequência de soluções aproximadas, temos que $x_0 = (r_0 + s_0) / 2 = (0 + 1) / 2 = 0.5000$ é uma solução inicial.

Como $f(r_0)f(x_0) = (-1)(0.3513) < 0$, temos que o novo intervalo r_1 e s_1 será dado por:

$$\begin{cases} r_1 = r_0 = 0 \\ s_1 = x_0 = 0.5 \end{cases}$$

Calculamos a nova solução aproximada, conforme segue:

$$x_1 = (r_1 + s_1) / 2 = (0 + 0.5) / 2 = 0.2500$$

Novamente, verificamos o critério de parada: $\frac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 1 > \varepsilon$, e como este não está satisfeito, repetimos o processo para calcular as novas soluções aproximadas, como segue:

Como $f(r_1)f(x_1) = (-1)(-0.2840) > 0$, temos que o novo intervalo r_2 e s_2 será dado por:

$$\begin{cases} r_2 = x_1 = 0.25 \\ s_2 = s_1 = 0.5 \end{cases}$$

Calculamos o ponto médio do intervalo $[r_2, s_2]$ e temos:

$$x_2 = (r_2 + s_2) / 2 = (0.25 + 0.5) / 2 = 0.3750$$

Verificamos novamente o critério de parada, dado por $\frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.3333 > \varepsilon$, e como este não está satisfeito, sucessivamente repetimos o processo de cálculo das novas soluções aproximadas, como exibidas a seguir:

$$x_3 = 0.3125 \rightarrow \frac{|x_3 - x_2|}{|x_3|} = 0.2000 > \varepsilon$$

$$x_4 = 0.3438 \rightarrow \frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} = 0.0910 > \varepsilon$$

$$x_5 = 0.3594 \rightarrow \frac{|x_5 - x_4|}{|x_5|} = 0.0434 > \varepsilon$$

$$x_6 = 0.3516 \rightarrow \frac{|x_6 - x_5|}{|x_6|} = 0.0222 > \varepsilon$$

$$x_7 = 0.3555 \rightarrow \frac{|x_7 - x_6|}{|x_7|} = 0.0110 > \varepsilon$$

$$x_8 = 0.3574 \rightarrow \frac{|x_8 - x_7|}{|x_8|} = 0.0053 < \varepsilon$$

Como o critério de parada está satisfeito, temos que a solução aproximada de $f(X) = 0$ é dada por $\bar{x} \cong x_8 = 0.3574$.

Podemos calcular o número mínimo de iterações usando a expressão:

$$n > \frac{\log(s_0 - r_0) - \log(\varepsilon)}{\log 2} - 1 = 5.6439$$

Portanto, $n > 5.6439$, isto é, devemos executar no mínimo 6 iterações para obter a raiz \bar{x} com a precisão ε desejada, o que pode ser comprovado no exemplo dado anteriormente com $n = 7$ iterações.

3.3.2 Método de Newton

Seja $f: \mathfrak{R} \rightarrow \mathfrak{R}$ uma função contínua e diferenciável, desejamos determinar a raiz ou raízes de $f(x)$, ou seja, determinar \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = 0$.

O Método de Newton consiste em, a partir de uma solução inicial aproximada x_0 dada inicialmente, determinar uma sequência $\{x_i\}$, $i = 1, 2, \dots$ de soluções aproximadas para a raiz de $f(x)$ da seguinte forma:

Traçamos a reta tangente ao gráfico da função $f(x)$ no ponto x_i , e no ponto em que essa tangente cortar o eixo das abscissas, temos a primeira solução aproximada x_{i+1} para a raiz \bar{x} .

Novamente no ponto x_{i+1} traçamos a reta tangente ao gráfico de $f(x)$, e no ponto em que essa nova tangente cortar o eixo das abscissas, temos a segunda solução aproximada para a raiz, e assim sucessivamente até determinarmos, com uma tolerância prefixada ε , a raiz \bar{x} desejada.

Ilustramos graficamente, conforme Figura 3.9:

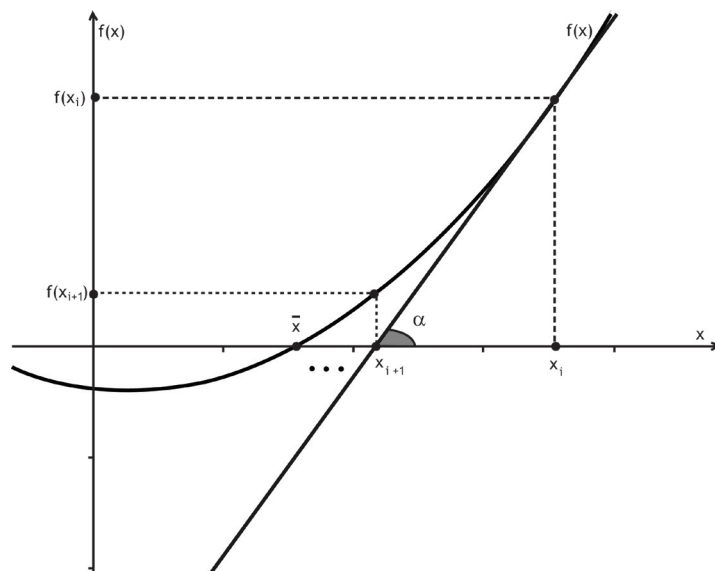


Figura 3.9 Método de Newton.

Definindo como α o ângulo formado com o eixo das abscissas através da reta tangente ao gráfico da função $f(x)$ no ponto x_i (Figura 3.9), temos:

$$\operatorname{tg}(\alpha) = \frac{f(x_i)}{(x_i - x_{i+1})}$$

Do Cálculo Diferencial Integral, sabemos que $\operatorname{tg}(\alpha)$ é a derivada da função $f(x)$ no ponto x_i , isto é, $\operatorname{tg}(\alpha) = f'(x_i)$ e, assim, podemos escrever:

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

Portanto, temos o processo iterativo chamado de Método de Newton, como segue:

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

Observação

O Método de Newton é também conhecido como **Método das tangentes**, devido a sua interpretação gráfica natural.

Convergência do Método de Newton

A convergência do Método de Newton pode ser tratada usando o Teorema de convergência do Método das Aproximações Sucessivas, o qual pode ser visto na Referência [1].

Definição 3.2 Convergência quadrática

Dizemos que um método iterativo possui convergência quadrática se $\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = k$, em que k é chamada constante assintótica de proporcionalidade, $e_i = |x_i - \bar{x}|$ e $e_{i+1} = |x_{i+1} - \bar{x}|$ são os erros cometidos nas iterações correspondentes.

Teorema 3.1

O Método de Newton possui convergência quadrática.

Prova: Referência [1].

Para observar as boas propriedades de convergência do Método de Newton, exibimos o seguinte exemplo:

Exemplo 3.4

O cálculo do número $\sqrt{3}$, usando o Método de Newton, consiste na resolução da equação $x^2 - 3 = 0$ e, usando uma tolerância fixa com $\varepsilon = 10^{-4}$, temos:

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

A partir de uma solução x_0 inicial, geramos a sequência de soluções aproximadas:

$$x_0 = 1.5000 \rightarrow \text{solução inicial dada}$$

$$x_1 = 1.7500 \rightarrow \frac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 0.1429 > \varepsilon$$

$$x_2 = 1.7321 \rightarrow \frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.0103 > \varepsilon$$

$$x_3 = 1.7321 \rightarrow \frac{|x_3 - x_2|}{|x_3|} = 0.0000 < \varepsilon$$

Como o critério de parada está satisfeito, podemos parar e observar que essa sequência converge para $\bar{x} = 1.7321 \cong \sqrt{3}$.

Dessa forma, podemos observar que à medida que os valores de x_k aproximam da raiz \bar{x} , a convergência torna-se muito rápida, isso devido à propriedade da convergência quadrática do Método de Newton.

Algoritmo 3.2

1. Defina as funções $f(x)$, $f'(x)$ e considere $\varepsilon > 0$ uma tolerância fixa.
2. Escolha x_0 uma solução inicial.

Faça Pare = Falso e $i = 0$

3. Enquanto Pare = Falso faça:

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

$$3.2 \quad \text{Se } \frac{|x_{i+1} - x_i|}{|x_{i+1}|} < \varepsilon, \text{ então Pare = Verdade}$$

Senão $i = i + 1$

Observação

O leitor pode incluir nesse algoritmo uma modificação no critério de parada, considerando o valor da função no ponto x_i , isto é, $|f(x_i)| \leq \varepsilon$.

Exemplo 3.5

Usando o Método de Newton, resolvemos a equação $\cos(x) - x = 0$ com $\varepsilon = 0.001$.

A partir do processo iterativo $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$, geramos a sequência:

$x_0 = 0.7 \rightarrow$ solução inicial dada

$$x_1 = 0.7394 \rightarrow \frac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 0.0533 > \varepsilon$$

$$x_2 = 0.7394 \rightarrow \frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.0000 > \varepsilon$$

Como o critério de parada está satisfeito, tomamos como solução aproximada para $f(x)$ a solução $\bar{x} \cong x_2 = 0.7394$.

Observação

Podemos, ainda, modificar o Método de Newton, da seguinte forma:

O valor calculado da derivada na 1ª iteração, $f'(x_0) = k$, em que $k \in \mathfrak{R}$, é fixado e substituído no processo iterativo de Newton durante as iterações:

Assim, temos:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{k}, i = 0, 1, \dots$$

o qual é conhecido como **Método Modificado de Newton**.

3.3.3 Método das Secantes

O Método das Secantes consiste em modificarmos o Método de Newton, cujo processo iterativo é dado por $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$, aproximando a derivada da função $f'(x_i)$ da seguinte forma:

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

Observe que nesse caso, estamos trocando a inclinação da reta tangente pela inclinação da reta secante à curva, conforme pode ser observado Figura 3.10 a seguir.

Substituindo a expressão aproximada da derivada $f'(x_i)$ no Método de Newton, podemos escrever:

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

Simplificando a expressão anterior obtida, temos o Método das Secantes conforme segue:

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

Assim, dados os pontos x_{i-1} e x_i , traçamos a reta secante passando por $(x_{i-1}, f(x_{i-1}))$ e $(x_i, f(x_i))$; onde esta cortar o eixo das abscissas temos a aproximação x_{i+1} para a raiz \bar{x} , conforme ilustrado na Figura 3.10.

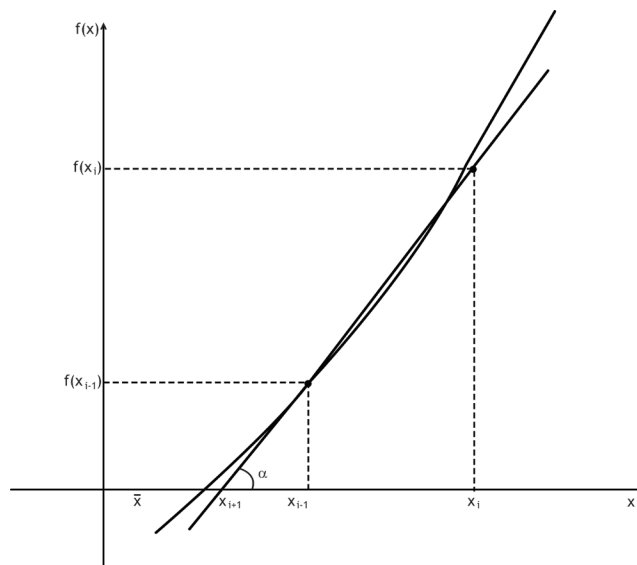


Figura 3.10 Método das Secantes.

Assim, na Figura 3.10, considerando o ângulo α formado pela reta secante à curva no eixo das abscissas, podemos escrever:

$$\operatorname{tg} \alpha = \frac{f(x_i)}{(x_i - x_{i+1})} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})}$$

Assim, temos o Método das Secantes dado por:

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

Algoritmo 3.3

1. Seja $f(x)$ contínua e $\varepsilon > 0$ uma tolerância fixa.
2. Escolha x_0 e x_1 duas soluções aproximadas iniciais.

Faça Pare = Falso e $i = 0$

3. Enquanto Pare = Falso faça:

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

$$3.2 \quad \text{Se } \frac{|x_{i+1} - x_i|}{|x_{i+1}|} < \varepsilon, \text{ então Pare = Verdade}$$

Senão $i = i + 1$

Convergência

Como o Método das Secantes é uma modificação do Método de Newton, as condições de convergência são parecidas, observando-se que não temos mais a propriedade de convergência quadrática.

Quando $f(x_k) \cong f(x_{k-1})$, podemos ter problemas de convergência, isto é, a sequência gerada pelo método pode divergir.

Exemplo 3.6

Considere a equação $x^2 + 4x + 3 = 0$; usando o Método das Secantes com $\varepsilon = 0.01$, podemos resolver essa equação conforme segue:

Podemos escrever a equação dada na forma equivalente $x^2 = -4x - 3$.

Chamando $f_1(x) = x^2$ e $f_2(x) = -4x - 3$, temos uma vizinhança para as raízes, na intersecção dos gráficos de $f_1(x)$ e $f_2(x)$, conforme Figura 3.11:

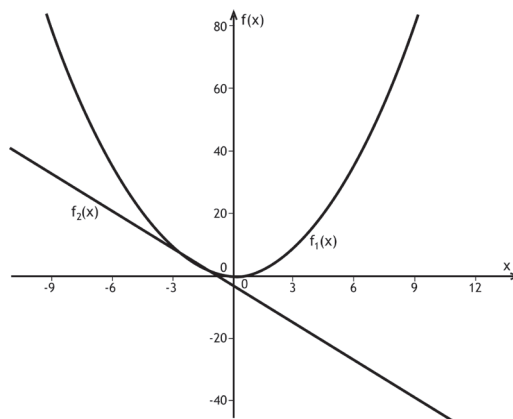


Figura 3.11 Localização de raízes.

Usando o processo iterativo do Método das Secantes $x_{i+1} = \frac{x_{i-1}f(x_i) - x_i f(x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$ e tomando como soluções iniciais $x_0 = -0.5$ e $x_1 = -2.0$, obtemos a solução aproximada x_2 para a raiz, como segue:

$$x_2 = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{(-0.5)(-1) - (-2)(1.25)}{(-1) - (1.25)} = \frac{3}{-2.25} = -1.3333$$

Calculamos o critério de parada, dado por:

$$\frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.5000 > \varepsilon$$

Como o critério de parada não está satisfeito, determinamos as demais soluções aproximadas, como seguem:

$$x_3 = -0.5001 \rightarrow \frac{|x_3 - x_2|}{|x_3|} = 1.6661 > \varepsilon$$

$$x_4 = -1.0769 \rightarrow \frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} = 0.5356 > \varepsilon$$

$$x_5 = -1.0159 \rightarrow \frac{|x_5 - x_4|}{|x_5|} = 0.0600 > \varepsilon$$

$$x_6 = -0.9996 \rightarrow \frac{|x_6 - x_5|}{|x_6|} = 0.0163 > \varepsilon$$

$$x_7 = -1.0000 \rightarrow \frac{|x_7 - x_6|}{|x_7|} = 0.0004 < \varepsilon$$

Como o critério de parada está satisfeito, temos a solução da equação $\bar{x} = -1.0000$.

Observação

Podemos também determinar a outra raiz negativa, conforme exibida no gráfico da Figura 3.10, apenas mudando as soluções iniciais e novamente usando o processo iterativo do Método das Secantes, até o critério de parada ser satisfeito.

3.4 Exercícios

1. Usando os métodos da Bisseção, de Newton e das Secantes, resolva a equação $3\cos(x) - e^{-0.4x} = 0$ e $\varepsilon = 0.1$. Localize graficamente uma vizinhança para as raízes.

2. Seja a função $f(x) = e^{x-2} + x^5 - 4$. Determine o valor de x em que a função $f(x) = 2$, usando o Método de Newton com $\varepsilon = 0.001$.

3. Determine \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = 0$, em que $f(x) = x^3 - \cos(x) + 2$, usando:

- Método da Bisseção com $\varepsilon = 0.1$
- Método de Newton com $\varepsilon = 0.001$
- Método das Secantes com $\varepsilon = 0.01$.

4. Determine um ponto da função $f(x) = 6x^4 - 3x^3 - 2x - 3$, em que a primeira derivada de $f(x)$ se anula, usando o Método de Newton com $\varepsilon = 0.001$. O ponto encontrado é um ponto de mínimo da função dada? Justifique teoricamente suas afirmações.

5. Considere a função $f(x) = 3x^2 + \text{sen}(x) - 2$. Localize graficamente uma vizinhança para as raízes de $f(x)$.

- Determine a raiz negativa de $f(x)$ usando o Método de Newton com $\varepsilon = 0.001$.
- Determine a raiz positiva usando o Método das Secantes, com $\varepsilon = 0.1$.

6. Determine as raízes da função $f(x) = 0.2x^3 - 3.006x^2 + 15.06x - 25.15$, usando um dos métodos vistos com $\varepsilon = 0.001$.

7. Considere a função $f(x) = x - \text{sen}(x) - 0.5$. Determine \bar{x} tal que $f(\bar{x}) = 0$, usando:

- Método das Secantes com $\varepsilon = 0.01$.

b) Método de Bisseção com $\varepsilon = 0.1$.

c) Determine uma raiz para $f(x)$ dada, com o Software Numérico, usando o Método de Newton e $\varepsilon = 0.0001$ – Referência [1].

