Análise Numérica

Textos de Apoio

1998/1999

J.A. Ferreira, M.F. Patrício

Tópicos da disciplina de Análise Numérica leccionada a alunos de Engenharia no ano lectivo 1998/1999.

Na elaboração destes apontamentos foi extremamente útil a colaboração dos colegas João Luís Soares, José Luis Esteves e Marta Pascoal.

Índice Geral

Capítulo 1 - Equações não lineares 2

1 Introdução 2

2 Localização das raízes 6

3 Métodos iterativos 8

3.1 O método da bissecção 9

3.2 O método de Newton 12

3.3 O método do ponto fixo 18

3.4 Aplicação a sistemas: o método de Newton 27

4 Equações polinomiais 31

4.1 Localização e separação das raízes 31

4.2 O método de Bairstow 35

Capítulo 2 - Sistemas de equações lineares 37

1 Introdução 37

2 Métodos Indirectos ou Iterativos 43

2.1 O método de Jacobi 47

2.2 O método de Gauss-Seidel 50

Capítulo 3 - Interpolação Polinomial 52

1 Introdução 52

2 O polinómio interpolador de Lagrange 53

3 O polinómio interpolador de Newton 59

4 O polinómio interpolador segmentado 64

5 O polinómio interpolador de Hermite 69

6 O polinómio interpolador segmentado de Hermite 75

7 Aplicação a funções de duas variáveis 76

Capítulo 4 - Derivação e integração numérica 78

1 Derivação numérica 78

2 Integração numérica 85

2.1 Fórmulas de Newton-Cotes: Trapézios e Simpson simples 86

2.2 Fórmulas dos Trapézios e de Simpson compostas 91

2.3 Fórmulas de Gauss 95

2.4 Aplicação ao cálculo de integrais duplos 99

Capítulo 5 - Métodos numéricos para problemas diferenciais ordinários 101

1 Introdução 101

2 Problemas com condição inicial 102

2.1 Algumas generalidades 102

2.2 Métodos numéricos 106

2.2.1 Métodos de Taylor 106

2.2.2 Métodos de Euler 108

2.2.3 Métodos de Runge - Kutta 111

2.3 Convergência 115

3 Problemas com condição de fronteira 123

Capítulo 1 - Equações não lineares

1 Introdução

O objectivo deste capítulo é o estudo de processos que permitem construir de forma aproximada a solução de equações não lineares do tipo

$$f(x) = 0, \tag{1.1}$$

onde f é a expressão analítica de uma função real de variável real que tem um único zero x^* em $[a, b]$. Em alguns casos é conhecida a forma explícita da solução de uma equação do tipo (1.1). No entanto, mesmo quando são consideradas pequenas "perturbações" nos elementos que definem f, podemos deixar de conhecer explicitamente a solução da equação.

Exemplo: A equação

$$x^2 - 2x + 1 = 0$$

tem por solução $x = 1$. No entanto para a equação

$$x^{1.99} - 2x + 1 = 0$$

não é conhecida exactamente a solução.

■

Seja x_0 uma aproximação de x^*. Pretendemos construir uma sucessão (x_n) que verifique

$$x_n \longrightarrow x^*. \tag{1.2}$$

Tal sucessão pode ser definida recursivamente por

$$x_{n+1} = g(x_n) \tag{1.3}$$

para uma função g específica.

O processo numérico definido por (1.3) é designado por método iterativo. Note-se que em (1.3), x_{n+1} apenas depende de uma aproximação x_n. No entanto, existem métodos numéricos onde figuram mais do que uma aproximação, ou seja, métodos que se podem escrever na forma

$$x_{n+1} = g(x_n, x_{n-1}).$$

A aproximação x_n é também designada iteração n.

Relativamente aos métodos iterativos colocam-se várias questões:

1. Como determinar um intervalo contendo uma só raiz da equação $f(x) = 0$?
2. Como construir a sucessão (x_n), isto é, como definir um processo recursivo?
3. Qual o significado da convergência (1.2)? Qual a "velocidade" com que a sucessão (x_n) converge para x^*? Como determinar uma aproximação para x^* com uma "precisão desejada"?

As respostas às questões 1. e 2. irão ser dadas nas secções seguintes sendo apresentádos vários métodos numéricos e estudadas as suas propriedades.

Atendendo à abrangência da questão 3, relativamente aos métodos numéricos a estudar comecemos por considerar a sucessão gerada por (1.3) e definir conceitos gerais.

Definição 1.1 *A $e_n = x^* - x_n$ chamamos erro da iteração n. O método iterativo definido por (1.3) diz-se convergente se*

$$\lim_{n\to\infty} e_n = 0.$$

■

Dentro dos métodos iterativos, é conveniente considerar métodos em que o erro decresça à medida que aumenta o número de iterações, isto é,

$$|e_n| > |e_{n+1}| > |e_{n+2}| > \dots$$

Mas o método será mais "eficiente" se existirem $p > 1$ e $n_0 \in \mathbb{N}$ tais que, para $n > n_0$, se tem

$$|e_{n+1}| < |e_n|^p.$$

Definição 1.2 *O método iterativo traduzido por (1.3) diz-se ter ordem de convergência p (ordem p) se existem uma constante M e uma ordem $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que para $n > n_0$,*

$$|e_{n+1}| \leq M|e_n|^p.$$

A M chamamos constante erro. Se $p = 1$ o método diz-se ter convergência linear e se $p = 2$ o método diz-se ter convergência quadrática.

■

Vejamos seguidamente a influência da constante erro e da ordem de um método iterativo no erro da iteração n.

Exemplo: Consideremos dois métodos iterativos que geram duas sucessões (x_n) e $(\tilde{x}_n)$. Sejam e_n e $\tilde{e}_n$ os erros das aproximações x_n e $\tilde{x}_n$, respectivamente, com $n \in \mathbb{N}$ e uma aproximação inicial x_0 com um erro inferior a 10^{-2}. Determinar o número de iterações necessárias, para cada método, de modo a podermos garantir uma aproximação com erro inferior a 10^{-4}.

Destaquemos os dois casos seguintes:

1. Os métodos têm a mesma constante erro e diferentes ordens. Seja por exemplo

$$|e_{n+1}| \leq 0.5|e_n|^2, \quad |\tilde{e}_{n+1}| \leq 0.5|\tilde{e}_n|, \; n \in \mathbb{N}.$$

É fácil provar que

$$|e_n| \leq 0.5^{2^n-1}|e_0|^{2^n} \leq 0.5^{2^n-1}(10^{-2})^{2^n}$$

e

$$|\tilde{e}_n| \leq 0.5^n|\tilde{e}_0| \leq 0.5^n 10^{-2}.$$

Então, relativamente ao primeiro método, tem-se para $n = 1$ o majorante $0.5 \times 10^{-4} < 10^{-4}$. Para o segundo método tem-se para $n = 7$ o seguinte majorante $0.8 \times 10^{-4} < 10^{-4}$.

2. Os métodos têm a mesma ordem e diferentes constantes erro. Seja por exemplo

$$|e_{n+1}| \leq 0.5|e_n|, \quad |\tilde{e}_{n+1}| \leq 0.75|\tilde{e}_n|.$$

Então para cada um dos métodos tem-se

$$|e_n| \leq 0.5^n |e_0| \leq 0.5^n 10^{-2},$$

e

$$|\tilde{e}_n| \leq 0.75^n |\tilde{e}_0| \leq 0.75^n 10^{-2}.$$

Com o primeiro método obtém-se a estimativa desejada com $n = 7$. No entanto com o segundo método só se obtém o erro pretendido para $n = 17$.

■

No que respeita às questões levantadas no terceiro ponto resta garantir que a aproximação determinada tenha uma "precisão desejada". A questão natural que se coloca é pois a paragem do processo iterativo. Devemos parar o processo recursivo de modo a que a última aproximação obtida tenha um erro inferior a δ, sendo δ uma tolerância estabelecida à priori.

Atendendo a que x^* é desconhecido, não podemos utilizar explicitamente o erro e_n para definir um critério de paragem. No entanto, atendendo à equação que pretendemos resolver, é de esperar que a aproximação obtida x_n seja uma "boa" aproximação quando $f(x_n) \simeq 0$. Assim se

$$|f(x_n)| < \delta, \tag{1.4}$$

a aproximação satisfaz os requisitos de precisão estabelecidos. Tal não acontece, pois se num ponto de $[a, b]$ o valor da função é aproximadamente zero, então este critério pode induzir a paragem nesse ponto do intervalo. É de notar que este ponto pode estar distante da raiz da equação (Figura1).

Um outro critério é a comparação entre duas aproximações consecutivas, isto é, $|x_n - x_{n-1}|$. Se este valor é inferior a δ então o processo de cálculo deve terminar. No entanto atendendo à diferente natureza das aproximações calculadas e da tolerância, em vez do erro absoluto de x_n, devemos considerar o erro relativo e parar o processo quando

$$\frac{|x_n - x_{n-1}|}{|x_n|} < \delta. \tag{1.5}$$

No entanto, como ilustra a Figura1, cada um destes critérios pode induzir em erro.

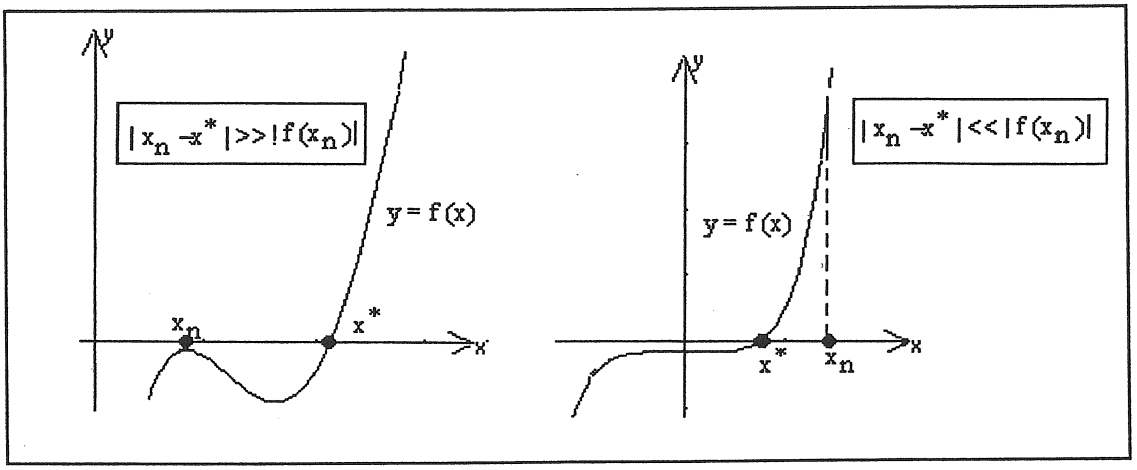

Figura 1

Assim sendo, um critério de paragem adequado é a conjugação de (1.4) com (1.5).

2 Localização das raízes

Para a determinação de uma aproximação da raiz x^* da equação $f(x) = 0$ torna-se necessário, para alguns métodos iterativos, o conhecimento de um intervalo $[a, b]$ contendo apenas uma raiz x^* e para outros o conhecimento de uma aproximação inicial de x^*.

Atendendo a que o segundo caso é uma particularização do primeiro, vejamos apenas como determinar $[a, b]$. Este intervalo, obtido considerando a representação gráfica de f, tem que conter a abcissa de um só ponto de interseção da representação com o eixo das abcissas. Notemos que para certas funções não é fácil construir, de forma rápida, a representação gráfica. Neste caso, como em muitos outros, é vantajoso reescrever a equação dada na forma equivalente $f_1(x) = f_2(x)$, quando as representações gráficas de f_1 e f_2 são fáceis de obter. O intervalo pretendido obtém-se considerando a abcissa do ponto de intersecção das duas representações gráficas.

Notemos que

1. no caso de f ter mais do que um zero, devemos isolar cada um desses zeros,ou seja, determinar intervalos disjuntos contendo apenas um zero;

2. o uso de meios informáticos para a obtenção da representação gráfica de uma função pode conduzir-nos a erros;

3. uma vez obtidos o(s) intervalo(s) $[a, b]$ devemos verificar analiticamente que no intervalo há apenas um zero de f. Para tal é suficiente verificar

   (a) $f(a)f(b) < 0$,

   (b) a derivada de f, f', tem sinal constante em $[a, b]$.

Exemplo: Determinar o(s) intervalo(s) contendo uma só raiz das equações

1. $lnx - cosx = 0$,

2. $e^{-x^2} - |x| + 1 = 0$.

Efectuando as representações gráficas das funções obtemos as seguintes figuras:

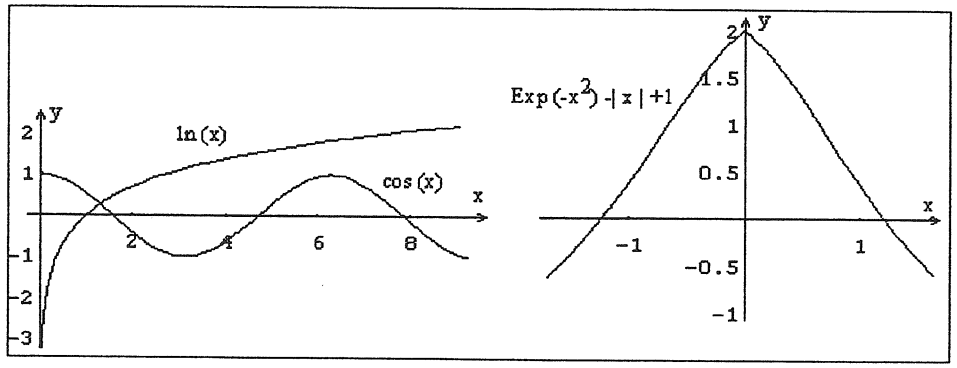

Figura 2

Podemos então concluir que os intervalos pedidos são

1. $[0.1, 2]$

2. $[-2, -1]$, $[1, 2]$.

Deveríamos agora verificar, analiticamente, que os intervalos anteriores têm efectivamente uma única raiz das respectivas equações.

■

Para certas equações, a localização das raízes pode ser feita de um modo mais simples, recorrendo ao método que designamos por método de Rolle. Tal método tem

como suporte teórico o teorema de Rolle e um dos seus corolários que passamos a enunciar (sem demonstração).

Teorema 2.1 [Teorema de Rolle] *Se f é uma função contínua em $[a,b]$, com derivada finita em (a,b) e $f(a) = f(b)$ então existe $c \in (a,b)$ tal que $f'(c) = 0$.* ■

Corolário 2.2 *Se c_1 e c_2 são dois zeros consecutivos de f' então em $[c_1, c_2]$ existe quando muito um zero de f.* ■

Assim, o método de Rolle consiste essencialmente em determinar os zeros da derivada de f e aplicar, em seguida, o corolário 2.2.

Exemplo: Usando o método de Rolle localizar as raízes da equação $f(x) = 0$ em que

$$f(x) = \frac{1}{3}x^3 - \frac{3}{2}x^2 - 4x - 1.$$

A equação definida por f' é

$$x^2 - 3x - 4 = 0$$

e tem as raízes $c_1 = -1$ e $c_2 = 4$. Temos $f(-1) = \frac{7}{6}$ e $f(4) = -\frac{59}{3}$. Logo em $[-1,4]$ existe um só zero de f. Atendendo a que

$$\lim_{x \to -\infty} f(x) = -\infty, \quad \lim_{x \to +\infty} f(x) = +\infty$$

concluimos que em cada um dos dois intervalos $(-\infty, -1)$ e $(4, +\infty)$ existe ainda uma única raiz de $f(x) = 0$. ■

3 Métodos iterativos

Uma vez obtido $[a,b]$, onde isolámos uma única raiz, qualquer ponto deste intervalo pode ser considerado uma aproximação para essa raiz. Mas obviamente que interessa determinar uma "boa aproximação" para x^*, isto é, uma aproximação cuja distância à raiz seja inferior a δ, sendo δ uma quantidade fixada à priori[1]. Tal pode ser conseguido usando um método iterativo adequado.

[1] Uma "boa aproximação" não dispensa o uso do critério de paragem

Existem muitos métodos iterativos que nos permitem construir uma sucessão de aproximações para a raiz. Vamos estudar apenas três métodos.

3.1 O método da bissecção

Consideremos um intervalo $[a, b]$ onde isolamos uma raiz da equação $f(x) = 0$. Bissectando sucessivamente o intervalo e seleccionando, convenientemente, de cada vez, o ponto médio de um dos subintervalos obtidos, podemos construir uma sucessão de aproximações para raiz. É esta ideia, muito simples, que está subjacente ao método da bissecção também conhecido por método do ponto médio.

Analisemos então como determinar, rigorosamente, a sucessão (x_n) de aproximações. Suponhamos $f(a) > 0$ e $f(b) < 0$. Calculemos $x_1 = (a + b)/2$ (ponto médio de $[a, b]$) e $f(x_1)$. Se $f(x_1) < 0$ então $x^* \in [a, x_1]$. Calculemos $x_2 = (a + x_1)/2$ (ponto médio de $[a, x_1]$) e seja $f(x_2) > 0$. Então $x* \in [x_2, x_1]$. De modo idêntico podemos determinar $x_3, x_4, \ldots$.

Para construir facilmente um algoritmo para o método da bissecção, designemos genericamente por I_j o intervalo $[a_j, b_j]$, $j = 0, 1, 2, \ldots$. Estes intervalos são obtidos do seguinte modo: Seja $I_0 = [a, b] = [a_0, b_0]$. Depois de calcular a primeira aproximação x_1, o intervalo $I_0 = [a, b]$ é substituído por $[a, x_1]$ que denotamos por $I_1 = [a_1, b_1]$. Depois de calcular a segunda aproximação o intervalo I_1 é substituído pelo intervalo $[x_2, x_1]$ que denotamos por $I_2 = [a_2, b_2]$. De um modo geral, se tivermos o intervalo $I_n = [a_n, b_n]$ determinamos a proximação $x_{n+1} = (a_n + b_n)/2$ e comparamos $f(x_{n+1})$ com $f(a_n)$. Se $f(x_{n+1})f(a_n) < 0$ então a raiz x^* está em $[a_n, x_{n+1}]$ e o intervalo $I_{n+1} = [a_{n+1}, b_{n+1}]$ onde $a_{n+1} = a_n$ e $b_{n+1} = x_{n+1}$. Caso contrário, os extremos do intervalo são $a_{n+1} = x_{n+1}$ e $b_{n+1} = b_n$.

Do exposto anteriormente é fácil construir um algoritmo para o método da bissecção.

1. Dados $I_0 = [a_0, b_0]$, $f(a_0)$, $f(b_0)$, n.

2. Para $i = 1, \ldots, n$, faça

   (a) $x_i = (a_{i-1} + b_{i-1})/2$,

   (b) Calcular $f(x_i)$,

   (c) Se $f(a_{i-1})f(x_i) < 0$ então $a_i = a_{i-1}, b_i = x_i$.

   Caso contrário , $a_i = x_i, b_i = b_{i-1}$.

Exemplo: A equação

$$e^{-x^2} - x^3 = 0$$

tem uma única raiz x^* no intervalo $[0.5, 1]$. Utilizando o método da bissecção determinar aproximações para x^* considerando os dados

$$a_0 = 0.5,\ f(0.5) \simeq 0.654, b_0 = 1,\ f(b_0) \simeq -0.632.$$

Por aplicação do algoritmo anterior obtivemos

- 1^a aproximação $x_1 = 0.75, f(x_1) \simeq 0.148 \Longrightarrow x^* \in [0.75, 1], a_1 = 0.75, b_1 = 1$
- 2^a aproximação $x_2 = 0.875, f(x_2) \simeq -0.205 \Longrightarrow x^* \in [0.75, 0.875], a_2 = a_1, b_2 = 0.875$
- 3^a aproximação $x_3 = 0.8125, f(x_3) \simeq -0.0196 \Longrightarrow x^* \in [0.75, 0.8125], a_1 = 0.75, b_1 = 0.8125$
- Outras aproximações
- 8^a aproximação $x_8 = 0.8067, f(x_8) < 0 \Longrightarrow x^* \in [0.8047, 0.8067], a_8 = 0.8047, b_8 = 0.8067$
- 9^a aproximação $x_9 = 0.8057, f(x_9) < 0 \Longrightarrow x^* \in [0.8047, 0.8057], a_8 = 0.8047, b_8 = 0.8057,$
- 10^a aproximação $x_{10} = 0.8052, f(x_{10}) \simeq 0.000926.$

■

Dos resultados apresentados no exemplo anterior "parece" que a sucessão das aproximações converge para 0.805. Não há contudo garantia de que a sucessão tenda efectivamente para algum valor. Podemos no entanto demonstrar que o método da bissecção gera uma sucessão que converge para a raiz da equação em estudo.

Comecemos por provar que as amplitudes dos intervalos obtidos com o método se vão reduzindo sucessivamente a metade.

Teorema 3.1 *Seja* $I_0 = [a_0, b_0]$ *e* $I_n, n \in \mathbb{N}$, *a sucessão de intervalos gerada pelo método do ponto médio. Então*

$$b_n - a_n = \frac{1}{2^n}(b_0 - a_0),\ n \in \mathbb{N}. \tag{3.6}$$

Demonstração: Para $n = 1$ a igualdade é trivialmente válida. Admitamos a veracidade da igualdade (3.6) e provemos que é ainda válida para $n+1$. Atendendo á definição de I_{n+1}, temos

$$b_{n+1} - a_{n+1} = \frac{1}{2}(b_n - a_n) = \frac{1}{2}\frac{1}{2^n}(b_0 - a_0) = \frac{1}{2^{n+1}}(b_0 - a_0).$$

■

Este resultado permite estabelecer um majorante para o erro que se comete ao tomar para raiz da equação $f(x) = 0$ a $n-$ ésima aproximação obtida com o método do ponto médio. Atendendo a que $x^*, x_n \in [a_{n-1}, b_{n-1}]$, e ao teorema anterior, o erro cometido verifica

$$|e_n| = |x^* - x_n| \leq \frac{1}{2}(b_{n-1} - a_{n-1}) = \frac{1}{2^n}(b_0 - a_0). \tag{3.7}$$

Exemplo: Consideremos de novo a equação

$$e^{-x^2} - x^3 = 0.$$

Determinar uma estimativa para o erro que se comete ao aproximar a raiz por x_{10}.

De (3.7) vem

$$|e_{10}| \leq \frac{1}{2^{10}}0.5 = \frac{1}{2048} \leq 0.0005.$$

■

A estimativa de erro traduzida por (3.7) permite:

1. Concluir que o método da bissecção é convergente, isto é,

$$\lim_{n \to +\infty} x_n = x^*;$$

2. Calcular o número mínimo de iterações que devemos considerar para obter uma aproximação para a raiz x^* com um erro inferior a uma quantidade pré-estabelecida δ. Atendendo à estimativa para o erro, é suficiente escolher n tal que

$$\frac{1}{2^n}(b-a) \leq \delta,$$

e portanto,

$$n \geq \frac{ln(\frac{b-a}{\delta})}{ln2}.$$

O teorema seguinte resume os resultados demonstrados anteriormente.

Teorema 3.2 *Seja f contínua em $[a,b]$, $f(a)f(b) < 0$ e x^* a única raiz de $f(x) = 0$ em $[a,b]$. Seja $x_n, n \in \mathbb{N}$, a sucessão construída pelo método do ponto médio. Então*

1. $|e_n| \leq \frac{1}{2^n}(b-a)$,
2. *fixado $\delta > 0$, o número n de iterações necessárias para que $|e_n| \leq \delta$ é*

$$n \geq \frac{ln(\frac{b-a}{\delta})}{ln2}.$$

■

Pode demonstrar-se ainda que o método da bissecção tem ordem de convergência igual a 1, ou seja, tem convergência linear. Assim sendo, para obter uma aproximação com um erro pequeno, é por vezes necessário efectuar um número elevado de iterações. Vamos seguidamente estudar um método que apresenta uma maior velocidade de convergência: o método de Newton.

3.2 O método de Newton

O método de Newton é um dos métodos mais usados na determinação de aproximações numéricas para raízes de equações não lineares. Relativamente ao método anterior, este novo método tem a vantagem de ser facilmente generalizado a sistema de equações e ainda de ter uma ordem superior.

Comecemos por apresentar o método de Newton também conhecido por método da tangente efectuando uma interpretação geométrica. Para o efeito, consideremos a equação $f(x) = 0$ e suponhamos que

1. $f(a) < 0, f(b) > 0$,
2. f' não se anula em $[a,b]$,
3. f'' é positiva neste intervalo.

Seja x^* a abcissa do ponto de intersecção do gráfico de f com o eixo das abcissas. Consideremos a recta r tangente ao gráfico de f no ponto $(b, f(b)) = (x_0, f(x_0))$ que tem por equação $y - f(b) = f'(b)(x-b)$. A recta r intersecta o eixo das abcissas no

ponto $(b - \frac{f(b)}{f'(b)}, 0)$. Seja x_1 a abcissa deste ponto, isto é, $x_1 = b - \frac{f(b)}{f'(b)}$. Esta abcissa é tomada como primeira aproximação para x^*. A recta tangente ao gráfico de f no ponto $(x_1, f(x_1))$, de equação $y - f(x_1) = f'(x_1)(x - x_1)$, intersecta o eixo das abcissas no ponto de abcissa $x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$ que representa a segunda aproximação para x^*.

Mais geralmente, suponhamos conhecida a aproximação x_n para x^*. Considerando a recta tangente ao gráfico de f no ponto $(x_n, f(x_n))$ e determinando a abcissa da intersecção desta recta com o eixo das abcissas, obtemos

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}. \tag{3.8}$$

A figura seguinte ilustra o procedimento seguido no método de Newton.

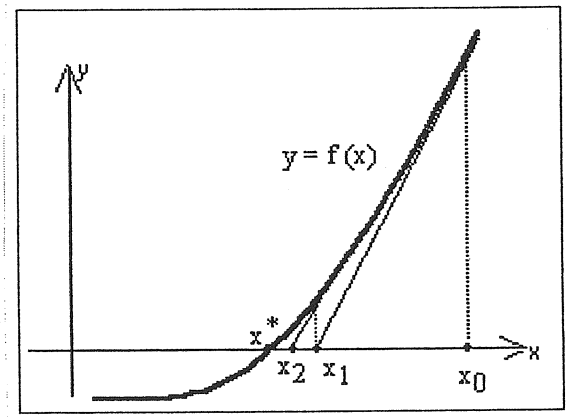

Figura 3

Se

1. $f(a) > 0, f(b) < 0$,
2. f' não se anula em $[a, b]$,
3. f'' é negativa neste intervalo,

então tomando para aproximação inicial $x_0 = b$ e considerando o procedimento descrito anteriormente, obtemos uma sucessão (x_n) ainda definida por (3.8). Esta fórmula recursiva traduz o método iterativo designado por método de Newton.

Deste modo geramos uma sucessão (x_n) que "parece" convergir para a raiz da equação $f(x) = 0$.

Acabámos de introduzir geometricamente o método de Newton para a determinação de uma aproximação para a raiz de $f(x) = 0$, em $[a, b]$, supondo que f' não se anula em $[a, b]$ e que tem, por exemplo, o seguinte algoritmo:

1. Dados $x_0, f(x_0), f'(x_0)$, n,

2. Para $i = 1, \ldots, n$, calcular

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

   (b) $f(x_i)$, $f'(x_i)$.

Exemplo: A equação

$$cosx - lnx = 0$$

tem uma raiz única em $[1, 1.5]$. Determinar, utilizando o algoritmo do método de Newton, a aproximação x_5. Temos

1. $f(1) \simeq 0.540302, f(1.5) \simeq -0.334728$,

2. $f'(x) = -senx - \frac{1}{x} < 0, x \in [1, 1.5]$,

3. $f''(x) = -cosx + \frac{1}{x^2} > 0, x \in [1, 1.5]$.

Atendendo à interpretação geométrica do método de Newton, tomemos $x_0 = 1$. Utilizando o algoritmo apresentado, obtemos

$$x_1 = 1.29340799,\ x_2 = 1.30295547,\ x_3 = 1.302964,\ x_4 = 1.302964,\ x_5 = 1.302964.$$

■

As condições consideradas para f, tanto na descrição geométrica como no exemplo, "parecem" fundamentais para obter uma sucessão de aproximações (x_n) convergente para a raiz x^*. Provemos seguidamente que sob as condições já referidas, o método de Newton permite construir uma sucessão de aproximações que efectivamente converge para x^*.

Teorema 3.3 *Se $f(a)f(b) < 0$, f' e f'' não nulas em $[a, b]$, então a sucessão (x_n) gerada pelo método de Newton é convergente para o único zero de f, pertencente a $[a, b]$, desde que se considere a aproximação inicial x_0 tal que*

$$f(x_0)f''(x_0) > 0. \tag{3.9}$$

Demonstração: Suponhamos sem perda de generalidade que $f(a) < 0, f(b) > 0$, e f' e f'' são positivas em $[a, b]$. Tomemos $x_0 = b$.

Provemos que (x_n) é

1. limitada inferiormente,
2. decrescente.

1. Atendendo a que

$$0 = f(x^*) = f(x_n + (x^* - x_n)) = f(x_n) + f'(x_n)(x^* - x_n) + f''(\eta_n)\frac{(x^* - x_n)^2}{2}$$

com η_n pertencendo ao intervalo de extremos x^* e x_n, vem

$$x^* - (x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}) = -\frac{f''(\eta_n)}{f'(x_n)}\frac{(x^* - x_n)^2}{2},$$

ou seja,

$$x^* - x_{n+1} = -\frac{f''(\eta_n)}{f'(x_n)}\frac{(x^* - x_n)^2}{2} \leq 0.$$

Logo $x^* \leq x_{n+1}$ para todo $n \in \mathbb{N}_0$.

2. Provemos que a sucessão (x_n) é decrescente. Atendendo a que

$$x^* \leq x_n, \forall n \in \mathbb{N},$$

vem

$$f(x_n) \geq 0, \forall n \in \mathbb{N}_0.$$

De

$$x_1 - x_0 = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \text{ e } f(x_0) > 0,$$

concluimos que

$$x_1 < x_0.$$

De modo idêntico, atendendo a que

$$x_{n+1} - x_n = -\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \text{ e } f(x_n) \geq 0 \tag{3.10}$$

vem $x_{n+1} \leq x_n$.