8. A concentração de bactérias poluentes C em um lago diminui de acordo com a seguinte função:

$$C(t) = 75e^{-1.5t} + 20e^{-0.075t}$$

Deseja-se determinar o tempo necessário para que a concentração de bactérias seja reduzida ao valor de 15.

a) Resolva o problema usando o método gráfico.

b) Resolva o problema usando o Método de Newton com aproximação inicial $t = 6$ e $\varepsilon = 0.001$.

9. Usando o Software Matlab, plote o gráfico e determine uma raiz das funções abaixo:

a) $f(x) = 1/[(x - 0.3)^2 + 0.01] + [1/(x - 0.9)^2 + 0.04] - 6$

b) $f(x) = e^x - \cos(x) - 2$

c) $f(x) = 2x^3 + \ln(x) - 5$

d) $f(x) = x^5 - 6.7x^4 + 8.4x^3 - 10.8x^2 + 8x - 6.8$

10. Faça um mapa conceitual detalhado sobre solução numérica de equações, considerando os métodos vistos, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

UNIDADE 4

Interpolação e Aproximação de funções

4.1 Introdução

Apresentamos nesta unidade a aproximação de uma função de uma variável real por outras funções mais simples, de modo que operações em geral sejam realizadas com mais facilidade.

Essa situação ocorre quando temos uma função $f(x)$ e esta apresenta um grau de dificuldade, por exemplo, para avaliar em pontos, derivar ou ainda integrar, ou mesmo quando conhecemos essa função em um número finito de pontos de um intervalo $[a, b]$, geralmente obtida em experimentos, sem o conhecimento de sua forma analítica.

Dessa forma, essa função será aproximada por funções polinomiais, exponenciais, trigonométricas, etc., que representarão a função original, e para obter qualquer informação sobre a função original, utilizamos a sua forma aproximada.

Exibimos nesta unidade apenas a aproximação de uma função $f(x)$, utilizando funções polinomiais, pela simplicidade no tratamento, continuidade e diferenciabilidade dessas funções, embora possamos estudar outros tipos de aproximações, como as indicadas nas Referências.

Posteriormente, apresentaremos o Método dos Mínimos Quadrados para aproximação de uma função definida em um número finito de pontos, e nesse caso, consideramos a minimização da soma dos quadrados dos erros nos pontos.

Como ilustração, apresentamos o problema da temperatura em um lago, conforme Figura 4.1.



Figura 4.1 Lago.

A temperatura $T(^{\circ}\text{C})$ em um lago numa determinada região e época do ano é dada em função da profundidade $P(\text{m})$, conforme dados a seguir:

T(°C)	23.8	22.8	21.8	20.8	19.8	18.7	11.1
P(m)	0	2.3	4.9	9.1	13.7	18.3	22.9

Deseja-se saber qual a profundidade do lago nas temperaturas 17.3°C e 13.4°C, que não foram medidas.

Como tais valores não se encontram na tabela, para resolver esse problema, necessitamos do conhecimento de interpolação, como segue:

4.2 Interpolação Polinomial

Considere uma função $f(x)$ definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos de um intervalo $[a, b]$, e denotamos $y_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots, n$ conforme representação na Figura 4.2:

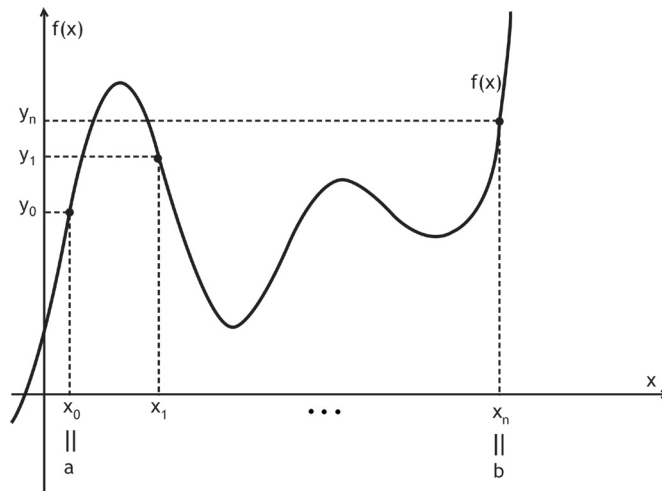


Figura 4.2 Valores da função $f(x)$ nos pontos de interpolação.

Desejamos aproximar a função $f(x)$ definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos de um intervalo $[a, b]$ por um polinômio $P(x)$ de grau menor ou igual n , tal que este coincida com a função nesses pontos, isto é, $P(x_i) = f(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \dots, n$.

O Teorema seguinte garante a existência e a unicidade do polinômio que desejamos determinar.

Teorema 4.1 Existência e Unicidade

Considere uma função $f(x)$ definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos de um intervalo $[a, b]$, então existe um único polinômio $P(x)$ de grau menor ou igual a n , tal que $P(x_i) = f(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \dots, n$.

Prova:

Seja um polinômio de grau n , $P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$, tal que $P(x_i) = f(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \dots, n$.

Dessa forma, para que o polinômio coincida com a função nos $n+1$ pontos, temos:

$$\begin{cases} a_n x_0^n + a_{n-1} x_0^{n-1} + \dots + a_1 x_0 + a_0 = y_0 \\ a_n x_1^n + a_{n-1} x_1^{n-1} + \dots + a_1 x_1 + a_0 = y_1 \\ \vdots \\ a_n x_n^n + a_{n-1} x_n^{n-1} + \dots + a_1 x_n + a_0 = y_n \end{cases}$$

Podemos observar que obtemos um sistema de equações lineares $Ax = b$, em que $x = (a_n, a_{n-1}, \dots, a_0)^t$, $b = (y_0, y_1, \dots, y_n)^t$ e a matriz A dada por:

$$A = \begin{bmatrix} x_0^n & x_0^{n-1} & \dots & x_0 & 1 \\ x_1^n & x_1^{n-1} & \dots & x_1 & 1 \\ \vdots & & & & \\ x_n^n & x_n^{n-1} & \dots & x_n & 1 \end{bmatrix}$$

O $\det(A)$, chamado de determinante de Vandermonde, é dado por

$$\det(A) = \prod_{i < j} (x_i - x_j) = (x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \dots (x_{n-1} - x_n)$$

Como os pontos $x_i, i = 0, 1, \dots, n$ são distintos, podemos mostrar que $\det(A) \neq 0$, o que significa que o sistema linear possui uma única solução e, portanto, os coeficientes a_0, a_1, \dots, a_n do polinômio são únicos, dados pela resolução desse sistema. Assim, o polinômio $P(x)$ existe e é único.

Definição 4.1 Polinômio interpolador

Denominamos polinômio interpolador de uma função $f(x)$ definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos de um intervalo $[a, b]$ o polinômio $P(x)$ de grau menor ou igual a n , tal que coincide com a função nos pontos $x_i, i = 1, \dots, n$ isto é, $P(x_i) = f(x_i) = y_i$, $i = 1, \dots, n$.

Representamos graficamente, conforme Figura 4.3:

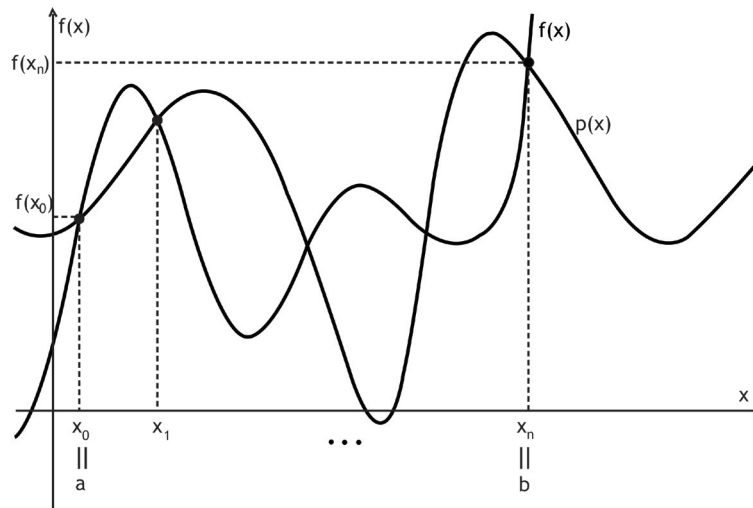


Figura 4.3 Interpolação.

Embora o polinômio interpolador $P(x)$ coincida com a função nos pontos de interpolação x_0, x_1, \dots, x_n , espera-se que $P(\bar{x}) \cong f(\bar{x})$ para $\bar{x} \neq x_i, i = 0, \dots, n$, ou seja, estimamos $f(x)$ pelo polinômio interpolador e cometemos um erro nessa aproximação, dado por:

$$E(\bar{x}) = f(\bar{x}) - P(\bar{x})$$

Podemos representar, graficamente conforme Figura 4.4:

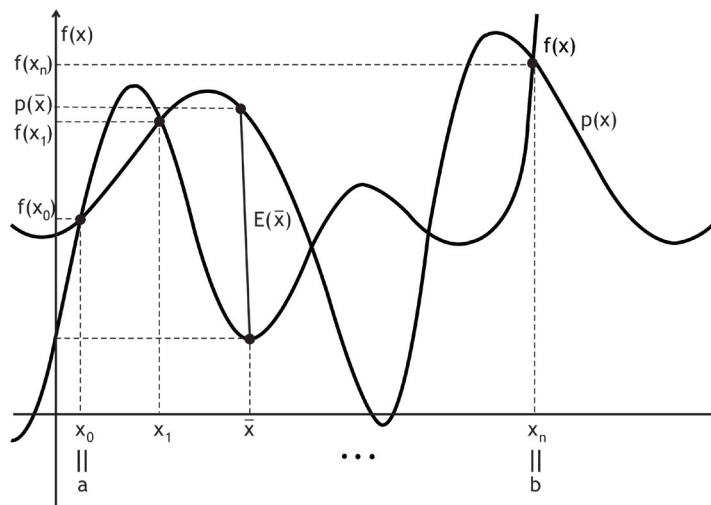


Figura 4.4 Erro de interpolação.

Apresentamos a seguir uma expressão geral para o erro cometido quando aproximamos uma função $f(x)$ por um polinômio interpolador $P(x)$.

Teorema 4.2

Seja $f(x)$ uma função definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos de um intervalo $[a, b]$ e $n+1$ vezes diferenciável. Se $P(x)$ interpola $f(x)$ nesses pontos, então o erro cometido em um ponto x é dado por:

$$E(x) = f(x) - P(x) = \frac{\Psi(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$$

em que $\Psi(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$ e $\xi \in [x_0, x_n]$.

Prova: Referência [1].

4.3 Limitante superior para o erro

Na expressão do erro do Teorema 4.2, o parâmetro ξ não é conhecido no intervalo $[x_0, x_n]$ e, portanto, não é possível calcular o valor numérico de $f^{(n+1)}(\xi)$.

Dessa forma, apresentamos uma estimativa para o erro como segue:

$$E(x) = f(x) - P(x) = \frac{\Psi(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$$

Podemos escrever:

$$|E(x)| = \left| \frac{\Psi(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \right| = \frac{|\Psi(x)|}{(n+1)!} |f^{(n+1)}(\xi)| \leq \frac{|\Psi(x)|}{(n+1)!} M$$

com $M = \max \{ |f^{(n+1)}(x)|, x \in [x_0, x_n] \}$.

Assim, temos um limitante superior para o erro:

$$|E(x)| \leq \frac{|\Psi(x)|}{(n+1)!} M.$$

Observações

Podemos calcular uma estimativa para o erro somente quando tivermos a expressão analítica da função $f(x)$, pois de acordo com a fórmula do limitante superior para o erro, temos que dispor da $(n + 1)$ -ésima derivada dessa função.

Nos casos em que tivermos apenas a função tabelada em um número finito de pontos, sabemos que estamos cometendo um erro no ponto a ser avaliado, mas não é possível estimá-lo.

Embora a resolução do sistema linear obtido na prova do Teorema 4.1 forneça uma maneira para determinar o polinômio interpolador de uma função, apresentamos, também nesta unidade, a Fórmula Interpolatória de Newton-Gregory. Nas Referências podemos ver alguns estudos sobre outras fórmulas interpolatórias, como a Fórmula de Lagrange e a Fórmula de Newton, as quais são fórmulas diferentes, mas que levam no mesmo polinômio interpolador, pois como foi demonstrado, este é único.

Para o desenvolvimento do polinômio interpolador de Newton-Gregory, apresentamos o conceito de diferenças finitas, como segue:

4.4 Diferenças finitas

Considere uma função $f(x)$ contínua no intervalo $[a, b]$. Sejam x_0, x_1, \dots, x_n , $n + 1$ pontos distintos deste intervalo $[a, b]$, tais que $x_{i+1} - x_i = h$, $i = 0, 1, \dots, n - 1$, isto é, os pontos são equidistantes.

Definição 4.2 Diferença finita de ordem zero

A diferença finita de ordem zero de uma função $f(x)$ definida nos pontos $x \in [a, b]$ é dada por:

$$\Delta^0 f(x) = f(x)$$

Definição 4.3 Diferença finita de ordem n

A diferença dividida de ordem n de uma função $f(x)$ definida nos pontos $x \in [a, b]$ é dada por:

$$\Delta^n f(x) = \Delta^{n-1} f(x + h) - \Delta^{n-1} f(x)$$

Nessa definição, para $r = 1$ temos o operador diferença finita progressivo Δ dado por:

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$$

Assim, desenvolvendo-se os operadores podemos escrever:

$$\Delta^0 f(x) = f(x)$$

$$\Delta^1 f(x) = f(x+h) - f(x)$$

$$\Delta^2 f(x) = f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)$$

$$\Delta^3 f(x) = f(x+3h) - 3f(x+2h) + 3f(x+h) - f(x)$$

⋮

$$\Delta^n f(x) = \binom{n}{0} f(x+nh) - \binom{n}{1} f(x+(n-1)h) + \dots + (-1)^n \binom{n}{n} f(x)$$

Exemplo 4.1

Considere uma função tabelada nos pontos, como segue:

x_i	0.1	0.2	0.3
$f(x_i)$	6	12	15

Cálculo das diferenças finitas de ordem zero:

$$\Delta^0 f(x_0) = f(x_0) = 6$$

$$\Delta^0 f(x_1) = f(x_1) = 12$$

$$\Delta^0 f(x_2) = f(x_2) = 15$$

Cálculo das diferenças finitas de ordem 1:

$$\Delta^1 f(x_0) = \Delta^0 f(x_1) - \Delta^0 f(x_0) = (12 - 6) = 6$$

$$\Delta^1 f(x_1) = \Delta^0 f(x_2) - \Delta^0 f(x_1) = (15 - 12) = 3$$

Cálculo das diferenças finitas de ordem 2:

$$\Delta^2 f(x_0) = \Delta^1 f(x_1) - \Delta^1 f(x_0) = (3 - 6) = -3$$

Podemos organizar o cálculo das diferenças finitas, conforme a Tabela 4.1 a seguir:

Tabela 4.1 Diferenças finitas.

	$\Delta^0 f$	$\Delta^1 f$	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$
x_0	$\Delta^0 f(x_0)$			
		$\Delta^1 f(x_0)$		
x_1	$\Delta^0 f(x_1)$		$\Delta^2 f(x_0)$	
		$\Delta^1 f(x_1)$		$\Delta^3 f(x_0)$
x_2	$\Delta^0 f(x_2)$		$\Delta^2 f(x_1)$	
		$\Delta^1 f(x_2)$		
x_3	$\Delta^0 f(x_3)$			

Os valores das diferenças finitas estão dispostos na tabela da seguinte forma:

$$\Delta^1 f(x_1) = \Delta^0 f(x_1) - \Delta^0 f(x_0)$$

$$\Delta^2 f(x_0) = \Delta^1 f(x_1) - \Delta^1 f(x_0)$$

$$\Delta^3 f(x_0) = \Delta^2 f(x_1) - \Delta^2 f(x_0)$$

Exemplo 4.2

Considere uma função $f(x)$ tabelada nos pontos, como segue:

x_i	0.2	0.4	0.6	0.8
$f(x_i)$	7.8	5.9	10.8	13.2

Conforme Tabela 4.1, construímos as diferenças finitas:

	$\Delta^0 f$	$\Delta^1 f$	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$
0.2	7.8			
		-1.90		
0.4	5.9		6.80	
		4.90		-9.30
0.6	10.8		-2.50	
		2.40		
0.8	13.2			

4.5 Fórmulas Interpolatórias

4.5.1 Fórmula Interpolatória de Newton-Gregory

Considere uma função $f(x)$ definida em um intervalo $[a, b]$ e, x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos e equidistantes deste intervalo. A Fórmula interpoladora de Newton-Gregory é dada pelo seguinte Teorema 4.3:

Teorema 4.3

Seja uma função $f(x)$ definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos e equidistantes de um intervalo $[a, b]$. O polinômio

$$P(x) = \Delta^0 f(x_0) + (x - x_0) \frac{\Delta^1 f(x_0)}{1! h^1} + (x - x_0)(x - x_1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2! h^2} + \dots + (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \frac{\Delta^n f(x_0)}{n! h^n}$$

interpola a função $f(x)$ dada nestes pontos, isto é, $P(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, \dots$

Prova: Referência [1].

Como desenvolvido anteriormente, uma estimativa para o erro é dada pelo limitante superior:

$$|E(x)| \leq \frac{|\psi(x)|}{(n+1)!} \max |f^{(n+1)}(x)|, x \in [x_0, x_n]$$

Exemplo 4.3

Considere a função $f(x) = \ln(x)$ tabelada nos pontos, como segue:

x_i	2	3	4
$f(x_i)$	0.6931	1.0986	1.3863

Podemos determinar o polinômio interpolador Newton-Gregory, avaliar $f(3.2)$ e calcular um limitante superior para o erro, como segue:

Usamos os três pontos tabelados para obter um polinômio interpolador de grau ≤ 2 :

$$P(x) = \Delta^0 f(x_0) + (x - x_0) \frac{\Delta^1 f(x_0)}{1! h^1} + (x - x_0)(x - x_1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2! h^2}$$

Conforme Tabela 4.1, construímos as diferenças finitas:

	$\Delta^0 f$	$\Delta^1 f$	$\Delta^2 f$
2	0.6931		
		0.4055	
3	1.0986		-0.1178
		0.2877	
4	1.3863		

Assim, temos o polinômio interpolador de Newton-Gregory:

$$P(x) = 0.6931 + (x-2) \frac{0.4055}{1} + (x-2)(x-3) \frac{-0.1178}{2}$$

$$= -0.0589x^2 + 0.7000x - 0.4713$$

Portanto, $f(3.2) \cong P(3.2) = 1.1656$

Limitante Superior para o erro:

$$|E(x)| \leq \frac{|\psi(x)|}{(n+1)!} \max |f^{(n+1)}(x)| \quad x \in [x_0, x_n]$$

Como a função $f(x) = \ln(x)$, temos que as suas derivadas:

$$f^{(1)}(x) = \frac{1}{x}, x \neq 0, f^{(2)}(x) = -\frac{1}{x^2}, x \neq 0 \text{ e } f^{(3)}(x) = \frac{2}{x^3}.$$

Podemos observar que a função $f^{(3)}(x) = \frac{2}{x^3}$ é decrescente em módulo no intervalo $[2, 4]$, portanto, $\max |f^{(3)}(x)| = 0.2500$, em $x = 2$.

Assim,

$$E(3.2) \leq \left| \frac{(3.2-2)(3.2-3)(3.2-4)}{3!} \right| (0.25) = 0.0080.$$

4.5.2 Polinômio Interpolador de Newton-Gregory com mudança de variável

Podemos, ainda, escrever o polinômio interpolador de Newton-Gregory, considerando a seguinte mudança de variável:

$$u = \frac{(x - x_0)}{h} \quad \text{ou} \quad x = x_0 + u h$$

Como os pontos são equidistantes, $x_r = x_0 + r h$ segue que:

$$(x - x_r) = (u - r) h$$

Note que nessa nova variável u os pontos de interpolação x_0, x_1, \dots, x_n correspondem aos pontos

$$u = 0, 1, 2, \dots, n.$$

Dessa forma, podemos escrever o polinômio de Newton-Gregory na variável u :

$$P(u) = \Delta^0 f(x_0) + (u - 0) \frac{\Delta^1 f(x_0)}{1!} + (u - 0)(u - 1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!} + \dots$$

$$+ (u - 0)(u - 1) \dots (u - (n - 1)) \frac{\Delta^n f(x_0)}{n!}$$

O limitante superior para o erro é dado por:

$$E(u) \leq \left| \frac{(u - 0)(u - 1) \dots (u - n)}{(n + 1)!} \right| h^{n+1} M$$

em que $M = \max |f^{(n+1)}(x)|, x \in [a, b]$.

Exemplo 4.4

Considere a função $f(x)$ da tabela nos pontos, conforme segue:

x_i	0.1	0.2	0.3
$f(x_i)$	2	8	10

Podemos determinar o polinômio interpolador de Newton-Gregory na variável u e avaliar $f(0.12)$ como segue:

O ponto $x = 0.12$ corresponde na variável u :

$$u = \frac{(x - x_0)}{h} = \frac{(0.12 - 0.1)}{0.1} = 0.2$$

$$P(u) = \Delta^0 f(x_0) + (u-0) \frac{\Delta^1 f(x_0)}{1!} + (u-0)(u-1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!}$$

Conforme Tabela 4.1, construímos a tabela de diferenças finitas:

	$\Delta^0 f$	$\Delta^1 f$	$\Delta^2 f$
0.1	2		
		6	
0.2	8		-4
		2	
0.3	10		

Assim temos:

$$P(u) = 2 + u(6) + u(u-1) \frac{-4}{2} = -2u^2 + 8u + 2$$

Portanto, $f(0.12) \cong P_u(0.2) = 3.52$.

4.6 Aproximação de funções: Método dos Mínimos Quadrados

O Método dos Mínimos Quadrados consiste em, dados os valores de uma função $f(x)$ nos pontos $x_i, i = 1, \dots, m$, determinar uma função $g(x)$ que melhor se aproxime dessa função conhecida. Para essa aproximação, usaremos funções polinomiais, exponenciais, logarítmicas, trigonométricas, etc.

Assim, conhecidos os valores de $f(x)$ nos pontos $x_i, i = 1, \dots, m$, desejamos determinar $g(x)$, tal que $g(x_i) \cong f(x_i), i = 1, \dots, m$.

Como ilustração, apresentamos o problema de previsão de escoamento de água, como segue, conforme Figura 4.5:



Figura 4.5 Escoamento de água.

A estimativa dos tamanhos dos reservatórios depende de estimativas acuradas do escoamento da água no rio que está sendo confinado.

Para alguns rios, registros históricos de longa duração de tais dados de escoamento são difíceis de obter. Entretanto, os dados meteorológicos sobre precipitação geralmente estão disponíveis mesmo após muitos anos.

Portanto, é útil determinar a relação existente entre o escoamento e a precipitação. Essa relação pode ser usada para fazer uma estimativa do escoamento nos anos em que apenas as medidas de precipitação foram feitas.

Os dados disponíveis para um rio que deve ser estancado estão dispostos na seguinte tabela:

Precipitação (cm)	88.9	108.5	104.1	139.7	127	94	116.8	99.1
Escoamento (m ³ /s)	14.6	16.7	15.3	23.2	19.5	16.1	18.1	16.6

Deseja-se determinar uma previsão do escoamento anual de água se a precipitação for de 120 cm.

Caso discreto

Consideremos o caso em que a função $f(x)$ é definida em um conjunto discreto, isto é, a função é conhecida em m pontos, geralmente obtidos em experimentos, conforme a tabela:

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

Graficamente, temos a disposição dos pontos obtidos no experimento, conforme Figura 4.6:

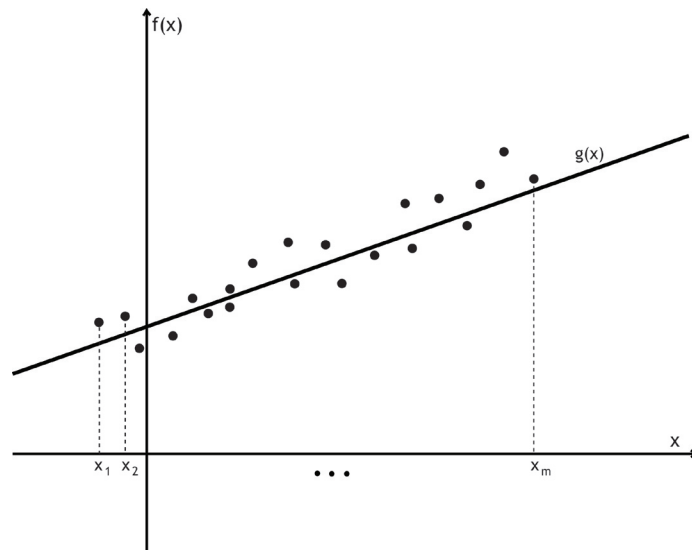


Figura 4.6 Dados de um experimento.

Observando a disposição dos pontos $(x_i, f(x_i))$, $i = 1, \dots, m$ na Figura 4.6, vemos que $g(x)$ possui o comportamento de uma reta, isto é, um polinômio de grau 1:

$$g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) = a_1 x + a_2$$

Com $g_1(x) = x$ e $g_2(x) = 1$. Assim, escolhemos uma família de funções as quais dependem dos parâmetros a_1 e a_2 .

O problema agora consiste em determinar os parâmetros a_1 e a_2 de modo que a função $g(x)$ melhor se ajuste aos dados da tabela.

Para falar em melhor ajuste, temos que ter um critério para a escolha dos parâmetros a_1 e a_2 , isto é, temos que ter uma medida para o erro cometido nessa aproximação.

Definição 4.4 Erro ou desvio

Definimos $e(x_i) = f(x_i) - g(x_i)$ como o erro ou desvio, cometido numa aproximação de uma função $f(x)$ por uma função $g(x)$, nos pontos x_i , $i = 1, \dots, m$.

Dessa forma, desejamos determinar uma função $g(x)$ de modo que nos pontos x_i , $i = 1, \dots, m$ os desvios sejam pequenos. Nesse caso é tentador desejar que a soma dos erros sejam mínimos, isto é, que $\sum_{i=1}^m e(x_i)$ seja mínima. Entretanto,

esse fato não traduz que $g(x)$ seja uma boa aproximação para a função $f(x)$, pois podemos ter $\sum_{i=1}^m e(x_i) = 0$, sem que os erros sejam pequenos.

Poderíamos, também, considerar $\sum_{i=1}^m |e(x_i)|$ mínima, porém esse critério acarreta dificuldades de resolução, pois a função valor absoluto não é diferenciável na origem.

Uma maneira para contornar esses problemas consiste em considerar uma medida para o erro da seguinte forma:

$$\text{Minimizar } \sum_{i=1}^m e(x_i)^2 = \text{Minimizar } \sum_{i=1}^m (f(x_i) - g(x_i))^2$$

Assim, considerando o exemplo da Figura 4.6, desejamos encontrar uma função $g(x) = a_1 x + a_2$ que melhor se aproxime da função $f(x)$, de forma que $E(a_1, a_2) = \sum_{i=1}^m (e(x_i))^2$ seja mínimo. Do Cálculo Diferencial de funções de várias variáveis, se a função $E(a_1, a_2)$ possui um ponto de mínimo, então suas derivadas parciais devem ser nulas nesse ponto, isto é:

$$\frac{\partial E}{\partial a_1} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial E}{\partial a_2} = 0$$

Derivando $E(a_1, a_2)$ com relação à variável a_1 , temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a_1} &= \frac{\partial}{\partial a_1} \left(\sum_{i=1}^m (e(x_i))^2 \right) = \frac{\partial}{\partial a_1} \left(\sum_{i=1}^m (a_1 x_i + a_2 - f(x_i))^2 \right) \\ &= \sum_{i=1}^m 2(a_1 x_i + a_2 - f(x_i)) x_i \\ &= 2 \left[a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^m x_i \right] - 2 \left[\sum_{i=1}^m x_i f(x_i) \right] = 0 \end{aligned}$$

Assim, temos:

$$\text{i) } \left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m x_i \right) a_2 = \sum_{i=1}^m x_i f(x_i)$$

Derivando $E(a_1, a_2)$ com relação à variável a_2 , temos:

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial a_2} &= \frac{\partial}{\partial a_2} \left(\sum_{i=1}^m (e(x_i))^2 \right) = \frac{\partial}{\partial a_2} \left(\sum_{i=1}^m (a_1 x_i + a_2 - f(x_i))^2 \right) \\ &= \sum_{i=1}^m 2(a_1 x_i + a_2 - f(x_i)) \\ &= 2 \left[a_1 \sum_{i=1}^m x_i + m(a_2) - \sum_{i=1}^m f(x_i) \right] = 0\end{aligned}$$

Assim, temos;

$$\text{ii) } \left(\sum_{i=1}^m x_i \right) a_1 + m a_2 = \sum_{i=1}^m f(x_i)$$

Portanto, os parâmetros a_1 e a_2 que minimizam o erro $E(a_1, a_2)$ necessariamente satisfazem o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{cases} \left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m x_i \right) a_2 = \sum_{i=1}^m x_i f(x_i) \\ \left(\sum_{i=1}^m x_i \right) a_1 + m a_2 = \sum_{i=1}^m f(x_i) \end{cases}$$

O sistema de equações obtido é chamado sistema de equações normais, o qual pode ser resolvido por qualquer método numérico visto anteriormente.

Exemplo 4.5

Considere a seguinte função $f(x)$ da tabela como segue:

x_i	0.5	0.8	0.9	1.0	1.1
$f(x_i)$	1.51	1.82	1.91	2.00	2.10

Plote os pontos dados e verifique se os mesmos possuem um comportamento linear, isto é, de uma reta (verifique isso!).

Usando o método dos Mínimos Quadrados, determinamos dentre todas as retas $g(x) = a_1 x + a_2$ aquela que melhor se ajusta aos dados.

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^5 x_i^2 & \sum_{i=1}^5 x_i \\ \sum_{i=1}^5 x_i & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^5 f(x_i)x_i \\ \sum_{i=1}^5 f(x_i) \end{bmatrix}$$

Temos a seguinte tabela de dados:

	x_i	$f(x_i)$	x_i^2	$f(x_i)x_i$
Σ	0.5	1.51	0.25	0.7550
	0.8	1.82	0.64	1.4560
	0.9	1.91	0.81	1.7190
	1.0	2.00	1.00	2.0000
	1.1	2.10	1.21	2.3100
	4.30	9.34	3.91	8.2400

Assim, temos o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} 3.91 & 4.30 \\ 4.30 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.24 \\ 9.34 \end{bmatrix}$$

Usando o Método de Eliminação de Gauss, na forma pivotada, temos:

$$\begin{bmatrix} 3.91 & 4.30 & . & 8.24 \\ 0 & 0.2711 & . & 0.2785 \end{bmatrix}$$

Assim,

$$\begin{cases} a_2 = 1.0272 \\ a_1 = 0.9778 \end{cases}$$

Portanto, a função linear que melhor se aproxima dos dados da tabela é dada por $g(x) = 0.9778x + 1.0272$.

Cálculo do erro:

$$e(x_1)^2 = (f(0) - g(0))^2 = 0.0000$$

$$e(x_2)^2 = (f(1) - g(1))^2 = 0.0001$$

$$e(x_3)^2 = (f(2) - g(2))^2 = 0.0000$$

$$e(x_4)^2 = (f(3) - g(3))^2 = 0.0001$$

$$e(x_5)^2 = (f(4) - g(4))^2 = 0.0000$$

Portanto, $\sum_{i=1}^5 e(x_i)^2 = 0.0001$ e qualquer outra reta possui a soma dos quadrados dos erros superior a esse valor obtido.

Podemos ter dados experimentais em que seja necessário aproximar a função $f(x)$ por um polinômio de grau 2, isto é, uma parábola:

$$g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + a_3 g_3(x) = a_1 x^2 + a_2 x + a_3$$

com $g_1(x) = x^2$, $g_2(x) = x$ e $g_3(x) = 1$.

Generalizando esse procedimento, escrevemos $g(x)$ como uma combinação linear de funções como segue:

$$g(x) = a_1 g_1(x) + a_2 g_2(x) + \dots + a_n g_n(x)$$

com as funções $g_i(x)$ escolhidas.

Procedendo de maneira análoga ao caso do ajuste linear, a reta, podemos determinar os parâmetros $a_i, i = 1, \dots, n$ de forma que o erro $\sum_{i=1}^m e(x_i)^2$ seja mínimo.

Assim, temos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a_1} = 0 \Leftrightarrow & \left(\sum_{i=1}^m g_1(x_i) g_1(x_i) \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m g_2(x_i) g_1(x_i) \right) a_2 + \dots \\ & + \left(\sum_{i=1}^m g_n(x_i) g_1(x_i) \right) a_n = \sum_{i=1}^m f(x_i) g_1(x_i) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a_2} = 0 \Leftrightarrow & \left(\sum_{i=1}^m g_1(x_i) g_2(x_i) \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m g_2(x_i) g_2(x_i) \right) a_2 + \dots \\ & + \left(\sum_{i=1}^m g_n(x_i) g_2(x_i) \right) a_n = \sum_{i=1}^m f(x_i) g_2(x_i) \end{aligned}$$

⋮

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a_n} = 0 \Leftrightarrow & \left(\sum_{i=1}^m g_1(x_i) g_n(x_i) \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m g_2(x_i) g_n(x_i) \right) a_2 + \dots \\ & + \left(\sum_{i=1}^m g_n(x_i) g_n(x_i) \right) a_n = \sum_{i=1}^m f(x_i) g_n(x_i) \end{aligned}$$

Portanto, para determinar os parâmetros $a_i, i = 1, \dots, n$ temos que resolver o seguinte sistema de equações lineares:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\sum_{i=1}^m g_1(x_i)g_1(x_i) \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m g_2(x_i)g_1(x_i) \right) a_2 + \dots \\ \quad + \left(\sum_{i=1}^m g_n(x_i)g_1(x_i) \right) a_n = \sum_{i=1}^m f(x_i)g_1(x_i) \\ \\ \left(\sum_{i=1}^m g_1(x_i)g_2(x_i) \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m g_2(x_i)g_2(x_i) \right) a_2 + \dots \\ \quad + \left(\sum_{i=1}^m g_n(x_i)g_2(x_i) \right) a_n = \sum_{i=1}^m f(x_i)g_2(x_i) \\ \\ \vdots \\ \\ \left(\sum_{i=1}^m g_1(x_i)g_n(x_i) \right) a_1 + \left(\sum_{i=1}^m g_2(x_i)g_n(x_i) \right) a_2 + \dots \\ \quad + \left(\sum_{i=1}^m g_n(x_i)g_n(x_i) \right) a_n = \sum_{i=1}^m f(x_i)g_n(x_i) \end{array} \right.$$

O sistema de equações lineares obtido é denominado sistema de equações normais, o qual pode ser resolvido por qualquer método visto anteriormente.