A sucessão (x_n) é então não crescente e limitada inferiormente e portanto é convergente. Vejamos agora que converge para x^*. Seja α tal que $x_n \to \alpha$. Tomando o limite em (3.10) quando $n \to +\infty$ e tendo em conta que f e f' são contínuas obtemos $f(\alpha) = 0$ e portanto, α é raiz da equação $f(x) = 0$ em $[a, b]$. Como neste intervalo existe uma só raiz concluimos que $\alpha = x^*$.

■

No resultado seguinte é estabelecida a relação entre os erros de duas aproximações consecutivas obtidas pelo método de Newton.

Teorema 3.4 *Nas condições do teorema anterior, os erros das iterações n e $n+1$ obtidas pelo método de Newton verificam*

$$|e_{n+1}| \leq M|e_n|^2, \; n \in \mathbb{N}_0, \tag{3.11}$$

onde

$$M = \frac{1}{2}\frac{\max_{x\in[a,b]} |f''(x)|}{\min_{x\in[a,b]} |f'(x)|}.$$

Demonstração: Consideremos x_0 a verificar (3.9). Usando a fórmula de Taylor, temos

$$|e_{n+1}| = |x^* - x_{n+1}| = |x^* - (x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)})| = |-\frac{1}{2}\frac{f''(\eta_n)}{f'(x_n)}e_n^2|$$

em que η_n pertence ao intervalo de extremos x_n e x^*, e portanto

$$|e_{n+1}| \leq M|e_n|^2.$$

■

Observação:

1. O teorema 3.3 garante que, sob certas condições, a sucessão gerada pelo método de Newton converge para x^*. No entanto este resultado é apenas uma condição suficiente.

   Exemplo: Determinar pelo método de Newton a única raiz real de $f(x) = 0$ em $[1, 2]$ em que

   $$f(x) = x^3 + 4x^2 - 10.$$

Atendendo a que $f(2) > 0$ e $f''(x) > 0$ para $x \in [1,2]$ então, pelo teorema 3.3 (notar que as restantes condições também são satisfeitas), a sucessão de aproximações gerada pelo método de Newton com $x_0 = 2$ converge para a raiz. Na 4^a coluna da tabela 3.1, listámos os valores determinados com esta aproximação inicial e na 5^a coluna os correspondentes valores $|f(x_i)|$. Incluímos ainda na tabela os valores obtidos com $x_0 = 1$ (2^a coluna) e com $x_0 = 0.001$ (6^a coluna)

Tabela 3.1

	$x_0 = 1$		$x_0 = 2$		$x_0 = 0.001$	
i	x_i	$\|f(x_i)\|$	x_i	$\|f(x_i)\|$	x_i	$\|f(x_i)\|$
0	1	5	2	14	0.001	9.999
1	1.45455	1.5402	1.5	2.375	1249.5	$1.95E+9$ [2]
2	1.36890	$6.07E-2$	1.37333	0.1343	832.6	$5.8E+8$
3	1.36524	$1.09E-4$	1.36526	$5.3E-4$	554.6	$1.7E+8$
4	1.36523	$3.5E-10$	1.36523	$8.2E-9$	369.3	$5.1E+7$
5	1.36523	$< E-20$	1.36523	$< E-20$	245.6	$1.5E+7$

Para $x_0 = 1$ obtivemos também uma sucessão de aproximações convergente. Para $x_0 = 0.001 \notin [1,2]$, embora da tabela não se possa inferir a convergência da sucessão de aproximações, ao fim de 20 iterações obtivemos $x_{20} = 1.36523$.

■

2. O teorema 3.4 assegura que, sob as mesmas condições a convergência é quadrática.

3. Atendendo à desigualdade (3.11) o decrescimento do erro depende de

$$M = \frac{1}{2}\frac{\max_{x\in[a,b]} |f''(x)|}{\min_{x\in[a,b]} |f'(x)|}.$$

A convergência será tanto mais rápida quanto menor for este o cociente. Assim, podemos concluir que a convergência, embora quadrática, é tanto mais rápida quanto maior é $|f'|$ em $[a,b]$. Esta conclusão poderia também ser inferida a partir da interpretação geométrica do método de Newton pois se o gráfico de f em $[a,b]$ é bastante "acentuado" então as abcissas dos pontos de intersecção das rectas tangentes ao gráfico de f com o eixo das abcissas aproximam-se rapidamente da raiz que pretendemos aproximar.

[2] $E+n$ significa 10^n

A finalizar o estudo dos métodos iterativos, consideramos seguidamente o método do ponto fixo. Este método tem como caso particular o método que acabámos de estudar. Realcemos que seguindo a filosofia do método do ponto fixo, podemos estabelecer métodos de ordem arbitrariamente elevada.

3.3 O método do ponto fixo

O método do ponto fixo, tal como o método de Newton, é facilmente generalizável a sistema de equações. Relativamente ao método de Newton possui a vantagem de gerar uma sucessão (x_n) de aproximações de x^* sem calcular f'. O conceito de ponto fixo de uma função é essencial para o estudo do método do ponto fixo.

Definição 3.1 *Seja f uma função definida num intervalo I. Dizemos que $p \in I$ é um ponto fixo de f se $f(p) = p$.* ■

Exemplo: A função

$$f(x) = x^2$$

tem em $[0,2]$ dois pontos fixos, $p = 0$ e $p = 1$. ■

O conceito de ponto fixo permite converter a determinação de aproximações para a raiz de uma equação na determinação de aproximações do ponto fixo de uma outra função. De facto, considerando

$$f(x) = 0 \Longleftrightarrow x = g(x),$$

é óbvio que determinar a raiz da equação $f(x) = 0$ é equivalente a calcular o ponto fixo de g.

Pretendemos agora analisar em que condições uma função tem um único ponto fixo num determinado intervalo.

Teorema 3.5 *Se g é uma função contínua em $[a,b]$ e $g(x) \in [a,b]$ para $x \in [a,b]$, então g tem um ponto fixo em $[a,b]$. Se além disso*

$$|g'(x)| \leq K < 1, \forall x \in [a,b]$$

então o ponto fixo é único.

Demonstração:

1. Existência

   Se $g(a) = a$ ou $g(b) = b$ então g tem um ponto fixo. Suponhamos agora que $g(a) > a$ e $g(b) < b$. Seja $h(x) = g(x) - x, x \in [a, b]$. Como esta função é contínua e $h(a)h(b) < 0$ então tem um zero neste intervalo, i.e, existe $p \in (a, b)$ tal que

   $$h(p) = 0 \Longleftrightarrow p = g(p).$$

2. Unicidade

   Se p e q são pontos fixos de g, então $g(p) = p$ e $g(q) = q$ e, portanto,

   $$|p - q| = |g(p) - g(q)| = |g'(\eta)||p - q| \leq K|p - q|,$$

   em que η pertence ao intervalo de extremos p e q. Logo $(1 - K)|p - q| \leq 0$. Desta desigualdade vem $p = q$.

Exemplo: Mostrar que $g(x) = \frac{x^2-1}{3}$ tem um único ponto fixo em $[-1, 1]$.

1. Existência

   Atendendo a que g é contínua em $[-1, 1]$ e $g(x) \in [-\frac{1}{3}, 0] \subseteq [-1, 1]$, concluimos que g tem no intervalo dado um ponto fixo.

2. Unicidade

   Atendendo a que $|g'(x)| \leq \frac{2}{3}$, $x \in [-1, 1]$, concluimos a unicidade do ponto fixo.

■

Vejamos seguidamente como construir aproximações para o ponto fixo de uma função g num intervalo $[a, b]$ que supomos existir e ser único. O ponto fixo p desta função obtém-se considerando a abcissa do ponto de intersecção do gráfico de g com a recta de equação $y = x$. Seja x_0 uma aproximação para p. Intersectando as rectas de equação $y = g(x_0)$ e $y = x$ obtemos um ponto cuja abcissa denotamos por x_1. Repetindo este processo podemos determinar aproximações para o ponto fixo p. Mais

precisamente, intersectando as rectas de equação $y = g(x_n)$ e $y = x$ obtemos um ponto cuja abcissa x_{n+1} é definida por

$$x_{n+1} = g(x_n),\ n = 0, 1, \ldots.$$

A sucessão (x_n) gerada utilizando o processo descrito, sob certas condições para g, deve convergir para o ponto fixo p.

As figuras seguintes ilustram o processo descrito. Da interpretação destas constatamos que a convergência da sucessão (x_n) depende da escolha de x_0.

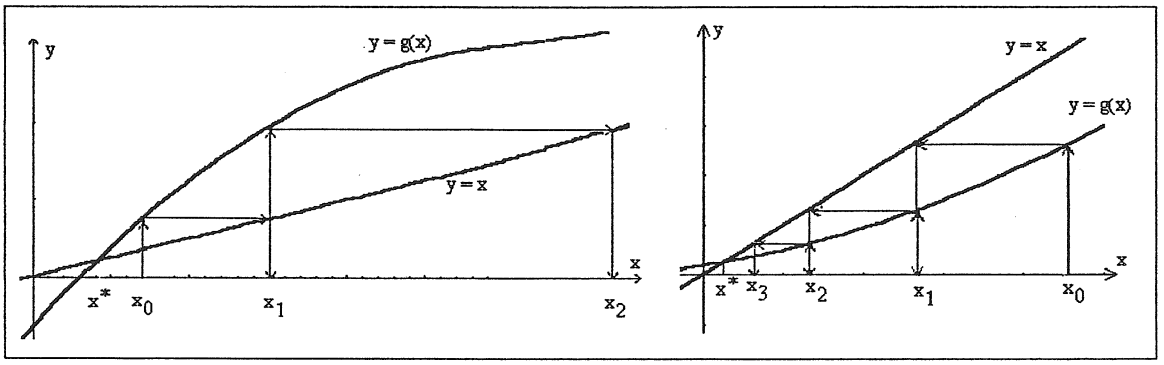

Figura 4

Algoritmo do método do ponto fixo:

1. Dados: $x_0, g(x_0), n$,
2. Para $i = 0, \ldots, n$, calcular $x_{i+1} = g(x_i)$.

Exemplo: Consideremos a equação $f(x) = 0, x \in [0, 4]$, em que

$$f(x) = x - \sqrt{16 - x^2}.$$

Determinar, utilizando

$$g(x) = \sqrt{16 - x^2},\ x \in [0, 4],$$

e $x_0 = 2$ nove aproximações para o ponto fixo de g.

Comecemos por notar que g tem um ponto fixo em $[0, 4]$. A sucessão (x_n) definida por

$$x_{n+1} = \sqrt{16 - x_n^2}, n = 0, 1, \ldots$$

com $x_0 = 2$ conduz-nos aos resultados

$$x_1 = 3.46410162, x_2 = 2, x_3 = 3.46410162, x_4 = 2, \ldots, x_8 = 2, x_9 = 3.46410162.$$

■

Observemos que

1. $f(2) = 1.4641, f(3.46410162) = -1.4641$,
2. g não verifica $|g'(x)| < 1, x \in [0, 4)$.

■

Determinemos quais as condições que nos garantem que efectivamente a sucessão gerada pelo método do ponto fixo é uma sucessão convergente para o ponto fixo.

Teorema 3.6 *Seja* $g : [a, b] \longrightarrow [a, b]$ *tal que*

$$|g'(x)| \leq k < 1, \forall x \in [a, b].$$

Então a sucessão gerada pelo método iterativo

$$x_{n+1} = g(x_n), n = 0, 1, \ldots \tag{3.12}$$

converge para o único ponto fixo de g *qualquer que seja a aproximação inicial* $x_0 \in [a, b]$.

Demonstração: Atendendo às hipóteses sobre g, esta função tem um único ponto fixo em $[a, b]$.

Considerando (x_n) definida por (3.12) e $x_0 \in [a, b]$ obtemos

$$x_{n+1} - x^* = g(x_n) - g(x^*),$$

e ainda

$$x_{n+1} - x^* = g'(\eta_n)(x_n - x^*)$$

em que η_n pertence ao intervalo de extremos x^* e x_n. Atendendo à hipótese vem

$$|x_{n+1} - x^*| \leq k|x_n - x^*|,$$

e assim

$$|x_{n+1} - x^*| \leq k^{n+1}|x_0 - x^*|. \tag{3.13}$$

Tomando limites e atendendo a que $k < 1$ vem

$$\lim_{n \to +\infty} |x_{n+1} - x^*| = 0$$

donde se segue o pretendido.

■

Exemplo: Determinar, utilizando o método do ponto fixo, uma aproximação para a raiz real da equação $f(x) = 0$ com

$$f(x) = x^3 + 4x^2 - 10.$$

É fácil verificar que a equação anterior tem uma única raiz em $[1, 2]$. De facto

1. f contínua em $[1, 2]$, $f(1)f(2) < 0$, logo existe uma raiz,
2. $f'(x) = 3x^2 + 8x > 0$ em $[1, 2]$, e portanto a raiz é única.

Para utilizar o método do ponto fixo, comecemos por reescrever a equação, no intervalo contendo a raiz x^*, na forma equivalente $x = g(x)$. Vejamos seguidamente várias formas que vão induzir diferentes métodos:

1. Atendendo a que

   $$f(x) = 0 \Longleftrightarrow x = x^3 + 4x^2 + x - 10,$$

   consideremos

   $$g(x) = x^3 + 4x^2 + x - 10, x \in [1, 2]. \tag{3.14}$$

   Notemos que $g(x) \notin [1, 2]$ para todo $x \in [1, 2]$ pois que $g(1) = -4$. Assim sendo, não temos garantia de que a sucessão gerada pelo método (3.12) com g dado por (3.14) convirja para o ponto fixo de g.

2. Em $[1, 2]$ a equação $f(x) = 0$ é equivalente

   $$x = \frac{1}{2}\sqrt{10 - x^3},$$

   e portanto podemos definir outro método do ponto fixo com

   $$g(x) = \frac{1}{2}\sqrt{10 - x^3}, \; x \in [1, 2], \tag{3.15}$$

para aproximar a raiz da equação inicial.

Temos

$$g'(x) = -\frac{3x^2}{4\sqrt{10-x^3}} < 0,\ x \in [1,2],$$

e portanto g é decrescente em $[1,2]$. Logo

$$g : [1,2] \to [\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{3}{2}] \not\subset [1,2].$$

Deste modo não temos garantia de que a sucessão (x_n) definida pelo método do ponto fixo, com g dada por (3.15), convirja para a raiz da equação $f(x) = 0$.

3. Finalmente, notemos que em $[1,2]$ a equação dada é equivalente a $x = g(x)$ com

$$g(x) = \sqrt{\frac{10}{x+4}}, x \in [1,2]. \tag{3.16}$$

Temos

(a) $g'(x) = -\frac{1}{2}\frac{\sqrt{10}}{(x+4)^{3/2}}, x \in [1,2]$, g é decrescente, e portanto

$$g : [1,2] \to [\sqrt{\frac{5}{3}}, \sqrt{2}] \subseteq [1,2],$$

(b)

$$h'(x) = |g'(x)|' = -\frac{3}{4}\frac{\sqrt{10}}{(x+4)^{5/2}}, x \in [1,2],$$

e portanto, $|g'(x)|$ é decrescente tendo-se

$$|g'(x)| \leq \frac{\sqrt{2}}{10} = |g'(1)|,\ x \in [1,2],$$

ou ainda,

$$|g'(x)| \leq \frac{\sqrt{2}}{10} < 1,\ x \in [1,2].$$

Pelo teorema 3.6, o método

$$x_{n+1} = \sqrt{\frac{10}{x_n+4}}, n = 0, 1, \ldots$$

gera uma sucessão convergente para a raiz de $f(x) = 0$ qualquer que seja $x_0 \in [1,2]$.

Considerando os 3 métodos anteriores e partindo da mesma aproximação inicial ($x_0 = 1$) determinámos alguns termos de (x_n). Os resultados obtidos encontram-se na tabela 3.2. As duas primeiras colunas dizem respeito ao primeiro método, as duas seguintes ao segundo e as últimas ao terceiro método.

Tabela 3.2

x_n	$\lvert f(x_n)\rvert$	x_n	$\lvert f(x_n)\rvert$	x_n	$\lvert f(x_n)\rvert$
-4	10	1.5	2.375	1.41421	$8.3E-1$
-14	1970	1.28695	1.24348	1.35904	$1.0E-1$
-1984	$7.8E+9$	1.40254	$6.3E-1$	1.36602	$1.3E-2$
$-7.8E+9$	$> E+20$	1.34546	$3.2E-1$	1.36513	$1.7E-3$
$< -E+20$	$> E+20$	1.37517	$1.6E-1$	1.36524	$2.1E-4$
$< -E+20$	$> E+20$	1.36009	$8.5E-2$	1.36523	$2.7E-5$
$< -E+20$	$> E+20$	1.36785	$4.3E-2$	1.36523	$3.4E-6$

No exemplo anterior somente para o terceiro método temos garantia de que a sucessão (x_n) converge para a solução da equação inicial. Contudo poderiam ser considerados outros métodos nas condições do método 3.

Suponhamos que a equação $f(x) = 0$ é reescrita nas formas equivalentes

$$x = g_1(x), \quad x = g_2(x),$$

num intervalo $[a, b]$ contendo uma única raiz x^* da equação dada. Deste modo temos duas formas distintas de construir a sucessão de aproximações. Suponhamos que g_1 e g_2 verificam

$$|g_1'(x)| \leq |g_2'(x)| < 1, \; x \in [a, b].$$

Nestas condições, em geral, a sucessão definida pelo método

$$x_{n+1} = g_1(x_n), \; n = 0, 1, \ldots,$$

converge mais rapidamente para x^* do que a sucessão definida por

$$x_{n+1} = g_2(x_n), \; n = 0, 1, \ldots,$$

e então devemos optar pelo método definido pela função g_1.

Os resultados seguintes são corolários do teorema 3.6 e permitem estabelecer estimativas para o erro que se comete ao tomar a aproximação x_n para ponto fixo de g.

Corolário 3.7 *Nas hipóteses do teorema 3.6 tem-se*

$$|e_n| \leq k^n max\{x_0 - a, b - x_0\}.$$

Demonstração: Consequência imediata de (3.13). ■

Corolário 3.8 *Nas hipóteses do teorema 3.6 tem-se*

$$|e_n| \leq \frac{k^n}{1-k}|x_1 - x_0|. \tag{3.17}$$

Demonstração: Atendendo à definição de (x_n) temos

$$x_{n+1} - x_n = g(x_n) - g(x_{n-1}).$$

Podemos então concluir

$$|x_{n+1} - x_n| = |g'(\eta_n)||x_n - x_{n-1}| \leq k|x_n - x_{n-1}|,$$

e ainda

$$|x_{n+1} - x_n| \leq k^n|x_1 - x_0|.$$

Consideremos $m > n$ e $|x_m - x_n|$. Temos

$$|x_m - x_n| \leq \sum_{j=n}^{m-1} |x_{j+1} - x_j| \leq |x_1 - x_0| \sum_{j=n}^{m} k^j$$

e

$$\sum_{j=n}^{m} k^j \leq k^n \sum_{j=0}^{\infty} k^j = \frac{k^n}{1-k}.$$

Logo

$$|x_m - x_n| \leq \frac{k^n}{1-k}|x_1 - x_0|.$$

Tomando na desigualdade anterior o limite quando $m \to \infty$ obtemos

$$|x^* - x_n| \leq \frac{k^n}{1-k}|x_1 - x_0|.$$

■

Observação:

1. Da desigualdade (3.17) podemos inferir, sob determinadas condições para g, a velocidade de convergência do método do ponto fixo. No entanto não foi ainda estabelecida a ordem deste método.

2. Atendendo à desigualdade (3.17), podemos calcular o número mínimo de iterações necessárias para obter uma aproximação com um erro inferior a uma quantidade δ fixada à priori.

3. Atendendo a que

$$|e_{n+1}| = |x_{n+1} - x^*| = |g(x_n) - g(x^*)| \leq k|e_n|,$$

podemos concluir que o método do ponto fixo tem convergência linear.

A finalizar o estudo do método do ponto fixo vejamos seguidamente que este método tem, sob certas condições, ordem 2.

Teorema 3.9 *Seja x^* o único ponto fixo de g em $[a,b]$. Se $g'(x^*) = 0$ e g'' é limitada num intervalo contendo x^*, então existe $\delta > 0$ tal que para todo $x_0 \in]x^* - \delta, x^* + \delta[$ a sucessão definida por*

$$x_{n+1} = g(x_n), n = 0, 1, \ldots$$

converge para x^* e a convergência é quadrática.

Demonstração: Atendendo a que g' é contínua numa vizinhança de x^* e $g'(x^*) = 0$, então existem $\delta > 0$ e $0 < k < 1$ tal que

$$|g'(x)| \leq k < 1,\ x \in [x^* - \delta, x^* + \delta].$$

Notemos que

$$|g(x) - x^*| = |g(x) - g(x^*)| = |g'(\eta)||x - x^*| < |x - x^*|$$

e portanto, para todo x em $[x^* - \delta, x^* + \delta]$,

$$|g(x) - x^*| < \delta$$

o que mostra que $g : [x^* - \delta, x^* + \delta] \longrightarrow [x^* - \delta, x^* + \delta]$.

Consideremos x_0 em $[x^* - \delta, x^* + \delta]$. Pelo teorema 3.6, a sucessão definida pelo método do ponto fixo converge para x^*.

Vejamos seguidamente qual a "velocidade" de convergência. Temos

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

com η no intervalo definido por x_n e x^*. Atendendo a que $g'(x^*) = 0$, vem

$$|x_{n+1} - x^*| = |\frac{1}{2}g''(\eta)(x_n - x^*)^2|.$$

Logo, com $M > |\frac{1}{2}g''(x)|$, $x \in [x^* - \delta, x^* + \delta]$, obtemos

$$|e_{n+1}| \leq M|e_n|^2.$$

■

No resultado seguinte estabelecemos uma condição suficiente para que o método do ponto fixo tenha ordem $p \in \mathbb{N}$.

Teorema 3.10 *Seja x^* o único ponto fixo de g em $[a, b]$. Se $g^{(j)}(x^*) = 0$ para $j = 1, \ldots, p-1$, e $g^{(p)}$ é limitada num intervalo contendo x^*, então existe $\delta > 0$ tal que, para todo $x_0 \in]x^* - \delta, x^* + \delta[$, a sucessão definida por*

$$x_{n+1} = g(x_n), n = 0, 1, \ldots$$

converge para x^* e a convergência é de ordem p.

■

A finalizar o estudo dos método iterativos para o cálculo aproximado da raiz de uma equação notemos que o método de Newton é um caso particular do método do ponto fixo. De facto, basta tomar

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

3.4 Aplicação a sistemas: o método de Newton

Os métodos de Newton e do ponto fixo estudados são, como referimos generalizáveis, a sistemas de equações. No que se segue faremos a extensão apenas do método de Newton a um sistema de equações. Consideremos um sistema com duas equações

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2) &= 0, \end{aligned} \tag{3.18}$$

com solução $x^* = (x_1^*, x_2^*)$ e seja $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)})$ uma aproximação para x^*. Vejamos seguidamente como podemos determinar uma sucessão de aproximações para x^*. Considerando a fórmula de Taylor obtemos

$$f_i(x_1^*, x_2^*) \simeq f_i(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) + \frac{\partial f_i}{\partial x_1}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})(x_1^* - x_1^{(0)}) + \frac{\partial f_i}{\partial x_2}(x_1^{(0)}, x_2^{(0)})(x_2^* - x_2^{(0)}), i = 1, 2.$$

Matricialmente temos

$$J(x^{(0)})x^* \simeq -F(x^{(0)}) + J(x^{(0)})x^{(0)}$$

em que

$$F(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} f_1(x^{(0)}) \\ f_2(x^{(0)}) \end{bmatrix}$$

e

$$J(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x^{(0)}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(x^{(0)}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(x^{(0)}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(x^{(0)}) \end{bmatrix}$$

é a matriz de Jacobi de F calculada em $x^{(0)}$.

Se a matriz de Jacobi é invertível, então

$$x^* \simeq x^{(0)} - J(x^{(0)})^{-1}F(x^{(0)}).$$

Seja

$$x^{(1)} = x^{(0)} - J(x^{(0)})^{-1}F(x^{(0)}).$$

Considerando $x^{(1)}$ no lugar de $x^{(0)}$ e supondo que $J(x^{(1)})$ é invertível obtemos

$$x^{(2)} = x^{(1)} - J(x^{(1)})^{-1}F(x^{(1)}).$$

Seja

$$x^{(m-1)} = x^{(m-2)} - J(x^{(m-2)})^{-1}F(x^{(m-2)}).$$

Se $J(x^{(m-1)})$ é invertível então consideramos

$$x^{(m)} = x^{(m-1)} - J(x^{(m-1)})^{-1}F(x^{(m-1)}).$$

Obtemos deste modo um processo recursivo que permite determinar uma sucessão de vectores que aproxima a solução do sistema. O método anterior é chamado método de Newton.

A dedução foi feita considerando um sistema de duas equações e duas incógnitas. Consideramos seguidamente o método de Newton para um caso geral. Seja $F(x) = 0$

uma equação não linear em que $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$, $x^{(0)}$ uma aproximação para a solução x^* da equação dada e $J(x) = [\frac{\partial f_i}{\partial x_j}]$ a matriz de Jacobi de F. O método de Newton para sistema de equações não lineares consiste na construção recursiva da sucessão $(x^{(m)})$ através da equação

$$x^{(m)} = x^{(m-1)} - J(x^{(m-1)})^{-1} F(x^{(m-1)}), m = 1, \ldots.$$

Observamos que para aplicar o método é necessário que, em cada iteração , a matriz de Jacobi seja invertível. No entanto não é necessário, em cada iteração, determinar a sua inversa. De facto, podemos considerar a seguinte igualdade

$$J(x^{(m-1)})x^{(m)} = J(x^{(m-1)})x^{(m-1)} - F(x^{(m-1)})$$

devendo a aproximação $x^{(m)}$ ser determinada através da resolução do último sistema obtido.

Algoritmo para o Método de Newton:

1. Dados $x^{(0)}, q \in \mathbb{N}$,
2. Para $m = 1, \ldots, q$,
   (a) Calcular $b1 = -F(x^{(m-1)})$,
   (b) Calcular $J(x^{(m-1)})$,
   (c) Calcular $b2 = J(x^{(m-1)})x^{(m-1)}$,
   (d) Calcular $b = b1 + b2$,
   (e) Resolver o sistema $J(x^{(m-1)})x^{(m)} = b$.

Exemplo: Determinar uma aproximação para a solução do sistema

$$\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 = 9 \\ x_1 x_2 - x_2 = 1 \end{cases}$$

que tem maior abcissa.

Representando graficamente os conjuntos de pontos definidos pelas duas equações do sistema (figura 5)[3] facilmente constatamos que a solução com maior abcissa está "próxima" de $(\frac{5}{2}, 1)$.

[3]As escalas nos eixos coordenados são diferentes

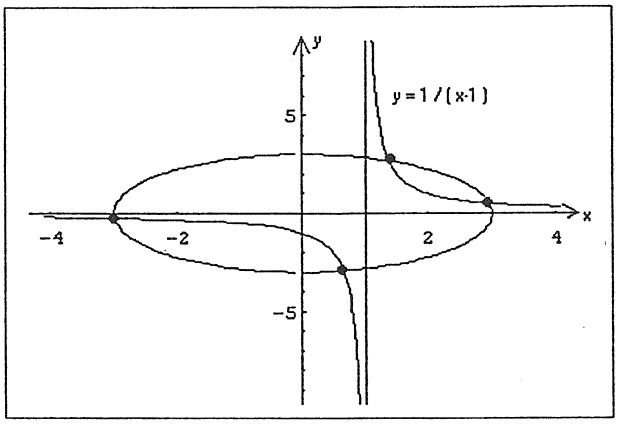

Figura 5

Seja então este vector a aproximação inicial. Temos

$$F(x) = \begin{bmatrix} x_1^2 + x_2^2 - 9 \\ x_1 x_2 - x_2 - 1 \end{bmatrix}, \; J(x) = \begin{bmatrix} 2x_1 & 2x_2 \\ x_2 & x_1 - 1 \end{bmatrix}$$

Então, atendendo a que

$$x^{(0)} = \begin{bmatrix} \frac{5}{2} \\ 1 \end{bmatrix}$$

representa a aproximação inicial, vem

1. $F(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} -\frac{7}{4} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}$,

2. $J(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 1 & \frac{3}{2} \end{bmatrix}$, $det(J(x^{(0)})) \neq 0$,

3. $J(x^{(0)})x^{(0)} - F(x^{(0)}) = \begin{bmatrix} \frac{65}{4} \\ \frac{7}{2} \end{bmatrix}$,

4. a solução do sistema $J(x^{(0)})x^{(1)} = [\frac{65}{4} \; \frac{7}{2}]^t$ é $x^{(1)} = \begin{bmatrix} \frac{139}{44} \\ \frac{5}{22} \end{bmatrix}$.

A tabela 3.3 contém as aproximações $x^{(i)}, i = 1, \ldots, 5$ (2^a e 3^a colunas). Considerando outros valores para $x^{(0)}$ obtivemos as aproximações que se encontram nas colunas 4, 5, 6 e 7 da tabela 3.3.

Tabela 3.3

i	$x_1^{(i)}$	$x_2^{(i)}$	$x_1^{(i)}$	$x_2^{(i)}$	$x_1^{(i)}$	$x_2^{(i)}$
0	2.5	1	1.5	2	0.5	−2.5
1	3.1591	0.22727	1.2885	2.8562	0.69231	−2.9615
2	2.9775	0.48227	1.3686	2.7662	0.65877	−2.9272
3	2.9564	0.51083	1.375	2.6664	0.65834	−2.9269
4	2.9561	0.51122	1.375	2.6663	0.65834	−2.9269
5	2.9561	0.51122	1.375	2.6663	0.65834	−2.9269

■

4 Equações polinomiais

Até ao momento considerámos equações não lineares, entre as quais estão incluídas as equações polinomiais. Consequentemente, a separação das suas raízes bem como os métodos iterativos estudados anteriormente, podem ser aplicados às equações polinomiais. No entanto, atendendo às propriedades dos polinómios, é possível efectuar a localização bem como a aproximação das raízes destas equações usando métodos mais eficientes.

4.1 Localização e separação das raízes

A localização de zeros reais e complexos de uma equação polinomial é feita de forma simples recorrendo ao teorema que se segue.

Teorema 4.1 *Todos os zeros x^* do polinómio $p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^{n-j}$, com $a_0 \neq 0$, estão no interior do círculo (do plano complexo) centrado na origem e de raio*

$$R = 1 + \max_{j=1,\ldots,n} \{|\frac{a_j}{a_0}|\}.$$

Demonstração:

1. Se o zero x^* de $p(x)$ é tal que $|x^*| \leq 1$ então x^* está no interior do círculo de raio R.

2. Seja x^* um zero de $p(x)$ e $|x^*| > 1$. Então

$$a_0(x^*)^n = -\sum_{j=1}^{n} a_j (x^*)^{n-j},$$

e portanto

$$\begin{aligned} |a_0||x^*|^n &\leq \sum_{j=1}^{n} |a_j||x^*|^{n-j} \\ &\leq \max_{j=1,\ldots,n}\{|a_j|\}\sum_{j=1}^{n}|x^*|^{n-j} \\ &\leq \max_{j=1,\ldots,n}\{|a_j|\}\frac{|x^*|^n-1}{|x^*|-1} \end{aligned}$$

ou ainda, atendendo a que $|x^*| > 1$,

$$|x^*| - 1 \leq \frac{1}{|a_0|}\max_{j=1,\ldots,n}\{|a_j|\}\frac{|x^*|^n-1}{|x^*|^n},$$

e facilmente se conclui a demonstração.

■

Corolário 4.2 *Os zeros do polinómio* $p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^{n-j}$, *com* $a_n \neq 0$ *e* $a_0 \neq 0$, *estão no exterior do círculo (do plano complexo) centrado na origem e de raio*

$$r = \frac{1}{1 + \max_{j=0,\ldots,n-1}\{\frac{|a_j|}{|a_n|}\}}.$$

Demonstração: Atendendo a que $a_n \neq 0$ então $x = 0$ não é zero de $p(x)$. Seja $q(y) = y^n p(\frac{1}{y})$. Pelo teorema anterior, os zero de $q(y)$ estão no interior do círculo de raio

$$r_0 = 1 + \max_{j=0,\ldots,n-1}\{\frac{|a_j|}{|a_n|}\}.$$

Mas, se y^* é zero de $q(y)$ ($y^* \neq 0$), então $\frac{1}{y^*} = x^*$ é zero de $p(x)$. Finalmente, atendendo à localização de y^* concluímos a demonstração do corolário.

■

Exemplo: Localizar os zeros de

$$p(x) = 8x^6 - 4x^5 - 22x^4 + 5x^3 - 3x^2 + 9x + 27.$$

Atendendo à definição de R e r temos $R = \frac{35}{8}$ e $r = \frac{27}{49}$. Logo qualquer zero x^* de p satisfaz $\frac{27}{49} < |x^*| < \frac{35}{8}$.

Na figura seguinte está representada a região onde se encontram os zeros do polinómio p.

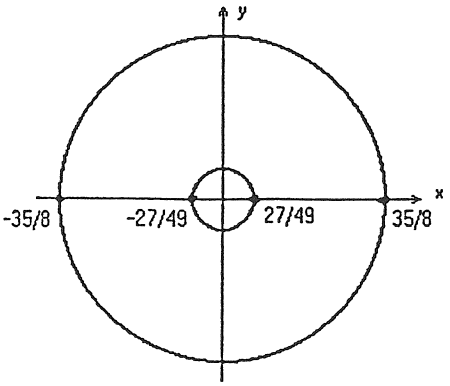

Figura 6

■

Como consequência do teorema e do corolário anteriores podemos concluir que os zeros reais se encontram em $]-R,-r[\cup]r,R[$ e os zeros complexos numa coroa circular de raios r e R.

Para os zeros reais de polinómios podemos determinar intervalos de menor amplitude contendo estes zeros. Um processo de cálculo de tais intervalos é consequência do seguinte teorema:

Teorema 4.3 (Teorema de Newton) *Se em $c>0$ o polinómio $p(x)=\sum_{j=0}^{n} a_j x^{n-j}$ com $a_0>0$, e as suas derivadas $p^{(j)}(x), j=1,2,\ldots,n-1$, são não negativos, então qualquer zero real positivo x^* de $p(x)$ é inferior ou igual a c.*

Demonstração: Atendendo à fórmula de Taylor temos

$$p(x)=p(c)+p'(c)(x-c)+\frac{p''(c)}{2!}(x-c)^2+\ldots+\frac{p^{(n-1)}(c)}{(n-1)!}(x-c)^{n-1}+a_0(x-c)^n,$$

e portanto, para $x>c$ vem $p(x)>0$, o que conclui a demonstração.

■

Como consequência deste teorema podemos determinar:

1. c tal que se x^* é um zero real negativo de $p(x)$ então $x^*\geq c$. De facto, consideremos $q_1(x)=(-1)^n p(-x)$. Os zeros positivos de $q_1(x)$ são os simétricos dos zeros negativos de $p(x)$. Assim, se c_1 é a constante calculada pelo teorema de Newton para $q_1(x)$ e x^* é um zero real negativo de $p(x)$ então $x^*\geq -c_1=c$.

2. $c > 0$ tal que se x^* é zero real positivo de $p(x)$ então $x^* \geq c$. De facto, consideremos $q_2(x) = x^n p(\frac{1}{x})$ e seja c_2 o majorante para os zeros positivos de $q_2(x)$ dado pelo teorema anterior. Se y^* é um zero real positivo de $q_2(x)$ então $\frac{1}{y^*} = x^*$ é zero positivo de $p(x)$. Logo $x^* \geq \frac{1}{c_2} = c$.

3. c tal que se x^* é um zero negativo de $p(x)$ então $x^* \leq c$. De facto, definamos $q_3(x) = (-1)^n x^n p(-\frac{1}{x})$ e seja y^* um zero real positivo de $q_3(x)$. Pelo teorema de Newton, existe c_3 tal que $y^* \leq c_3$. Mas, $x^* = -\frac{1}{y^*}$ é zero negativo de $p(x)$ e tem-se $x^* \leq -\frac{1}{c_3} = c$.

Exemplo: Localizar os zeros reais

$$p(x) = 8x^6 - 4x^5 - 22x^4 + 5x^3 - 3x^2 + 9x + 27.$$

Pelo teorema de Newton temos que se $x^* > 0$ é zero de $p(x)$ então

$$1 < x^* < 2$$

e se $x^* < 0$ então

$$-2 < x^* \leq -1.$$

■

Uma vez determinado o intervalo que contém as raízes reais da equação polinomial podemos separar as raízes - determinar (se possível) subintervalos contendo uma só raiz - usando o teorema de Fourier.

Definição 4.1 *Chamamos sequência de Fourier de $p(x)$ em $[a, b]$ à sequência formada por p e pelas suas sucessivas derivadas $p, p', \ldots, p^{(k)}$ até à primeira derivada $p^{(k)}$ que tem sinal constante em $[a, b]$.*

■

Teorema 4.4 *O número de raízes reais de $p(x) = 0$ em $[a, b]$, onde $p(a) \neq 0$ e $p(b) \neq 0$, é igual ao número de variações de sinal perdidas pela sequência de Fourier de $p(x)$ de a para b ou um número inferior e da mesma paridade.* ■

4.2 O método de Bairstow

Consideremos um polinómio $p(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^{n-j}$ com $a_0 \neq 0$. O método de Bairstow, baseado no algoritmo da divisão de polinómios, permite-nos determinar os zeros - complexos e reais- do polinómio $p(x)$. O método consiste essencialmente na divisão de $p(x)$ por um polinómio de grau 2 seguida do anulamento do resto desta divisão. Deste modo, fica determinado o polinómio do segundo grau e os zeros deste polinómio e do dividendo são os zeros de $p(x)$.

O método de Bairstow tem o seguinte algoritmo:

1. Determinar $q_{n-2}(x)$ e $R(x)$ tais que $p(x) = (x^2 + sx + t)q_{n-2}(x) + R(x)$,
2. Determinar s e t tais que $R(x) = 0$,
3. Determinar os zeros x_1 e x_2 de $x^2 + sx + t$,
4. Determinar os zeros de $q_{n-2}(x)$.

Observamos que

1. a maior dificuldade nas aplicações do método de Bairstow é o cálculo de s e t pois que, de um modo geral, somos conduzidos a um sistema não linear;
2. o processo é repetido tantas vezes quantas as necessárias até à determinação completa dos zeros de $p(x)$.

Exemplo: Determinar os zeros de $p(x) = x^4 - 3x^3 + 3x^2 - 3x + 2$ usando o método anterior.

1. Efectuando o cociente entre o polinómio dado e o polinómio $x^2 + sx + t$ obtemos

$$p(x) = q_2(x)(x^2 + sx + t) + R(x),$$

em que

$$q_2(x) = x^2 - (3 + s)x + (3 - t + 3s + s^2)$$

$$R(x) = (2st - 3s - 3s^2 - s^3 - 3 + 3t)x + (-3st - s^2t + 2 - 3t + t^2);$$

2. Determinando s e t tais que $R(x) = 0$,

$$\begin{cases} 2st - 3s - 3s^2 - s^3 - 3 + 3t = 0 \\ -3st - s^2t + 2 - 3t + t^2 = 0, \end{cases}$$

obtemos $s = 0, t = 1$ (é suficiente porque vamos obter 2 polinómio de grau 2)

3. Os zeros de $x^2 + sx + t$ são $x_1 = +i$ e $x_2 = -i$

4. Os zeros de $q_2(x)$ são 2 e 1.

■

Capítulo 2 - Sistemas de equações lineares

1 Introdução

Muitos problemas são modelizados directamente por sistemas de equações lineares. No entanto, muitos problemas de Análise Numérica são reduzidos a sistemas deste tipo, por exemplo, o cálculo da aproximação dos mínimos quadrados, a determinação da aproximação da solução de uma equação diferencial.

Consideremos então um sistema de equações lineares na forma matricial

$$Ax = b \tag{1.1}$$

em que A é uma matriz de ordem $n$de entradas em $\mathbb{R}$ e b é um vector coluna com n componentes (por $M_{n\times m}(\mathbb{R})$ denotamos os conjunto das matriz do tipo $n \times m$ e de entradas em $\mathbb{R}$. Se $m = n$ escrevemos $M_n(\mathbb{R})$.)

Iremos supor que o sistema (1.1) é possível e determinado, isto é, atendendo a que as condições são

1. A é não singular,
2. A é invertível,
3. $Ax = 0$ é possível e determinado,
4. qualquer que seja $b \in M_{n\times 1}(\mathbb{R})$, o sistema $Ax = b$ é possível e determinado,

são equivalentes, admitiremos que qualquer uma das condições anteriores é válida.

Os métodos para a resolução do sistema (1.1) podem ser agrupados fundamentalmente em duas classes:

1. métodos directos,
2. métodos indirectos ou métodos iterativos.

Os métodos directos são aqueles que supondo não haver erros de arredondamento ou quaisquer outros, nos permitem obter a solução exacta do sistema num número finito de operações aritméticas. Estes métodos têm a sua fundamentação no processo de elimanação de Gauss. Os métodos pertencentes à segunda classe geram, a partir de uma aproximação inicial, uma sucessão de vectores que sob determinadas condições "convergem" para a solução do sistema. Iremos centrar a nossa atenção nos métodos iterativos.

Com o objectivo de estudar as propriedades dos métodos iterativos recordemos alguns conceitos para vectores e matrizes.

Definição 1.1 *Chamamos norma em* $\mathbb{R}^n$ *a toda a aplicação*

$$\|.\| : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}_0^+$$

que verifica

1. $\|x\| \geq 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$, *e se* $x \in \mathbb{R}^n$ *é tal que* $\|x\| = 0$ *então* $x = 0$,
2. $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|, \forall \alpha \in \mathbb{R}, \forall x \in \mathbb{R}^n$,
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|, \forall x, y \in \mathbb{R}^n$.

■

Consideremos alguns exemplos de normas em $\mathbb{R}^n$.

Exemplo:

Norma 1 (norma absoluta): $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$,

Norma 2 (norma euclidiana): $\|x\|_2 = (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2)^{1/2}$,

Norma infinito: $\|x\|_\infty = \max_{i=1,\ldots,n} |x_i|$.

■

Com o conceito de norma podemos definir o conceito de convergência. Este conceito tem significado quando considerado associado à norma $\|.\|$.

Definição 1.2 *A sucessão de vectores de* $\mathbb{R}^n$, $(x^{(m)})$, *diz-se convergente para* $x^* \in \mathbb{R}^n$ *se para todo* $\epsilon > 0$ *existe uma ordem* $m_0 \in \mathbb{N}$ *tal que para* $m \geq m_0$ *se tem*

$$\|x^{(m)} - x^*\| < \epsilon$$

e escreve-se

$$\lim_{m\to+\infty} x^{(m)} = x^*. \tag{1.2}$$

■

Uma condição necessária e suficiente para que se verifique (1.2) é dada pelo seguinte teorema:

Teorema 1.1 *Relativamente a qualquer uma das normas* $\|.\|_1, \|.\|_2, \|.\|_\infty$, *uma sucessão* $(x^{(m)})$ *de vectores de* $\mathbb{R}^n$ *é convergente para* x^* *se e só se* $x_i^{(m)} \to x_i$, $i = 1, \ldots, n$.

■

Definição 1.3 *Uma aplicação* $\|.\| : M_n(\mathbb{R}) \longrightarrow \mathbb{R}_0^+$ *diz-se uma norma em* $M_n(\mathbb{R})$ *se verifica as condições*

1. $\|A\| \geq 0, \forall A \in M_n(\mathbb{R})$, *e se* $A \in M_n(\mathbb{R})$ *é tal que* $\|A\| = 0$ *então* $A = 0$ *(matriz nula)*
2. $\|\alpha A\| = |\alpha|\|A\|$, $\forall A \in M_n(\mathbb{R})$, $\forall \alpha \in \mathbb{R}$,
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$, $\forall A, B \in M_n(\mathbb{R})$.

■

De entre as normas matriciais, aquelas que iremos considerar são as que são induzidas por uma norma de vectores.

Teorema 1.2 *Seja* $\|.\|_v$[4] *uma norma em* $\mathbb{R}^n$. *A aplicação de* $M_n(\mathbb{R})$ *em* $\mathbb{R}_0^+$ *definida por*

$$\|A\|_m = \sup_{x\in\mathbb{R}^n-\{0\}} \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v}, A \in M_n(\mathbb{R})$$

é uma norma em $M_n(\mathbb{R})$

Demonstração: De facto a aplicação dada verifica a definição de norma pois

[4]Iremos considerar $v = 1, v = \infty$ e $v = 2$.

1. pela definição de $\|A\|_m$ temos $\|A\|_m \geq 0$ e se $\|A\|_m = 0$ então $\|Ax\|_v = 0$, $\forall x \in \mathbb{R}^n$, e portanto, $Ax = 0, \forall x \in \mathbb{R}^n$. Considerando sucessivamente $x = e_i$(i ésimo vector da base canónica de $\mathbb{R}^n$, obtemos $A = 0$;

2. $\|\alpha A\|_m = \sup_{x \in \mathbb{R}^n - \{0\}} \frac{\|\alpha Ax\|_v}{\|x\|_v} = |\alpha| \sup_{x \in \mathbb{R}^n - \{0\}} \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} = |\alpha| \|A\|_m$;

3. atendendo a que para a norma de vectores se tem $\|x + y\|_v \leq \|x\| + \|y\|$ então também é fácil verificar que $\|A + B\|_m \leq \|A\|_m + \|B\|_m$.

■

A norma $\|.\|_m$ definida no teorema anterior é designada norma induzida ou norma associada à norma vectorial $\|.\|_v$ e para esta norma vale a seguinte desigualdade

$$\|AB\|_m \leq \|A\|_m \|B\|_m, \forall A, B \in M_n(\mathbb{R}). \tag{1.3}$$

De facto, temos

$$\|AB\|_m = \sup_{x \in \mathbb{R}^n - \{0\}} \frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v} \leq \sup_{x \in \mathbb{R}^n - \{0\}, Bx \neq 0} \frac{\|A(Bx)\|_v}{\|Bx\|_v} \frac{\|Bx\|_v}{\|x\|_v} \leq \|A\|_m \|B\|_m.$$

Vejamos seguidamente as normas induzidas mais comuns e que são as induzidas pelas normas vectoriais $\|\|_1$ e $\|.\|_\infty$.

Exemplo:

1.

$$\|A\|_1 = \sup_{x \in \mathbb{R}^n - \{0\}} \frac{\|Ax\|_1}{\|x\|_1},$$

e

$$\begin{aligned} \|Ax\|_1 &= \sum_{i=1}^{n} |\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j| \\ &\leq \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}||x_j| \\ &= \sum_{j=1}^{n} (\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|)|x_j| \\ &\leq \max_{j=1,\ldots,n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \|x\|_1. \end{aligned}$$

Atendendo à desigualdade anterior, vale

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

Podemos também provar que

$$\|A\|_1 \geq \max_{j=1,\ldots,n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

e portanto,para a norma absoluta tem-se

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

2.

$$\|A\|_\infty = \sup_{x \in \mathbb{R}^n - \{0\}} \frac{\|Ax\|_\infty}{\|x\|_\infty},$$

e

$$\begin{aligned} \|Ax\|_\infty &= \max_{i=1,\ldots,n} |\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j| \\ &\leq \max_{i=1,\ldots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{i,j}||x_j| \\ &\leq \max_{i=1,\ldots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \max_{j=1,\ldots,n} |x_j| \\ &\leq \max_{i=1,\ldots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \|x\|_\infty. \end{aligned}$$

Atendendo à desigualdade anterior, vale

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

Podemos também provar que

$$\|A\|_\infty \geq \max_{i=1,\ldots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$$

e portanto, para a norma infinito tem-se

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\ldots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|.$$

■

Podemos agora introduzir em $M_n(\mathbb{R})$ o conceito de limite de uma sucessão de matrizes.

Definição 1.4 *A sucessão de matrizes* $(A(m))$ *de* $M_n(\mathbb{R})$ *converge para* $A \in M_n(\mathbb{R})$ *se para todo* $\epsilon > 0$ *existe uma ordem* m_0 *tal que para* $m \geq m_0$ *se tem*

$$\|A(m) - A\| < \epsilon.$$

■

Para as normas matriciais $\|.\|_1$ e $\|.\|_\infty$ é válida a seguinte caracterização:

Teorema 1.3 *A sucessão de matrizes* $(A(m))$ *de* $M_n(\mathbb{R})$, *com* $A(m) = [a_{ij}(m)]$, *converge para* $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{R})$ *relativamente às normas* $\|.\|_1$ *e* $\|.\|_\infty$ *se e só se*

$$\lim_{m \to +\infty} a_{ij}(m) = a_{ij},$$

para todo $i, j \in \{1, \ldots, n\}$. ■

A convergência de certas sucessões de matrizes está associada ao raio espectral.

Definição 1.5 *Seja* $A \in M_n(\mathbb{R})$ *e* $\lambda \in \mathbb{R}$. *Diz-se que* λ *é valor próprio de* A *se existe* $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, *tal que* $Ax = \lambda x$.

A $max\{|\lambda| : \lambda$ *é valor próprio de* $A\}$ *chama-se raio espectral de* A *e é denota-se por* $\rho(A)$.

■

No teorema seguinte é estabelecida uma condição necessária e suficiente para que se tenha a convergência da sucessão (A^m) (sucessão das potências de uma matriz).

Teorema 1.4 *Seja* $A \in M_n(\mathbb{R})$. *É condição necessária e suficiente para que*

$$\lim_{m \to \infty} A^m = 0$$

que se tenha $\rho(A) < 1$.

■

2 Métodos Indirectos ou Iterativos

Consideremos o sistema (1.1) em que $A = [a_{ij}]$ é invertível. Particionando A na forma

$$A = N - P,$$

o sistema (1.1) é reescrito na forma equivalente

$$Nx = Px + b.$$

Supondo que N é invertível temos

$$x = N^{-1}Px + N^{-1}b$$

ou ainda

$$x = Mx + d \tag{2.4}$$

em que $M = N^{-1}P$ e $d = N^{-1}b$. Considerando um vector arbitrário $x^{(0)}$ no segundo membro de (2.4) obtemos um vector que denotamos por $x^{(1)}$, isto é,

$$x^{(1)} = Mx^{(0)} + d.$$

Repetindo o processo sucessivamente obtemos a partir de $x^{(m-1)}$ um vector $x^{(m)}$,

$$x^{(m)} = Mx^{(m-1)} + d. \tag{2.5}$$

Deste modo construímos um processo iterativo que nos permite determinar $x^{(1)}$, $x^{(2)}, \ldots$, supondo conhecido $x^{(0)}$.

À matriz M da igualdade (2.5) chamamos matriz de iteração e a $x^{(m)}$ aproximação m de x^* ou iteração m.

Definição 2.1 *Seja x^* a solução de $Ax = b$ e $x^{(m)}$ a aproximação dada pelo método iterativo (2.5). A $e^{(m)} = x^* - x^{(m)}$ chamamos erro da iteração m.*

O método iteratiov (2.5) diz-se convergente se

$$\lim_{m \to +\infty} e^{(m)} = 0.$$

Caso contário diz-se divergente.

■

Vejamos seguidamente em que condições o método iterativo (2.5) é convergente.

Teorema 2.1 *O método iterativo (2.5) converge, qualquer que seja a aproximação inicial* $x^{(0)}$, *se e só se*

$$\lim_{m\to+\infty} M^m = 0. \tag{2.6}$$

Demonstração: Atendendo a (2.4) e (2.5), facilmente concluimos que o erro $e^{(m)}$ da aproximação $x^{(m)}$ satisfaz

$$e^{(m)} = Me^{(m-1)},\ m = 1,\ldots, \tag{2.7}$$

e assim

$$e^{(m)} = M^m e^{(0)}, m = 1,\ldots. \tag{2.8}$$

Logo o método é convergente se e só se (2.6).

■

Do teorema anterior e do teorema 1.4 obtemos a seguinte caracterização:

Teorema 2.2 *O método iterativo (2.5) converge, qualquer que seja a aproximação inicial* $x^{(0)}$, *se e só se* $\rho(M) < 1$.

■

Podemos agora obter uma condição suficiente para a convergência do método iterativo (2.5) em que a norma matricial que se considera é a induzida pela norma vectorial relativamente à qual se estuda a convergência do método. De facto, usando a desigualdade (1.3) e o teorema 2.1 obtemos o seguinte teorema.

Teorema 2.3 *Se* $\|M\| < 1$ *então o método iterativo (2.5) converge, qualquer que seja a aproximação inicial* $x^{(0)}$, *e tem-se*

$$\|x^* - x^{(n)}\| \leq \|M\|^n \|x^* - x^{(0)}\|, \tag{2.9}$$

e

$$\|x^* - x^{(n)}\| \leq \frac{\|M\|^n}{1-\|M\|}\|x^{(1)} - x^{(0)}\|. \tag{2.10}$$

Demonstração: Considerando em (2.8) normas obtemos

$$\|e^{(m)}\| \leq \|M\|^m \|e^{(0)}\|, m = 1, \ldots.$$

Atendendo a que $\|M\| < 1$, tomando limite na desigualdade anterior obtemos

$$\lim_{m \to +\infty} \|e^{(m)}\| = 0,$$

o que prova a convergência do método iterativo.

Para provar a segunda estimativa para o erro de $x^{(n)}$ ((2.10)) comecemos por notar que

$$x^{(m)} - x^{(n)} = \sum_{j=n+1}^{m} x^{(j)} - x^{(j-1)}$$

e portanto,

$$\|x^{(m)} - x^{(n)}\| \leq \sum_{j=n+1}^{m} \|x^{(j)} - x^{(j-1)}\|.$$

Mais ainda, é facil estabelecer a seguinte igualdade

$$x^{(j)} - x^{(j-1)} = M^{j-1}[x^{(1)} - x^{(0)}],$$

e consequentemente

$$\|x^{(j)} - x^{(j-1)}\| \leq \|M\|^{j-1} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|.$$

Conjugando as desigualdade anteriores vem

$$\begin{aligned} \|x^{(m)} - x^{(n)}\| &\leq (\sum_{j=n+1}^{m} \|M\|^{j-1}) \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \\ &= \|M\|^n (\sum_{j=0}^{m-n-1} \|M\|^j) \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \\ &\leq \|M\|^n (\sum_{j=0}^{\infty} \|M\|^j) \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \\ &= \frac{\|M\|^n}{1 - \|M\|} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|. \end{aligned}$$

Considerando $m \to +\infty$ obtemos (2.10).

■

Podemos então concluir que

1. o método iterativo é convergente se e só se $\rho(M) < 1$,

2. se $\|M\| < 1$ então o método iterativo é convergente,

3. se $\|M\| \geq 1$ então o método iterativo pode ser ou não convergente.

Observação:

1. A matriz de iteração, M, do método iterativo foi definida por

$$M = N^{-1}P$$

em que N e P são tais que $A = N - P$.

2. A matriz anterior desempenha um papel importante pois através dela podemos concluir se o método é ou não convergente.

3. Atendendo a que podemos associar a A diferentes partições do tipo $N - P$, então para resolver o sistema $Ax = b$ podemos considerar diferentes métodos iterativos. Iremos estudar dois métodos no próximo parágrafo.

4. Uma questão que se levanta quando resolvemos um sistema linear usando um método iterativo, é o de saber qual o número de iterações que devemos considerar de modo a obter uma solução aproximada "aceitável". Esta questão é resolvida estabelecendo à priori uma tolerância δ e exigindo que o erro absoluto ou o erro relativo seja inferior a δ. Mais precisamente, o número de iterações m deve ser calculado de modo a serem válidas as desigualdades

$$\|x^{(m)} - x^{(m-1)}\| \leq \delta \tag{2.11}$$

ou

$$\frac{\|x^{(m)} - x^{(m-1)}\|}{\|x^{(m)}\|} \leq \delta \tag{2.12}$$

5. A ordem do método iterativo $x^{(m)} = Mx^{(m-1)} + d, m = 1, \ldots$ é um pois que se tem

$$\|e^{(m)}\| \leq \|M\|\|e^{(m-1)}\|, m = 1, \ldots.$$

2.1 O método de Jacobi

Consideremos o sistema $Ax = b$ em que $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{R})$ é não singular e $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \ldots, n$. Efectuemos a partição

$$A = D - L - U$$

em que $D = [d_{ij}]$ é uma matriz diagonal com $d_{ii} = a_{ii}$, $L = [\ell_{ij}]$ é uma matriz triangular inferior com elementos diagonais iguais a zero e $\ell_{ij} = -a_{ij}$ e $U = [u_{ij}]$ é uma matriz triangular superior com elementos da diagonal principal iguais a zero e $u_{ij} = -a_{ij}$, isto é,

$$D = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ -a_{21} & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & -a_{n4} & \ldots & -a_{n\,n-1} & 0 \end{bmatrix}$$

e

$$U = \begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & \ldots & -a_{1\,n-1} & -a_{1n} \\ 0 & 0 & -a_{23} & \ldots & -a_{2\,n-1} & -a_{2n} \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & -a_{3\,n-1} & -a_{3n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Com a partição feita em A, o sistema $Ax = b$ é equivalente a

$$Dx = (L + U)x + b.$$

A partir desta equação deduzimos o método iterativo

$$x^{(m)} = D^{-1}(L + U)x^{(m-1)} + D^{-1}b, \; m = 1, \ldots. \tag{2.13}$$

O método traduzido pela igualdade anterior é conhecido por método de Jacobi.

Conjugando as igualdades (2.13) e (2.5) concluimos que a matriz de iteração do método de Jacobi é $M = D^{-1}(L + U)$. Esta matriz é também conhecida por matriz de Jacobi.

Exemplo: Determinar a aproximação $x^{(2)}$ para a solução do sistema

$$\begin{cases} 10x_1 + x_2 + x_3 &= 12 \\ x_1 - 5x_2 + 2x_3 &= -2 \\ x_1 + x_2 + 3x_3 &= 5 \end{cases}$$

utilizando o método de Jacobi.

A matriz de iteração M do método de Jacobi e o vector d são, respectivamente,

$$M = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{10} & -\frac{1}{10} \\ \frac{1}{5} & 0 & \frac{2}{5} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix} \quad d = \begin{bmatrix} \frac{12}{10} \\ \frac{2}{5} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix}.$$

Assim, obtemos o seguinte método iterativo

$$\begin{bmatrix} x_1^{(m)} \\ x_2^{(m)} \\ x_3^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{10} & -\frac{1}{10} \\ \frac{1}{5} & 0 & \frac{2}{5} \\ -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(m-1)} \\ x_2^{(m-1)} \\ x_3^{(m-1)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{12}{10} \\ \frac{2}{5} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix}, \quad m = 1, \ldots.$$

Tomado $x^{(0)} = (0,0,0)$ obtemos $x^{(1)} = (\frac{12}{10}, \frac{2}{5}, \frac{5}{3})$ e $x^{(2)} = (\frac{149}{150}, \frac{98}{75}, \frac{17}{15})$.

Notamos que a solução do sistema é $(1,1,1)$.

■

Concretizemos seguidamente para o método de Jacobi os teoremas de convergência estabelecidos anteriormente.

Teorema 2.4 *Seja $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{R})$ não singular com $a_{ii} \neq 0, i = 1, \ldots, n$, e $b \in \mathbb{R}^n$. Consideremos em A a partição $A = D - L - U$ onde D, L e U são as matrizes definidas anteriormente.*

1. *Se $\|D^{-1}(L+U)\| < 1$ então qualquer que seja a aproximação inicial $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, o método de Jacobi gera uma sucessão de vectores que converge para a única solução de $Ax = b$.*
2. *O método de Jacobi gera uma sucessão de vectores que converge para a única solução de $Ax = b$ qualquer que seja a aproximação inicial se e só se $\rho(D^{-1}(L+U)) < 1$.*

■

Para alguns tipos de matrizes, podemos facilmente estabecelecer uma condição suficiente para a convergência do método de Jacobi. Uma matriz $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{R})$ diz-se estritamente diagonal dominante por linhas (ou por colunas) se

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

(ou $|a_{ii}| > \sum_{\ell \neq i} |a_{\ell i}|, i = 1, \ldots, n$).

A condição suficiente para a convergência do método de Jacobi quando a matriz A é estritamente diagonal dominante por linhas (ou colunas) é consequência do Teorema de Gershgorin.