Resolvido esse sistema, determinamos os parâmetros $a_i, i = 1, \dots, n$ e, conseqüentemente, a função:

$$g(x) = a_1g_1(x) + \dots + a_n g_n(x)$$

que melhor se ajusta à função $f(x)$ nos pontos x_1, \dots, x_m no sentido dos mínimos quadrados.

Exemplo 4.6

Considere uma função $f(x)$ definida conforme tabela:

x_i	-2	-1	0	1	2	3
$f(x_i)$	19.01	3.99	-1.00	4.01	18.99	45.00

Dispondo os pontos num gráfico podemos ver que $g(x)$ pode ser ajustada por uma parábola. Verifique esta afirmação!

Assim, tomamos $g(x) = a_1x^2 + a_2x + a_3$, isto é, $g_1(x) = x^2$, $g_2(x) = x$, $g_3(x) = 1$ e determinamos os parâmetros a_1, a_2 e a_3 de modo que $g(x)$ se ajuste aos dados da tabela no senso dos mínimos quadrados.

Temos o sistema de equações normais:

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^6 x_i^4 & \sum_{i=1}^6 x_i^3 & \sum_{i=1}^6 x_i^2 \\ \sum_{i=1}^6 x_i^3 & \sum_{i=1}^6 x_i^2 & \sum_{i=1}^6 x_i \\ \sum_{i=1}^6 x_i^2 & \sum_{i=1}^6 x_i & 6 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^6 f(x_i)x_i^2 \\ \sum_{i=1}^6 f(x_i)x_i \\ \sum_{i=1}^6 f(x_i) \end{bmatrix}$$

Temos a seguinte tabela de dados:

	x_i	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$f(x_i)$	$x_i f(x_i)$	$x_i^2 f(x_i)$
	-2	4	-8	16	19.01	-38.02	76.04
	-1	1	-1	1	3.99	-3.99	3.99
	0	0	0	0	-1.00	0.00	0.00
	1	1	1	1	4.01	4.01	4.01
	2	4	8	16	18.99	37.98	75.96
Σ	3	9	27	81	45.00	135.00	405.00
	3	19	27	115	90.00	134.98	565.00

Assim, podemos escrever o sistema de equações normais, como segue:

$$\begin{bmatrix} 115 & 27 & 19 \\ 27 & 19 & 3 \\ 19 & 3 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 565.00 \\ 134.98 \\ 90.00 \end{bmatrix}$$

Usando o Método de Eliminação de Gauss, na forma pivotada, temos:

$$\begin{bmatrix} 115 & 27 & 19 & . & 565.00 \\ 0 & 12.6604 & -1.4612 & . & 134.98 \\ 0 & 0 & 2.6926 & . & 90.00 \end{bmatrix}$$

Assim:

$$\begin{cases} a_1 = 5.0893 \\ a_2 = 0.0515 \\ a_3 = -1.1403 \end{cases}$$

Portanto, $g(x) = 5.0893x^2 + 0.0515x - 1.1403$

Cálculo do erro:

$$e(x_1)^2 = (f(x_1) - g(x_1))^2 = 0.0108$$

$$e(x_2)^2 = (f(x_2) - g(x_2))^2 = 0.0086$$

$$e(x_3)^2 = (f(x_3) - g(x_3))^2 = 0.0197$$

$$e(x_4)^2 = (f(x_4) - g(x_4))^2 = 0.0001$$

$$e(x_5)^2 = (f(x_5) - g(x_5))^2 = 0.1088$$

$$e(x_6)^2 = (f(x_6) - g(x_6))^2 = 0.0332$$

Portanto, $\sum_{i=1}^6 e(x_i)^2 = 0.1812$ e qualquer outra parábola ajustada possuem a soma dos quadrados dos erros superiores a esse valor obtido.

4.7 Exercícios

1. Seja uma função $f(x)$ definida conforme a tabela abaixo:

x	0	1	2	3
f(x)	-5.6	-4	8.1	9

Determine o polinômio interpolador de $f(x)$, avalie $f(2.3)$ usando a Fórmula Interpolatória de Newton-Gregory.

2. Seja uma função $f(x)$ definida conforme a tabela abaixo:

x	0.1	0.2	0.3	0.4
f(x)	8	3.9	4.8	-8.9

Determine o polinômio interpolador de $f(x)$ nos pontos dados, usando a Fórmula Interpolatória de Newton-Gregory na variável u . Avalie $f(0.35)$.

3. Estude o polinômio interpolador de Lagrange e o limitante superior para o erro – Referência [1].

4. Seja a função $f(x) = e^x + \cos(x) + 1$ tabelada como segue:

x	0	0.5	1.1
f(x)	3	3.53	4.46

Usando o polinômio interpolador de Lagrange, avalie $f(0,6)$ e um limitante superior para o erro.

5. O calor específico da água em função da temperatura em °C é dado por:

t	30	35	40	45
c	0.99826	0.99818	0.99828	0.99890

Com o Software Numérico – Referência [1] –, usando o polinômio interpolador de Newton-Gregory, calcule aproximadamente o calor específico para

$$t = 37.5 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

6. A partir dos seus conhecimentos de aproximação de funções, resolva o problema da temperatura em relação à profundidade de um lago, proposto no início deste capítulo, usando um polinômio interpolador de grau 2. Analise os resultados obtidos.

7. Usando o Método dos Mínimos Quadrados, determine $g(x) = a_1x + a_2$ que melhor se ajusta aos dados da tabela abaixo:

x	-2	-1	0	1	2	3	4
f(x)	-4.98	-3.00	-1.01	0.99	3.01	4.98	7.01

Calcule $\sum_{i=1}^7 e(x_i)^2$ e analise os resultados obtidos.

8. Com o Software Numérico – Referência [1] –, e usando o Método dos Mínimos Quadrados, determine uma função $g(x)$ que melhor se ajusta aos dados da tabela abaixo:

X	-2	-1	0	0.1	1	2	3
f(x)	6.00	1.01	0	0.12	3.00	9.98	20.98

Calcule $\sum_{i=1}^7 e(x_i)^2$ e analise os resultados obtidos.

9. Considere o problema de previsão de escoamento de água, exibido neste capítulo:

a) Faça um gráfico dos dados da tabela.

b) Usando o Método dos Mínimos Quadrados, determine a melhor reta que melhor se ajusta aos dados da tabela e faça uma previsão do escoamento anual de água se a precipitação for de 120 cm.

10. Usando o Software Matlab, resolva os exercícios 7) e 8).

11. Faça um Mapa Conceitual detalhado sobre os tópicos de interpolação, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

12. Faça um Mapa Conceitual detalhado sobre os tópicos de ajuste de curvas – MMQ –, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

UNIDADE 5

Integração Numérica

5.1 Introdução

Nesta unidade, apresentamos alguns métodos numéricos para calcular aproximadamente o valor da integral de uma função com uma variável real definida num intervalo fechado $[a, b]$.

De maneira geral, temos:

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

Em que a função $f(x)$ é contínua com derivadas contínuas no intervalo $[a, b]$.

Sabemos que o valor da integral I é dado pelo Teorema Fundamental do Cálculo para integrais como:

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

em que $F(x)$, chamada de função primitiva de $f(x)$ é tal que $F'(x) = f(x)$.

Graficamente, podemos representar $I = \int_a^b f(x) dx$ como a área A , formada entre a curva e o eixo das abscissas quando $f(x)$ assume valores positivos em $[a, b]$, conforme a Figura 5.1 a seguir:

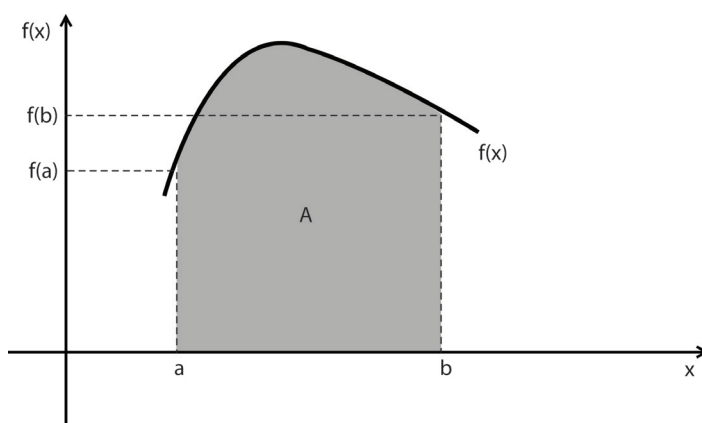


Figura 5.1 Área sob o gráfico da função $f(x)$.

Exemplo 5.1

Para calcular $\int_0^1 x^5 dx$, como $F(x) = \frac{x^6}{6}$ satisfaz $F'(x) = x^5$, então:

$$\int_0^1 x^5 dx = F(1) - F(0) = \frac{(1)^6}{6} - \frac{(0)^6}{6} = 1/6$$

Muitas vezes, o cálculo da função primitiva torna-se algo trabalhoso, em alguns casos conhecemos apenas os valores da função tabelados em um número finito de pontos e não podemos calcular a integral dessa função usando apenas os conhecimentos do Cálculo Diferencial Integral, como citamos anteriormente.

Métodos numéricos são desenvolvidos para calcular aproximadamente o valor da integral $I = \int_a^b f(x)dx$, em que é necessário apenas o conhecimento da função $f(x)$ em um número finito de pontos. Esse processo é conhecido como **Fórmulas de Quadratura de Newton-Cotes**.

Para ilustrar o tópico de integração numérica, consideremos o problema de estimar medidas das margens até um rio conforme Figura 5.2:



Figura 5.2 Margens de um rio.

A partir de uma linha reta próxima às margens de um rio, foram feitas medidas em (m) entre essa linha reta e as margens do rio, de 15 em 15 metros, a partir do ponto tomado como origem. Tais dados foram registrados conforme a tabela abaixo.

	0	15	30	45	60
M_1	0	1	0	2	4
M_2	5	7	7	8	10

Deseja-se determinar o valor aproximado da área coberta pelo rio.

5.2 Integração numérica usando interpolação

Este método consiste em aproximar uma função $f(x)$ definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos do intervalo $[a, b]$, pelo polinômio interpolador $P_n(x)$, e integrar o polinômio $P_n(x)$ ao invés da função $f(x)$.

Assim, temos:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \cong \int_{x_0}^{x_n} P_n(x) dx$$

Podemos representar graficamente, conforme Figura 5.3:

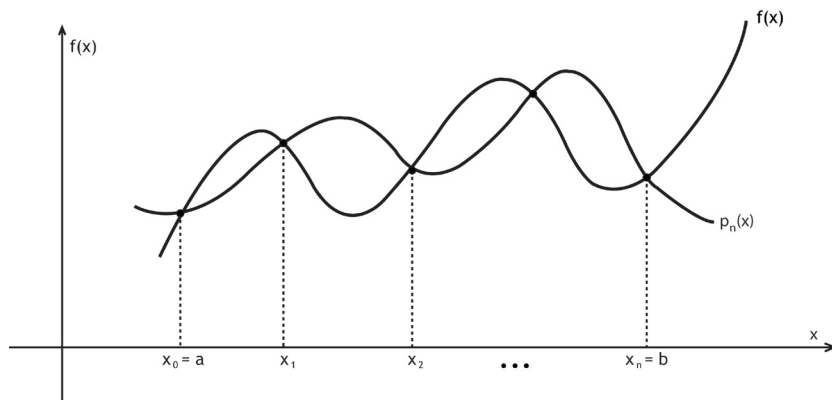


Figura 5.3 Integração numérica.

5.3 Fórmulas de Quadratura de Newton-Cotes

Considere uma função definida em x_0, x_1, \dots, x_n , $n+1$ pontos distintos e equidistantes do intervalo $[a, b]$, isto é, $x_{i+1} - x_i = h$, $i = 0, \dots, n-1$, com $h > 0$ a distância entre os pontos.

Nesse caso, podemos considerar o polinômio interpolador de Newton-Gregory para $f(x)$:

$$P_n(x) = D^0 f(x_0) + (x - x_0) \frac{D^1 f(x_0)}{1! h} + (x - x_0)(x - x_1) \frac{D^2 f(x_0)}{2! h^2} + \dots + (x - x_0) \dots (x - x_{n-1}) \frac{\Delta^n f(x_0)}{n! h^n}$$

Dessa forma, temos:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \cong \int_{x_0}^{x_n} P_n(x) dx$$

Como $f(x) = P_n(x) + E_n(x)$ em que o erro é dado por:

$$E_n(x) = (x - x_0) \dots (x - x_n) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad x_0 \leq \xi \leq x_n$$

Temos

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} P_n(x) dx + \int_{x_0}^{x_n} E_n(x) dx$$

Como os pontos são distintos e equidistantes, podemos considerar o polinômio de Newton-Gregory na variável u , em que:

$$u = (x - x_0)/h$$

Assim,

$$P_n(u) = \Delta^0 f(x_0) + u \Delta^1 f(x_0) + \frac{u(u-1)}{2!} \Delta^2 f(x_0) + \dots + \frac{u(u-1) \dots (u-(n-1))}{n!} \Delta^n f(x_0)$$

e o erro na interpolação na variável u é dado por:

$$E_n(u) = \frac{u(u-1) \dots (u-n)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \quad x_0 \leq \xi \leq x_n$$

Dessa forma, o erro na integração pode ser escrito como:

$$E_n = \int_{x_0}^{x_n} E_n(x) dx = h \int_0^n E_n(u) du = h \int_0^n \frac{u(u-1) \dots (u-n)}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n+1)}(x) du$$

Erro cometido na Integração Numérica

Podemos aproximar $\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx$ por $\int_{x_0}^{x_n} P_n(x)dx$ e nessa aproximação cometemos um erro expresso pelo seguinte teorema:

Teorema 5.1

a) Se $f(x)$ possui $n+1$ derivadas contínuas no intervalo $[x_0, x_n]$, e os pontos $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$ subdividem o intervalo de integração num número ímpar de intervalos, então existe um ponto ξ , tal que:

$$E_n = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \int_0^n (u)(u-1) \dots (u-n) du, \text{ com } x_0 \leq \xi \leq x_n$$

b) Se $f(x)$ possui $n+2$ derivadas contínuas no intervalo $[x_0, x_n]$, e os pontos $x_i = x_0 + ih$, $i = 0, 1, \dots, n$ subdividem o intervalo de integração num número par de intervalos, então existe um ponto ξ , tal que:

$$E_n = \frac{h^{n+3}}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi) \int_0^n \left(u - \frac{n}{2}\right) (u)(u-1) \dots (u-n) du, \text{ com } x_0 \leq \xi \leq x_n.$$

Prova: Referência [1].

5.3.1 Regra dos Trapézios

Considere uma função $f(x)$ definida em dois pontos x_0 e x_1 no intervalo $[a, b]$. O polinômio interpolador da função $f(x)$ de grau $n=1$ é dado por:

$$P_1(x) = \Delta^0 f(x_0) + (x - x_0) \frac{\Delta^1 f(x_0)}{1! h^1}$$

e

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \cong \int_{x_0}^{x_1} P_1(x) dx = h \int_0^1 P_1(u) du$$

em que $u = \frac{(x - x_0)}{h}$.

Representamos graficamente, conforme Figura 5.4:

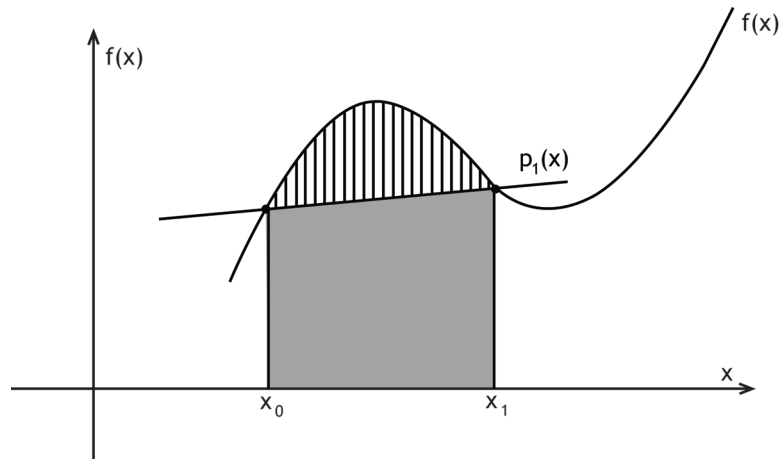


Figura 5.4 Regra dos Trapézios.

Assim,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &\cong h \int_0^1 (\Delta^0 f(x_0) + u \Delta^1 f(x_0)) du \\ &= h \int_0^1 \Delta^0 f(x_0) du + h \int_0^1 u \Delta^1 f(x_0) du \end{aligned}$$

Como $\Delta^0 f(x_0) = f(x_0)$ e $\Delta^1 f(x_0) = f(x_1) - f(x_0)$, temos:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx &\cong h \int_0^1 \Delta^0 f(x_0) du + h \int_0^1 u \Delta^1 f(x_0) du \\ &= hf(x_0)u \Big|_0^1 + h(f(x_1) - f(x_0)) \left(\frac{u^2}{2} \right) \Big|_0^1 \\ &= hf(x_0) + \frac{h}{2}(f(x_1) - f(x_0)) \\ &= \frac{h}{2}(f(x_0) + f(x_1)) \end{aligned}$$

Portanto, temos:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx \cong \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)]$$

denominada Regra dos Trapézios.

Observação

O cálculo da integral $\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx$ corresponde à área do trapézio formada entre o polinômio interpolador $P_1(x)$ e o eixo das abscissas, conforme a Figura 5.4, justificando, assim, a denominação Regra dos Trapézios.