Teorema 2.5 [Teorema de Gershgorin] *Os valores próprios da matriz* $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{R})$ *pertencem à união dos círculos centrados em* a_{ii} *e de raio*

$$r_i = \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, i = 1, \ldots, n.$$

■

Observação: Atendendo a que os valores próprios de A são os valores próprios de A^t, pelo teorema de Gershgorin os valores próprios de A estão também na união dos círculos centrados em a_{ii} e raio $\sum_{i \neq j} |a_{ij}|$, $j = 1, \ldots, n$.

Teorema 2.6 *Se* A *é estritamente diagonal dominante por linhas (ou colunas) então o método iterativo de Jacobi gera uma sucessão de aproximações que converge para a solução do sistema* $Ax = b$ *qualquer que seja a aproximação inicial* $x^{(0)}$.

Demonstração: A matriz de iteração do método de Jacobi é

$$M = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \ldots & -\frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \ldots & -\frac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \ldots & \ldots & 0 \end{bmatrix}$$

Os valores próprios desta matriz estão na união dos círculos centrados na origem e de raio

$$r_i = \sum_{j \neq i} |\frac{a_{ij}}{a_{ii}}|$$

tendo-se $r_i < 1$ pois que A é estritamente diagonal dominante por linhas. Logo $\rho(M) < 1$.

■

2.2 O método de Gauss-Seidel

Consideremos de novo o sistema $Ax = b$ e a decomposição

$$A = D - L - U.$$

em que D é invertível. Com a partição anterior, o sistema $Ax = b$ é equivalente a

$$(D - L)x = Ux + b,$$

ou ainda

$$(I - D^{-1}L)x = D^{-1}Ux + D^{-1}b.$$

Desta igualdade facilmente deduzimos o seguinte método iterativo

$$(I - D^{-1}L)x^{(m)} = D^{-1}Ux^{(m-1)} + D^{-1}b, \tag{2.14}$$

ou ainda

$$x^{(m)} = D^{-1}Lx^{(m)} + D^{-1}Ux^{(m-1)} + D^{-1}b, \ m = 1, \ldots. \tag{2.15}$$

O método iterativo traduzido pela equação anterior é conhecido por método de Gauss-Seidel. Conjugando as igualdades (2.5) e (2.15) vem

$$M = (I - D^{-1}L)^{-1}D^{-1}U.$$

A matriz anterior, matriz de iteração do método de Gauss Seidel, é também conhecida por matriz de Gauss-Seidel.

Exemplo: Consideremos o sistema

$$\begin{cases} 10x_1 + x_2 + x_3 &= 12 \\ x_1 - 5x_2 + 2x_3 &= -2 \\ x_1 + x_2 + 3x_3 &= 5 \end{cases}$$

que foi introduzido anteriormente. Aplicando o método de Gauss-Seidel determine $x^{(1)}$.

Usando (2.14) podemos escrever

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{5} & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(m)} \\ x_2^{(m)} \\ x_3^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{-1}{10} & \frac{-1}{10} \\ 0 & 0 & \frac{2}{5} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1^{(m-1)} \\ x_2^{(m-1)} \\ x_3^{(m-1)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{6}{5} \\ \frac{2}{5} \\ \frac{5}{3} \end{bmatrix}, \ m = 1, 2, \ldots.$$

Para $x^{(0)} = (0, 0, 0)$ obtemos $x^{(1)} = (\frac{6}{5}, \frac{16}{25}, \frac{79}{75})$.

■

Concretizemos seguidamente para o método de Gauss-Seidel os teoremas de convergência estabelecidos anteriormente.

Teorema 2.7 *Seja $A = [a_{ij}] \in M_n(\mathbb{R})$ não singular com $a_{ii} \neq 0, i = 1, \ldots, n$, e $b \in \mathbb{R}^n$. Consideremos a partição $A = D - L - U$ com D, L e U definidas anteriormente.*

1. *Se $\|(I - D^{-1}L)^{-1}D^{-1}U\| < 1$ então qualquer que seja a aproximação inicial $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, o método de Gauss-Seidel gera uma sucessão de vectores que converge para a única solução de $Ax = b$.*
2. *O método de Gauss-Seidel gera uma sucessão de vectores que converge para a única solução de $Ax = b$ qualquer que seja a aproximação inicial se e só se $\rho((I - D^{-1}L)^{-1}D^{-1}U) < 1$.*

■

A finalizar estabelecemos uma condição suficiente para que o método de Gauss-Seidel seja convergente quando a matriz do sistema é estritamente diagonal dominante.

Teorema 2.8 *Se A é estritamente diagonal dominante por linhas (ou colunas) então o método iterativos de Gauss-Seidel gera uma sucessão de aproximações que converge para a solução do sistema $Ax = b$ qualquer que seja a aproximação inicial $x^{(0)}$.*

■

Capítulo 3 - Interpolação Polinomial

1 Introdução

Seja $(x_i, y_i), i = 0, \ldots, n$, um conjunto de valores em que $x_i, i = 0, \ldots, n$, estão por ordem crescente. Admitamos que os valores x_i e $y_i, i = 0, \ldots, n$, estão relacionados por uma função f desconhecida, isto é,

$$f(x_i) = y_i, i = 0, \ldots, n,$$

e que pretendemos determinar $f(\overline{x})$ com $\overline{x} \neq x_i$, $i = 0, \ldots, n$.

A teoria de interpolação permite resolver o problema anterior aproximando f por uma função g pertencendo a uma classe de funções $\mathcal{P}$ previamente escolhida e tomando, em seguida, $g(\overline{x})$ para $f(\overline{x})$. Atendendo ao procedimento descrito, colocam-se várias questões das quais salientamos:

1. Como escolher a classe $\mathcal{P}$?
2. Como determinar $g \in \mathcal{P}$?
3. Como quantificar o erro $f(\overline{x}) - g(\overline{x})$?

Relativamente à primeira questão iremos considerar a classe dos polinómios de grau menor ou igual a n- $\mathcal{P}_n$ - e restringimo-nos apenas à interpolação polinomial. No que diz respeito à segunda questão iremos determinar $P \in \mathcal{P}_n$ tal que

$$P(x_i) = f(x_i), i = 0, \ldots, n. \tag{1.1}$$

Este polinómio é chamado polinómio interpolador de f nos pontos $x_i, i = 0, \ldots, n$, e a estes pontos chamamos nodos de interpolação. A figura seguinte ilustra o problema que pretendemos resolver.

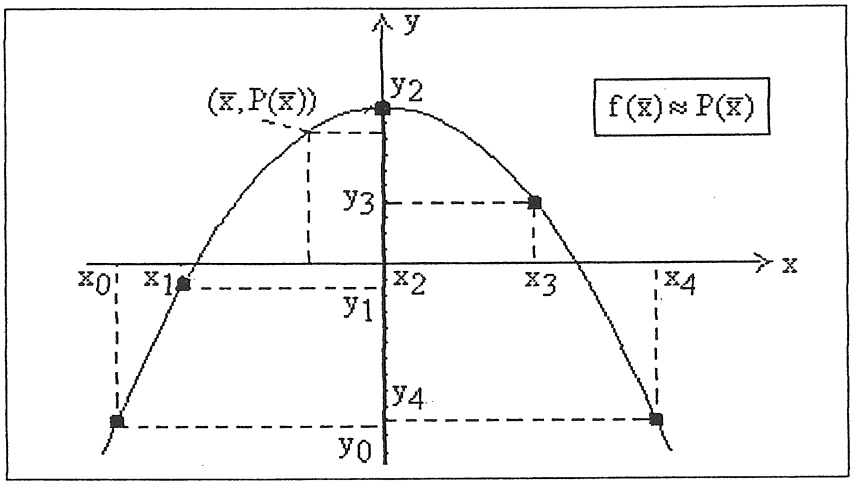

Figura 1

Relativamente à terceira questão, o estudo do erro é feito aquando da construção do polinómio interpolador.

2 O polinómio interpolador de Lagrange

Consideremos uma função f definida num intervalo $[a, b]$ e neste intervalo a partição

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Pretendemos construir um polinómio $P(x)$ que verifique $P(x_i) = f(x_i), i = 0, \ldots, n$, e estudar o comportamento de $P(x)$ em $[a, b]$.

Consideremos as funções

$$\ell_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, i = 0, \ldots, n.$$

As funções anteriores são chamadas polinómios de Lagrange e têm um papel importante na construção do polinómio interpolador. Notemos que os polinómios de Lagrange têm grau n e verificam

$$\ell_i(x_j) = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

A existência e unicidade do polinómio interpolador é estabelecida no teorema seguinte.

Teorema 2.1 *Dado o conjunto de pontos* $(x_i, f(x_i))$, $i = 0, \ldots, n$, *de abcissas distintas o polinómio*

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x)$$

é o único polinómio de grau menor ou igual a n *que é interpolador de* f *nos pontos* $x_i, i = 0, \ldots, n$.

Demonstração: Atendendo às propriedades dos polinómios de Lagrange, concluímos que $P_n(x)$ tem grau menor ou igual a n e verifica $P_n(x_i) = f(x_i), i = 0, \ldots, n$.

Provemos seguidamente a unicidade. Seja $Q(x)$ outro polinómio de grau menor ou igual a n que verifica $Q(x_i) = f(x_i), i = 0, \ldots, n$. Denotemos por R a função $R(x) = P_n(x) - Q(x)$. Esta função tem grau menor ou igual a n e tem por zeros $x_i, i = 0, \ldots, n$. Logo $R(x) = 0$ pois um polinómio de grau menor ou igual a n tem quando muito n zeros.

■

Exemplo: Considere os pontos $(0, \frac{1}{2}), (\frac{1}{2}, 1)$ e $(1, \frac{1}{4})$. Determinar o polinómio que passa nos pontos dados.

Temos

$$\ell_0(x) = 2(x - \frac{1}{2})(x - 1), \quad \ell_1(x) = -4x(x - 1), \quad \ell_2(x) = 2x(x - \frac{1}{2})$$

e portanto

$$P_2(x) = (x - \frac{1}{2})(x - 1) - 4x(x - 1) + \frac{1}{2}x(x - \frac{1}{2}).$$

■

Observação: No teorema anterior é estabelecida a unicidade do polinómio interpolador. No entanto, atendendo a que na sua construção utilizámos os polinómios de Lagrange, o polinómio interpolador $P_n(x)$ é, por abuso de linguagem, chamado polinómio interpolador de Lagrange. Como veremos posteriormente, outras designações serão consideradas para o mesmo polinómio e que estão relacionadas com o processo usado na sua construção.

Vejamos seguidamente como estimar o erro que se comete ao aproximar f por P_n.

Teorema 2.2 *Seja* f *uma função que tem derivada de ordem* n *contínua em* $[a, b]$ *e que tem derivada de ordem* $n + 1$ *em* (a, b). *Em* $[a, b]$ *consideremos a partição*

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$$

e seja $P_n(x)$ o polinómio interpolador de Lagrange de f nos $n+1$ pontos $x_i, i = 0, \ldots, n$. Se $x \in [a,b]$, então existe $\eta(x) \in (a,b)$ tal que

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{n+1}(\eta(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j).$$

Demonstração: Seja $x \in [a,b]$. Se $x = x_i$ então teorema está demonstrado. Se $x \neq x_i, i = 0, \ldots, n$, consideremos a função

$$g(t) = f(t) - P_n(t) - [f(x) - P_n(x)] \prod_{j=0}^{n} \frac{t - x_j}{x - x_j}, t \in [a,b].$$

A função g verifica

$$g(x) = 0,\ g(x_i) = 0, i = 0, \ldots, n,$$

e portanto tem pelo menos $n+2$ zeros. Assim, $g^{(n+1)}$ tem pelo menos um zero em (a,b), i.e, existe $\eta(x) \in (a,b)$ tal que $g^{(n+1)}(\eta(x)) = 0$. Temos então

$$0 = f^{(n+1)}(\eta(x)) - [f(x) - P_n(x)] \frac{1}{\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)} \left(\frac{d^{n+1}}{dt^{n+1}} \prod_{j=0}^{n} (t - x_j) \right) |_{t=\eta(x)}.$$

Da igualdade anterior vem

$$0 = f^{(n+1)}(\eta(x)) - [f(x) - P_n(x)] \frac{(n+1)!}{\prod_{j=0}^{n}(x - x_j)},$$

o que prova o pretendido.

■

Atendendo ao resultado anterior podemos determinar uma estimativa para o erro cometido ao substituir a função pelo seu polinómio interpolador num ponto do intervalo $[a,b]$. Se existe $M > 0$ tal que

$$|f^{(n+1)}(x)| \leq M, \forall x \in [a,b]$$

então

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} |x - x_j|. \tag{2.2}$$

Exemplo: Considere a função $f(x) = lnx, x \in [1,2]$ e os valores

x_i	1	1.5	2
$f(x_i)$	0	$ln1.5$	$ln2$

Determinar o polinómio interpolador de Lagrange de f nos pontos dados na tabela. Utilizar o polinómio determinado para calcular um valor aproximado de $ln\frac{9}{8}$. Determinar uma estimativa para o erro com que vem afectado o valor anterior.

Polinómio interpolador de Lagrange para os dados anteriores

$$P_2(x) = -4ln1.5(x-1)(x-2) + 2ln2(x-1)(x-1.5).$$

Utilizando o polinómio anterior vem

$$ln\frac{9}{8} \simeq P_2(\frac{9}{8}) = 0.11241.$$

A estimativa de erro obtida utilizando a expressão (2.2)

$$|ln\frac{9}{8} - P_2(\frac{9}{8})| \leq \frac{2}{3!}\frac{21}{8^3} \leq 0.01368.$$

■

Podemos obter uma estimativa para o erro independente de $x \in [a,b]$. De facto, antendendo a que

$$|x - x_j| \leq b - a, j = 0, \ldots, n, x \in [a,b],$$

vem, de (2.2),

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M}{(n+1)!}(b-a)^{n+1}, x \in [a,b]. \tag{2.3}$$

A estimativa do erro calculada usando esta desigualdade é, de um modo geral, muito grosseira. Esta desigualdade pode ser utilizada para determinar o polinómio interpolador que tenha em qualquer ponto do intervalo da partição um erro inferior a uma quantidade estabelecida ϵ. De facto, basta determinar n tal que

$$\frac{M}{(n+1)!}(b-a)^{n+1} < \epsilon \tag{2.4}$$

e em seguida considerar para o valor determinado n uma partição uniforme de espaçamento $h = (b-a)/n$.

Exemplo: Considerar $f(x) = lnx, x \in [1,2]$. Determinar qual deve ser o menor grau do polinómio interpolador para que o erro cometido ao aproximar f por esse polinómio seja inferior a 10^{-2}.

Atendendo a que

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

para $n \in \mathbb{N}$, de (2.4) vem

$$|lnx - P_n(x)| \leq \frac{1}{(n+1)}, \ x \in [1,2].$$

Assim, o valor de n pretendido é 100.

■

Vejamos seguidamente como determinar uma estimativa para o erro em função de

$$h = \max_{i=1,\ldots,n}(x_i - x_{i-1}).$$

Provemos que

$$\max_{x\in[a,b]} | \prod_{j=0}^{n}(x - x_j) | \leq \frac{h^{n+1}n!}{4}. \tag{2.5}$$

Para $n = 1$ temos

$$g(x) = |(x - x_0)(x - x_1)| = -(x - x_0)(x - x_1), \ x \in [a,b],$$

e esta função tem um máximo em $x^* = (x_0 + x_1)/2$ cujo valor é

$$g(\frac{x_0 + x_1}{2}) = |(\frac{x_0 + x_1}{2} - x_0)(\frac{x_0 + x_1}{2} - x_1)| \leq \frac{h^2}{4}.$$

Suponhamos a veracidade da desigualdade (2.5) para n e provemos a sua veracidade para $n+1$, i.e,

$$\max_{x\in[a,b]} | \prod_{j=0}^{n+1}(x - x_j) | \leq \frac{h^{n+2}(n+1)!}{4},$$

em que $x_0 = a$ e $x_{n+1} = b$. Notemos que se $x \in [a,b]$ então $x \in [a,x_n]$ ou $x \in [x_n,b]$.

Consideremos $x \in [a,x_n]$. Atendendo a

$$| \prod_{j=0}^{n+1}(x - x_j) | = | \prod_{j=0}^{n}(x - x_j) | \, |x - b|, \tag{2.6}$$

$$|\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)| \leq \frac{h^{n+1}n!}{4}$$

e

$$|x-b| \leq (n+1)h, \ x \in [a,b],$$

concluímos o pretendido.

Quando $x \in [x_n, b]$ em vez de (2.6) devemos considerar

$$|\prod_{j=0}^{n+1}(x-x_j)| = |(x-a)||\prod_{j=1}^{n+1}(x-x_j)|,$$

e a demostração é análoga à anterior.

Provámos o seguinte corolário:

Corolário 2.3 *Seja f uma função que tem derivada de ordem $n+1$ em $[a,b]$ e tal que existe M que verifica*

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

Em $[a,b]$ consideremos a partição

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$$

e seja $P_n(x)$ o polinómio interpolador de Lagrange de f nos $n+1$ pontos $x_i, i = 0, \ldots, n$. Então

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M}{4(n+1)}h^{n+1}, x \in [a,b] \tag{2.7}$$

em que $h = \max_{i=1,\ldots,n}(x_i - x_{i-1})$.

■

Particularizando este corolário ao caso em que a partição é uniforme podemos estabelecer o seguinte resultado.

Corolário 2.4 *Seja f uma função que tem derivada de ordem $n+1$ em $[a,b]$ e tal que existe M que verifica*

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

Em $[a,b]$ consideremos a partição uniforme

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$$

em que $x_i - x_{i-1} = \frac{b-a}{n}, i = 1, \ldots, n$, *e seja* $P_n(x)$ *o polinómio interpolador de Lagrange de* f *nos* $n+1$ *pontos* $x_i, i = 0, \ldots, n$. *Então*

$$|f(x) - P_n(x)| \leq \frac{M}{4(n+1)n^{n+1}}(b-a)^{n+1}, x \in [a,b]. \tag{2.8}$$

■

Este corolário pode ser usado para estimar o erro cometido ao substituir f pelo seu polinómio interpolador em qualquer ponto de $[a,b]$ e também para determinar o polinómio interpolador de Lagrange que aproxima f em qualquer ponto do intervalo $[a,b]$ com um erro inferior a ϵ.

No exemplo anterior considerámos a desigualdade (2.3) e determinámos $n = 100$. Usando (2.8) para resolver o problema apresentado naquele exemplo obtemos $n = 3$.

3 O polinómio interpolador de Newton

A expressão do polinómio interpolador foi obtida considerando os polinómio de Lagrange $\ell_i(x), i = 0, \ldots, n$, definidos sobre a partição. A determinação do polinómio interpolador de uma função usando as funções $\ell_i(x)$ exige um grande esforço computacional e não permite obter o polinómio interpolador de grau n a partir do conhecimento do polinómio interpolador de grau $n-1$. Estes dois factores levam-nos a considerar outro modo de obter o polinómio interpolador.

Consideremos uma função f definida num intervalo $[a,b]$ onde consideramos a partição $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$. Seja $P_n(x)$ o polinómio interpolador de Lagrange para f relativamente a esta partição, ou seja, nos pontos $x_i, i = 0, \ldots, n$, considerados em $[a,b]$. Este polinómio tem grau menor ou igual a n e, portanto, pertence ao espaço $\mathcal{P}_n$- espaço dos polinómmios de grau menor ou igual a n. Neste espaço consideremos as funções

$$\phi_0(x) = 1, \quad \phi_j = \prod_{i=0}^{j-1}(x - x_i), j = 1, \ldots, n.$$

O conjunto $\{\phi_j(x), j = 0, \ldots, n\}$ constitui uma base do espaço $\mathcal{P}_n$. Logo existem constantes $a_j, j = 0, \ldots, n$, tais que o polinómio interpolador de Lagrange é dado por

$$P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j \phi_j(x).$$

Determinemos os coeficientes da combinação linear anterior. Atendendo a que $P_n(x_0) = f(x_0)$ vem

$$a_0 = f(x_0).$$

Considerando esta constante em $P_n(x)$ obtemos

$$P_n(x) = f(x_0) + \sum_{j=1}^{n} a_j \phi_j(x).$$

Atendendo a que $P_n(x_1) = f(x_1)$, vem

$$a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

que denotamos por $f[x_0, x_1]$ e chamamos *diferença dividida de primeira ordem.*

Substituindo em $P_n(x)$ e atendendo a que $P_n(x_2) = f(x_2)$, deduzimos

$$a_2 = \frac{f(x_2) - f(x_0) - f[x_0, x_1](x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{f[x_2, x_1] - f[x_1, x_0]}{x_2 - x_0}$$

que denotamos por $f[x_0, x_1, x_2]$.

Podemos deste modo obter um processo recursivo para a determinação dos coeficientes do polinómio $P_n(x)$.

Seja então

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

A diferença dividida de ordem $k \geq 2$ é definida em função das diferenças divididas de ordem $k-1$ por

$$f[x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k+1}] = \frac{f[x_{i+1}, \ldots, x_{i+k+1}] - f[x_i, \ldots, x_{i+k}]}{x_{i+k+1} - x_i}, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Atendendo às considerações anteriores vem

$$a_j = f[x_0, \ldots, x_j], \ j = 1, \ldots, n.$$

Substituindo na expressão de $P_n(x)$ obtemos

$$P_n(x) = f(x_0) + \sum_{j=1}^{n} f[x_0, \ldots, x_j] \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i).$$

O polinómio interpolador determinado é designado *polinómio interpolador de Newton.*

Notemos que uma vez determinado P_n se pretendermos obter P_{n+1} basta fazer

$$P_{n+1}(x) = P_n(x) + f[x_0, \ldots, x_{n+1}] \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

A determinação dos coeficientes do polinómio interpolador de Newton pode ser feita organizando os cálculos numa tabela - tabela de diferenças divididas. A tabela seguinte apresenta os referidos coeficientes para o caso $n = 3$.

x_i	$f(x_i)$	$f[.,.]$	$f[.,.,]$	$f[.,.,.,.]$
x_0	$f(x_0)$			
		$\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$		
x_1	$f(x_1)$		$\frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}$	
		$\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$		$f[x_0, ., ., x_3]$
x_2	$f(x_2)$		$\frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1}$	
		$\frac{f(x_3) - f(x_2)}{x_3 - x_2}$		
x_3	$f(x_3)$			

Exemplo: Considerar uma função da qual se conhecem os valores dados no seguinte quadro

x_i	1	$\frac{5}{4}$	$\frac{3}{2}$	2	$\frac{5}{2}$
$f(x_i)$	-1	0	2	3	1

Determinar, utilizando diferenças divididas, o polinómio interpolador de f nos pontos $x_i, i = 0, 1, 2, 3$.

Construindo a tabela de diferenças divididas obtemos

x_i	$f(x_i)$	$f[.,.]$	$f[.,.,.]$	$f[.,.,.,.]$	$f[.,.,.,.,.,.]$
1	-1				
		4			
$\frac{5}{4}$	0		8		
		8		-16	
$\frac{3}{2}$	2		-8		$\frac{176}{15}$
		2		$\frac{8}{5}$	
2	3		-6		
		-4			
$\frac{5}{2}$	1				

e portanto o polinómio interpolador pretendido é

$$P_4(x) = -1 + 4(x-1) + 8(x-1)(x-\tfrac{5}{4}) - 16(x-1)(x-\tfrac{5}{4})(x-\tfrac{3}{2}) + \tfrac{176}{15}(x-1)(x-\tfrac{5}{4})(x-\tfrac{3}{2})(x-2).$$

■

Exemplo: [Interpolação inversa] Considerar

x_i	x_0	x_1	x_2	x_3
$f(x_i)$	f_0	f_1	f_2	f_3

em que $f_i = f(x_i)$, $i = 0,1,2,3$, são valores estritamente crescentes (ou estritamente decrescentes). Dado $y^* \in [f_0, f_3]$ determinar x^* tal que $f(x^*) = y^*$.

O problema é resolvido considerando a tabela

y_i	f_0	f_1	f_2	f_3
$x_i = g(y_i)$	x_0	x_1	x_2	x_3

obtida a partir da anterior. Seja $P(y)$ o polinómio interpolador da função g nos pontos $y_i, i = 0,1,2,3$. Então $P(y^*)$ é um valor aproximado de x^*.

■

Vimos dois processos diferentes de determinar o polinómio interpolador:

1. utilização dos polinómios de Lagrange,
2. utilização das diferenças divididas.

No entanto quando os pontos da partição são igualmente distanciados, isto é, $x_i - x_{i-1} = h, i = 1,\ldots,n$, a construção do polinómio interpolador pode ser feita usando um processo mais simples e mais eficiente - utilizando *diferenças progressivas.*

Definição 3.1 *Seja $h > 0$ uma quantidade fixa e f uma função definida em x e $x+h$. Chamamos diferença progressiva de primeira ordem de f em x a*

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

Se f é definida em $x + ih, i = 0,\ldots,n$, a $\Delta^{n-1}(\Delta f(x))$ chamamos diferença progressiva de ordem $n \geq 2$ de f em x e esta diferença progressiva é denotada por $\Delta^n f(x)$.

■

A diferença progressiva de primeira ordem de f em x está relacionada com a diferença dividida $f[x, x+h]$. De facto temos

$$f[x, x+h] = \frac{\Delta f(x)}{h}.$$

Mais geralmente, vale a igualdade

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \frac{\Delta^n f(x_0)}{n! h^n},$$

em que $x_i = x_{i-1} + h, i = 1, \ldots, n$.

Atendendo à igualdade anterior, o polinómio interpolador de f em $x_i, i = 0, \ldots, n, x_i = x_{i-1} + h, i = 1, \ldots, n$, pode ser escrito na forma

$$P_n(x) = f(x_0) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\Delta^j f(x_0)}{h^j j!} \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i).$$

A finalizar, observamos que o cálculo das diferenças progressivas pode ser organizado num quadro análogo ao construído para as diferenças divididas.

Para determinar o polinómio interpolador para uma função f definida num intervalo $[a, b]$ coloca-se a questão de como escolher a partição no intervalo. Será que podemos escolher a partição de uma forma arbitrária ou a escolha dos pontos da partição tem influência no erro cometido?

Consideremos a função $f(x) = 1/(1 + 25x^2), x \in [-1, 1]$, e as partições

$$-1, -\frac{3}{4}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1,$$

e

$$-1, -\frac{7}{8}, -\frac{5}{8}, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, \frac{5}{8}, \frac{7}{8}, 1.$$

Sejam P_8 e P_8^* respectivamente os polinómios interpoladores de f para os dois conjuntos de pontos anteriores.

Sejam $E_8(x) = |f(x) - P_8(x)|$, $x \in [-1, 1]$, e $E_8^*(x) = |f(x) - P_8^*(x)|, x \in [-1, 1]$. As figuras 2a e 2b ilustram o comportamento de P_8 e E_8 e as figuras 3a e 3b ilustram o comportamento de P_8^* e E_8^*. Podemos facilmente verificar que o máximo do valor absoluto do erro é inferior quando os pontos da partição são considerados próximos das extremidades do intervalo. Assim, para este caso, a escolha dos pontos influênciou o erro

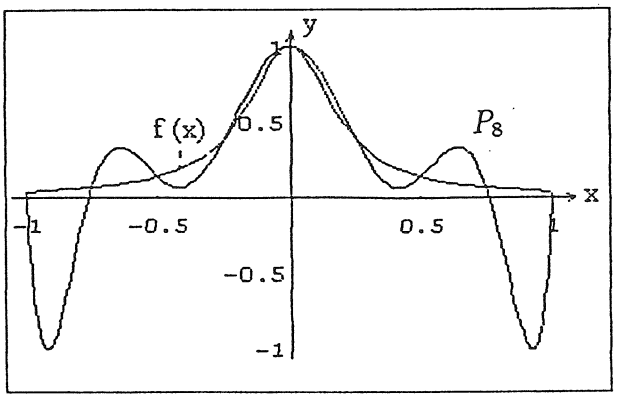

Figura 2 a

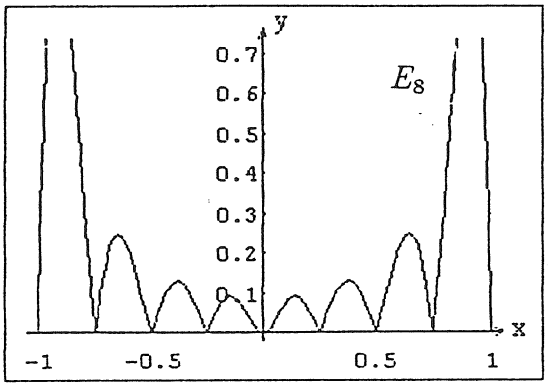

Figura 2 b

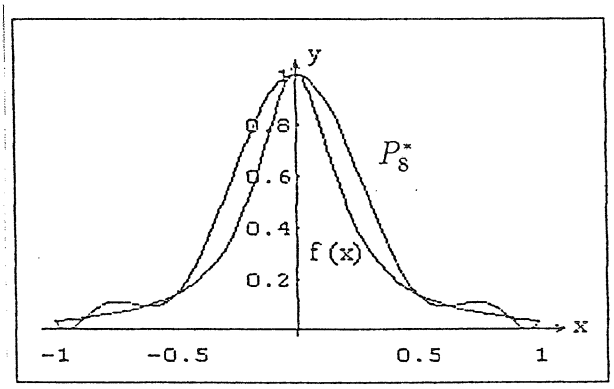

Figura 3 a

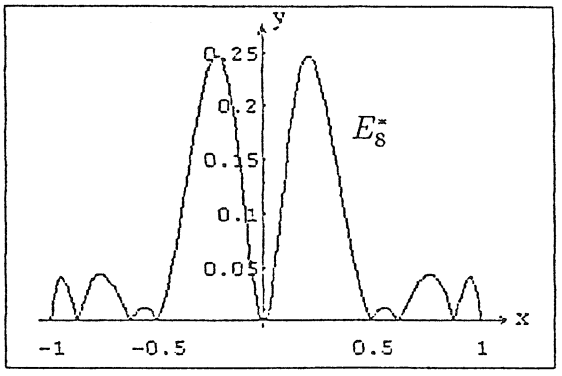

Figura 3 b

4 O polinómio interpolador segmentado

Consideremos uma função f definida num intervalo $[a, b]$ onde está definida uma partição uniforme com $n + 1$ pontos

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Seja P_n o polinómio interpolador de Lagrange. Provámos que se existe uma constante positiva M tal que

$$|f^{(n+1)}(x)| \leq M, \forall x \in [a, b],$$

então

$$|f(x) - P_n(x)| \leq M \frac{(b-a)^{n+1}}{4(n+1)n^{(n+1)}}, \; x \in [a,b].$$

Atendendo a que

$$\lim_{n \to +\infty} \frac{(b-a)^{n+1}}{4(n+1)n^{(n+1)}} = 0,$$

concluímos que

$$|f(x) - P_n(x)| \to 0, \quad n \to +\infty, x \in [a,b].$$

Assim, para certas funções, o aumento do grau do polinómio implica um aumento de precisão.

No entanto existem funções para as quais não podemos concluir que a um aumento do grau do polinómio interpolador corresponda um aumento da proximidade entre o polinómio interpolador e a função interpolada, isto é, uma diminuição do erro $|f(x) - P_n(x)|$ em $[a,b]$. Um exemplo de uma função que ilustra a situação anterior é a conhecida função de Runge $f(x) = 1/(1+25x^2)$, $x \in [-1,1]$. De facto consideremos para a função de Runge o polinómio interpolador de Lagrange de grau 4 - $P_4(x)$- para a partição $-1, -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1$, e seja $E_4(x) = |f(x) - P_4(x)|$, $x \in [-1,1]$. Seja ainda $P_8(x)$ o polinómio interpolador de Lagrange para a função de Runge e para a partição $-1, -\frac{3}{4}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{4}, 0, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1$ e $E_8(x) = |f(x) - P_8(x)|$, $x \in [-1,1]$. As figuras seguintes ilustram respectivamente o comportamento das funções $E_4(x)$ e $E_8(x)$ para $x \in [-1,1]$.

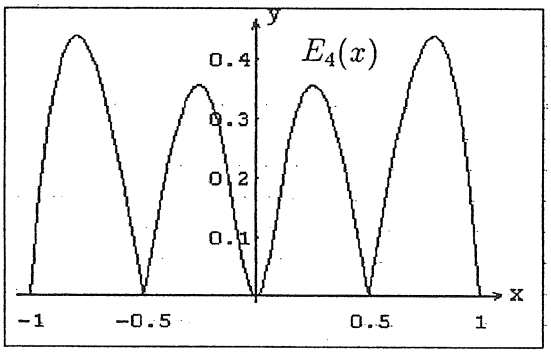

Figura 4a

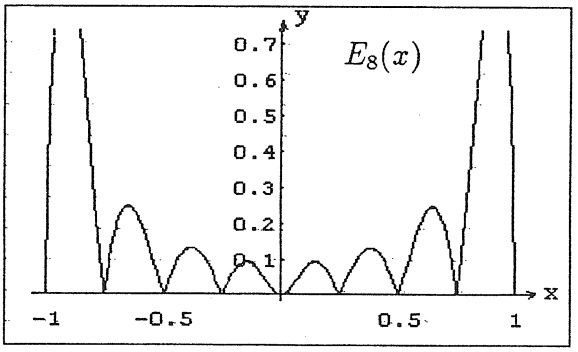

Figura 4b

É evidente que

$$\max_{x\in[-1,1]} E_8(x) > \max_{x\in[-1,1]} E_4(x).$$

A construção de um polinómio interpolador que "aproxime" a função de Runge com erro inferior ao dos polinómios $P_4(x)$ e $P_8(x)$ é conseguida com polinómios de grau inferior a 4. Assim, considerando os pontos $-1, -1/2, 0$, e $0, 1/2, 1$, e a decomposição de $[-1,1]$ nos subintervalos $[-1,0]$ e $[0,1]$, podemos facilmente obter os polinómios interpoladores de Lagrange de grau 2 $s^{(1)}(x)$ e $s^{(2)}(x)$ para a função de Runge e para os intervalos definidos. Seja

$$s(x) = \begin{cases} s^{(1)}(x) & x \in [-1,0] \\ s^{(2)}(x) & x \in]0,1]. \end{cases} \tag{4.9}$$

Esta função é um "polinómio" de grau 2 interpolador da função de Runge nos pontos $-1, -1/2, 0, 1/2, 1$. A figura seguinte ilustra o comportamento do polinómio $s(x)$.

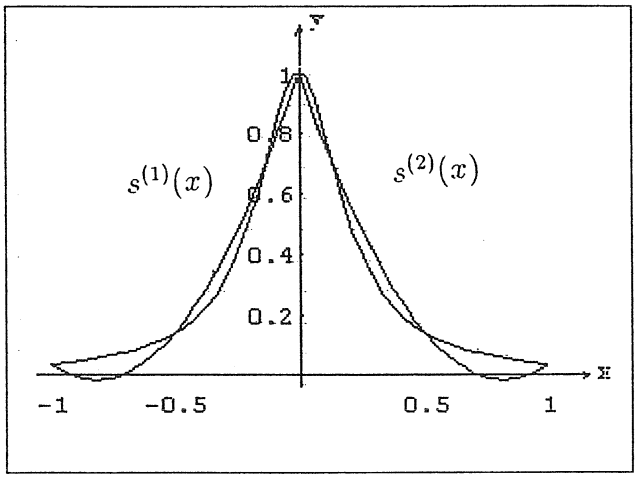

Figura 5

O polinómio $s(x)$ definido por (4.9) é um polinómio interpolador da função $f(x)$ para a partição considerada mas diferente do polinómio de Lagrange anteriormente estudado. Para realçar a diferença existente entre estes polinómios vamos adoptar a designação *polinómio interpolador segmentado de Lagrange.*

Definição 4.1 *Seja f uma função definida num intervalo $[a,b]$ onde consideramos a partição $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$. Se n é divisível por m chamamos*

polinómio interpolador segmentado de Lagrange de grau m ao polinómio

$$s(x) = \begin{cases} s^{(1)}(x) & x \in [x_0, x_m] \\ s^{(2)}(x) & x \in]x_m, x_{2m}] \\ \vdots & \vdots \\ s^{(j)}(x) & x \in]x_{(j-1)m}, x_{jm}] \\ \vdots & \vdots \\ s^{(\frac{n}{m})}(x) & x \in]x_{n-m}, x_n] \end{cases}$$

em que, para $i = 1, \ldots, \frac{n}{m}$, $s^{(i)}(x)$ *é o polinómio interpolador de Lagrange de grau m para f em* $[x_{(i-1)m}, x_{im}]$ *considerando a partição*

$$x_{(i-1)m} < x_{(i-1)m+1} < \ldots < x_{im}.$$

Para construir cada um dos ramos do "polinómio" $s(x)$ podemos usar um dos processos introduzidos para construir o polinómio interpolador: utilização dos polinómios de Lagrange ou a utilização das diferenças divididas. Neste caso podemos definir, de modo análogo ao anterior, o *polinómio interpolador segmentado de Newton.*

Exemplo: Determinar o polinómio interpolador segmentado quadrático para uma função f definida no intervalo $[a, b]$ e considerando a partição

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_6 = b.$$

Temos, utilizando as funções de Lagrange

$$s(x) = \begin{cases} f(a)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} & x \in [a, x_2], \\ f(x_2)\frac{(x-x_3)(x-x_4)}{(x_2-x_3)(x_2-x_4)} + f(x_3)\frac{(x-x_2)(x-x_4)}{(x_3-x_2)(x_3-x_4)} + f(x_4)\frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_4-x_2)(x_4-x_3)} & x \in]x_2, x_4], \\ f(x_4)\frac{(x-x_5)(x-x_6)}{(x_4-x_5)(x_4-x_6)} + f(x_5)\frac{(x-x_4)(x-x_6)}{(x_5-x_4)(x_5-x_6)} + f(b)\frac{(x-x_4)(x-x_5)}{(b-x_4)(b-x_5)} & x \in]x_4, b], \end{cases}$$

e, utilizando as diferenças divididas

$$s(x) = \begin{cases} f(a) + f[a, x_1](x-a) + f[a, x_1, x_2](x-a)(x-x_1) & x \in [a, x_2], \\ f(x_2) + f[x_2, x_3](x-x_2) + f[x_2, x_3, x_4](x-x_2)(x-x_3) & x \in]x_2, x_4], \\ f(x_4) + f[x_4, x_5](x-x_4) + f[x_4, x_5, x_6](x-x_4)(x-x_5) & x \in]x_4, b], \end{cases}$$

■

Exemplo: Considerar a função $f(x) = \sin \pi x, x \in [\frac{1}{2}, \frac{3}{2}]$, e, neste intervalo a partição $\frac{1}{2}, \frac{3}{4}, 1, \frac{5}{4}, \frac{3}{2}$. Determinar o polinómio interpolador segmentado quadrático de f nos pontos dados. Calcular uma aproximação para $f(\frac{7}{8})$ e uma estimativa para o erro da aproximação.

O polinómio pretendido é

$$s(x) = \begin{cases} s^{(1)}(x), & x \in [\frac{1}{2}, 1] \\ s^{(2)}(x), & x \in]1, \frac{3}{2}], \end{cases}$$

em que

$$s^{(1)}(x) = \sin \frac{\pi}{2} \frac{(x-\frac{3}{4})(x-1)}{(\frac{1}{2}-\frac{3}{4})(\frac{1}{2}-1)} + \sin \frac{3\pi}{4} \frac{(x-\frac{1}{2})(x-1)}{(\frac{3}{4}-\frac{1}{2})(\frac{3}{4}-1)} + \sin \pi \frac{(x-\frac{1}{2})(x-\frac{3}{4})}{(1-\frac{1}{2})(1-\frac{3}{4})}, \; x \in [\frac{1}{2}, 1]$$

e

$$s^{(2)}(x) = \sin \pi \frac{(x-\frac{5}{4})(x-\frac{3}{2})}{(1-\frac{5}{4})(1-\frac{3}{2})} + \sin \frac{5\pi}{4} \frac{(x-1)(x-\frac{3}{2})}{(\frac{5}{4}-1)(\frac{5}{4}-\frac{3}{2})} + \sin \frac{3\pi}{2} \frac{(x-1)(x-\frac{5}{4})}{(\frac{3}{2}-1)(\frac{3}{2}-\frac{5}{4})}, \; x \in [1, \frac{3}{2}].$$

Então

$$f(\frac{7}{8}) \simeq s^{(1)}(\frac{7}{8}) = 8(\frac{7}{8}-\frac{3}{4})(\frac{7}{8}-1) - 8\sqrt{2}(\frac{7}{8}-\frac{1}{2})(\frac{7}{8}-1).$$

Podemos agora determinar uma estimativa para o erro da aproximação obtida. Usando (2.2) obtemos

$$|f(x) - s^{(1))}(x)| \leq \frac{\pi^3}{3!} |(x-\frac{1}{2})(x-\frac{3}{4})(x-1)|, \; x \in [\frac{1}{2}, 1],$$

e para $x = \frac{7}{8}$ vem

$$|f(\frac{7}{8}) - s(\frac{7}{8})| \leq \frac{\pi^3}{2^{10}}. \tag{4.10}$$

Usando agora (2.3) obtemos

$$|f(x) - s^{(1))}(x)| \leq \frac{\pi^3}{768}, \; x \in [\frac{1}{2}, 1]. \tag{4.11}$$

Observamos que a estimativa para o erro (4.11) é mais "grosseira" do que a estimativa (4.10), e ainda que a estimativa (4.11) é válida para $x \in [1, \frac{3}{2}]$ pois que $|f'''(x)| \leq \pi^3, \; x \in [1, \frac{3}{2}]$. ■

5 O polinómio interpolador de Hermite

Em muitas questões práticas é conhecida uma função num conjunto de pontos e ainda o coeficiente angular da tangente ao gráfico da função nesses pontos. Nestas circunstâncias, para aproximar a função f, determinamos um polinómio que coincida com f nos pontos dados e cujo gráfico tenha nos nodos de interpolação tangente com o coeficiente angular dado. Mais especificamente, coloca-se o problema:

Seja f definida no intervalo $[a,b]$ e suponhamos conhecidas f e f' nos pontos da partição

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Pretendemos determinar um polinómio $H(x)$ tal que

$$H(x_i) = f(x_i),\ H'(x_i) = f'(x_i), i = 0, \ldots, n.$$

Notemos que as restrições anteriores fornecem-nos $2n+2$ condições para a determinação do polinómio $H(x)$ e portanto, a existir, este polinómio tem grau menor ou igual a $2n+1$.

No resultado seguinte estabelecemos a existência do polinómio interpolador que verifica as restrições impostas e a unicidade de tal polinómio.

Teorema 5.1 *Seja f uma função definida num intervalo $[a,b]$ onde consideramos partição $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$. Dados $f(x_i)$, $f'(x_i), i = 0, \ldots, n$, existe um único polinómio de grau menor ou igual a $2n+1$ - H_{2n+1} - que verifica*

$$H_{2n+1}(x_i) = f(x_i),\ H'_{2n+1}(x_i) = f'(x_i), i = 0, \ldots, n. \tag{5.12}$$

Demonstração: Provemos a unicidade. Sejam F e G dois polinómios que verificam as condições (5.12) e seja $R(x) = F(x) - G(x), x \in [a,b]$. O polinómio $R(x)$ tem grau inferior ou igual a $2n+1$ e verifica a $R(x_i) = R'(x_i) = 0, i = 0, \ldots, n$. Então $R(x)$ tem pelo menos $2n+2$ zeros e, portanto, concluímos assim que se existir um polinómio verificando as condições impostas, esse polinómio é único.

Provemos a existência. Atendendo às condições consideradas, o polinómio, a existir, pertence ao espaço dos polinómios de grau menor ou igual a $2n+1$- $\mathcal{P}_{2n+1}$. Consideremos os polinómios de Lagrange

$$\ell_i(x) = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, i = 0, \ldots, n.$$

Definamos as $2n+2$ funções de grau $2n+1$

$$h_i(x) = [1 - 2\ell_i'(x_i)(x - x_i)]\ell_i(x)^2, \quad \overline{h}_i(x) = (x - x_i)\ell_i(x)^2, \; i = 0, \ldots, n.$$

As funções $h_i(x), \overline{h}_i(x), i = 0, \ldots, n$, verificam

$$h_i(x_j) = \delta_{ij}, i, j = 0, \ldots, n, \quad h_i'(x_j) = 0, i, j = 0, \ldots, n,$$

e

$$\overline{h}_i(x_j) = 0, i, j = 0, \ldots, n, \quad \overline{h}_i'(x_j) = \delta_{ij}, i, j = 0, \ldots, n,$$

e, portanto, são linearmente independentes. Logo constituem uma base de $\mathcal{P}_{2n+1}$.

Consideremos

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} C_i h_i(x) + \sum_{i=0}^{n} \overline{C}_i \overline{h}_i(x).$$

Determinemos as constantes $C_i, \overline{C}_i, i = 0, \ldots, n$, de modo a serem verificadas as condições (5.12). Atendendo a que $H_{2n+1}(x_i) = f(x_i)$ obtemos $C_i = f(x_i), i = 0, \ldots, n$. Por outro lado, atendendo a que $H_{2n+1}'(x_i) = f'(x_i)$ vem $\overline{C}_i = f'(x_i), i = 0, \ldots, n$. Finalmente, substituindo obtemos

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) h_i(x) + \sum_{i=0}^{n} f'(x_i) \overline{h}_i(x). \tag{5.13}$$

■

O polinómio anterior é chamado *polinómio interpolador de Hermite* de f nos pontos $x_i, i = 0, \ldots, n$.

Vamos seguidamente utilizar diferenças divididas para construir o polinómio interpolador de Hermite.

Na construção do polinómio interpolador de Hermite de grau $2n+1$ consideramos as funções $h_i(x), \overline{h}_i(x), i = 0, \ldots, n$, que constituem uma base de $\mathcal{P}_{2n+1}$. O polinómio anterior pode ser construído utilizando outra base para o espaço referido.

Consideremos as funções

$$1, (x - x_0), (x - x_0)^2, (x - x_0)^2(x - x_1), \ldots, (x - x_0)^2 \ldots (x - x_{n-1})^2(x - x_n).$$

Estas funções são linearmente independentes e, portanto, podemos escrever

$$\begin{aligned} H_{2n+1}(x) &= A_0 + A_1(x - x_0) + A_2(x - x_0)^2 + C_3(x - x_0)^2(x - x_1) \\ &+ \ldots + \\ &+ A_{2n+1}(x - x_0)^2 \ldots (x - x_{n-1})^2(x - x_n). \end{aligned}$$

Determinemos as constantes $A_i, i = 0, \ldots, 2n+1$.

Atendendo a que $H_{2n+1}(x_0) = f(x_0)$ vem $A_0 = f(x_0)$. Por outro lado, atendendo a que $H'_{2n+1}(x_0) = f'(x_0)$ deduzimos $A_1 = f'(x_0)$ que representamos por $f[x_0, x_0]$. Substituindo as constantes determinadas e considerando as condições para $x = x_1$, vem

$$A_2 = f[x_0, x_0, x_1], A_3 = f[x_0, x_0, x_1, x_1].$$

Repetindo o processo deduzimos todos os coeficientes $A_i, i = 4, \ldots, 2n+1$. Substituindo em $H_{2n+1}(x)$ obtemos

$$\begin{array}{rcl} H_{2n+1}(x) & = & f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 \\ & + & f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1) \\ & + & \ldots + \\ & + & f[x_0, x_0, \ldots, x_n, x_n](x - x_0)^2 \ldots (x - x_{n-1})^2(x - x_n). \end{array} \tag{5.14}$$

O polinómio interpolador de Hermite H_{2n+1} pode ser determinado utilizando a tabela das diferenças divididas como veremos seguidamente. Consideremos a mudança de variável

$$y_0 = x_0, y_1 = x_0, y_2 = x_1, y_3 = x_1, \ldots, y_{2n} = x_n, y_{2n+1} = x_n,$$

e a função g que verifica

$$g(y_0) = f(x_0), g(y_1) = f(x_0)$$

$$g(y_2) = f(x_1), g(y_3) = f(x_1)$$

$$g(y_4) = f(x_2), g(y_5) = f(x_2)$$

$$\ldots$$

$$g(y_{2n}) = f(x_n), g(y_{2n+1}) = f(x_n).$$

Podemos então definir o polinómio

$$\begin{array}{rcl} H(x) & = & g(y_0) + g[y_0, y_1](x - x_0) + g[y_0, y_1, y_2](x - x_0)^2 \\ & + & g[y_0, y_1, y_2, y_3](x - x_0)^2(x - x_1) \\ & + & \ldots \\ & + & g[y_0, y_1, \ldots, y_{2n+1}](x - x_0)^2(x - x_1)^2 \ldots (x - x_{n-1})^2(x - x_n) \end{array}$$

com

$$\begin{array}{rcl} g[y_0, y_1] & = & f[x_0, x_0] = f'(x_0), \\ g[y_0, y_1, y_2] & = & f[x_0, x_0, x_1], \\ & & \ldots, \\ g[y_0, y_1, \ldots, y_{2n}, y_{2n+1}] & = & f[x_0, x_0, \ldots, x_n, x_n], \end{array}$$

em que estas constantes podem ser calculadas utilizando a tabela das diferenças divididas. Este polinómio coincide com o polinómio interpolador de Hermite $H_{2n+1}(x)$.

Exemplo: Determinar o polinómio de Hermite de menor grau interpolador de $f(x) = e^{-x^2}$, $x \in [-1, 1]$.

Usando (5.14) com $n = 1$ e

x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$
-1	e^{-1}	$2e^{-1}$
1	e^{-1}	$-2e^{-1}$

obtemos

$$H_3(x) = e^{-1} + 2e^{-1}(x+1) - e^{-1}(x+1)^2, \; x \in [-1, 1].$$

A figura seguinte ilustra o comportamento da função e do polinómio H_3.

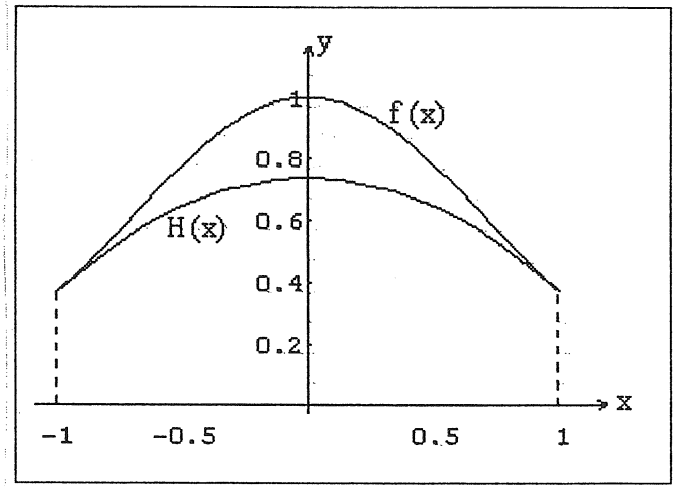

Figura 6

A construção de um polinómio interpolador para uma função que verifique outras restrições de regularidade para as derivadas além de $H'(x_i) = f'(x_i), i = 0, \ldots, n$, é feita de modo análogo à construção do polinómio de Hermite usando diferenças divididas. O exemplo seguinte ilustra o procedimento a seguir para um caso específico.

Exemplo: Seja f uma função definida num intervalo $[a, b]$ e suponha dados os valores

$$f(a), f(b), f'(a), f('b), f''(a).$$

Determinar o polinómio interpolador $H(x)$ que verifique

$$H(a) = f(a), H(b) = f(b), H'(a) = f'(a), H'(b) = f'(b), H''(a) = f''(a).$$

O polinómio $H(x)$ vai pertencer ao espaço dos polinómios de grau menor ou igual a quatro. Neste espaço as funções

$$1, (x-a), (x-a)^2, (x-a)^3, (x-a)^3(x-b),$$

são linearmente independentes e, portanto,

$$H(x) = A_0 + A_1(x-a) + A_2(x-a)^2 + A_3(x-a)^3 + A_4(x-a)^3(x-b).$$

Determinemos as constantes atendendo às condições impostas a este polinómio. Atendendo a que $H(a) = f(a)$ vem $A_0 = f(a)$. Por outro lado, atendendo a que $H'(a) = f'(a)$ obtemos $A_1 = f'(a) = f[a,a]$. Mais ainda, atendendo a que $f''(a) = H''(a)$ vem $A_2 = \frac{f''(a)}{2}$ que pode ser representado por $f[a,a,a]$.

De $H_4(b) = f(b)$ obtemos

$$A_3 = f[a,a,a,b].$$

Considerando $H'(b) = f'(b)$ vem

$$A_4 = \frac{f'(b) - f[a,a] - 2f[a,a,a](b-a) - 3f[a,a,a,b](b-a)^2}{(b-a)^3},$$

e, tem-se

$$A_4 = f[a,a,a,b,b].$$

Substituindo, vem finalmente

$$\begin{aligned} H(x) &= f(a) + f[a,a](x-a) + f[a,a,a](x-a)^2 \\ &+ f[a,a,a,b](x-a)^3 + f[a,a,a,b,b](x-a)^3(x-b). \end{aligned}$$

■

Seguidamente vamos estudar o erro cometido ao aproximar uma função pelo seu polinómio de Hermite de grau $2n+1$.

Teorema 5.2 *Seja f uma função com derivadas até à ordem $2n+1$ contínuas em $[a,b]$ e com derivada de ordem $2n+2$ em (a,b). Em $[a,b]$ consideremos a partição $a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$, e seja H_{2n+1} o polinómio interpolador de Hermite para a função f e relativamente à partição anterior. Se $x \in [a,b]$ então existe $\epsilon(x) \in (a,b)$ tal que*

$$f(x) - H_{2n+1}(x) = \frac{f^{(2n+2)}(\epsilon(x))}{(2n+2)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)^2$$

Demonstração: Seja $x \in [a,b]$. Se $x = x_i, i = 0,\ldots,n$, então o teorema está provado. Suponhamos agora que $x \neq x_i, i = 0,\ldots,n$ e consideremos a função

$$g(t) = f(t) - H_{2n+1}(t) - [f(x) - H_{2n+1}(x)] \prod_{j=0}^{n} \frac{(t-x_j)^2}{(x-x_j)^2}, t \in [a,b].$$

A função g tem o valor zero em $x_i, i = 0,\ldots,n$, (zeros duplos) e em x (zero simples). Por aplicação sucessiva do teorema de Rolle, $g^{(2n+2)}$ tem pelo menos um zero em (a,b), isto é, existe $\epsilon(x) \in (a,b)$ tal que

$$0 = g^{(2n+2)}(\epsilon(x)) = f^{(2n+2)}(\epsilon(x)) - [f(x) - H_{2n+1}(x)] \frac{(2n+2)!}{\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)^2}.$$

Esta última igualdade finaliza a demonstração. ■

Observação:

1. Considerando a estimativa dada para o erro cometido ao aproximar uma função f pelo seu polinómio interpolador de Hermite de grau $2n+1$ deduzimos

$$|f(x) - H_{2n+1}(x)| \leq \frac{M}{(2n+2)!} \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)^2,$$

cm $\max_{x\in[a,b]} |f^{(2n+2)}(x)| \leq M$.

2. Atendendo a que para $x \in [a,b]$, $|x - x_i| \leq (b-a)$, vale a seguinte estimativa

$$|f(x) - H_{2n+1}(x)| \leq \frac{M}{(2n+2)!}(b-a)^{2(n+1)}.$$

3. A função $|\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)|$ verifica a

$$|\prod_{j=0}^{n}(x-x_j)| \leq \frac{h^{n+1}n!}{4}$$

em que $h = \max_{i=1,\ldots,n}(x_i - x_{i-1})$. Então

$$\max_{x\in[a,b]} \prod_{j=0}^{n}(x-x_j)^2 \leq \frac{h^{2(n+1)}(n!)^2}{16},$$

e portanto

$$|f(x) - H_{2n+1}(x)| \leq M \frac{h^{2(n+1)}(n!)^2}{(2n+2)!16}$$

Observamos que dependendo do comportamento de $|f^{(2n+2)}|$ podemos, ou não, concluir que o aumento do grau do polinómio interpolador de Hermite implique uma diminuição do erro cometido ao aproximar a função por este polinómio. Uma forma de minimizar o erro consiste na utilização de polinómios interpoladores de Hermite de baixo grau.

6 O polinómio interpolador segmentado de Hermite

Seja f uma função definida em $[a,b]$ onde consideramos a partição

$$a = x_0 < x_1 < x_2 = b.$$

Admitamos que f e a sua derivada são conhecidas nos pontos anteriores e que pretendemos aproximar a função f por um polinómio interpolador de Hermite de grau 3. Para determinar polinómios com este grau só poderemos usar, de cada vez, dois pontos e, deste modo, obtemos expressões distintas em $[x_0,x_1]$ e $[x_1,x_2]$. Assim, o "polinómio" que aproxima f tem a seguinte expressão

$$s(x) = \begin{cases} f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + f[x_0,x_0,x_1](x-x_0)^2 \\ +f[x_0,x_0,x_1,x_1](x-x_0)^2(x-x_1), & x \in [x_0,x_1] \\ f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + f[x_1,x_1,x_2](x-x_1)^2 \\ +f[x_1,x_1,x_2,x_2](x-x_1)^2(x-x_2), & x \in]x_1,x_2] \end{cases}$$

Este "polinómio" é designado *polinómio interpolador segmentado de Hermite cúbico.*

Definição 6.1 *Seja f uma função definida num intervalo $[a,b]$ onde consideramos a partição $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$. Se $m \in \mathbb{N}$ é tal que n é divisível por m então o polinómio*

$$s(x) = \begin{cases} H^{(1)}_{2m+1}(x), & x \in [x_0,x_m] \\ H^{(2)}_{2m+1}(x), & x \in]x_m,x_{2m}] \\ \ldots \\ H^{(j)}_{2m+1}(x), & x \in]x_{(j-1)m},x_{jm}] \\ \ldots \\ H^{(\frac{n}{m})}_{2m+1}(x), & x \in]x_{n-m},x_n] \end{cases}$$

em que $H^{(j)}_{2m+1}$ denota o polinómio interpolador de Hermite de grau $2m+1$ para os pontos $x_{(j-1)m}, x_{(j-1)m+1}, \ldots, x_{jm}, j = 1, \ldots, \frac{n}{m}$, é designado polinómio interpolador de Hermite segmentado de grau $2m+1$. ■

Exemplo: Considere de novo $f(x) = e^{-x^2}, x \in [-1,1]$. Determinar o polinómio interpolador de Hermite segmentado de f de menor grau.

Utilizando a definição anterior, facilmente deduzimos que

$$s(x) = \begin{cases} H_3^{(1)}(x), & x \in [-1,0] \\ H_3^{(2)}(x), & x \in]0,1] \end{cases}$$

em que

$$H_3^{(1)}(x) = 1 + (e^{-1} - 1)x^2 + (4e^{-1} - 2)x^2(x+1),$$

e

$$H_3^{(2)}(x) = 1 + (e^{-1} - 1)x^2 + (2 - 4e^{-1})x^2(x-1).$$

O esboço do gráfico do polinómio $s(x)$ encontra-se na figura 7a, e na figura 7b sobrepomos este gráfico com o gráfico de f.

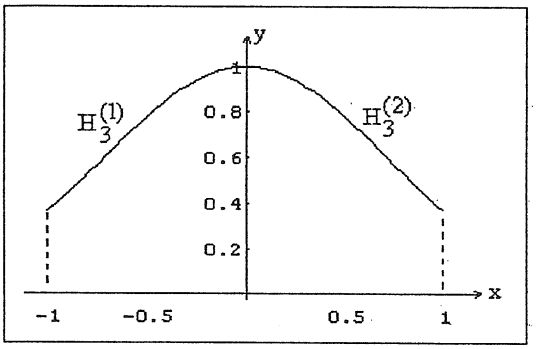

Figura 7a

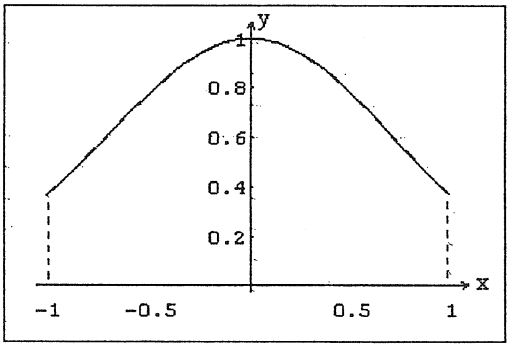

Figura 7b

■

7 Aplicação a funções de duas variáveis

Atendendo às propriedades dos polinómios de Lagrange, é fácil construir um polinómio $P(x,y)$ interpolador de uma função f de duas variáveis.