Erro na Regra dos Trapézios

Nesse caso, como o intervalo de integração $n = 1$ é ímpar, e usamos a parte (a) do Teorema 5.1, temos:

$$E_1 = \frac{h^3 f^{(2)}(\xi)}{2!} \int_0^1 (u)(u-1) du, \quad x_0 \leq \xi \leq x_1$$

Como $\int_0^1 u(u-1) du = -\frac{1}{6}$, temos que o erro é dado por:

$$E_1 = -\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi)$$

Limitante superior para o erro

Podemos observar que o argumento ξ , na fórmula do erro, não é uma grandeza numérica conhecida no intervalo $[x_0, x_1]$ e, portanto, não é possível calcular o erro cometido na Regra dos Trapézios. Dessa forma, podemos calcular uma estimativa para o erro, que será o limitante superior para o erro:

$$|E_1| = \left| -\frac{h^3}{12} f^{(2)}(\xi) \right| = \left| -\frac{h^3}{12} \right| |f^{(2)}(\xi)|, \quad \xi \in [x_0, x_1].$$

Como $|f^{(2)}(\xi)| \leq \max \{ |f^{(2)}(x)|, x \in [x_0, x_1] \}$, temos que:

$$|E_1| \leq \frac{h^3}{12} \max \{ |f^{(2)}(x)|, x_0 \leq x \leq x_1 \}$$

Exemplo 5.2

Podemos calcular $\int_1^2 (\text{sen}(x) + x) dx$ usando a Regra dos Trapézios e um limitante superior para o erro da seguinte forma:

Tabelando a função $f(x)$ nos pontos $x_0 = 1.0$ e $x_1 = 2$, temos:

x	1	2
$f(x_i)$	1.8415	2.9093

Usando a Regra dos Trapézios, temos:

$$\int_1^2 (\text{sen}(x) + x) dx \cong \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] = \frac{1}{2} [1.8415 + 2.9093] = 2.3754$$

Limitante superior para o erro:

$$|E_1| \leq \frac{h^3}{12} \text{máx} \{ |f^{(2)}(x)|, 1 \leq x \leq 2 \}$$

Como a função $f^{(2)}(x) = -\text{sen}(x)$, então

$$\left| f^{(2)}\left(\frac{\pi}{2}\right) \right| = \text{máx} \{ |f^{(2)}(x)|, 1 \leq x \leq 2 \} = 1$$

pois a função $|f^{(2)}(x)| = \text{sen}(x)$ assume o valor máximo em $x = \frac{\pi}{2}$.

Dessa forma, temos:

$$|E_1| \leq \frac{(1)^3}{12} (1) = 0.0833$$

5.3.2 Regra dos Trapézios Generalizada

A Regra dos Trapézios Generalizada consiste em dividirmos o intervalo de integração $[a, b]$ em n subintervalos iguais, de amplitude h , de forma que $x_0 = a$ e $x_n = b$ e, aplicarmos a Regra dos Trapézios em cada um deles, isto é, em cada dois pontos consecutivos.

Graficamente, temos:

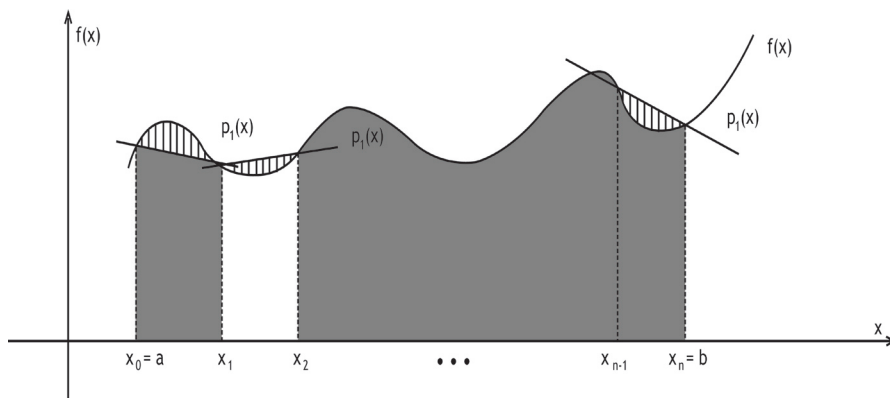


Figura 5.5 Regra dos Trapézios Generalizada.

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \cong \frac{h}{2} [f(x_0) + f(x_1)] + \frac{h}{2} [f(x_1) + f(x_2)] + \dots$$

$$+ \frac{h}{2} [f(x_{n-1}) + f(x_n)] =$$

$$= \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

Erro total na Regra dos Trapézios Generalizada

O erro total na fórmula generalizada é obtido a partir da soma dos erros cometidos em cada subintervalo, isto é:

Como vimos em cada aplicação da Regra dos Trapézios, temos a seguinte expressão para o erro:

$$E_1 = -\frac{h^3}{12} f''(\xi), \quad x_0 \leq \xi \leq x_1$$

Assim, o erro total cometido é dado por:

$$E_t = \sum_{i=1}^n -\frac{h^3}{12} f''(\xi_i), \quad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$$

Como $x_{i-1} \leq \xi_i \leq x_i$, $i = 1, \dots, n$ e $f''(x)$ é uma função contínua por hipótese, então existe $\xi \in [x_0, x_n]$, tal que

$$\sum_{i=1}^n f^{(2)}(\xi_i) = nf^{(2)}(\xi), x_0 \leq \xi \leq x_n$$

Assim, a expressão para o erro na Regra dos Trapézios Generalizada torna-se:

$$E_T = -\frac{h^3}{12} nf^{(2)}(\xi), \xi \in [x_0, x_n]$$

Como o número de subintervalos n é dado por $n = (x_n - x_0)/h$, temos:

$$E_t = -\frac{h^2}{12} (x_n - x_0) f^{(2)}(\xi), \xi \in [x_0, x_n]$$

Limitante superior para o erro

Como o argumento ξ não é conhecido, não podemos determinar o erro exatamente, mas podemos calcular um limitante superior para o erro.

$$|E_t| \leq \frac{h^2}{12} (x_n - x_0) \max \{ |f^{(2)}(x)|, x_0 \leq x \leq x_n \}$$

Exemplo 5.3

Usando a Regra dos Trapézios Generalizada, podemos calcular o valor aproximado da integral $\int_0^1 (x \ln(1+x)) dx$ com 5 subintervalos e um limitante superior para o erro.

Solução:

$$n = \frac{x_n - x_0}{h} \rightarrow 5 = \frac{(1-0)}{h} \rightarrow h = 0.2$$

Dessa forma, podemos tabelar a função $f(x)$ como segue:

x_i	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$f(x_i)$	0	0.0365	0.1346	0.2820	0.4702	0.6931

Assim, temos:

$$\int_0^1 (x \ln(1+x)) dx \cong \frac{h}{2} [f(x_0) + 2(f(x_1) + f(x_2) + f(x_3) + f(x_4)) + f(x_5)] =$$

$$= \frac{0.2}{2} (2.5397) = 0.2538$$

Limitante Superior para o erro:

$$|E_t| \leq \frac{h^2}{12} (x_n - x_0) \max \{ |f^{(2)}(x)|, x_0 \leq x \leq x_n \}$$

Como a função $f^{(2)} = \frac{(2+x)}{(1+x)^2}$ é uma função decrescente em módulo em $[0, 1]$ (verifique isso, observando que a função $f^{(3)}(x) < 0$ no intervalo de integração), então $\max |f^{(2)}(x)| = 2$ em $x = 0$.

Assim,

$$|E_t| \leq \frac{h^2}{12} (x_n - x_0) \max \{ |f^{(2)}(x)|, 0 \leq x \leq 1 \} = \frac{0.2}{12} (1-0)(2) = 0.0333$$

5.3.3 Regra 1/3 de Simpson

Considere uma função $f(x)$ definida em três pontos distintos x_0, x_1 e x_2 e equidistantes no intervalo $[a, b]$ e o polinômio interpolador da função $f(x)$, de grau $n=2$, com $x_0 = a$ e $x_2 = b$.

Assim,

$$P_2(x) = \Delta^0 f(x_0) + (x - x_0) \frac{\Delta^1 f(x_0)}{1!h^1} + (x - x_0)(x - x_1) \frac{\Delta^2 f(x_0)}{2!h^2}$$

e

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \cong \int_{x_0}^{x_2} P_2(x) dx = h \int_0^2 P_2(u) du$$

em que $u = \frac{(x - x_0)}{h}$.

Graficamente, temos:

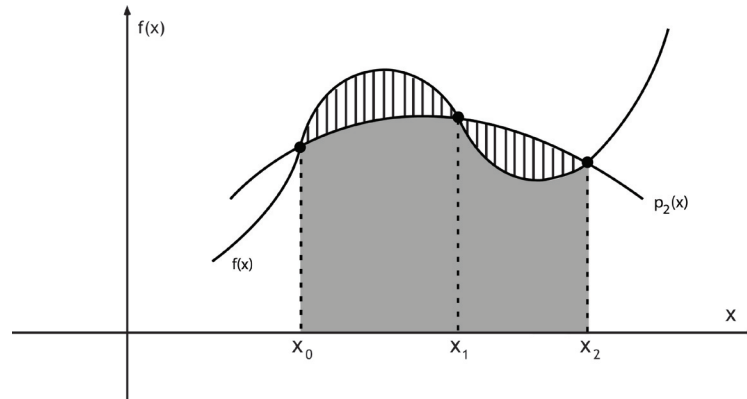


Figura 5.6 Regra 1/3 de Simpson.

Assim,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx &\cong h \int_0^2 \left(\Delta^0 f(x_0) + u \Delta^1 f(x_0) + \frac{u(u-1)}{2!} \Delta^2 f(x_0) \right) du = \\ &= h \int_0^2 \Delta^0 f(x_0) du + h \int_0^2 u \Delta^1 f(x_0) du \\ &\quad + h \int_0^2 \frac{u(u-1)}{2!} \Delta^2 f(x_0) du \end{aligned}$$

Sabendo-se que

$$\Delta f(x_0) = f(x_1) - f(x_0)$$

$$\Delta^2 f(x_0) = f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)$$

Temos:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_2} f(x) dx &= h \int_0^2 \Delta^0 f(x_0) du + h \int_0^2 u \Delta^1 f(x_0) du + h \int_0^2 \frac{u(u-1)}{2!} \Delta^2 f(x_0) du \\ &= hf(x_0) \left(u \right) \Big|_0^2 + h(f(x_1) - f(x_0)) \left(\frac{u^2}{2} \right) \Big|_0^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{h}{2}(f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)) \left(\frac{u^3}{3} - \frac{u^2}{2} \right) \Big|_0^2 \\
& = 2hf(x_0) + 2hf(x_1) - 2hf(x_0) + \frac{h}{3}(f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)) = \\
& = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]
\end{aligned}$$

Assim, obtemos:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx \cong \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

denominada Regra 1/3 de Simpson.

Erro na Regra 1/3 de Simpson

Nesse caso, o intervalo de integração foi subdividido em um número par de subintervalos, $n = 2k$, $k = 1, 2, 3, \dots$ e portanto, pela parte (b) do Teorema 5.1, temos:

$$E_n = \frac{h^{n+3}}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi) \int_0^u (u - n/2)(u)(u-1) \dots (u-n) du, \text{ com } x_0 \leq \xi \leq x_n$$

Assim, para $n = 2$ temos:

$$E_2 = \frac{h^5}{4!} f^{(4)}(\xi) \int_0^2 (u-1)(u)(u-1)(u-2) du$$

Como $\int_0^2 (u-1)(u)(u-2) du = -\frac{4}{15}$, temos:

$$E_2 = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \text{ } x_0 \leq \xi \leq x_2$$

Como o argumento ξ não é conhecido, não é possível calcular o erro exatamente, portanto, trabalhamos com um limitante superior para o erro:

Limitante Superior para o erro

Temos que o erro é dado por:

$$E_2 = -\frac{h^5 f^{(4)}(\xi)}{90}, x_0 \leq x \leq x_2$$

Tomando em módulo a expressão dada anteriormente, temos que:

$$|E_2| = \left| -\frac{h^5}{90} \right| |f^{(4)}(\xi)|, \xi \in [x_0, x_2]$$

Dessa forma, podemos escrever o limitante superior para o erro como:

$$|E_2| \leq \frac{h^5}{90} \{ \text{máx} |f^{(4)}(x)|, x_0 \leq x \leq x_2 \}$$

Exemplo 5.4

Usando a Regra 1/3 de Simpson, podemos calcular $\int_0^2 e^x dx$ e um limitante superior para o erro da seguinte forma:

Tabelando a função $f(x)$ com $h = 1.0$, temos:

x_i	0	1.0	2.0
$f(x_i)$	1	2.7183	7.3891

Dessa forma, temos:

$$\begin{aligned} \int_0^2 f(x) dx &\cong \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] \\ &= \frac{1}{3} [1 + 4(2.7183) + 7.3891] = 6.4208 \end{aligned}$$

Portanto,

$$\int_0^2 e^x dx \cong 6.4208$$

Limitante superior para o erro

Da fórmula do limitante superior para erro, temos que:

$$|E_2| \leq \frac{h^5}{90} \{ \text{máx} |f^{(4)}(x)|, x \in [0, 2] \}$$

Como a função $f^{(4)}(x) = e^x$, então

$$|f^{(4)}(2.0)| = \text{máx} \{ |f^{(4)}(x)|, x \in [0, 2] \} = 7.3891,$$

pois a função $|f^{(4)}(x)|$ é crescente no intervalo $[0, 2]$.

Assim,

$$|E_2| \leq \frac{(1)^5}{90} 7.3891 = 0.0821$$

5.3.4 Regra 1/3 de Simpson Generalizada

A Regra 1/3 de Simpson Generalizada consiste em dividirmos o intervalo $[a, b]$ de integração em n subintervalos iguais de amplitude h , em que n é um número par de subintervalos, de forma que $x_0 = a$, $x_n = b$, e aplicarmos a Regra 1/3 de Simpson em cada 2 subintervalos, isto é, a cada 3 pontos consecutivos.

Graficamente, temos:

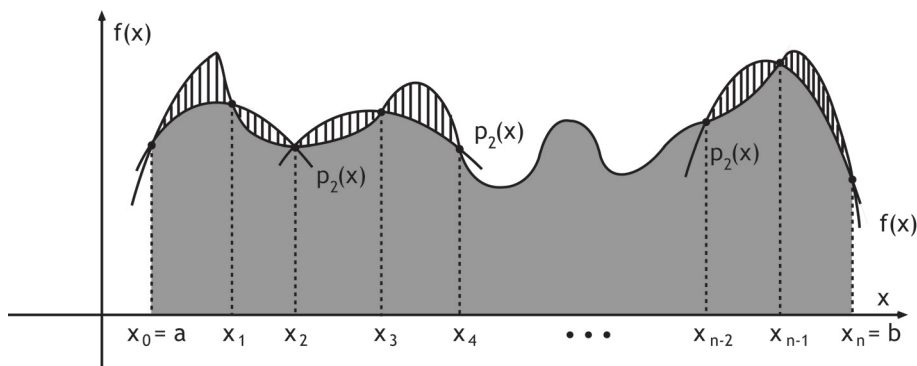


Figura 5.7 Regra 1/3 de Simpson Generalizada.

Assim, aplicando a Regra 1/3 de Simpson para cada 3 pontos, isto é, a cada 2 subintervalos, temos:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \cong \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] + \frac{h}{3}[f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] + \dots$$

$$+ \frac{h}{3}[f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

$$= \frac{h}{3}[f(x_0) + 4(f(x_1) + f(x_3) + \dots + f(x_{n-1}))$$

$$+ 2(f(x_2) + f(x_4) + \dots + f(x_{n-2})) + f(x_n)]$$

Erro total na Regra 1/3 de Simpson Generalizada

O erro total cometido na Regra 1/3 de Simpson Generalizada é obtido a partir da soma dos erros cometidos a cada aplicação da Regra 1/3 de Simpson em dois subintervalos subsequentes, isto é:

Para cada dois subintervalos, 3 pontos distintos e equidistantes, aplicamos a Regra 1/3 de Simpson e o erro cometido para cada aplicação é dado por:

$$E_2 = -\frac{h^5 f^{(4)}(\xi_i)}{90}, x_{2i-2} \leq \xi_i \leq x_{2i}, i = 1, 2, \dots, n/2$$

Assim, temos:

$$E_t = \sum_{i=1}^{n/2} -\frac{h^5 f^{(4)}(\xi_i)}{90}, x_{2i-2} \leq \xi_i \leq x_{2i}, i = 1, 2, \dots, n/2$$

Como $x_0 \leq \xi_i \leq x_n$, $i = 1, 2, \dots, n/2$ e a função $f^{(4)}(x)$ é contínua por hipótese, então existe um $\xi \in [x_0, x_n]$, tal que:

$$\sum_{i=1}^{n/2} f^{(4)}(\xi_i) = \frac{n/2}{2} f^{(4)}(\xi), x_0 \leq \xi \leq x_n$$

Assim, a expressão para o Erro na Regra 1/3 de Simpson Generalizada é dada por:

$$E_t = -\frac{h^5 n}{90 \cdot 2} f^{(4)}(\xi), x_0 \leq \xi \leq x_n$$

Como o número de subintervalos $n = \frac{(x_n - x_0)}{h}$, temos que:

$$E_t = -\frac{h^4}{180}(x_n - x_0)f^{(4)}(\xi), x_0 \leq \xi \leq x_n$$

Limitante Superior para o erro

Como $\xi \in [x_0, x_n]$ não é uma grandeza numérica conhecida, trabalhamos com um limitante para o erro, conforme segue:

$$|E_t| \leq \frac{h^4}{180}(x_n - x_0) \max \{ |f^{(4)}(x)|, x_0 \leq x \leq x_n \}$$

Exemplo 5.5

Usando a Regra 1/3 de Simpson Generalizada, podemos calcular

$\int_0^2 \frac{1}{(1+x)} dx$ com 4 subintervalos e um limitante superior para o erro, da seguinte forma:

$$\text{Temos } h = \frac{(x_n - x_0)}{n} = \frac{2}{4} = 0.5$$

Tabelando a função $f(x)$ com $h = 0.5$, temos:

x_i	0	0.5	1.0	1.5	2.0
$f(x_i)$	1	0.6666	0.5000	0.4000	0.3333

Temos

$$\begin{aligned} \int_0^2 \frac{1}{(1+x)} dx &\cong \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)] = \\ &= \frac{0.5}{3} [1 + 4((0.6666) + 0.4000) \\ &\quad + 2(0.5000) + 0.3333] = 1.1000 \end{aligned}$$

Assim,

$$\int_0^2 \frac{1}{(1+x)} dx \cong 1.1000$$

Limitante Superior para o erro

Temos

$$|E_t| \leq \frac{h^4}{180} (x_n - x_0) \max \left\{ |f^{(4)}(x)|, x_0 \leq x \leq x_n \right\}$$

Como $f^{(4)}(x) = \frac{24}{(1+x)^5}$ é uma função decrescente em módulo no intervalo

$$[0, 2], \max |f^{(4)}(x)| = 24, \text{ em } x = 0.$$

Assim,

$$|E_t| \leq \frac{0.5^4}{180} (2 - 0)(24) = 0.0166$$

5.4 Exercícios

1. Calcule $I = \int_{0.1}^{0.7} (e^{-6x} + 8.4x + 3)dx$ usando:

- Regra dos Trapézios com 6 pontos.
- Regra 1/3 de Simpson com 6 subintervalos.
- Calcule um limitante superior para o erro em cada caso.