Seja f uma função de duas variáveis x e y, $f(x,y)$, definida no rectângulo $\mathcal{R} = [a,b] \times [c,d]$. Consideremos em $[a,b]$ e $[c,d]$, respectivamente, as partições

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b, \quad c = y_0 < y_1 < \ldots < y_m = d.$$

Estas partições induzem em $\mathcal{R}$ uma rede definida pelos pontos

$$(x_i, y_j),\ i = 0, \ldots, n, j = 0, \ldots, m.$$

Consideremos o polinómio

$$P(x,y) = \sum_{i=0}^{n}\sum_{j=0}^{m} f(x_i,y_j)\ell_i(x)\ell_j(y) \tag{7.15}$$

em que

$$\ell_i(x) = \prod_{t\neq i}^{n} \frac{x-x_t}{x_i-x_t}, i = 0,\ldots,n, \quad \ell_j(y) = \prod_{t\neq j}^{m} \frac{y-y_t}{y_j-y_t}, j = 0,\ldots,m.$$

É fácil verificar que o polinómio $P(x,y)$ tem grau menor ou igual a n relativamente à variável x e grau menor ou igual a m relativamente à variável y. Mais ainda, $P(x,y)$ verifica

$$P(x_i,y_j) = f(x_i,y_j), i = 0,\ldots,n, j = 0,\ldots,m.$$

O polinómio $P(x,y)$ é chamado *polinómio interpolador de Lagrange* de f nos pontos $(x_i,y_j), i = 0,\ldots,n, j = 0,\ldots,m$, de grau n em x e de grau m em y.

Exemplo: Seja f uma função definida em $\mathcal{R} = [0,2]\times[0,20]$ da qual se conhecem os valores

$x\backslash y$	0	20
0	0	0
1	2	2
2	0	0

Determinar o polinómio interpolador de f nos pontos dados.

Atendendo a (7.15) temos

$$\begin{aligned} P(x,y) &= \sum_{i=0}^{2}\sum_{j=0}^{1} f(x_i,y_j)\ell_i(x)\ell_j(y) \\ &= -2x(x-2). \end{aligned}$$

A figura seguinte ilustra o comportamento de P em $\mathcal{R}$.

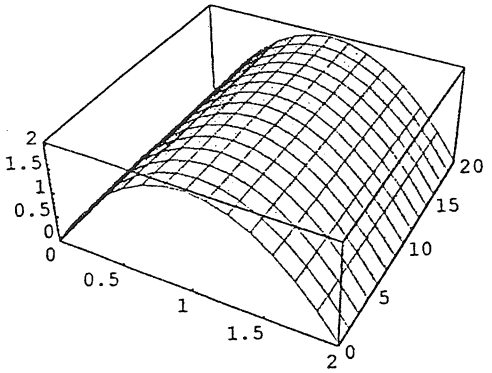

Figura 8

Capítulo 4 - Derivação e integração numérica

1 Derivação numérica

Como vimos no capítulo anterior, para determinar o polinómio interpolador de Hermite é necessário conhecer a derivada da função nos nodos de interpolação. Atendendo à interpretação geométrica do conceito de derivada, se conhecermos uma função em dois pontos "próximos" a e b, o coeficiente angular da tangente num ponto $c \in (a,b)$ pode ser aproximado pelo coeficiente angular da secante ao gráfico de f nos pontos $(a, f(a))$ $(b, f(b))$. Obtemos deste modo uma forma simples de aproximar a derivada de f.

Vamos seguidamente deduzir fórmulas que permitem, a partir do conhecimento pontual de uma função, determinar aproximadamente a sua derivada nesses pontos. Podemos considerar fundamentalmente duas abordagem para deduzir tais fórmulas de aproximação: a primeira e a mais natural é o uso do polinómio interpolador e a segunda abordagem é a utilização da fórmula de Taylor.

Suponhamos que f é uma função definida num intervalo $[a,b]$ onde consideramos uma partição $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b$.

Consideremos o polinómio interpolador de f em $x_i, i = 0, \ldots, n$. Demonstrámos no capítulo anterior que se f tem derivada contínua de ordem n e existe derivada de ordem $n+1$ em (a,b) então para $x \in [a,b]$ existe $\eta(x) \in (a,b)$ tal que

$$\begin{aligned} f(x) &= P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\eta(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \\ &= \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\ell_j(x) + \frac{f^{(n+1)}(\eta(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j) \end{aligned} \tag{1.1}$$

em que $\ell_j(x)$ são os polinómios de Lagrange. Logo

$$f'(x_i) \simeq \sum_{j=0}^{n} f(x_j)\ell_j'(x_i)$$

e o erro cometido na aproximação anterior é

$$\frac{f^{(n+1)}(\eta(x_i))}{(n+1)!}\frac{d}{dx}(\prod_{j=0}^{n}(x-x_j))_{x=x_i}.$$

Especifiquemos seguidamente a fórmula de aproximação anterior.

1. **Fórmulas para a primeira derivada com dois pontos**

   Seja f uma função conhecida em x_i e x_{i+1}. Admitamos que f tem apenas derivada de primeira ordem contínua em (a,b) e existe derivada de segunda ordem em $[a,b]$. Considerando em (1.1) $n=1$ e usando o polinómio interpolador de f em x_i e x_{i+1}, vem

$$\begin{aligned} f(x) &= P_1(x)+\frac{f^{(2)}(\eta(x))}{2}(x-x_i)(x-x_{i+1}) \\ &= f(x_i)\frac{x-x_{i+1}}{x_i-x_{i+1}}+f(x_{i+1})\frac{x-x_i}{x_{i+1}-x_i} \\ &+ \frac{f^{(2)}(\eta(x))}{2}(x-x_i)(x-x_{i+1}). \end{aligned}$$

   Então,

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

   e o erro cometido é

$$\frac{d}{dx}\left(\frac{f^{(2)}(\eta(x))}{2}(x-x_i)(x-x_{i+1})\right)_{x=x_i}=\frac{f^{(2)}(\eta(x_i))}{2}(x_i-x_{i+1}),\ \eta(x_i)\in(x_i,x_{i+1}).$$

   A fórmula de aproximação

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

   é designada *fórmula progressiva para a primeira derivada.*

   Se tivessemos considerado o polinómio interpolador de f em x_{i-1} e x_i obteríamos

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

   que é designada *fórmula regressiva para a primeira derivada.* O erro cometido ao aproximar $f'(x_i)$ pelo cociente anterior é dado por

$$\frac{f^{(2)}(\eta(x_i))}{2}(x_i-x_{i-1}),\ \eta(x_i)\in(x_{i-1},x_i).$$

Quando consideramos pontos igualmente espaçados de espaçamento h obtemos respectivamente

$$f'(x_i) \simeq \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \tag{1.2}$$

$$f'(x_i) \simeq \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}. \tag{1.3}$$

2. **Fórmula para a primeira derivada com três pontos**

Seja f uma função conhecida em três pontos x_{i-1}, x_i e x_{i+1}. Determinemos uma fórmula de aproximação para $f'(x_i)$ utilizando os pontos anteriores.

Notamos que

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_{i-1})\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} + f(x_i)\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} \\ &+ f(x_{i+1})\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} + \frac{f^{(3)}(\eta(x))}{3!}(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1}) \end{aligned}$$

e portanto

$$\begin{aligned} f'(x_i) &\simeq f(x_{i-1})\frac{x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} + f(x_i)\frac{(x_i-x_{i+1})+(x_i-x_{i-1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} \\ &+ f(x_{i+1})\frac{x_i - x_{i-1}}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} \end{aligned} \tag{1.4}$$

e o erro cometido na aproximação anterior é

$$\frac{f^{(3)}(\eta(x_i))}{3!}(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}),\ \eta(x_i) \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

Para $f'(x_{i-1})$ temos

$$\begin{aligned} f'(x_{i-1}) &\simeq f(x_{i-1})\frac{2x_{i-1} - x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} + f(x_i)\frac{x_{i-1}-x_{i+1}}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} \\ &+ f(x_{i+1})\frac{x_{i-1}-x_i}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} \end{aligned} \tag{1.5}$$

e o erro cometido na aproximação anterior é

$$\frac{f^{(3)}(\eta(x_{i-1}))}{3!}(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1}),\ \eta(x_{i-1}) \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

As fórmulas traduzidas por (1.4) e (1.5) são designadas respectivamente por *centrada para a primeira derivada* e *progressiva para a primeira derivada.*

Se considerarmos, nas fórmulas anteriores, pontos igualmente espaçados (de espaçamento h) obtemos, de (1.4),

$$f'(x_i) \simeq \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} \tag{1.6}$$

sendo o erro desta aproximação

$$\frac{f^{(3)}(\eta(x_i))}{3!}(-h^2),\ \eta(x_i) \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

De modo análogo, de (1.5), temos

$$f'(x_{i-1}) \simeq \frac{1}{2h}(-3f(x_{i-1}) + 4f(x_i) - f(x_{i+1})) \tag{1.7}$$

sendo o erro

$$\frac{f^{(3)}(\eta(x_{i-1}))}{3}h^2,\ \eta(x_{i-1}) \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

Um outro processo frequentemente usado para deduzir fórmulas de aproximação para as derivadas de uma função apenas conhecida pontualmente é a fórmula de Taylor.

Suponhamos que pretendemos determinar uma fórmula de aproximação para a primeira derivada $f'(x_{i+1})$ considerando ainda três pontos. Podemos então escrever $f'(x_{i+1})$ como combinação linear de $f(x_{i-1}), f(x_i)$ e $f(x_{i+1})$ onde, para simplificar, consideramos pontos igualmente espaçados. Pretendemos determinar a, b, c tais que $af(x_{i-1}) + bf(x_i) + cf(x_{i+1})$ seja uma aproximação para $f'(x_{i+1})$. Pela fórmula de Taylor temos

$$f(x_{i-1}) = f(x_{i+1}) - 2hf'(x_{i+1}) + \frac{(2h)^2}{2}f''(x_{i+1}) - \frac{(2h)^3}{6}f'''(\eta_1),\ \eta_1 \in (x_{i-1}, x_{i+1}),$$

e também

$$f(x_i) = f(x_{i+1}) - hf'(x_{i+1}) + \frac{h^2}{2}f''(x_{i+1}) - \frac{h^3}{6}f'''(\eta_2),\ \eta_2 \in (x_i, x_{i+1}),$$

e portanto,

$$\begin{aligned} af(x_{i-1}) + bf(x_i) + cf(x_{i+1}) &= (a+b+c)f(x_{i+1}) \\ &+ h(-2a-b)f'(x_{i+1}) \\ &+ \frac{h^2}{2}(4a+b)f''(x_{i+1}) - \frac{h^3}{6}(8af'''(\eta_1) + bf'''(\eta_2)). \end{aligned} \tag{1.8}$$

Assim, obtemos uma aproximação para $f'(x_{i+1})$ se a, b e c são escolhidos de modo a satisfazer

$$\begin{cases} a+b+c=0 \\ -2a-b=\dfrac{1}{h}. \end{cases}$$

Para diversas particularizações dos parâmetros obtemos diversas fórmulas e a partir da igualdade (1.8) obtemos ainda a expressão do erro. Por exemplo, fazendo $a=0, b=-c=-\frac{1}{h}$ obtemos a fórmula (1.3). Tomando $a=\frac{1}{h}, b=-\frac{3}{h}$ e $c=\frac{2}{h}$ vem

$$f'(x_{i+1}) \simeq \frac{1}{h}(f(x_{i-1}) - 3f(x_i) + 2f(x_{i+1})). \tag{1.9}$$

A fórmula anterior é designada por *fórmula regressiva para a primeira derivada.*

Exemplo: Considere a seguinte tabela

x	0.2	0.4	0.6	0.8	1
$f(x)$	98	92	81	64	38

Determinar uma aproximação para

$$f'(0.2),\ f'(0.6),\ f'(1).$$

Utilizando (1.7), (1.6) e (1.9) vem respectivamente

$$f'(0.2) \simeq \frac{1}{2\times 0.2}(-3\times 98 + 4\times 92 - 81) = -17.5,$$

$$f'(0.6) \simeq \frac{1}{2\times 0.2}(64 - 92) = -70,$$

$$f'(1) \simeq \frac{1}{0.2}(81 - 3\times 64 + 2\times 38) = -175.$$

■

3. Fórmulas para a segunda derivada com três pontos

Comecemos por observar que para determinar uma aproximação para a segunda derivada de uma função podemos usar qualquer uma das técnicas referidas anteriormente.

Consideremos uma função f conhecida nos pontos x_{i-1}, x_i e x_{i+1} e que tem derivada de quarta ordem limitada em (x_{i-1}, x_{i+1}). Suponhamos que os pontos são igualmente espaçados e de espaçamento h. Determinemos seguidamente uma fórmula de aproximação para a segunda derivada $f''(x_i)$ como combinação linear de $f(x_{i-1}), f(x_i)$ e $f(x_{i+1})$. Procedendo como no caso anterior, é fácil obter

$$\begin{aligned} af(x_{i+1}) + bf(x_i) + cf(x_{i-1}) &= (a+b+c)f(x_i) + (a-c)f'(x_i)h \\ &+ (a+c)f''(x_i)\frac{h^2}{2} + (a-c)f'''(x_i)\frac{h^3}{6} \\ &+ (af^{(4)}(\eta) + cf^{(4)}(\xi))\frac{h^4}{24}, \quad \eta, \xi \in (x_{i-1}, x_{i+1}). \end{aligned} \tag{1.10}$$

Para a, b e c tais que

$$\begin{cases} a+b+c=0 \\ a-c=0, \end{cases}$$

isto é,

$$a = c = -\frac{b}{2}, \quad b \in \mathbb{R},$$

obtemos a fórmula de aproximação desejada. Assim, por exemplo, tomando $b=-2, a=c=1$ deduzimos

$$f''(x_i) \simeq \frac{1}{h^2}[f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})] \tag{1.11}$$

que é designada *fórmula centrada para a segunda derivada.* O erro com que vem afectado o valor dado pelo último cociente tem a seguinte expressão

$$-\frac{h^2}{24}[f^{(4)}(\eta) + f^{(4)}(\xi)], \ \eta, \xi \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

Se a derivada de quarta ordem de f é contínua em $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ então o erro anterior toma a forma[5]

$$-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\sigma), \ \sigma \in [x_{i-1}, x_{i+1}].$$

4. Fórmulas para as derivadas parciais

Seja f uma função de duas variáveis x e y, $f(x,y)$, definida num rectângulo $\mathcal{R} = [a,b] \times [c,d]$. Neste rectângulo consideremos a seguinte partição

$$\left\{(x_i, y_j): \begin{array}{c} x_i = x_{i-1} + h, x_0 = a, h = (b-a)/n, \\ y_j = y_{j-1} + k, y_0 = b, k = (d-c)/m \end{array}\right\}$$

[5] Atendendo a que $f^{(4)}(\eta) + f^{(4)}(\xi) \in [\min_{x\in[x_{i-1},x_{i+1}]} 2f^{(4)}(x), \max_{x\in[x_{i-1},x_{i+1}]} 2f^{(4)}(x)]$, pelo Teorema do Valor Intermédio tem-se $f^{(4)}(\eta) + f^{(4)}(\xi) = 2f^{(4)}(\sigma)$ para algum $\sigma \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$.

Vamos seguidamente considerar fórmulas de aproximação para as derivadas parciais de primeira e segunda ordem f, relativamente a x, nos pontos (x_i, y_j), ou seja,

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y_j), \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_i, y_j).$$

Notemos que nas derivadas parciais anteriores a segunda variável é fixa e, portanto, todas as fórmulas para a derivada de primeira e segunda ordem, já estudadas, podem ser consideradas para aproximar estas derivadas parciais. Assim, por exemplo, podemos obter

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y_j) \simeq \frac{1}{h}[f(x_{i+1}, y_j) - f(x_i, y_j)],$$

e

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y_j) \simeq \frac{1}{2h}[-3f(x_i, y_j) + 4f(x_{i+1}, y_j) - f(x_{i+2}, y_j)]$$

usando, respectivamente, as fórmulas progressivas (1.2) e (1.7). De modo anólogo, a fórmula centrada (1.6), permite-nos escrever

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_i, y_j) \simeq \frac{1}{2h}[f(x_{i+1}, y_j) - f(x_{i-1}, y_j)]. \tag{1.12}$$

Relativamente à segunda derivada, usando (1.11) vem

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_i, y_j) \simeq \frac{1}{h^2}[f(x_{i+1}, y_j) - 2f(x_i, y_j) + f(x_{i-1}, y_j)]. \tag{1.13}$$

De modo análogo se estabelecem as fórmulas para as derivadas relativamente à variável y. Por exemplo, usando as fórmulas centradas vem

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x_i, y_j) \simeq \frac{1}{2k}[f(x_i, y_{j+1}) - f(x_i, y_{j-1})], \tag{1.14}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x_i, y_j) \simeq \frac{1}{k^2}[f(x_i, y_{j+1}) - 2f(x_i, y_j) + f(x_i, y_{j-1})].$$

Exemplo: Considere a função

$$f(x, y) = x^2 + ycos(xy).$$

Determinar o vector gradiente de f, ∇f, em $P = (\frac{\pi}{2}, 0)$.

Usando, por exemplo, (1.12) e (1.14) com $h = k = \frac{\pi}{2}$, obtemos, respectivamente,

$$\frac{\partial f}{\partial x}(P) \simeq \pi, \quad \frac{\partial f}{\partial y}(P) \simeq cos(\frac{\pi^2}{4}) \simeq 0.781.$$

Assim, o vector $\nabla f(P)$ é aproximadamente

$$\nabla f(P) \simeq \pi \hat{i} + 0.781 \hat{j}.$$

2 Integração numérica

O cálculo de $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ sob determinadas condições de regularidade de f em $[a, b]$ pode ser dado pelo Teorema Fundamental do Cálculo tendo-se

$$I(f) = F(b) - F(a)$$

em que F é uma primitiva de f. No entanto, por exemplo

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx$$

atendendo a que a função integranda não é primitivável não pode ser calculado utilizando o teorema referido. Não sendo conhecida a expressão analítica da função integranda também não podemos utilizar o teorema citado para efectuar o cálculo do integral. É portanto importante o desenvolvimento de técnicas numéricas que permitam o cálculo aproximado do integral de uma função e, ainda, que especifiquem estimativas para o erro com que vem afectado o valor determinado.

Suponhamos que a função integranda f é positiva. Assim $I(f)$ é igual à medida da área da região limitada pelo gráfico de f e pelas rectas $y = 0$, $x = a$ e $x = b$. Se "substituirmos" o gráfico de f pela recta que passa pelos pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$ então podemos aproximar $I(f)$ pela medida da área do trapézio assim definido obtendo-se

$$I(f) \simeq \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)).$$

A dedução de fórmulas de aproximação para o cálculo do integral pode ser feita recorrendo à teoria de interpolação. De facto, ao substituirmos a função integranda - f - pelo seu polinómio interpolador - $P_n(x)$ - obtemos o integral

$$\int_a^b P_n(x)dx$$

em que a função integranda é primitivável. Por aplicação do Teorema Fundamental do Cálculo obtemos uma fórmula de aproximação para $I(f)$. A determinação de uma estimativa para o erro da aproximação obtida é dada por

$$E(f) = \int_a^b (f(x) - P_n(x))dx.$$

Procedendo deste modo, obtemos fórmulas de aproximação que são designadas por *fórmulas de Newton-Cotes.*

2.1 Fórmulas de Newton-Cotes: Trapézios e Simpson simples

Seja $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ em que f'' é contínua em (a,b). Atendendo a que

$$f(x) = f(a)\frac{x-b}{a-b} + f(b)\frac{x-a}{b-a} + \frac{f''(\eta(x))}{2}(x-a)(x-b), x \in [a,b],$$

para algum $\eta(x) \in (a,b)$, vem

$$\begin{aligned} I(f) &= f(a)\int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx + f(b)\int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx \\ &+ \int_a^b \frac{f''(\eta(x))}{2}(x-a)(x-b)dx. \end{aligned}$$

Notemos que

$$f(a)\int_a^b \frac{x-b}{a-b}dx + f(b)\int_a^b \frac{x-a}{b-a}dx = \frac{b-a}{2}(f(a)+f(b)),$$

e por outro lado, aplicando o Teorema do Valor Médio para Integrais[6] temos

$$\int_a^b \frac{f''(\eta(x))}{2}(x-a)(x-b)dx = -\frac{f''(\xi)(b-a)^3}{12}, \xi \in (a,b).$$

Deste modo obtemos a seguinte fórmula de aproximação

$$I(f) \simeq \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$$

[6]Teorema do Valor Médio para Integrais: Se f e g são funções contínuas em $[a,b]$ e g não muda de sinal neste intervalo, então existe $\xi \in (a,b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(\xi)\int_a^b g(x)dx.$$

que é designada por *fórmula dos trapézios.* O valor dado pelo cociente anterior vem afectado do erro $E_T(f)$ dado por

$$E_T(f) = -\frac{f''(\xi)(b-a)^3}{12}$$

para algum $\xi \in (a,b)$.

O resultado seguinte resume o que provámos.

Teorema 2.1 *Se f tem segunda derivada contínua em $[a,b]$ então existe $\xi \in (a,b)$ tal que*

$$I(f) = \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)] + E_T(f)$$

com

$$E_T(f) = -\frac{f''(\xi)(b-a)^3}{12}.$$

■

Consideremos f definida em $[a,b]$ e com derivada de quarta ordem contínua em $[a,b]$. Em $[a,b]$ consideremos o ponto $c = \frac{a+b}{2}$ e seja $P_2(x)$ o polinómio interpolador de f em a, c e b, isto é,

$$P_2(x) = f(a)\ell_0(x) + f(c)\ell_1(x) + f(b)\ell_2(x)$$

em que $\ell_0(x), \ell_1(x)$ e $\ell_2(x)$ denotam os polinómios de Lagrange para os pontos dados. Substituindo em $I(f)$ a função integranda por $P_2(x)$ e efectuando a integração desta função obtemos

$$\begin{aligned} I(f) \simeq \int_a^b P_2(x)\,dx &= \int_a^c P_2(x)\,dx + \int_c^b P_2(x)\,dx \\ &= \frac{h}{3}[f(a)+4f(c)+f(b)] \end{aligned}$$

onde $h = (b-a)/2$.

A fórmula de aproximação anterior é designada por *fórmula de Simpson.* Estimemos seguidamente o erro que se comete ao aproximar $I(f)$ pelo valor obtido pela fórmula anterior. Atendendo a que

$$f(x) = P_2(x) + \frac{f^{(3)}(\eta(x))}{6}(x-a)(x-c)(x-b)$$

para $\eta(x) \in (a,b)$, seguindo a técnica usada na determinação de $E_T(f)$, obteríamos para $E_S(f)$ um majorante em potências de h^4. No entanto, sabemos que o erro anterior é

majorado pelo produto de uma constante por h^5. Este facto está associado a resultados numéricos obtidos por experimentação.

É válido o seguinte teorema.

Teorema 2.2 *Se f tem derivada de quarta ordem contínua em $[a,b]$ então existe $\xi \in [a,b]$ tal que*

$$I(f) = \frac{h}{3}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] + E_S(f)$$

em que

$$E_S(f) = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi),$$

e $h = (b-a)/2$.

Demonstração: Se $f^{(4)}$ é contínua em $[a,b]$, utilizando a fórmula de Taylor para $x \in [a,b]$, existe $\eta(x) \in (a,b)$ tal que

$$f(x) = f(c) + f'(c)(x-c) + \frac{f''(c)}{2}(x-c)^2 + \frac{f'''(c)}{6}(x-c)^3 + \frac{f^{(4)}(\eta(x))}{24}(x-c)^4.$$

Considerando a igualdade anterior em $I(f)$ vem

$$I(f) = f(c)(b-a) + \frac{f''(c)}{3}h^3 + \int_a^b \frac{f^{(4)}(\eta(x))}{24}(x-c)^4\,dx,$$

e, pelo Teorema do Valor Médio para Integrais, deduzimos

$$I(f) = f(c)(b-a) + \frac{f''(c)}{3}h^3 + \frac{f^{(4)}(\eta)}{60}h^5,\ \eta \in (a,b).$$

Atendendo a que por (1.11)

$$f''(c) = \frac{1}{h^2}(f(a) - 2f(c) + f(b)) - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\sigma)$$

com $\sigma \in (a,b)$, obtemos

$$I(f) = f(c)(b-a) + \frac{h}{3}(f(a) - 2f(c) + f(b)) - f^{(4)}(\sigma)\frac{h^5}{36} + f^{(4)}(\eta)\frac{h^5}{60},$$

ou ainda

$$I(f) = \frac{h}{3}(f(a) + 4f(c) + f(b)) + \frac{h^5}{12}\left(\frac{-5f^{(4)}(\sigma) + 3f^{(4)}(\eta)}{15}\right).$$

Prova-se que

$$\frac{h^5}{12}\left(\frac{-5f^{(4)}(\sigma)+3f^{(4)}(\eta)}{15}\right) = -\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$$

para agum $\xi \in [a,b]$. ■

Exemplo: Determine, utilizando as fórmulas dos Trapézios e de Simpson, $I(f)$ e $I(g)$ em que

$$f(x) = \frac{1}{x+1},\ g(x) = \sqrt{1+x^2},\ x \in [0,2].$$

Compare com o valor exacto.

Utilizando as fórmulas referidas é fácil estabelecer

	Trapézios	Simpson	"Exacto"
$f(x)$	1.333	1.111	1.099
$g(x)$	3.236	2.964	2.958

■

Como já referimos anteriormente as fórmulas apresentadas pertencem à classe das fórmulas de Newton-Cotes que são deduzidas utilizando a teoria de interpolação. Observamos que as fómulas dos trapézios e de Simpson foram obtidas utilizando polinómios interpoladores de f de grau um e dois respectivamente.

Para obter outras fórmulas da classe referida aproximamos f pelo seu polinómio interpolador de grau $n \geq 3$. Asssim , seja f uma função definida em $[a,b]$ onde consideramos os pontos $x_i = x_{i-1} + h, i = 1,\ldots,n$, com $x_0 = a$ e $h = (b-a)/n$, e

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_i(x)$$

o polinómio interpolador de Lagrange de f nos pontos anteriores onde $\ell_i(x)$ denotam os polinómios de Lagrange. Se, em $I(f)$, aproximarmos f por P_n obtemos

$$I(f) \simeq \int_a^b P_n(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\int_a^b \ell_i(x)\,dx,$$

ou ainda,

$$I(f) \simeq \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) \quad \text{com } a_i = \int_a^b \ell_i(x)\,dx,\ i = 0,\ldots,n. \tag{2.15}$$

A fórmula de aproximação traduzida por (2.15)

' chamada *fórmula de Newton-Cotes* e os coeficientes $a_i, i = 0,\ldots,n$, encontram-se tabelados para diferentes valores de n. No quadro seguinte são apresentadas as fórmulas de Newton-Cotes para $n \leq 4$.

n	Fórmula	Designação
1	$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx \simeq \frac{h}{2}[f(x_0)+f(x_1)]$	Trapézios
2	$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx \simeq \frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]$	Simpson
3	$\int_{x_0}^{x_3} f(x)\,dx \simeq \frac{3h}{8}[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)]$	Três Oitavos
4	$\int_{x_0}^{x_4} f(x)\,dx \simeq \frac{2h}{45}[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)]$	Milne

No resultado seguinte que apresentamos sem demonstração é estabelecido o erro que se comete ao usar a fórmula de integração (2.15).

Teorema 2.3 *Seja f uma função definida em $[a,b]$ onde consideramos os pontos $x_i = x_{i-1}+h, i = 1,\ldots,n$, com $x_0 = a$ e $h = (b-a)/n$ e seja $a_i = \int_a^b \ell_i(x)\,dx, i = 0,\ldots,n$.*

1. *Se n é impar e f tem derivada de ordem $n+1$ contínua em $[a,b]$ então existe $\eta \in [a,b]$ tal que*

$$I(f) = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + h^{n+2}\frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\int_0^1 t(t-1)\ldots(t-n)\,dt.$$

2. *Se n é par e f tem derivada de ordem $n+2$ contínua em $[a,b]$ então existe $\eta \in [a,b]$ tal que*

$$I(f) = \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i) + h^{n+3}\frac{f^{(n+2)}(\eta)}{(n+2)!}\int_0^1 t^2(t-1)\ldots(t-n)\,dt.$$

■

Deste teorema é fácil concluir que se n é impar então as fórmulas de Newton-Cotes são exactas para polinómios de grau menor ou igual a n. Mais ainda, se n é par então as fórmulas referidas são exactas para polinómios de grau menor ou igual a $n+1$. Este facto motiva o conceito de *ordem de precisão de uma fórmula de integração.*

Definição 2.1 *Uma fórmula de integração diz-se com ordem de precisão q se é exacta para polinómios de grau menor ou igual a q.* ■

A fórmula dos trapézios tem ordem de precisão um enquanto que a ordem de precisão da fórmula de Simpson é três.

2.2 Fórmulas dos Trapézios e de Simpson compostas

Para calcular $I(f)$ usando as fómulas dos Trapézios e Simpson podemos apenas utilizar, respectivamente, dois e três valores da função integranda. Nestes casos somos conduzidos, muitas vezes, a aproximações que não têm a precisão desejada. No entanto, podemos conhecer a função f nos pontos $x_i, i = 0, \ldots, n$, $(n > 3)$, caso em que devemos aplicar as fórmulas de aproximação consideradas aos integrais induzidos pela partição anterior. O exemplo seguinte ilustra a técnica a usar.

Exemplo: Considere a função $f(x) = e^x, x \in [0, 4]$. Aplicar a fórmula de Simpson a

1. $I_1(f) = \int_0^4 f(x)dx,$
2. $I_2(f) = \int_0^2 f(x)\,dx + \int_2^4 f(x)\,dx.$

Temos

1.
$$I_1(f) \simeq \tilde{I}_1(f) = \frac{2}{3}(f(0) + 4f(2) + f(4)) \simeq 56.76958,$$

2.
$$I_2(f) \simeq \tilde{I}_2(f)\frac{1}{3}[f(0) + 4f(1) + 2f(2) + 4f(3) + f(4)] \simeq 53.86385.$$

Comparando com o valor exacto obtemos

$$|I(f) - \tilde{I}_1(f)| \leq 3.17144, \; |I(f) - \tilde{I}_2(f)| \leq 0.26571.$$

A segunda forma de cálculo conduziu a um valor mais preciso.

■

Como ilustra o exemplo anterior, o erro que se comete ao aproximar $I(f)$ subdividindo o intervalo de integração e aplicando a cada subintervalo a fórmula de Simpson conduz a uma diminuição do erro. Vamos seguidamente generalizar as fórmulas deduzidas anteriormente- fórmulas simples. A generalização consiste em subdividir $[a, b]$ e

aplicar em cada subintervalo (Trapézios) ou em dois intervalos consecutivos (Simpson) as fórmulas simples. Obtemos deste modo as fórmulas de Newton-Cotes compostas.

As figuras seguintes ilustram a aplicação da fórmula dos trapézios composta ao cálculo de $I(f)$ em que a medida da área da região sombreada representa o erro cometido nesta aplicação.

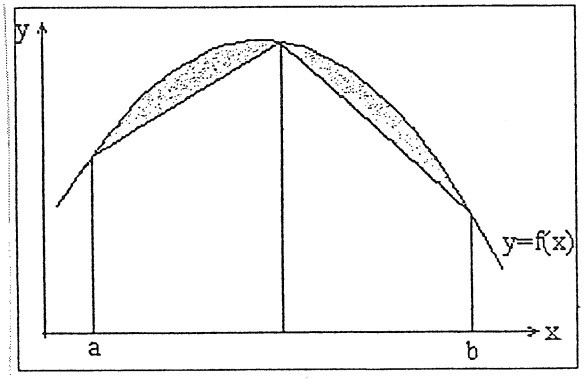

Figura 1

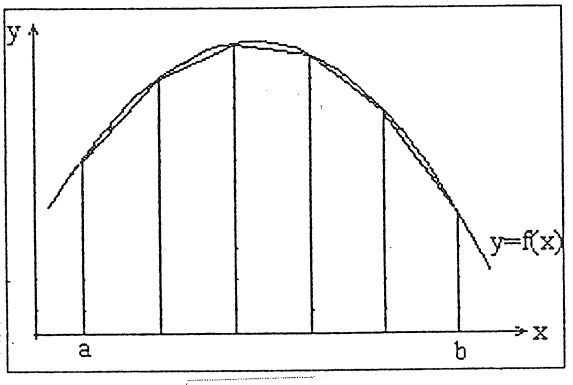

Figura 1b

Teorema 2.4 *Seja f uma função definida em $[a,b]$ e neste intervalo consideremos a partição uniforme*

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b.$$

e $h = (b-a)/n$.

Se f tem derivada de segunda ordem contínua em $[a,b]$ então existe $\eta \in [a,b]$ tal que

$$I(f) = \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)\right) - \frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta). \tag{2.16}$$

Demonstração: Atendendo

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx$$

por aplicação da fórmula dos Trapézios, vem

$$I(f) = \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}[f(x_{i-1}) + f(x_i)] - \frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i),$$

em que $\eta_i \in [x_{i-1}, x_i]$, $i = 1, \ldots, n$. Da última igualdade vem

$$I(f) \simeq \frac{h}{2}[f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)] \tag{2.17}$$

e

$$E_T(f) = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i).$$

Notemos que

$$\min_{x\in[a,b]} f''(x) \leq f''(\eta_i) \leq \max_{x\in[a,b]} f''(x),$$

e portanto,

$$\min_{x\in[a,b]} f''(x) \leq \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) \leq \max_{x\in[a,b]} f''(x).$$

Logo, pelo Teorema dos Valores Intermédios, existe $\eta \in [a,b]$ tal que

$$\sum_{i=1}^{n} f''(\eta_i) = nf''(\eta).$$

Substituindo em $E_T(f)$ e atendendo que $nh = b-a$, concluímos

$$E_T(f) = -\frac{h^2}{12}(b-a)f''(\eta).$$

■

A fórmula de aproximação para $I(f)$ traduzida por (2.17) é chamada *fórmula dos Trapézios composta.*

Teorema 2.5 *Seja $h = (b-a)/n$ e em $[a,b]$ consideremos os pontos $x_i = x_{i-1} + h, i = 1,\ldots,n, x_0 = a$ e $n = 2m$.*

Se f tem derivada de quarta ordem contínua em $[a,b]$, então existe $\eta \in [a,b]$ tal que

$$I(f) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4\sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} f(x_{2i}) + f(b)\right) - \frac{h^4}{180}(b-a)f^{(4)}(\eta). \quad (2.18)$$

Demonstração: Atendendo

$$I(f) = \sum_{i=1}^{m}\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)\,dx$$

por aplicação da fórmula de Simpson , vem

$$I(f) = \sum_{i=1}^{m}\frac{h}{3}[f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})] - \frac{h^5}{90}\sum_{i=1}^{m} f^{(4)}(\eta_i),$$

em que $\eta_i \in [x_{2i-2}, x_{2i}]$, $i = 1, \ldots, m$. Da última igualdade obtemos

$$I(f) \simeq \frac{h}{3}[f(a) + 2\sum_{i=2}^{m} f(x_{2i-2}) + 4\sum_{i=1}^{m} f(x_{2i-1}) + f(b)] \tag{2.19}$$

e

$$E_S(f) = -\frac{h^5}{90}\sum_{i=1}^{m} f^{(4)}(\eta_i).$$

Notemos que

$$\min_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x) \leq f^{(4)}(\eta_i) \leq \max_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x),$$

e portanto,

$$\min_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x) \leq \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f^{(4)}(\eta_i) \leq \max_{x\in[a,b]} f^{(4)}(x).$$

Logo, pelo Teorema dos Valores Intermédios, existe $\eta \in [a, b]$ tal que

$$\sum_{i=1}^{m} f^{(4)}(\eta_i) = m f^{(4)}(\eta).$$

Substituindo em $E_S(f)$ e atendendo que $2mh = b - a$, concluímos

$$E_S(f) = -\frac{h^4}{180}(b-a) f^{(4)}(\eta).$$

■

A fórmula de aproximação para $I(f)$ traduzida por (2.19) é chamada *fórmula de Simpson composta.*

Exemplo: Determinar, utilizando as fórmulas dos Trapézios e Simpson compostas com $n \leq 8$, uma aproximação para

$$I(f) = \int_0^2 x^2 e^{-x^2}\, dx$$

e indique o erro tomando $I(f) = 0.422725$.

Os resultados obtidos usando as fórmulas indicadas foram

n	Trapézios	$\lvert E_T\rvert$	Simpson	$\lvert E_S\rvert$
1	0.07326	0.349463	-	-
2	0.4045	0.0182143	0.5149	0.0922017
3	0.4147	0.00801275	-	-
4	0.4182	0.00454547	0.4227	0.00001081
5	0.4198	0.00291804	-	-
6	0.4207	0.00202937	0.4227	0.00003491
7	0.4212	0.00149218	-	-
8	0.4216	0.00114302	0.4227	$8.86E-6$

Por aplicação dos teoremas 2.4 e 2.5, podemos determinar o número de pontos a considerar em $[a,b]$ de modo a que a aproximação para $I(f)$, determinado utilizando as fórmulas dos Trapézios e Simpson compostas respectivamente, tenha erro inferior ou igual a uma quantidade ϵ pré-estabelecido. De facto, se $M > 0$ é tal que $|f''(x)| \leq M$ em $[a,b]$, então é suficiente tomar para a regra dos Trapézios composta n a verificar

$$|E_T(f)| \leq \frac{(b-a)^3}{12n^2} M \leq \epsilon,$$

isto é,

$$n \geq (b-a)\sqrt{\frac{M(b-a)}{12\epsilon}}.$$

Se $M > 0$ é tal que $|f^{(4)}(x)| \leq M$ em $[a,b]$, então é suficiente tomar para a regra de Simpson composta n par e a verificar

$$|E_S(f)| \leq \frac{(b-a)^5}{180n^4} M \leq \epsilon,$$

isto é,

$$n \geq (b-a)\left(\frac{M(b-a)}{180\epsilon}\right)^{1/4}.$$

2.3 Fórmulas de Gauss

As fórmulas de Newton-Cotes foram estabelecidas substituindo em $I(f)$ a função integranda f pelo seu polinómio interpolador. Estas fórmulas têm, como vimos, ordem precisão n (n impar) ou $(n+1)$ (n par) e para a sua aplicação é suficiente conhecer a função f num conjunto de pontos do intervalo de integração.

Em geral os pontos considerados no intervalo de integração são dados ou determinados de acordo com algum critério de precisão (por exemplo o que foi referido das fórmulas dos Trapézios e Simpson compostas). No entanto, os pontos $x_i, i = 0, \ldots, n$, podem ser calculados de modo a aumentar a precisão da fórmula de integração. Deste modo somos conduzidos a outro tipo de fórmulas de integração que são designadas por *fórmulas de Gauss* que têm, como veremos, maior ordem de precisão do que as fórmulas de Newton-Cotes.

Consideremos, sem perda de generalidade,

$$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\,dx$$

pois que se tivermos o integral sobre $[a,b]$ vem

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\frac{(b-a)t+b+a}{2})\,dt.$$

Determinemos $c_1,\ldots,c_n$ e $x_1,\ldots,x_n \in (-1,1)$ de modo a que a fórmula de aproximação

$$I(f) \simeq \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i) \tag{2.20}$$

tenha ordem de precisão $2n-1$, isto é, seja exacta para polinómios de grau menor ou igual a $2n-1$.

Sejam $P_0(x) = 1, P_1(x) = x$. Considerando para $k \geq 2$

$$B_k = \frac{\int_{-1}^{1} x[P_{k-1}(x)]^2\,dx}{\int_{-1}^{1}[P_{k-1}(x)]^2\,dx}, \qquad C_k = \frac{\int_{-1}^{1} xP_{k-1}(x)P_{k-2}(x)\,dx}{\int_{-1}^{1}[P_{k-2}(x)]^2\,dx},$$

definimos os polinómios

$$P_k(x) = (x - B_k)P_{k-1}(x) - C_kP_{k-2}(x).$$

Os polinómios $P_k(x)$ são conhecidos por *polinómios de Legendre.*[7] Estes polinómios são ortogonais em $[-1,1]$, isto é,

$$i \neq j \Longrightarrow \int_{-1}^{1} P_i(x)P_j(x)\,dx = 0$$

e

$$\int_{-1}^{1} P_i(x)^2\,dx > 0.$$

Mais ainda, cada polinómio de Legendre P_n tem n zeros distintos $x_1,\ldots,x_n \in (-1,1)$.

Seja então $P_n(x)$ o polinómio de Legendre de grau n e sejam $x_1,\ldots,x_n$ os seus zeros. Seja $P(x)$ o polinómio interpolador de f nos zeros do polinómio de Legendre

[7]Os polinómios de Legendre também se podem escrever na forma

$$P_k(x) = \frac{1}{2^k k!}\frac{d^k}{dx^k}[(x^2-1)^k].$$

$P_n(x)$. Substituindo $f(x)$ por $P(x)$ em $I(f)$ obtemos a fórmula de aproximação (2.20) com $x_i, i = 1, \ldots, n$, zeros do polinómio de Legendre $P_n(x)$ e

$$c_i = \int_{-1}^{1} \ell_i(x)\, dx \tag{2.21}$$

em que $\ell_i(x)$ denotam os polinómios de Lagrange. Atendendo ao modo como esta fórmula foi construída, podemos concluir que é exacta para polinómios de grau menor ou igual a $n-1$. Provemos agora que a fórmula (2.20) é exacta para polinómios Q de grau menor ou igual a $2n-1$.

Considerando o cociente do polinómio Q com o polinómio de Legendre $P_n(x)$ vem

$$Q(x) = D(x)P_n(x) + R(x) \tag{2.22}$$

em que $D(x)$ e $R(x)$ têm grau menor ou igual a $n-1$.

Para o polinómio $D(x)$ existem[8] constantes $d_i, i = 0, \ldots, n-1$ tais que

$$D(x) = \sum_{i=0}^{n-1} d_i P_i(x)$$

e atendendo à ortogonalidade de $\{P_i, i = 0, \ldots, n-1\}$ em $[-1, 1]$, vem

$$\int_{-1}^{1} D(x)P_n(x)\, dx = \sum_{i=0}^{n-1} d_i \int_{-1}^{1} P_i(x)P_n(x)\, dx = 0. \tag{2.23}$$

Conjugando (2.22) com (2.23) obtemos

$$\int_{-1}^{1} Q(x)\, dx = \int_{-1}^{1} R(x)\, dx. \tag{2.24}$$

Mas, atendendo a que o grau de precisão da fórmula (2.20) é $n-1$, vem ainda

$$\int_{-1}^{1} R(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} c_i R(x_i) \tag{2.25}$$

em que

$$R(x_i) = Q(x_i) \tag{2.26}$$

atendendo a (2.22) e a que $x_i, i = 1, \ldots, n$, são os zeros de $P_n(x)$. Logo, conjugando (2.24) com (2.25) e (2.26) obtemos finalmente

$$\int_{-1}^{1} Q(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} c_i Q(x_i)$$

[8] Os polinómios de Legengre $P_i(x), i = 0, \ldots, n-1$, são ortogonais e não nulos, e portanto, linearmente independentes. Logo constituem uma base do espaço dos polinómios de grau menor ou igual a $n-1$.

o que mostra que a fórmula (2.20) é exacta para Q. A conclusão segue-se de imediato atendendo a que Q tem grau menor ou igual a $2n-1$.

Para a construção de uma fórmula de Gauss com ordem de precisão $2n-1$ são necessários os zeros do polinómio de Legendre $P_n(x)$ e os coeficientes $c_i, i=1,\ldots,n$ que são calculados pela igualdade (2.21). É de salientar que tais elementos se encontram em tabelas como a que apresentamos seguidamente.

n	x_i	c_i
2	$\pm\frac{1}{\sqrt{3}} \simeq \pm 0.5773503$	1
3	0	$\frac{8}{9} \simeq 0.8888889$
	$\pm\sqrt{\frac{3}{5}} \simeq \pm 0.7745967$	$\frac{5}{9} \simeq 0.5555556$
4	$\simeq \pm 0.3399810$	$\simeq 0.6521452$
	$\simeq \pm 0.8611363$	$\simeq 0.3478548$
5	0	$\simeq 0.5688889$
	$\simeq \pm 0.5384693$	$\simeq 0.4786287$
	$\simeq \pm 0.9061798$	$\simeq 0.2369269$

Exemplo: Determinar, utilizando as fórmulas de Gaus com $n=2,3,4$ com $I(f)$ e $I(g)$ em que

$$f(x)=\frac{1}{x+1},\ g(x)=\sqrt{1+x^2},\ x\in[0,2].$$

Compare com o valor exacto.

Atendendo a que as fórmulas de Gauss foram estabelecidas para o intervalo $[-1.1]$ temos

$$I(f)=\int_0^2 \frac{1}{x+1}\,dx=\int_{-1}^1 \frac{1}{2+t}\,dt.$$

Para $n=2$ temos

$$I(f)\simeq \frac{1}{2-\frac{\sqrt{3}}{3}}+\frac{1}{2+\frac{\sqrt{3}}{3}}\simeq 1.091.$$

Calculando de modo análogo $I(f)$ com $n=3$ e $n=4$ e $I(g)$ com $n=2,3,4$, obtemos os valores da tabela seguinte.

	$n=2$	$n=3$	$n=4$	"Exacto"
$f(x)$	1.091	1.098	1.099	1.099
$g(x)$	2.953	2.958	2.958	2.958

Note que $I(f)$ e $I(g)$ forma calculados anteriormente utilizando as fórmulas dos Trapézios e de Simpson.

■

2.4 Aplicação ao cálculo de integrais duplos

Seja f uma função de duas variáveis, x e y definida no rectângulo $\mathcal{R} = [a,b] \times [c,d]$. Atendendo a que

$$I(f) = \int_a^b \int_c^d f(x,y)\,dy\,dx = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)\,dy \right) dx$$

podemos estabelecer fórmulas de aproximação para $I(f)$ utilizando as fórmulas de integração já estudadas.

Vejamos seguidamente como obter uma fórmula de aproximação para $I(f)$ utilizando a fórmula dos Trapézios no cálculo dos integrais quando considerados sobre os intervalos $[a,b]$ e $[c,d]$. Assim, considerando a fórmula referida em $\int_c^d f(x,y)dy$ obtemos

$$\int_c^d f(x,y)dy = \frac{d-c}{2}[f(x,c)+f(x,d)] - \frac{(d-c)^3}{12}\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,\eta)$$

com $\eta \in [c,d]$. Substituindo em $I(f)$ vem

$$\begin{aligned} I(f) &= \frac{d-c}{2}\left(\int_a^b f(x,c)\,dx + \int_a^b f(x,d)\,dx \right) \\ &- \frac{(d-c)^3}{12}\int_a^b \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,\eta)\,dx, \end{aligned}$$

e por aplicação da fórmula dos Trapézios e do Teorema do Valor Médio para Integrais, obtemos ainda

$$\begin{aligned} I(f) &= \frac{(b-a)(d-c)}{4}[f(a,c)+f(b,c)+f(a,d)+f(b,d)] \\ &- \frac{(b-a)^3(d-c)}{24}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\xi_1,c) + \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\xi_2,d) \right) \\ &- \frac{(b-a)(d-c)^3}{12}\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(\xi_3,\eta)\,dx \end{aligned}$$

em que $\xi_1, \xi_2, \xi_3 \in [a,b]$ e $\eta \in [c,d]$.

Provámos deste modo o seguinte teorema.

Teorema 2.6 *Se f é uma função definida no rectângulo $\mathcal{R} = [a,b] \times [c,d]$ e com derivadas parciais $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ e $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ contínuas neste rectângulo, então existem $\xi_1, \xi_2, \xi_3 \in [a,b]$ e $\eta \in [c,d]$ tais que*

$$I(f) \simeq \frac{(b-a)(d-c)}{4}[f(a,c)+f(b,c)+f(a,d)+f(b,d)] \qquad (2.27)$$

em que o erro $E_T(f)$ *é dado por*

$$\begin{aligned} E_T(f) &= -\frac{(b-a)^3(d-c)}{24}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\xi_1,c)+\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(\xi_2,d)\right) \\ &- \frac{(b-a)(d-c)^3}{12}\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(\xi_3,\eta)\,dx \end{aligned}$$

■

Notamos que se tivéssemos considerado outras fórmulas para o cálculo dos integrais sobre $[a,b]$ e $[c,d]$ obteríamos outras fórmulas para calcular $I(f)$.

Exemplo: Determinar o volume V do sólido S limitado superiormente pelo parabolóide elíptico de equação

$$x^2+2y^2+z=16$$

e inferiormente pelo quadrado $R=[0,2]\times[0,2]$.

Aplicando (2.27) com $f(x,y)=16-x^2-y^2$ obtemos $V\simeq 40$.

Sudividindo o quadrado R conforme a figura seguinte

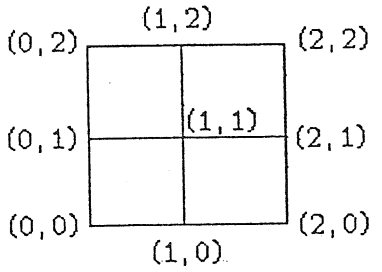

Figura 2

e aplicando de novo (2.27) em cada um dos quatro quadrados resultantes, obtemos $V\simeq 46$. Notemos que o valor exacto[9] de V é 48.

[9]Cálculo com funções de duas variáveis, A. Breda, J. Costa

Capítulo 5 - Métodos numéricos para problemas diferenciais ordinários

1 Introdução

As equações diferenciais ordinárias surgem na modelização de diversos problemas da ciência, nomeadamente em problemas de engenharia. Elas podem surgir como um modelo matemático que se adapta a um determinado problema, mas também aquando da resolução de uma equação de derivadas parciais.

Para um número reduzido de equações diferenciais ordinárias são conhecidas técnicas que permitem determinar a sua solução. Contudo, na maioria dos casos, esta solução pode ser difícil de obter ou mesmo impossível. Atendendo a este facto, torna-se importante o estudo de métodos numéricos que permitam determinar uma aproximação para a solução do problema apenas num conjunto de pontos do intervalo onde esta solução está definida.

Os problemas diferenciais, mais exactamente problemas envolvendo equações diferenciais ordinárias, podem ser divididos em dois grupos: problemas diferenciais ordinários com condição inicial e problemas diferenciais ordinários com condições de fronteira. Os primeiros são caracterizados por apresentarem apenas uma condição que especifica a solução num extremo do intervalo de integração enquanto que na segunda classe de problemas a solução é especificada nos extremos do intervalo. Também os métodos numéricos se podem agrupar em duas classes, sendo cada uma delas adaptada a um dos grupos de problemas anteriormente referidos. Assim temos métodos numéricos para problemas com condição inicial e métodos numéricos para problemas com condição de fronteira. Na primeira classe podemos incluir os métodos de Taylor, métodos de Euler e os métodos de Runge - Kutta. Na segunda classe salientamos métodos de diferenças finitas, método de "shooting" e o método Rayleigh Ritz.

2 Problemas com condição inicial

2.1 Algumas generalidades

Consideremos o problema com condição inicial

$$\begin{cases} y'(x) = f(x,y), x \in [a,b] \\ y(a) = \alpha \end{cases} \tag{2.1}$$

em que f está definida de $[a,b] \times \mathbb{R}$ em $\mathbb{R}$. Vamos estudar alguns métodos numéricos que nos permitem determinar uma aproximação para a solução de (2.1). O prolongamento dos métodos a estudar a sistemas de equações diferenciais de primeira ordem é, na maioria das vezes, imediato sendo estes sistemas representados por (2.1) com $f : [a,b] \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$.

Um problema com condição inicial envolvendo uma equação diferencial ordinária de ordem m, da forma

$$y^{(m)}(x) = f(x, y(x), y'(x), \ldots, y^{(m-1)}(x)), \; x \in [a,b]$$

e com as condições iniciais

$$y^{(\ell)}(a) = \alpha_\ell, \; \ell = 0, \ldots, m-1,$$

pode, mediante mundança de variável, ser transformado num sistema diferencial de primeira ordem da forma (2.1). De facto, introduzindo as variáveis

$$y_1 = y, \; y_2 = y', \ldots, y_m = y^{(m-1)}$$

obtemos o sistema

$$\begin{cases} y_1'(x) = y_2(x) \\ y_2'(x) = y_3(x) \\ \ldots \\ y_{m-1}'(x) = y_m(x) \\ y_m'(x) = f(x, y_1(x), y_2(x), \ldots, y_m(x)) \end{cases}$$

e as condições iniciais

$$y_1(a) = \alpha_0, \; y_2(a) = \alpha_1, \ldots, y_m(a) = \alpha_{m-1}.$$

Exemplo : Considerar o problema de condição inicial

$$y''(x) = b(x)y'(x) + c(x)y(x) + g(x), \; y(a) = \alpha, \; y'(a) = \beta.$$

Determinar o sistema diferencial equivalente.

Considerando a mudança de variável

$$y_1 = y,\ y_2 = y'$$

vem

$$\begin{cases} y_1'(x) = y_2(x) \\ y_2'(x) = b(x)y_2(x) + c(x)y_1(x) + g(x) \end{cases}$$

e as condições iniciais

$$y_1(a) = \alpha,\ y_2(a) = \beta.$$

■

Consideremos seguidamente alguns conceitos relacionados com o problema diferencial (2.1) cuja solução representamos por $y(x)$.

Definição 2.1 *O problema com condição inicial (2.1) diz-se bem posto se*

1. *tem solução única*
2. *existem constantes positivas ϵ e δ tais que dados $\delta(x)$ e $\tilde{\alpha}$ a satisfazer*

$$|\delta(x)| < \delta, x \in [a,b],\ |\tilde{\alpha}| < \delta,$$

então

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)) + \delta(x), x \in [a,b] \\ y(a) &= \alpha + \tilde{\alpha} \end{aligned} \tag{2.2}$$

tem solução única $\tilde{y}(x)$ que verifica

$$|y(x) - \tilde{y}(x)| < \epsilon,\ x \in [a,b].$$

Um problema que não é bem posto diz-se mal posto.

■

O problema (2.2) é designado *problema perturbado* do problema (2.1). O conceito de problema bem posto é importante atendendo a que, em geral, as condições iniciais são obtidas por medição e portanto sujeitas a erros. Logo o problema resolvido é, em geral, o problema perturbado e a solução obtida deve ser uma pequena perturbação da solução do problema inicial.

Podemos averiguar se um dado problema é ou não bem posto usando a definição dada anteriormente. No entanto uma forma mais simples é dada pelo resultados seguintes.

Teorema 2.1 *Sejam $y(x)$ e $\tilde{y}(x)$ respectivamente as soluções dos problemas (2.1) e (2.2). Se $\delta(x)$ é contínua e limitada em $[a,b]$ e a função f do problema (2.1) tem derivada parcial em relação a y contínua em $[a,b]\times\mathbb{R}$ então $y(x)-\tilde{y}(x)$ é dada por*

$$y(x)-\tilde{y}(x)=e^{\int_a^x \frac{\partial f}{\partial y}dt}\left[-\int_a^x \delta(\sigma)e^{-\int_a^\sigma \frac{\partial f}{\partial y}d\mu}\,d\sigma-\tilde{\alpha}\right],\ x\in[a,b]. \tag{2.3}$$

Demonstração: Atendendo a que $y(x)$ é solução do problema inicial e $\tilde{y}(x)$ é solução do problema perturbado então $y(x)-\tilde{y}(x)$ é solução da equação diferencial

$$[y(x)-\tilde{y}(x)]'=\frac{\partial f}{\partial y}(x,\bar{y}(x))[y(x)-\tilde{y}(x)]-\delta(x)$$

com a condição inicial

$$y(a)-\tilde{y}(a)=-\tilde{\alpha},$$

em que $\bar{y}(x)$ pertence ao intervalo definido por $y(x)$ e $\tilde{y}(x)$. Integrando a equação diferencial anterior obtemos

$$y(x)-\tilde{y}(x)=e^{\int_a^x \frac{\partial f}{\partial y}dt}\left[-\int_a^x \delta(\sigma)e^{-\int_a^\sigma \frac{\partial f}{\partial y}d\mu}\,d\sigma-\tilde{\alpha}\right].$$

■

Corolário 2.2 *Se f tem derivada parcial em relação a y contínua e limitada em $[a,b]\times\mathbb{R}$ então o problema (2.1) é bem posto.*

Demonstração: Não provamos a existência de solução. No entanto, relativamente às perturbações, a prova é imediata atendendo a (2.3) e às condições exigidas a f.

■

Notemos que relativamente a um problema com condição inicial bem posto, por ser $\dfrac{\partial f}{\partial y}$ limitada, nem sempre se pode concluir que a uma pequena perturbação na condição inicial corresponda uma pequena perturbação na solução.

No entanto para $\delta(x) = 0, x \in [a,b]$, atendendo a (2.3), é fácil concluir que se $\dfrac{\partial f}{\partial y}$ é negativa então o problema (2.1) é *bem condicionado*, isto é, pequenas perturbações na condição inicial implicam pequenas variações na solução. Se a derivada anterior é negativa e é grande em valor absoluto, então o problema (2.1), apesar de bem condicionado, é problemático para a maioria dos métodos numéricos. As equações com esta última propriedade - $\dfrac{\partial f}{\partial y}$ negativo e com módulo grande - são chamadas *equações "stiff"*.

Se a derivada parcial de f em relação a y, embora limitada, é positiva então o problema pode ser mal condicionado. O exemplo seguinte ilustra esta situação.

Exemplo: Considerar o problema de condição inicial

$$y'(x) = 100y - 101e^{-x}, x \in [0,3],$$

com a condição inicial

1. $y(0) = 1$
2. $y(0) = 1 + \tilde{\alpha}$.

Compare as soluções dos dois problemas tomando para $\tilde{\alpha} = 10^{-130}$.

A solução do primeiro problema é $y(x) = e^{-x}, x \in [0,3]$, sendo a solução do problema perturbado $\tilde{y}(x) = e^{-x} + \tilde{\alpha}e^{100x}$, $x \in [0,3]$. A figura 1a ilustra o comportamento da solução do primeiro problema enquanto que na figura 1b ilustramos o comportamento da solução do problema perturbado para $\tilde{\alpha} = 10^{-130}$.