2. Seja uma função $f(x)$ tabelada como segue:

x	-1	0	1	2	3	4	5
f(x)	1	0.51	0.42	0.82	1.91	0.99	1.88

Calcule $\int_{-1}^5 f(x)dx$ usando a Regra dos Trapézios e a Regra 1/3 de Simpson.

3. Calcule $\int_0^1 (4.6x^2 + \cos(x)) + 3.5dx$ usando a Regra dos Trapézios com 6 pontos e um limitante superior para o erro.

4. Estude a Regra 3/8 de Simpson e um limitante superior para o erro e resolva o exercício 2) – Referência [1].

5. Calcular $\int_1^2 (e^{3x} + 8.5x + 6)dx$ usando:

- Regra dos Trapézios com 4 subintervalos.

b) Regra 1/3 de Simpson com 6 subintervalos.

c) Regra 3/8 de Simpson com 9 subintervalos e um limitante superior para o erro.

6. Determine o menor número de subintervalos em que podemos dividir o intervalo [0 1] para obter

$$I = \int_0^1 (5e^{-2x}) dx$$

usando a Regra dos Trapézios com erro menor ou igual a 0.001.

7. Resolva o exercício 6) usando a Regra 1/3 de Simpson, a Regra 3/8 de Simpson e para a divisão encontrada calcular a integral I.

8. Uma linha reta foi traçada de modo a tangenciar as margens de um rio nos pontos A e B. Para medir a área entre o rio e a reta AB, foram traçadas perpendiculares em relação a AB com um intervalo de 0.05 m. Qual é essa área?

Perpendiculares	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Comprimento(m)	3.28	4.02	4.64	5.26	4.98	3.62	3.82	3.68	3.26

Faça uma interpretação gráfica do problema e resolva-o usando seus conhecimentos de Cálculo Numérico.

9. Com o Software Matlab, usando a Regra dos Trapézios, calcule as integrais das seguintes funções:

a) $\int_1^5 (\text{sen}(x) - x^2 + 3.1) dx$

b) $\int_{-1}^3 (e^x + \cos(x) - 2.8) dx$

10. Com o Software Numérico – Referência [1] –, usando a Regra 1/3 de Simpson, calcule o valor aproximado da integral das seguintes funções:

a) $\int_1^4 (e^{-x} + 5x + 4.9) dx$, usando 6 subintervalos e um limitante superior para o erro.

b) $\int_1^{2.5} (x^3 + 6x + 2) dx$, usando 9 pontos e um limitante superior para o erro.

11. Faça um Mapa Conceitual detalhado sobre métodos numéricos para Integração Numérica, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

UNIDADE 6

Solução Numérica de Equações Diferenciais
Ordinárias e Parciais

6.1 Introdução

O estudo de Equações Diferenciais deve-se ao fato de que, em situações práticas nas diversas áreas científicas, frequentemente temos problemas cuja modelagem matemática é representada por uma equação diferencial.

O desenvolvimento de métodos numéricos para resolução dessas equações diferenciais é necessário, pois soluções analíticas nem sempre são possíveis de serem determinadas.

Tipicamente, problemas que envolvem uma função de uma variável e suas derivadas levam a uma Equação Diferencial Ordinária, e problemas que envolvem uma função de várias variáveis e suas derivadas parciais nos levam a uma equação diferencial parcial.

Um exemplo simples de equação diferencial ordinária é o problema da propagação da fumaça de cigarro num ambiente fechado ou semifechado.

Exemplo 6.1

Considere uma sala de trabalho que contenha um volume $V = 36 \text{ m}^3$ de ar originalmente isento de monóxido de carbono. Suponha que, a partir do instante $t = 0$, a fumaça do cigarro contendo 4% de monóxido de carbono é introduzida na sala por um fumante, com uma vazão de 0.002 m^3 por minuto, e que essa sala possui uma janela ou porta semiaberta, de forma que a mistura gasosa, distribuída homoganeamente, sai da sala com a mesma vazão.

- Qual é a expressão para a quantidade $q(t)$ de monóxido de carbono na sala num instante t ?
- Sabendo-se que a exposição prolongada de monóxido de carbono com concentração acima de 0.00012 é prejudicial à saúde, em quanto tempo essa concentração será atingida?

Para equacionarmos o problema, consideremos a quantidade $q(t)$ de monóxido de carbono na sala no instante t . A taxa de variação de $q(t)$ é igual a quantidade de monóxido de carbono que está entrando menos a que está saindo.

$$\frac{dq}{dt} = \frac{4}{100} 0.002 - \frac{0.002}{36} q(t)$$

A solução analítica desse problema com a condição inicial $q(0) = 0$ é a função

$$q(t) = \frac{200}{139} - \frac{200}{139} e^{-\frac{139 t}{2500000}}$$

Considerando $f(t) = \frac{q(t)}{36}$, temos:

$$f(t) = 0.04 - 0.04e^{-\frac{139 t}{2500000}}$$

que é a percentagem da quantidade de monóxido de carbono na sala no instante t , como exibido na Figura 6.1:

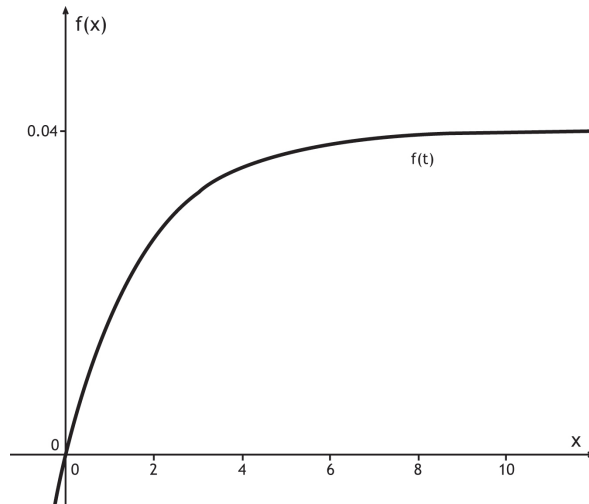


Figura 6.1 Monóxido de carbono numa sala de fumantes.

Para sabermos o instante em que a sala atinge o limite insuportável de monóxido de carbono, resolvemos a seguinte equação:

$$f(t) = \frac{q(t)}{36} = 0.00012$$

E obtemos o instante $t = 54.1$ minutos, o que significa que em 54 minutos a sala estará saturada de monóxido de carbono.

Entretanto, muitas equações diferenciais não possuem solução analítica, o que nos leva ao desenvolvimento de métodos numéricos para obter a solução aproximada.

Definição 6.1

Uma Equação Diferencial Ordinária de ordem n é uma equação da seguinte forma:

$$F(t, y(t), y'(t), y''(t), \dots, y^{(n)}(t)) = 0$$

em que estão envolvidas a função incógnita $y = y(t)$ e suas derivadas até a ordem n , sendo t a variável independente.

A notação $y^{(j)}$ representa a derivada de ordem j da função incógnita y em relação a variável independente t e pode também ser representada por $\frac{d^j y}{dt^j}$.

Exemplo 6.1

As equações a seguir podem ser escritas conforme a definição anterior. São equações diferenciais ordinárias, em que a função desconhecida é $y = y(x)$ e as suas derivadas são $y' = \frac{dy}{dx}$, $y'' = \frac{d^2 y}{dx^2}$.

a) $\frac{dy}{dx} = 2x - y$ é uma equação diferencial de ordem 1.

b) $y'' + (1 - y^2)y' + 6y = 0$, em que $y = y(t)$ e suas derivadas $y'(t) = \frac{dy}{dt}$ e $y''(t) = \frac{d^2 y}{dt^2}$, é uma equação diferencial de ordem 2.

6.2 Equação diferencial de primeira ordem com valor inicial

Um problema de valor inicial consiste em uma equação diferencial $y' = f(x, y)$, e uma condição inicial $y(x_0) = y_0$, em que y_0 é um valor da função y dado no ponto x_0 .

Assim, temos um problema de valor inicial denotado por:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \quad (1)$$

Resolver o problema (1) consiste em determinar uma função $y(x)$ que satisfaça (1), isto é, $y' = f(x, y)$ e $y(x_0) = y_0$.

Exemplo 6.2

Considere o problema do crescimento da poluição numa cidade e o modelo matemático em que o crescimento da poluição está sujeito à hipótese de que a taxa de variação da poluição $p(t)$ é proporcional à poluição num instante t , dado pela equação diferencial:

$$\frac{dp}{dt} = kp, \text{ ou } p'(t) = kp(t)$$

em que k é a taxa de variação da poluição anual.

Suponha que no instante $t = 0$ temos uma poluição inicial de 1ppm (uma parte por milhão). Se $k = 0.065$ por ano, podemos utilizar métodos analíticos ou numéricos adequados de resolução e fazer a previsão dessa poluição num período de tempo $t = 10$ anos, resolvendo o problema de valor inicial:

$$\begin{cases} p' = 0.065 p \\ p(0) = 1 \end{cases}$$

A solução analítica dessa equação diferencial é dada pela função $p(t) = e^{0.065t}$, pois ao substituirmos $p(t)$ e sua derivada na equação dada, verificamos que a equação está satisfeita.

Uma condição que garante a existência e a unicidade da solução do problema de valor inicial (1) é dada pelo seguinte Teorema 6.1:

Teorema 6.1

Considere uma função real $f(x, y)$ contínua no intervalo $a \leq x \leq b$, com a e b finitos e $-\infty < y < +\infty$. Se existe uma constante L tal que para todo $x \in [a, b]$ e para todo par de valores (y, y_1) tivermos

$$|f(x, y) - f(x, y_1)| \leq L |y - y_1|$$

conhecida como Condição de Lipschitz, então existe uma única função $y = y(x)$ satisfazendo as seguintes condições:

- $y(x)$ é contínua e diferenciável para todo $x \in [a, b]$;
- $y' = f(x, y(x))$ para $x \in [a, b]$;
- $y(x_0) = y_0$, em que y_0 é um valor conhecido.

Prova: Referência [11]

Observação

Podemos observar pelo Teorema 6.1 que a solução de uma equação diferencial ordinária é uma função $y = y(x)$ contínua e diferenciável que satisfaz a equação diferencial $y' = f(x, y)$ e passa pelo ponto (x_0, y_0) .

6.3 Discretização

O processo de discretização consiste em resolver numericamente uma equação diferencial calculando aproximações para a função $y = y(x)$ em pontos discretos $x_0, x_1, x_2, \dots, x_N$ do intervalo de discretização $[a, b]$.

Para discretizar o intervalo $[a, b]$, tomamos N subintervalos, $N \geq 1$, e fazemos $x_n = x_0 + nh$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$ com $x_0 = a$ e $x_N = b$, sendo $h = \frac{x_N - x_0}{N}$.

Conhecendo $y(x)$ num ponto inicial dado $y(x_0) = y_0$ (valor inicial), calculamos passo a passo, nos pontos $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$, $x_3 = x_0 + 3h, \dots$, $x_n = x_0 + nh$, as soluções aproximadas y_n para a solução exata $y(x_n)$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$, conforme ilustrado na Figura 6.2:

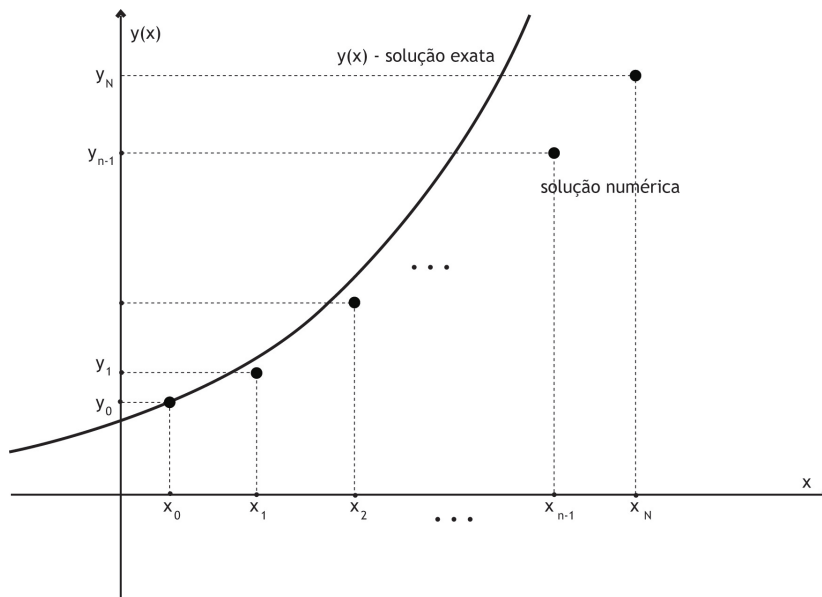


Figura 6.2 Discretização de um intervalo.

O erro local, cometido nas aproximações em cada ponto, é a diferença entre o valor exato da equação diferencial e o valor numérico aproximado em cada um dos pontos do intervalo $[a, b]$, isto é:

$$e(x_n) = y(x_n) - y_n, n = 1, \dots, N$$

6.4 Métodos Numéricos para Equações Diferenciais Ordinárias

6.4.1 Método de Euler

Seja a equação diferencial de primeira ordem com valor inicial:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

O Método de Euler é baseado na expansão da função derivável $y(x)$ em Série de Taylor, isto é, expandindo a função $y(x)$ por Série de Taylor nas vizinhanças do ponto x_n , até a ordem 1, podemos escrever:

$$y(x_n + h) \cong y(x_n) + hy'(x_n)$$

Dessa forma, como o ponto $x_n + h = x_{n+1}$ e $y'(x_n) = f(x_n, y(x_n))$, temos:

$$y(x_{n+1}) \cong y(x_n) + hf(x_n, y(x_n))$$

Assim, podemos escrever para $n = 0$:

$$y(x_1) \cong y(x_0) + hf(x_0, y(x_0))$$

e

$$y(x_1) \cong y_0 + hf(x_0, y_0)$$

Chamando $y_1 = y(x_0) + hf(x_0, y(x_0))$, temos o valor aproximado da função $y(x)$ no ponto x_1 , isto é, $y(x_1) \cong y_1$.

Portanto, o Método de Euler no primeiro passo calcula $y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$ que é a aproximação y_1 da solução exata $y(x_1)$ no ponto x_1 .

Repetindo esse procedimento para o ponto x_2 , temos no segundo passo $y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1)$ que é a aproximação y_2 da solução exata $y(x_2)$ no ponto x_2 . E assim sucessivamente para cada um dos pontos x_n , $n = 0, 1, 2, \dots, N$ de um intervalo $[a, b]$.

De maneira geral, temos:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), n = 0, 1, 2, \dots$$

Podemos interpretar graficamente o Método de Euler aproximando a função $y(x)$ pela reta tangente ao gráfico de y no ponto dado $(x_0, y(x_0))$, da seguinte forma:

$$(y - y_0) = m(x - x_0).$$

em que $m = y'(x_0) = f(x_0, y_0)$ é o coeficiente angular dessa reta.

Assim, podemos escrever:

$$(y - y_0) = f(x_0, y_0)(x - x_0) \rightarrow y = y_0 + f(x_0, y_0)(x - x_0)$$

Tomando $y = y_1$ e $x = x_1$, temos que:

$$y_1 = y_0 + f(x_0, y_0)(x_1 - x_0)$$

Ou ainda

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$$

Assim, o ponto (x_1, y_1) pertence a essa reta tangente, e o mesmo raciocínio pode ser utilizado para os demais pontos discretizados, conforme ilustramos na Figura 6.3:

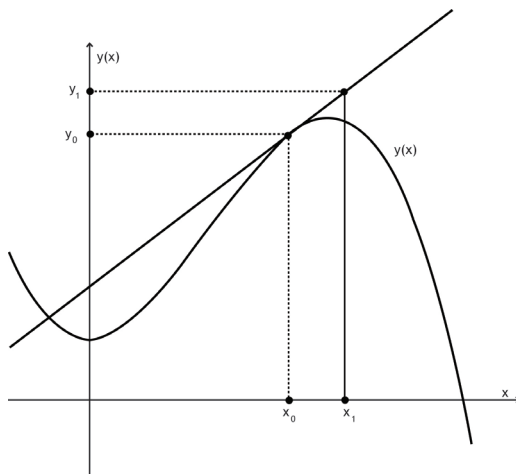


Figura 6.3 Método de Euler.

O erro local cometido é a diferença entre o valor exato e o valor aproximado em cada ponto (x_n, y_n) , $n = 0, 1, \dots, N$.

Erro de Truncamento

No Método de Euler, truncamos a Série de Taylor em $p = 1$, e o erro é dado por: $E = \frac{y''(\xi)h^2}{2!}$, $\xi \in [a, b]$.

Como o parâmetro ξ não é conhecido no intervalo de discretização, vamos considerar uma estimativa para o erro, isto é, um limitante superior para o erro:

$$E \leq \frac{Mh^2}{2!}$$

$$M = \text{máx} \{ |y''(x)|, x \in [a, b] \}$$

Algoritmo 6.1

Considere a equação diferencial, com valor inicial $\begin{cases} y' = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$

1. Declare

a) Função $f(x, y)$

b) Condições iniciais: $y(x_0) = y_0$

c) Intervalo $[a, b]$, em que $a = x_0$

d) Número de subintervalos N e calcule $h = \frac{b - a}{N}$

2. Para $n = 0, \dots, N - 1$, faça:

$$\left[\begin{array}{l} \text{início} \\ x_{n+1} = x_n + h \\ y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ \text{fim} \end{array} \right.$$

Exemplo 6.3

Considere a seguinte equação diferencial de ordem 1 com valor inicial:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) = y \\ y(x_0) = y(0) = 1 \end{cases}$$

- a) Usando o Método de Euler, podemos calcular a solução aproximada $y(1.0)$ com $h = 0.2$.
- b) Compare os valores exatos dessa equação, com os valores aproximados obtidos em a).

Considerando $h = 0.2$, temos a discretização do intervalo dada por:

$$x_0 = 0, x_1 = 0.2, x_2 = 0.4, x_3 = 0.6, x_4 = 0.8 \text{ e } x_5 = 1.0$$

Do Método de Euler:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

Cálculo de y_1

Para $n = 0$, temos a condição inicial $y(x_0) = y(0) = 1$, então:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) \\ &= y_0 + 0.2(y_0) = 1 + 0.2(1) = 1.2000 \end{aligned}$$

Cálculo de y_2

Para $n = 1$, temos:

$$\begin{aligned} y_2 &= y_1 + hf(x_1, y_1) \\ &= y_1 + 0.2(y_1) = 1.2000 + 0.2(1.2000) = 1.4400 \end{aligned}$$

Cálculo de y_3

Para $n = 2$, temos:

$$\begin{aligned} y_3 &= y_2 + hf(x_2, y_2) \\ &= y_2 + 0.2(y_2) = 1.7208 + 0.2(1.7208) = 2.0736 \end{aligned}$$

Cálculo de y_4

Para $n = 3$, temos:

$$y_4 = y_3 + hf(x_3, y_3)$$

$$= y_3 + 0.2(y_3) = 1.7208 + 0.2(1.7208) = 2.0736$$

Cálculo de y_5

Para $n = 4$, temos:

$$y_5 = y_4 + hf(x_4, y_4)$$

$$= y_4 + 0.2(y_4) = 2.0736 + 0.2(2.0736) = 2.4883$$

Portanto, temos que $y(1) \cong y_5 = 2.4883$.

Estimativa para o erro

$$E \leq \frac{h^2}{2} \max \{ |y''(x)|, x \in [0, 1] \}$$

Como a solução analítica $y(x)$ da equação é dada por $y(x) = e^x$, temos que: $\max \{ |y''(x)|, x \in [0, 1] \} = 2.7183$, em $x = 1$, uma vez que $y''(x) = e^x$ é uma função crescente em módulo.

Portanto, temos:

$$E \leq \frac{(0.2)^2}{2} (2.7183) = 0.0544.$$

Exibimos na Tabela 6.1 os valores exatos, a partir da solução exata $y(x) = e^x$, a solução numérica pelo Método de Euler e os respectivos erros locais nos pontos discretos.

Tabela 6.1

N	x_j	Sol. Exata $y(x_n)$	Sol. Aprox. y_n	Erro $ y(x_n) - y_n $
0	0	1.0000	1.0000	0.0000
1	0.2	1.2214	1.2000	0.0214
2	0.4	1.4918	1.4400	0.0518
3	0.6	1.8221	1.7280	0.0941
4	0.8	2.2255	2.0736	0.1519
5	1.0	2.7183	2.4883	0.2300

Observe na Tabela 6.1 que temos uma boa estimativa para o erro no início do processo, mas piora quando os pontos afastam-se do ponto inicial.

Podemos observar também que para valores de h menores que $h = 0.2$, obteremos melhores resultados, pois o erro depende da amplitude do passo h .

6.4.2 Método de Euler Aperfeiçoado

O Método de Euler Aperfeiçoado é uma modificação do Método de Euler desenvolvido anteriormente, da seguinte forma:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} [f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hy'_n)], \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Para melhor entendimento da expressão do Método de Euler Aperfeiçoado, faremos uma interpretação gráfica, conforme Figura 6.4 a seguir:

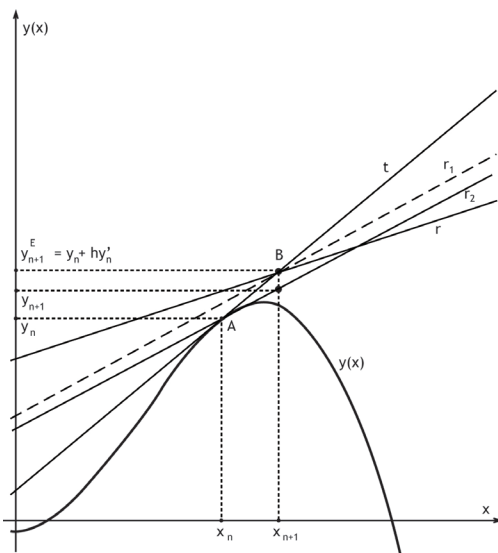


Figura 6.4 Método de Euler aperfeiçoado.

Observando a Figura 6.4, vemos que:

- A reta t passa pelo ponto $A = (x_n, y_n)$ e possui coeficiente angular $y'_n = f(x_n, y_n)$. Usando o Método de Euler, calcula-se $y_{n+1}^E = y_n + hy'_n$;
- A reta r passa pelo ponto $B = (x_{n+1}, y_{n+1}^E)$ e possui coeficiente angular $f(x_n + h, y_n + hy'_n) = f(x_{n+1}, y_{n+1}^E)$;
- A reta r_1 passa pelo ponto B e sua inclinação é a média das inclinações das retas t e r ;
- A reta r_2 passa pelo ponto A e é paralela a reta r_1 ;

e) O valor y_{n+1} obtido pelo Método de Euler Aperfeiçoado é uma aproximação para a solução $y(x)$ no ponto x_{n+1} .

Algoritmo 6.2

Considere a equação diferencial
$$\begin{cases} y'(x) = f(x, y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}$$

1. Declare:

a) Função $f(x, y)$

b) Condições iniciais: $y(x_0) = y_0$

c) Intervalo $[a, b]$, em que $a = x_0$

d) Número de subintervalos N e calcule: $h = \frac{b - a}{N}$

2. Para $n = 0, 1, 2, 3, \dots, N - 1$

Calcule:

$$\left[\begin{array}{l} \textit{início} \\ x_{n+1} = x_n + h \\ k_1 = f(x_n, y_n) \\ k_2 = f(x_{n+1}, y_n + hk_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ \textit{fim} \end{array} \right.$$

Exemplo 6.4

Considere a equação diferencial com valor inicial:

$$\begin{cases} y' = f(x, y) = y \\ y(x_0) = y(0) = 1 \end{cases}$$

Podemos, usando o Método de **Euler Aperfeiçoado**, determinar a solução aproximada $y(1.0)$ com $h = 0.2$ da seguinte forma:

Considerando $h = 0.2$, temos a discretização do intervalo:

$$x_0 = 0, x_1 = 0.2, x_2 = 0.4, x_3 = 0.6, x_4 = 0.8 \text{ e } x_5 = 1.0$$

Cálculo de y_1

Para $n=0$ temos a condição inicial $y(x_0) = y(0) = 1$, então:

$$k_1 = f(x_0, y_0) \rightarrow k_1 = y_0 = 1$$

$$k_2 = f(x_0 + h, y_0 + hk_1) = y_0 + hk_1 = 1 + 0.2(1) = 1.2000$$

Do Método de Euler Aperfeiçoado temos:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(k_1 + k_2)$$

Portanto:

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 1 + \frac{0.2}{2}(1 + 1.200) = 1.2200$$

Cálculo de y_2

Para $n=1$

$$k_1 = f(x_1, y_1) \rightarrow k_1 = y_1 = 1.2200$$

$$k_2 = f(x_1 + h, y_1 + hk_1) = (y_1 + hk_1) = 1.2200 + 0.2(1.2200) = 1.4640$$

$$y_2 = y_1 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 1.2200 + \frac{0.2}{2}(1.2200 + 1.4640) = 1.4884$$

Cálculo de y_3

Para $n=2$

$$k_1 = f(x_2, y_2) \rightarrow k_1 = y_2 = 1.4884$$

$$k_2 = f(x_2 + h, y_2 + hk_1) = (y_2 + hk_1) = 1.4884 + 0.2(1.4884) = 1.7861$$

$$y_3 = y_2 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 1.4884 + \frac{0.2}{2}(1.4884 + 1.7861) = 1.8159$$

Cálculo de y_4

Para $n=3$

$$k_1 = f(x_3, y_3) \rightarrow k_1 = y_3 = 1.8159$$

$$k_2 = f(x_3 + h, y_3 + hk_1) = (y_3 + hk_1) = 1.8159 + 0.2(1.8159) = 2.1791$$

$$y_4 = y_3 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 1.8159 + \frac{0.2}{2}(1.8159 + 2.1791) = 2.2154$$

Cálculo de y_5

Para $n = 4$

$$k_1 = f(x_4, y_4) \rightarrow k_1 = y_4 = 2.2154$$

$$k_2 = f(x_4 + h, y_4 + hk_1) = (y_4 + hk_1) = 2.2154 + 0.2(2.2154) = 2.6585$$

$$y_5 = y_4 + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) = 2.2154 + \frac{0.2}{2}(2.2154 + 2.6585) = 2.7028$$

Portanto, temos que $y(1.0) \cong y_1 = 2.7028$.

Exibimos na Tabela 6.2 os valores exatos e os valores aproximados obtidos.

Tabela 6.2

N	x_i	Sol. Exata $y(x_n)$	Sol. Aprox. y_n	Erro $ y(x_n) - y_n $
0	0	1.0000	1.0000	0.0000
1	0.2	1.2214	1.2200	0.0014
2	0.4	1.4918	1.4884	0.0034
3	0.6	1.8221	1.8159	0.0062
4	0.8	2.2255	2.2154	0.0101
5	1.0	2.7183	2.7028	0.0155

Como podemos observar na Tabela 6.2, o Método de Euler Aperfeiçoado apresentou melhores resultados quando comparado com o Método de Euler, isto é, os erros são menores.

Para obtermos melhores resultados devemos diminuir a amplitude do passo h , por exemplo, tome $h = 0.01$ e resolva o exercício da mesma forma, como anteriormente, e compare os resultados obtidos.

Observação

Os Métodos de Euler e Euler Aperfeiçoado são chamados de Métodos de Runge-Kutta de 1ª ordem e 2ª ordem, respectivamente. Esses métodos são bastante utilizados, pela sua simplicidade e pela precisão dos resultados.

Existem também, os Métodos de Runge-Kutta de 3ª e 4ª ordem, os quais podem ser encontrados com detalhes na Referência [2].

6.5 Solução Numérica de Equações Diferenciais Parciais: Uma Introdução

Como no caso das equações diferenciais ordinárias, vários problemas nas diversas áreas científicas podem ser formulados por uma equação diferencial parcial.

Em geral, as equações diferenciais parciais são mais complexas do que as equações diferenciais ordinárias, pois envolvem um número maior de variáveis.

Assim, quando a função incógnita depende de mais de uma variável e relaciona com suas derivadas parciais através de uma equação, temos uma equação diferencial a derivadas parciais.

Por exemplo, a equação $\frac{\partial u}{\partial t} - 2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$ é uma equação diferencial parcial do tipo parabólica em que a função incógnita é $u = u(x, t)$.

Nesta seção, veremos um método numérico para resolução das equações diferenciais parciais, usando para isto uma discretização por diferenças finitas.

Apresentaremos um método de diferenças finitas para resolução de uma equação diferencial parcial, o qual é baseado na discretização do domínio e a substituição das derivadas presentes na equação diferencial por aproximações envolvendo valores numéricos da função.

Para isso, inicialmente tratamos a aproximação das derivadas de uma função de uma variável por diferenças finitas, usando a expansão da Série de Taylor.

Considere uma função $y(x)$ contínua com derivadas contínuas, podemos escrever a função $y(x)$ nas vizinhanças de um ponto x por:

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2} y''(x) + \dots$$

Ou ainda,

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2} y''(x) + \dots$$

Tomando a expansão da função $y(x)$ por Série de Taylor, nas vizinhanças do ponto x até a primeira ordem, e desprezando os termos de ordem $O(h^2)$ e de ordem maior, temos:

$$y(x+h) \cong y(x) + hy'(x)$$

Dessa forma temos a aproximação da derivada da função $y(x)$, da seguinte forma:

$$y'(x) \cong \frac{y(x+h) - y(x)}{h}$$

Considerando $\Delta y(x) = y(x+h) - y(x)$, temos a diferença finita progressiva de $y(x)$ e a **Fórmula Progressiva** por:

$$y'(x) \cong \frac{1}{h} \Delta y(x)$$

Analogamente, podemos obter a **Fórmula Regressiva** do seguinte modo:

$$y'(x) \cong \frac{y(x) - y(x-h)}{h}$$

Considerando $\nabla y(x) = y(x) - y(x-h)$, obtemos a diferença finita regressiva de $y(x)$ e a **Fórmula Regressiva** por:

$$y'(x) \cong \frac{1}{h} \nabla y(x)$$

Podemos também, usando a expansão da função $y(x)$ por Série de Taylor nas vizinhanças do ponto x , até ordem 1, desprezando os termos da ordem $O(h^2)$ e subtraindo $y(x-h)$ de $y(x+h)$, obter:

$$y'(x) \cong \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}$$

Considerando $\delta y(x) = y(x+h) - y(x-h)$, temos a diferença finita central de $y(x)$ e a **Fórmula Central** dada por:

$$y'(x) \cong \frac{\delta y(x)}{2h}$$

Como anteriormente, podemos obter uma aproximação para $y''(x)$, tomando a expansão da função $y(x)$ por Série de Taylor até a ordem 3 e considerando a soma das expressões para $y(x+h)$ e $y(x-h)$, temos:

$$\begin{aligned} y''(x) &\cong \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} \\ &= \frac{1}{h^2} \delta^2 y(x) \end{aligned}$$

Observação

As notações $\Delta y(x)$, $\nabla y(x)$ e $\delta y(x)$ representam os operadores de diferença finita progressivo, regressivo e central, respectivamente, aplicados à função $y(x)$.

Essas fórmulas de diferenças finitas desenvolvidas para aproximação das derivadas de uma função de uma variável podem ser utilizadas para aproximação das derivadas parciais de uma função de várias variáveis.

Seja $u(x, t)$ uma função de duas variáveis (x, t) , temos as seguintes diferenças:

Fórmula Progressiva na variável t

$$u_t(x, t) \cong \frac{u(x, t+k) - u(x, t)}{k} = \frac{1}{k} \Delta_t u(x, t)$$

Fórmula Regressiva na variável t

$$u_t(x, t) \cong \frac{u(x, t) - u(x, t-k)}{k} = \frac{1}{k} \nabla_t u(x, t)$$

Fórmula Central na variável x

$$u_x(x, t) \cong \frac{u(x+h, t) - u(x-h, t)}{2h} = \frac{1}{2h} \delta_x u(x, t)$$

$$u_{xx}(x, t) \cong \frac{u(x+h, t) - 2u(x, t) + u(x-h, t)}{h^2} = \frac{1}{h^2} \delta_x^2 u(x, t)$$

6.5.1 Método de Diferenças Finitas

Seja uma função de duas variáveis $u(x, t)$, considere o plano subdividido em retângulos iguais de lados $\Delta x = h$ e $\Delta t = k$.

Considere um ponto $P = (x, t)$ na malha, então este será representado por $P = (x, t) = (x_i, t_j) = (ih, jk)$. Os índices i e j são inteiros e os valores h e k são os espaçamentos da malha nas direções dos eixos x e t .

Nesse caso, o valor da função $u(x, t)$ no ponto P será denotado por $u_P = u(x_i, t_j) = u(ih, jk) = u_{i,j}$.

O Método das Diferenças Finitas consiste em definir uma malha na região de interesse a ser calculada, os valores da equação diferencial parcial e utilizar aproximações das derivadas vistas anteriormente nessa equação, num ponto genérico $P = (x_i, t_j)$, conforme mostrado na Figura 6.5.

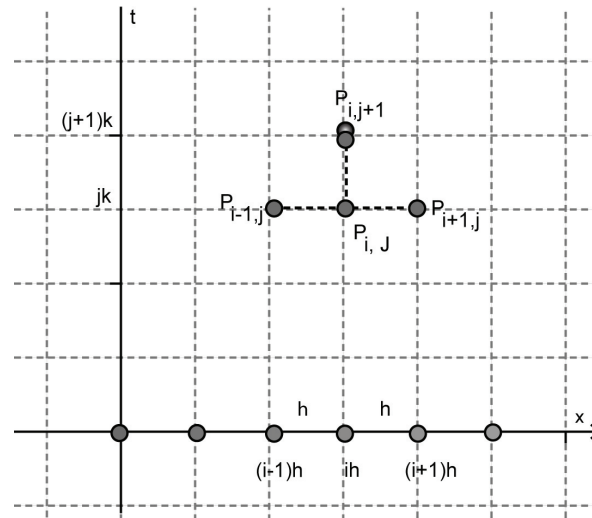


Figura 6.5 Malha dos pontos no plano.

O Método de Diferenças Finitas para uma equação do tipo parabólica é obtido pelo desenvolvimento da Série de Taylor da função $u(x, t)$ na variável t (tempo) para formar o quociente de diferenças:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) = \frac{u(x_i, t_{j+k}) - u(x_i, t_j)}{k} + \frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) \quad (2)$$

para algum $\mu_j \in (t_j, t_{j+1})$ e a Série de Taylor para função $u(x, t)$ na variável espacial x :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) = \frac{u(x_{i+1}, t_j) - 2u(x_i, t_j) - u(x_{i-1}, t_j))}{h^2} - \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_i, t_j), \quad (3)$$

em que $\xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$.

Uma vez substituídas as expressões das derivadas (2) e (3) e desprezando os termos de ordem $O(k)$ e de $O(h^2)$ na equação diferencial parcial, teremos uma equação de diferenças para ser resolvida, escrevendo as derivadas parciais no ponto $P = (x_i, t_j)$ como:

$$u_t(x_i, t_j) = \frac{u_{ij+1} - u_{ij}}{k}$$

$$u_{xx}(x_i, t_j) = \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}$$

6.5.2 Método Explícito

Descreveremos a seguir um método explícito para resolução de uma equação diferencial parcial, baseado em diferenças finitas.

As equações diferenciais parciais de segunda ordem classificam-se em hiperbólicas, elípticas e parabólicas. Para facilidade de entendimento exibiremos um problema unidimensional de difusão dado pela equação diferencial parabólica para uma função $u(x, t)$ definida no retângulo $[0, L] \times [0, T]$:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = 0, \quad 0 < x < L \text{ e } 0 < t < T \quad (4)$$

com condições de contorno $u(0, t) = u(L, t) = 0$ e $0 < t < T$, as quais representam os valores da função u nas extremidades $x = 0$ e $x = L$, as condições iniciais no instante $t = 0$, $u(x, 0) = f(x)$, $0 \leq x \leq L$, e α é o coeficiente de difusão.

O Método das Diferenças Finitas Explícito consiste em determinarmos uma aproximação da solução da equação diferencial parcial envolvendo uma função $u(x, t)$ utilizando, para isto, a derivada parcial de u com relação a variável t (tempo) pela diferença progressiva e a derivada parcial de u com relação a variável x (espaço) pela diferença central, conforme malha da Figura 6.6:

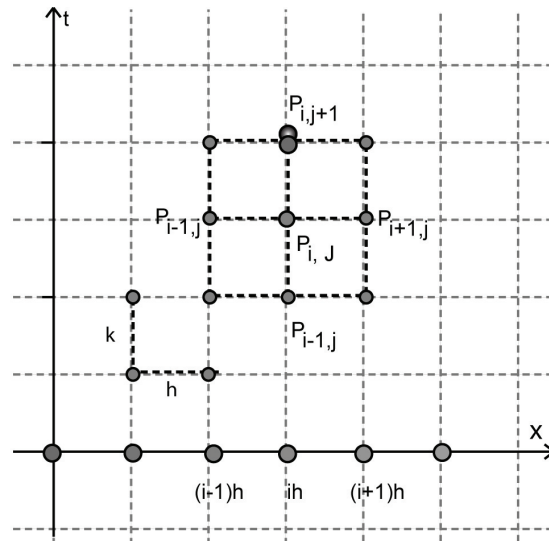


Figura 6.6 Malha do Método Explícito.

Inicialmente, construímos uma malha no domínio selecionando um número inteiro $m > 0$ e definimos um passo na direção da variável x de tamanho $h = l/m$. Em seguida, selecionamos um passo na direção da variável t de tamanho k .

Os pontos da malha nesse caso são do tipo (x_i, t_j) , em que $x_i = ih$ para $i = 0, 1, \dots, m$, e $t_j = jk$, para $j = 0, 1, \dots$

A equação parabólica (4) implica que para todos os pontos interiores à malha (x_i, t_j) , para todo $i = 1, 2, \dots, m-1$ e $j = 1, 2, \dots$, teremos:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j)$$

Então, substituindo as expressões (2) e (3) em (4) temos a função $u(x, t)$ nos pontos (x_i, t_j) , ou seja, $u_{ij} = u(x_i, t_j)$ satisfazendo o sistema de equações lineares como segue:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \alpha^2 \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \quad (5)$$

Para todo $i = 1, 2, \dots, m-1$ e $j = 1, 2, \dots$

Essa aproximação leva a um erro de truncamento local no ponto (i, j) para esta equação de diferenças que é dado por:

$$E_{ij} = \frac{k}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_i, \mu_j) - \alpha^2 \frac{h^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\xi_i, t_j)$$

A equação de difusão discretizada como em (5) pode ser resolvida para $u_{i,j+1}$ conhecendo-se os valores $u_{i,j}$, $u_{i+1,j}$ e $u_{i-1,j}$, como segue:

$$u_{i,j+1} = \left(1 - 2\alpha^2 \frac{k}{h^2}\right) u_{i,j} + \alpha^2 \frac{k}{h^2} (u_{i+1,j} + u_{i-1,j}) \quad (6)$$

Para todo $i = 1, 2, \dots, m-1$ e $j = 1, 2, \dots$

Denotando $\alpha^2 \frac{k}{h^2} = \lambda$ escrevemos (6) como:

$$u_{i,j+1} = \lambda u_{i+1,j} + (1 - 2\lambda) u_{i,j} + \lambda u_{i-1,j} \quad (7)$$

Se conhecermos uma condição inicial $u(x, 0) = f(x)$, para todo $0 \leq x \leq 1$, temos que $u_{i,0} = f(x_i)$, para todo $i = 0, 1, \dots, m-1$ e as condições de contorno nas extremidades $u(0, t) = 0$ e $u(1, t) = 0$ temos que $u_{0,j} = u_{m,j}$, respectivamente.

Dessa forma, podemos determinar todos os elementos da forma $u_{i,1}$ explicitamente conhecendo as aproximações $u_{i,0}$ e continuando o procedimento obtemos de maneira similar os valores $u_{i,2}, u_{i,3}, \dots$

Exemplo 6.5

Considere o problema de difusão com valor inicial e condições de contorno dado pela equação unidimensional:

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t) = 0, \quad 0 < x < 1, t > 0 \quad (8)$$

Com as condições de contorno $u(0, t) = u(1, t) = 0, t > 0$, e com as condições iniciais $u(x, 0) = \text{sen}(\pi x)$, $0 \leq x \leq 1$.

Resolvendo numericamente e utilizando o método de diferenças progressivas na variável t e centradas em x , considerando os passos na variável x com $h = 0.2$ e com passo na variável t com $k = 0.01$. Observe que a relação entre os espaçamentos da malha escolhida é $\lambda = \frac{k}{h^2} = 0.25$.

Considerando esses passos temos:

$$x_i = 0.2i, \quad i = 0, 1, 2, \dots, 5$$

$$t_j = 0.01j, \quad j = 0, 1, 2, \dots$$

As condições de contorno do problema nos fornecem $u_{0,j} = u_{i,j} = 0$ e os dados iniciais, $u_{i,0} = \text{sen}(\pi(ih))$. Representamos os valores das condições iniciais na Tabela 6.3:

Tabela 6.3

i	j	$x_i = ih = 0.2i$	$u_{i,j}$
0	0	0	0
1	0	0.2	0.5877852524
2	0	0.4	0.9510565165
3	0	0,6	0.9510565163
4	0	0.8	0.5877852522
5	0	1	0

Aplicando a expressão da fórmula (7):

$$u_{i,j+1} = 0.25u_{i+1,j} + 0.5u_{i,j} + 0.25u_{i-1,j}$$

ou

$$u_{i,j+1} = 0.25(u_{i+1,j} + 2u_{i,j} + u_{i-1,j})$$

para calcular os valores da solução aproximada nos pontos da $(j+1)$ -ésima linha no tempo, conhecendo-se apenas os valores da j -ésima linha.

Assim, obtemos os elementos $u_{i,j+1}$ para $j = 1, 2, \dots$ e os demais elementos a partir das condições iniciais e condições de contorno.

Escolhendo inicialmente $j = 0$, obtemos os valores aproximados da solução $u_{1,1}$, $u_{2,1}$, $u_{3,1}$ e $u_{4,1}$ na primeira linha da malha na variável t , como segue:

$$\begin{aligned} u_{1,1} &= 0.25(u_{2,0} + 2u_{1,0} + u_{0,0}) \\ &= 0.25(0.9510565165) + 2(0.5877852524) + (0) \\ &= 0.5316567555 \end{aligned}$$

$$u_{2,1} = 0.25(u_{3,0} + 2u_{2,0} + u_{1,0}) = 0.8602387002$$

$$u_{3,1} = 0.25(u_{4,0} + 2u_{3,0} + u_{2,0}) = 0.8602387005$$

$$u_{4,1} = 0.25(u_{5,0} + 2u_{4,0} + u_{3,0}) = 0.5316567555$$

Da mesma forma, os valores numéricos aproximados de $u(x, t)$ na segunda linha da variável t e x , e em todos os pontos do domínio desejado podem ser calculados.

Como a solução exata desse problema é dada pela expressão $u(x, t) = e^{-\pi^2 t} \text{sen}(\pi x)$, podemos comparar os resultados obtidos numericamente com os valores exatos nos pontos (i, j) e obter os erros correspondentes.

A estabilidade de um método numérico está relacionada ao crescimento ou decaimento dos erros decorrentes das operações aritméticas envolvidas na resolução do sistema de equações envolvido.

Dizemos que um método é estável quando esses erros não aumentam quando o número de pontos da malha cresce.

Mostra-se que devemos escolher os valores de h e k de modo que $\frac{k}{h^2} \leq \frac{1}{2}$, e já que $\alpha = 1$ no exemplo dado, escolhemos $h = 0,2$ e $k = 0,01$ e obtemos $\lambda = \frac{k}{h^2} = 0.25 \leq 0.5$, de modo que essa condição de estabilidade é satisfeita para o método utilizado.

Caso o valor da relação entre o espaçamento da malha λ fosse maior do que 0.5, teríamos problemas de estabilidade e buscaríamos outro método para resolução.

6.6 Exercícios

1. Usando o Método de Euler, resolva as seguintes equações diferenciais com valor inicial:

a) $y' = 4 - 2x$, com $y(0) = 2$. Usando $h = 0.01$, calcule $y(0.05)$.

b) $y' = 1 - y/x$, com $y(2) = 2$. Usando $h = 0.1$, calcule $y(2.4)$.

c) $y' = -y/x$, com $y(0) = 20$. Usando $h = 0.2$, calcule $y(1.0)$.

2. Usando o Método de Euler Aperfeiçoado, calcule a solução aproximada para as seguintes equações diferenciais com valor inicial:

a) $y' = -x/y$, com $y(0) = 20$. Usando $h = 0.2$, calcule $y(1.2)$.

b) $y' = y - x$, com $y(0) = 2$. Usando $h = 0.1$, calcule $y(0.9)$.

3. Com o Software Numérico – Referência [1] –, usando o Método de Euler, calcule a solução aproximada para as seguintes equações diferenciais com valor inicial:

a) $y' = -2y + 1$, com $y(0) = 1$.

Usando $h = 0.1$ e depois $h = 0.01$, calcule $y(0.9)$. O que você pode afirmar sobre a qualidade dos resultados obtidos? Justifique suas afirmações teoricamente.

b) $y' = y$, com $y(0) = 1$.

Usando $h = 0.2$, calcule $y(2.0)$ e um limitante superior para o erro.

4. Escreva as equações discretizadas da equação diferencial parabólica da difusão para:

a) $h = 0.1$ e $k = 0.1$

b) $h = 0.5$ e $k = 0.3$

5. Discretize a equação diferencial parcial parabólica da difusão,

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t)$$

utilizando o Método das Diferenças Finitas para valores de passos no tempo $k = 0.05$ e no espaço $h = 0.1$.

Considere as condições de contorno $u(0,t) = u(2,t) = 0$, $0 < t < T$ e as condições iniciais $u(x,0) = 1$, $0 \leq x \leq 2$ para calcular o valor de $u(x,t)$ nos pontos $(0.9, 0.05)$, $(1, 0.05)$, $(1.1, 0.05)$ e $(1, 0.1)$.

6. Discretize a equação diferencial parcial parabólica da difusão,

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,t) = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,t)$$

utilizando o Método das Diferenças Finitas para valores do coeficiente de difusão $\alpha = 1$.

Escolha valores para os passos no tempo k e no espaço h e encontre um valor aproximado para a solução numa região quadriculada de lado 1, considerando as condições de contorno $u(0,t) = u(1,t) = 0$, $0 < t < T$ e as condições iniciais $u(x,0) = 1$, $0 \leq x \leq 1$. Plote os valores das aproximações obtidas nos pontos da malha.

7. Faça um Mapa Conceitual detalhado sobre métodos numéricos para as Equações Diferenciais Ordinárias, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

8. Faça um Mapa Conceitual detalhado sobre métodos numéricos para as Equações Diferenciais Parciais, introduzindo *labels* indicando se aprendeu (A), não aprendeu (N), se gostou (G), detestou (D), achou interessante (I), etc.

REFERÊNCIAS

- [1] ARENALES, S. H. V.; DAREZZO A. *Cálculo Numérico: Aprendizagem com Apoio de Software*. São Paulo: Thomson, 2008.
- [2] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. Boston: PWS Publishing Company, 1993.
- [3] DEMIDOVICH, B. P.; MARON, I. A. *Computational Mathematics*. Moscow: Mir Publishers, 1976.
- [4] LAMBERT, J. D. *Computational Methods in Ordinary Differential Equations*. London: John Wiley & Sons, 1971.
- [5] RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. *Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais*. 2. ed. São Paulo: Makron Books, 1997.
- [6] SALVADOR, J. A. et al. Mapas Conceituais/Software Numérico: Uma Experiência no Estudo de Sistemas Lineares e Zeros de Funções. *Revista Tema: Publicação da Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional*, São Carlos, v. 4, n. 1, 2003.
- [7] STEINBRUCH, A.; WINTERLE, P. *Álgebra Linear*. São Paulo: Makron Books Ltda., 1987.
- [8] SWOKOWSKI, E. W. *Cálculo com Geometria Analítica*. 2. ed. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 1995. v. 1 e 2.
- [9] STEWART, J. *Cálculo*. 4.ed. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2003. v. 1.
- [10] WILKINSON, J. H. *Rounding Errors in Algebraic Processes*. Englewood Cliffs: Prentice Hall, Inc., 1963.
- [11] ZILL, D. G. *Equações Diferenciais*. São Paulo: Makron Books, 2001. v. 1.
- [12] CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. *Métodos Numéricos para Engenharia*. São Paulo: Mc-Graw Hill, 2008

SOBRE OS AUTORES

Selma Helena de Vasconcelos Arenales

Professora do Departamento de Matemática da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar). Possui graduação em Matemática na Universidade Estadual Paulista (UNESP) de Presidente Prudente e Mestrado em Matemática Aplicada na Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP). Tem experiência em projetos de pesquisa nas áreas de Análise Numérica e Otimização com enfoques em modelagem de problemas e métodos numéricos de resolução. Possui vários trabalhos publicados e apresentados em Congressos de Matemática Aplicada, Ensino de matemática e, em particular, Ensino de Cálculo Numérico. Autora do livro *Cálculo Numérico: Aprendizagem com Apoio de Software*, pela Editora Thomson, e *MatLab: Fundamentos e Programação*, pela EdUFSCar.

José Antonio Salvador

Professor do Departamento de Matemática da UFSCar. Possui graduação em Matemática, no IBILCE – UNESP de São José do Rio Preto, e em Astronomia, no Instituto de Geociências da Universidade Federal do Rio de Janeiro. Mestrado e doutorado em Matemática Aplicada na área de Termodinâmica dos Meios Contínuos e pós-doutorado na UCSD-USA. Tem experiência em projetos de pesquisa nas áreas de Matemática Aplicada e Ensino de Ciências e Matemática, Modelagem Matemática e métodos numéricos de resolução. Possui vários trabalhos publicados e apresentados em Congressos de Matemática Aplicada e Computacional, Educação Matemática e no Congresso Brasileiro de Ensino de Engenharia. Autor dos trabalhos *Hipertexto de Métodos de Matemática Aplicada com Maple* e *Equações Diferenciais Parciais com Maple*, publicados pela EdUFSCar.