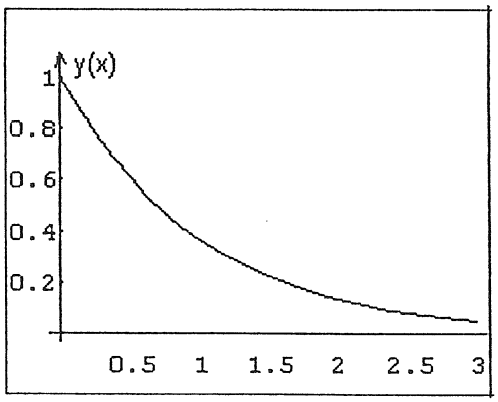

Figura 1 a

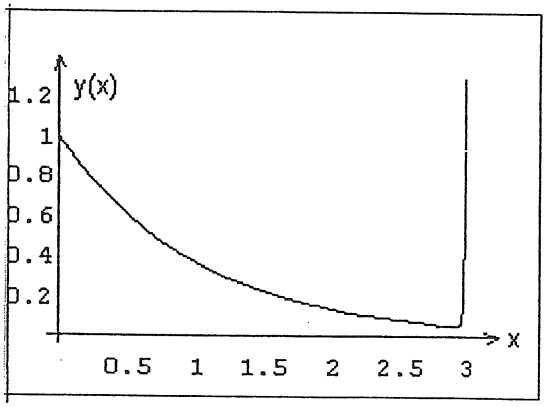

Figura 1 b

Conforme se conclui do exemplo anterior, a uma pequena variação da condição inicial corresponde uma grande variação da solução. Tal facto é traduzido dizendo que o problema é *mal condicionado.*

■

2.2 Métodos numéricos

Nos métodos que iremos estudar para determinar a solução aproximada de (2.1) iremos considerar em $[a,b]$ a partição

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$$

em que $x_i - x_{i-1} = h = (b-a)/n, i = 1, \ldots, n.$

2.2.1 Métodos de Taylor

Suponhamos que a solução $y(x)$ do problema com condição inicial (2.1) tem derivada de ordem $p+1$ em (a,b). Considerando a fórmula de Taylor para $y(x_{i+1}) = y(x_i + h)$ vem

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_i) + \ldots + \frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x_i) \\ &+ \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(\eta_i),\ \eta_i \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned}$$

Atendendo a que $y(x)$ é solução do problema (2.1), temos

$$\begin{aligned} &y'(x) = f(x, y(x)), \\ &y''(x) = \frac{d}{dx}f(x, y(x)) = f'(x, y(x)), \\ &\ldots, \\ &y^{(k)}(x) = \frac{d^{k-1}}{dx^{k-1}}f(x, y(x)) = f^{(k-1)}(x, y(x)), \end{aligned}$$

e portanto, vem

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + hf(x_i, y(x_i)) + \frac{h^2}{2}f'(x_i, y(x_i)) + \frac{h^3}{3!}f''(x_i, y(x_i)) + \ldots \\ &+ \frac{h^p}{p!}f^{(p-1)}(x_i, y(x_i)) + \frac{h^{p+1}}{(p+1)!}f^{(p)}(\xi_i, y(\xi_i)),\ \xi_i \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned} \tag{2.4}$$

Suprimindo o último termo da igualdade anterior e denotando por y_i a aproximação para $y(x_i)$, obtemos

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) + \frac{h^2}{2}f'(x_i, y_i) + \frac{h^3}{3!}f''(x_i, y_i) + \ldots + \frac{h^p}{p!}f^{(p-1)}(x_i, y_i),\ i = 0, \ldots, n-1. \tag{2.5}$$

A partir desta equação podemos determinar y_i, ou seja, aproximações para a solução de (2.1), nos pontos x_i considerados em $[a, b]$. Assim, atendendo a que $y_0 = \alpha$, é conhecido, podemos determinar $f^{(k)}(x_0, y_0)$ e então, de (2.5), com $i = 0$ determinamos y_1. Uma vez obtido este valor, fazendo em (2.5), $i = 1$ obtemos y_2 e assim sucessivamente. Deduzimos deste modo um processo que permite calcular y_i a partir apenas de y_{i-1} para $i = 1, \ldots, n$. Os métodos numéricos em que y_{i+1} depende apenas de y_i são chamados *método de um passo.* O método numérico traduzido pela equação (2.5) é chamado *método de Taylor de ordem p.*

Por exemplo, se considerarmos, em (2.5), $p = 2$, obteríamos

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i) + \frac{h^2}{2}(f_x(x_i, y_i) + f(x_i, y_i)f_y(x_i, y_i)), i = 0, 1, \ldots, n-1, y_0 = \alpha,$$

que é conhecido por *método de Taylor de ordem 2.*

Se tivessemos considerado a fórmula de Taylor para $y(x_i)$ em torno de x_{i+1} obteríamos, em vez de (2.4) e (2.5), respectivamente

$$\begin{aligned} y(x_i) &= y(x_{i+1}) - hf(x_{i+1}, y(x_{i+1})) + \frac{h^2}{2}f'(x_{i+1}, y(x_{i+1})) - \frac{h^3}{3!}f''(x_{i+1}, y(x_{i+1})) + \ldots \\ &+ (-1)^p\frac{h^p}{p!}f^{(p-1)}(x_{i+1}, y(x_{i+1})) + (-1)^{p+1}\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}f^{(p)}(\eta_i, y(\eta_i)),\ \eta_i \in (x_i, x_{i+1}), \end{aligned} \tag{2.6}$$

e

$$\begin{aligned} y_i &= y_{i+1} - hf(x_{i+1}, y_{i+1}) + \frac{h^2}{2}f'(x_{i+1}, y_{i+1}) - \frac{h^3}{3!}f''(x_{i+1}, y_{i+1}) + \ldots \\ &+ (-1)^p\frac{h^p}{p!}f^{(p-1)}(x_{i+1}, y_{i+1}),\ i = 0, \ldots, n-1. \end{aligned} \tag{2.7}$$

O método de Taylor embora permita obter, em muitos casos, "bons" resultados exige o cálculo das derivadas parciais de f, eventualmente de ordem elevada, e consequentemente impõe bastante regularidade àquela função. Este facto reduz a aplicabilidade do método. Observamos ainda que os métodos de Taylor, não sendo geralmente aplicados isoladamente, são uteis para a determinação de valores iniciais necessários à aplicação de outros métodos numéricos.

2.2.2 Métodos de Euler

Considerando, em (2.5), $p = 1$ obtemos

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i),\ i = 0, \ldots, n-1, \tag{2.8}$$

em que $y_0 = y(a) = \alpha$. O método traduzido pela equação anterior é chamado *método de Euler explícito.* A utilização do termo *explícito* caracteriza o facto de y_{i+1} depender apenas de y_i na equação do método. Notemos ainda que (2.8) foi obtida de (2.4) suprimindo o termo

$$T_{i+1} = \frac{h^2}{2} f'(\xi_i, y(\xi_i)) = \frac{h^2}{2} y''(\xi_i),\ \xi_i \in (x_i, x_{i+1}). \tag{2.9}$$

Exemplo: Considerar o problema com condição inicial

$$\begin{aligned} y' &= xy,\ x \in [0,1] \\ y(0) &= 1. \end{aligned}$$

Determinar uma aproximação para a solução do problema utilizando o método de Euler explícito.

1. Consideremos $h = \frac{1}{2}$. Obtemos

   (a) $y_1 = y_0 + hx_0y_0 = y_0(1 + hx_0) = 1$

   (b) $y_2 = y_1(1 + hx_1) = \frac{5}{4}$.

2. Os resultados da integração, para $h = 0.1$, encontram-se na figura 2 onde usámos interpolação linear para "unir" os pontos que determinam a solução aproximada. Na figura incluímos o esboço do gráfico da solução exacta $y(x) = e^{x^2/2}$, $x \in [0,1]$.

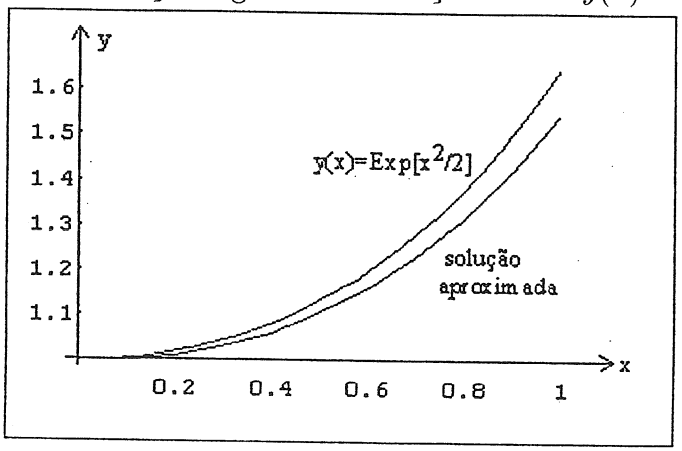

Figura 2

3. Para outros valores de h calculámos o valor da solução em $x = 1$ e determinámos o erro. Os resultados obtidos encontram-se na tabela seguinte.

h	Aproximação	|erro|
$\frac{1}{5}$	1.4593	0.189
$\frac{1}{10}$	1.5471	0.102
$\frac{1}{20}$	1.5959	0.053
$\frac{1}{40}$	1.6218	0.027

Conforme se pode concluir, para este problema, à medida que h diminui o erro também diminui.

■

Considerando agora, em (2.7), $p = 1$, obtemos

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), i = 0, \ldots, n-1, \tag{2.10}$$

com $y_0 = y(a) = \alpha$. O método traduzido pela última equação é chamado *método de Euler implícito*. Recordamos que este método foi obtido de (2.6) suprimindo o termo

$$T_{i+1} = \frac{h^2}{2} f'(\eta_i, y(\eta_i)) = \frac{h^2}{2} y''(\eta_i), \ \eta_i \in (x_i, x_{i+1}). \tag{2.11}$$

A equação (2.10) permite obter a solução aproximada do problema (2.1). No entanto, quando f é não linear em y, o cálculo da solução, utilizando este método, exige um maior esforço computacional do que o exigido pelo método de Euler explícito. De facto, para determinar y_{i+1} teremos de resolver a equação não linear (2.10). Usando, por exemplo o método do ponto fixo, podemos gerar uma sucessão de aproximações $(y_{i+1}^{(s)})$ para y_{i+1} definida por

$$y_{i+1}^{(s+1)} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}^{(s)}), s = 0, 1, \ldots,$$

em que $y_{i+1}^{(0)}$ pode ser tomado igual a y_i. Esta sucessão de aproximações é, sob determinadas condições, convergente para y_{i+1} se a medida do passo h satisfizer

$$h|\frac{\partial f}{\partial y}| < 1. \tag{2.12}$$

Se $|\frac{\partial f}{\partial y}| \leq L$ para $(x, y) \in [a, b] \times \mathbb{R}$, então a condição (2.12) é válida se

$$h \leq \frac{1}{L}. \tag{2.13}$$

Assim, o método do ponto fixo poderá ser convergente apenas para valores de h satisfazendo (2.13). A restrição imposta à medida do passo pode ser "severa" e sê-lo-á no caso de $\frac{\partial f}{\partial y}$ ser grande em valor absoluto.

A partir dos dois métodos de Euler (2.8) e (2.10) obtidos anteriormente, podemos deduzir outro método. De facto, somando membro a membro as equações referidas obtemos

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})], i = 0, \ldots, n-1, \tag{2.14}$$

com $y_0 = \alpha$. O método traduzido pela equação (2.14) é chamado *método dos trapézios.* Atendendo a que se trata de um método implícito, este método exige um esforço computacional maior do que o exigido pelo método de Euler explícito.

Exemplo: Determinar, utilizando o método dos trapézios e as medidas de passo consideradas no exemplo anterior, a solução aproximada do problema com condição inicial apresentado naquele exemplo.

Na tabela seguinte são apresentados os valores calculados utilizando o método dos trapézios apenas em $x = 1$ bem como o erro.

h	Aproximação	|erro|
$\frac{1}{5}$	1.6585	9×10^{-3}
$\frac{1}{10}$	1.6511	2×10^{-3}
$\frac{1}{20}$	1.6493	6×10^{-4}
$\frac{1}{40}$	1.6489	2×10^{-4}

■

Os métodos de Taylor, Euler (explícito e implícito) bem como o método dos trapézios são métodos de um passo. Tal designação é devida ao facto de apenas figurar no cálculo de y_{i+1} um único valor de y.

2.2.3 Métodos de Runge - Kutta

Consideremos o método de Taylor de ordem 2. Neste método, o termo

$$f(x_i, y_i) + \frac{h}{2}(f_x(x_i, y_i) + f(x_i, y_i) f_y(x_i, y_i)) \tag{2.15}$$

é responsável pelo grande esforço computacional necessário aquando da aplicação do método. Tal esforço será menor se o referido termo for substituído por $\bar{b} f(x_i + \bar{c}, y_i + \bar{a})$ para $\bar{b}, \bar{c}$ e $\bar{a}$ adequados. Vejamos seguidamente como determinar estes valores.

Pela fórmula de Taylor temos

$$\bar{b} f(x + \bar{c}, y + \bar{a}) = \bar{b} f(x, y) + \bar{b}\bar{c} f_x(x, y) + \bar{b}\bar{a} f_y(x, y) + \bar{b}\bar{c}\bar{a} f_{xy} + \frac{1}{2}\bar{b}\bar{c}^2 f_{xx} + \frac{1}{2}\bar{a}^2 \bar{b} f_{yy},$$

em que as derivadas parciais de segunda ordem são calculadas em pontos apropriados. Da igualdade anterior vem

$$\bar{b} f(x, y) + \bar{b}\bar{c} f_x(x, y) + \bar{b}\bar{a} f_y(x, y) = \bar{b} f(x + \bar{c}, y + \bar{a}) - \bar{b}\bar{c}\bar{a} f_{xy} - \frac{1}{2}\bar{b}\bar{c}^2 f_{xx} - \frac{1}{2}\bar{b}\bar{a}^2 f_{yy}. \tag{2.16}$$

Fazendo $x = x_i$ e $y = y(x_i)$ em (2.15) e (2.16) e conjungando as expressões obtidas depois de tomar

$$\bar{b} = 1, \ \bar{b}\bar{c} = \frac{h}{2}, \ \bar{b}\bar{a} = \frac{h}{2} f(x_i, y(x_i))$$

obtemos

$$\begin{aligned} f(x_i, y(x_i)) \ &+ \ \frac{h}{2}[f_x(x_i, y(x_i)) + f(x_i, y(x_i)) f_y(x_i, y(x_i))] \\ &= \ f\left(x_i + \frac{h}{2}, y(x_i) + \frac{h}{2} f(x_i, y(x_i))\right) - h^2 R_1 \end{aligned} \tag{2.17}$$

com

$$R_1 = \frac{1}{4} f f_{xy} + \frac{1}{8} f_{xx} + \frac{1}{8} f^2 f_{yy}$$

em que a função f as suas derivadas parciais estão calculadas em pontos apropriados.

Considerando a igualdade (2.4) e atendendo a (2.17) obtemos

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) \ &= \ y(x_i) + h f\left(x_i + \frac{h}{2}, y(x_i) + \frac{h}{2} f(x_i, y(x_i))\right) \\ &+ \ \frac{h^3}{6} y'''(\eta_i) - h^3 R_1, \ \ \eta_i \in (x_i, x_{i+1}). \end{aligned}$$

Suprimindo na última igualdade

$$T = \frac{h^3}{6} y'''(\eta_i) - h^3 R_1, \ \ \eta_i \in (x_i, x_{i+1}), \tag{2.18}$$

obtemos

$$y_{i+1} = y_i + hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}f(x_i, y_i)\right), \ i = 0, \ldots, n-1. \tag{2.19}$$

O método traduzido pela equação anterior é chamado *método de Runge - Kutta de ordem 2.*

Procedendo deste modo eliminámos, no método de Taylor de ordem 2, as derivadas parciais de f e obtivémos um método explícito em que necessitamos apenas de calcular f em 2 pontos distintos. Procedendo de modo análogo ao anterior, é possível deduzir métodos envolvendo apenas f em s pontos. Para definir tais métodos, sejam

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + c_2 h, y_i + a_{2,1} h k_1)$$

$$k_3 = f(x_i + c_3 h, y_i + a_{3,1} h k_1 + a_{3,2} h k_2)$$

$$k_4 = f(x_i + c_4 h, y_i + a_{4,1} h k_1 + a_{4,2} h k_2 + a_{4,3} h k_3)$$

$$\ldots$$

$$k_s = f(x_i + c_s h, y_i + a_{s,1} h k_1 + a_{s,2} h k_2 + \ldots + a_{s,s-1} h k_{s-1}).$$

Então, a equação

$$y_{i+1} = y_i + h\left(b_1 k_1 + b_2 k_2 + \ldots + b_s k_s\right), \ i = 0, \ldots, n-1, \tag{2.20}$$

com $y_0 = \alpha$ traduz o chamado *método de Runge - Kutta com s etapas.*

Podemos associar ao método anterior a seguinte tabela

$$\begin{array}{c|cccccc}
0 & & & & & & \\
c_2 & a_{2,1} & & & & & \\
c_3 & a_{3,1} & a_{3,2} & & & & \\
c_4 & a_{4,1} & a_{4,2} & a_{4,3} & & & \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & & \\
c_s & a_{s,1} & a_{s,2} & a_{s,3} & \ldots & a_{s,s-1} & \\
\hline
 & b_1 & b_2 & b_3 & \ldots & b_{s-1} & b_s
\end{array}$$

Esta tabela é chamada *tabela de Butcher.*

Consideremos o método de Runge - Kutta (2.19). Este método é representado pela seguinte tabela de Butcher

$$\begin{array}{c|cc}
0 & & \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \\
\hline
 & 0 & 1
\end{array}$$

Exemplo: Determinar a tabela de Butcher do método de Runge - Kutta de quarta ordem

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i \\ &+ h[\frac{1}{6}f(x_i,y_i) + \frac{1}{3}f(x_i+\frac{h}{2}, y_i+\frac{h}{2}f(x_i,y_i)) \\ &+ \frac{1}{3}f\left(x_i+\frac{h}{2}, y_i+\frac{h}{2}f\left(x_i+\frac{h}{2}, y_i+\frac{h}{2}f\left(x_i,y_i\right)\right)\right) \\ &+ \frac{1}{6}f\left(x_i+h, y_i+hf\left(x_i+\frac{h}{2}, y_i+\frac{h}{2}f\left(x_i+\frac{h}{2}, y_i+\frac{h}{2}f\left(x_i,y_i\right)\right)\right)\right)]. \end{aligned}$$

Sejam

$$k_1 = f(x_i, y_i),$$

$$k_2 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_1),$$

$$k_3 = f(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hk_2),$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3).$$

Então o método de Runge - Kutta de quarta ordem é reescrito na forma

$$y_{i+1} = y_i + h\left(\frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4\right) \; i = 0, \ldots, n-1,$$

que tem associada a seguinte tabela de Butcher

$$\begin{array}{c|cccc} 0 & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ 1 & 0 & 0 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{6} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{6} \end{array}$$

■

Exemplo: Considerar o método de Runge-Kutta que tem o seguinte quadro de Butcher

$$\begin{array}{c|cc} 0 & & \\ 1 & 1 & \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

Determinar a solução aproximada do problema com condição inicial

$$\begin{aligned} y' &= y - x,\ x \in [0,1] \\ y(0) &= 2 \end{aligned}$$

em $x = 1$ utilizando o método representado pela forma anterior e com $h = \frac{1}{2}$.

O método de Runge - Kutta associado ao quadro de Butcher dado é

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2), i = 0, \ldots, n-1$$

com

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + h, y_i + hk_1).$$

Com $h = \frac{1}{2}$ temos $x_0 = 0, x_1 = \frac{1}{2}$ e $x_2 = 1$. Então vem

1. $i = 0$

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + \tfrac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 &= f(x_0, y_0) = 2 \\ k_2 &= f(x_0 + h, y_0 + hk_1) = \tfrac{5}{2} \\ y_1 &= \tfrac{25}{8}. \end{aligned}$$

2. $i = 1$

$$\begin{aligned} y_2 &= y_1 + \tfrac{h}{2}(k_1 + k_2) \\ k_1 &= f(x_1, y_1) = \tfrac{21}{8} \\ k_2 &= f(x_1 + h, y_1 + hk_1) = \tfrac{55}{16} \\ y_2 &= \tfrac{297}{64}. \end{aligned}$$

Notemos que a solução do problema dado é $y(x) = e^x + x + 1, x \in [0,1]$. Para outros valores de h obtivemos os resultados que figuram na seguinte tabela.

h	Aproximação	$\lvert erro \rvert$
$\frac{1}{10}$	4.7141	0.0042
$\frac{1}{20}$	4.7172	0.0011
$\frac{1}{100}$	4.7182	0.0001

■

2.3 Convergência

Os métodos explícitos de um passo podem ser escritos na forma geral

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(h, x_i, y_i), i = 0, \ldots, n-1,\ y_0 = y(a). \tag{2.21}$$

De facto, por exemplo no método de Euler explícito temos

$$\phi(h, x, y) = f(x, y),$$

e no método de Taylor de ordem 2 temos

$$\phi(h, x, y) = f(x, y) + \frac{h}{2}(f_x(x, y) + f(x, y)f_y(x, y)).$$

Consideremos então o método de um passo explícito (2.21), para determinar uma aproximação para a solução $y(x)$ de (2.1), reescrito na forma

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \phi(h, x_i, y_i) = 0,\ i = 0, \ldots, n-1,\ y_0 = \alpha. \tag{2.22}$$

Substituindo na equação anterior, a solução aproximada em x_i, y_i, pela solução do problema (2.1), $y(x_i)$, e considerando em seguida a fórmula de Taylor, vem

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \phi(h, x_i, y(x_i)) = y'(x_i) + \frac{h}{2}y''(x_i) + \ldots - \phi(h, x_i, y(x_i)) \tag{2.23}$$

Especifiquemos para alguns métodos o segundo membro de (2.23). Por exemplo, para os métodos de Euler e de Taylor de ordem 2, de acordo com o apresentado anteriormente, temos respectivamente,

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \phi(h, x_i, y(x_i)) = \frac{h}{2}y''(\eta_i), \eta_i \in (x_i, x_{i+1}), \tag{2.24}$$

e

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \phi(h, x_i, y(x_i)) = \frac{h^2}{3!}y'''(\eta_i),\ \eta_i \in (x_i, x_{i+1}). \tag{2.25}$$

Quando $h \to 0$ os segundos membros de (2.24) e (2.25) tendem, sob certas condições de regularidade de y, para zero e, portanto, as expressões encontradas "medem a distância a que o método está de zero" quando se considera na equação deste a solução do problema inicial. Torna-se então útil introduzir o seguinte conceito.

Definição 2.2 *Consideremos o método de um passo*

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(h, x_i, y_i), i = 0, \ldots, n-1,\ y_0 = \alpha,$$

e o problema com condição inicial (2.1) de solução $y(x)$. A

$$T_{i+1} = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \phi(h, x_i, y(x_i))$$

chamamos erro de truncatura do método em x_{i+1}. Se, para $i = 0, \ldots, n-1$, T_{i+1} converge para zero quando $h \to 0$, então o método diz-se consistente com o problema (2.1). O método diz-se de ordem $p > 0$ se existe $C > 0$ tal que

$$|T_{i+1}| \leq Ch^p, i = 0, \ldots, n-1.$$

■

Determinamos seguidamente o erro de truncatura de alguns métodos já considerados. Por exemplo, como já vimos, para o método de Euler explícito temos

$$T_{i+1} = \frac{h}{2} y''(\eta_i), \eta_i \in (x_i, x_{i+1}), i = 0, \ldots, n-1,$$

e para o método de Taylor de ordem 2

$$T_{i+1} = \frac{h^2}{6} y'''(\eta_i), \ \eta_i \in (x_i, x_{i+1}), \ i = 0, \ldots, n-1.$$

Determinemos agora a ordem destes dois métodos. Para o método de Euler, com

$$C = \frac{1}{2} \max_{x \in [a,b]} |y''(x)|,$$

vem

$$|T_{i+1}| \leq Ch, i = 0, \ldots, n-1,$$

donde este método tem ordem 1.

De modo idêntico, para o método de Taylor, com

$$C = \frac{1}{6} \max_{x \in [a,b]} |y'''(x)|,$$

vem

$$|T_{i+1}| \leq Ch^2, i = 0, \ldots, n-1,$$

donde este método tem ordem 2.

Exemplo: Determinar o erro de truncatura do método de Runge - Kutta de ordem 2.

Usando (2.19) podemos escrever o método do seguinte modo

$$\frac{y_{i+1}-y_i}{h} = f(x_i+\frac{h}{2}, y_i+\frac{h}{2}f(x_i,y_i)).$$

Substituindo, em f, a solução aproximada por $y(x_i)$ e utilizando a fórmula de Taylor temos

$$\begin{aligned} f(x_i+\frac{h}{2},\ & y(x_i)+\frac{h}{2}f(x_i,y(x_i)) = f(x_i,y(x_i)) \\ & +\frac{h}{2}[f_x(x_i,y(x_i))+f_y(x_i,y(x_i))f(x_i,y(x_i))] \\ & +h^2\,[\frac{1}{8}f_{xx}(\xi_{i,1},y(x_i)+\frac{h}{2}f(x_i,y(x_i)))+\frac{1}{4}f_{xy}(x_i,\eta_{i,1})f(x_i,y(x_i)) \\ & +\frac{1}{8}f_{yy}(x_i,\eta_{i,2})f^2(x_i,y(x_i))\,] \end{aligned}$$

com $\xi_{i,1} \in (x_i, x_{i+1})$ e $\eta_{i,1}$, $\eta_{i,2}$ a pertencerem ao intervalo aberto definido por $y(x_i)$ e $y(x_i)+\frac{h}{2}f(x_i,y(x_i))$. Atendendo a que

$$\frac{y(x_{i+1})-y(x_i)}{h} = y'(x_i)+\frac{h}{2}y''(x_i)+\frac{h^2}{6}y'''(\xi_{i,2}),\ \xi_{i,2}\in(x_i,x_{i+1}),$$

é fácil concluir que

$$\begin{aligned} T_{i+1} \;=\; & h^2\,[\frac{1}{6}y'''(\xi_{i,2})-\frac{1}{8}f_{xx}(\xi_i,y(x_i)+\frac{h}{2}f(x_i,y(x_i))) \\ & -\frac{1}{4}f_{xy}(x_i,\eta_{i,1})f(x_i,y(x_i))-\frac{1}{8}f_{yy}(x_i,\eta_{i,2})f^2(x_i,y(x_i))\,]. \end{aligned}$$

■

Ao aplicarmos um método de um passo, para aproximar a solução $y(x)$ do problema diferencial com condição inicial (2.1), obtemos um conjunto de valores $y_i, i=1,\ldots,n$. Interessa garantir que quando $h \to 0$ então a diferença $|y(x_i)-y_i|$ também converge para zero.

Definição 2.3 *Consideremos o método explícito de um passo*

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(h,x_i,y_i), i=0,\ldots,n-1, y_0=\alpha$$

na determinação de uma aproximação para a solução do problema com condição inicial (2.1). A $e(x_i)=y(x_i)-y_i$ chamamos erro da aproximação y_i. Se

$$\max_{i=1,\ldots,n}|y(x_i)-y_i| \to 0$$

quando $h \to 0$, então o método diz-se convergente.

No teorema que se segue é estabelecida uma condição suficiente para a convergência dos métodos explícitos de um passo e ainda uma estimativa para o erro $e(x_i)$.

Teorema 2.3 *Suponhamos que o método de um passo*

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(h, x_i, y_i), i = 0, \ldots, n-1, y_0 = \alpha$$

é consistente com o problema com condição inicial (2.1) e tem erro de truncatura de ordem p, $|T_{i+1}| \leq Ch^p, i = 0, \ldots, n-1, p \geq 1$. *Se a função* $\phi(h, x, y)$ *é de Lipschitz*[10] *relativamente a y em* $[a, b] \times \mathbb{R}$ *com constante L, então*

$$|e(x_i)| \leq \frac{C}{L} h^p [e^{L(x_i - a)} - 1], i = 1, \ldots, n,$$

e o método é convergente.

Demonstração: Atendendo à definição de $e(x_i)$ obtemos a seguinte equação

$$e(x_{i+1}) = e(x_i) + h\left[\phi(h, x_i, y(x_i)) - \phi(h, x_i, y_i)\right] + hT_{i+1}, i = 0, \ldots, n-1.$$

Uma vez que a função ϕ é de Lipschitz vem ainda

$$\begin{aligned} |e(x_{i+1})| &\leq (1 + hL)|e(x_i)| + h|T_{i+1}| \\ &\leq (1 + hL)|e(x_i)| + Ch^{p+1} \end{aligned}$$

e portanto, atendendo a que $e(x_0) = 0$, obtemos

$$|e(x_{i+1})| \leq Ch^{p+1} \sum_{j=0}^{i} (1 + hL)^j = Ch^{p+1} \frac{1 - (1 + hL)^{i+1}}{1 - (1 + hL)} \leq \frac{Ch^p}{L} [e^{(i+1)hL} - 1].$$

A estimativa pretendida é obtida atendendo a que $x_{i+1} = a + (i + 1)h$.

Quanto à convergência do método, ela é estabelecida tomando na desigualdade anterior $h \to 0$.

■

Para concluir que um método da forma (2.21) é convergente basta verificar, atendendo ao resultado anterior, que o método é consistente e que ϕ é uma função de

[10] Uma função $g(x_1, \ldots, x_m)$ diz-se de Lipschitz num conjunto D relativamente a uma variável x_j se existe uma constante positiva L a que chamamos constante de Lipschitz, tal que

$$|g(x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_m) - g(x_1, \ldots, \bar{x}_j, \ldots, x_m)| \leq L|x_j - \bar{x}_j|, \forall (x_1, \ldots, x_j, \ldots, x_m), (x_1, \ldots, \bar{x}_j, \ldots, x_m) \in D.$$

Lipschitz relativamente a y. Observamos ainda que se $\phi(h,x,y)$ tem derivada parcial, relativamente a y, limitada no conjunto $[a,b] \times \mathbb{R}$, - isto é, existe $M > 0$ tal que $|\frac{\partial \phi}{\partial y}| \leq M$ - então esta função é de Lipschitz, relativamente a y, naquele conjunto e podemos tomar M para constante de Lipschitz.

Exemplo: Mostrar que se a função f, do problema (2.1), é de Lipschitz relativamente a y em $[a,b] \times \mathbb{R}$ com constante L, então o método de Euler explícito é convergente.

1. Se f é de Lipschitz relativamente a y então a função ϕ do método de Euler também é de Lipschitz.

2. Provámos que o método é consistente e tem ordem 1.

Atendendo ao teorema anterior o método é convergente.

Podemos ainda, usando o mesmo teorema, obter

$$|e(x_i)| \leq \frac{C}{L} h[e^{L(x_i-a)} - 1], i = 1, \ldots, n,$$

onde $C = \frac{1}{2} \max_{x \in [a,b]} |y''(x)|$.

■

Exemplo: Considerar o problema com condição inicial

$$\begin{aligned} y'(x) &= 1 + 2y(x), \ x \in [0,1], \\ y(0) &= 0 \end{aligned}$$

cuja solução é $y(x) = \frac{1}{2}(e^{2x} - 1), x \in [0,1]$.

Determinar, usando o método de Euler explícito e $h = \frac{1}{2}$,

1. uma aproximação para $y(1)$,

2. o erro da aproximação obtida,

3. uma estimativa para o erro.

1. $y_1 = y_0 + \frac{1}{2}(1 + 2y_0) = \frac{1}{2}$,

   $y_2 = y_1 + \frac{1}{2}(1 + 2y_1) = \frac{3}{2}$.

2. $|e(1)| = |y(1) - y_2| = |\frac{1}{2}e^2 - 2| \simeq 1.69.$

3. Atendendo a que $\max_{x\in[0,1]} |y''(x)| = 2e^2$, vem $C = e^2$. Por outro lado $L = 2$. Usando o teorema 2.3, obtemos a seguinte estimativa

$$|e(1)| \leq \frac{e^2}{4}(e^2 - 1) \simeq 11.802.$$

A figura seguinte ilustra o comportamento da solução exacta e da solução aproximada obtida com $h = 0.1$, bem como o esboço de $y(x) + e(x)$, $y(x) - e(x), x \in [0, 1]$, onde

$$e(x) = \frac{e^2}{20}[e^{2x} - 1], x \in [0, 1].$$

O gráfico da solução aproximada foi obtido considerando interpolação linear segmentada.

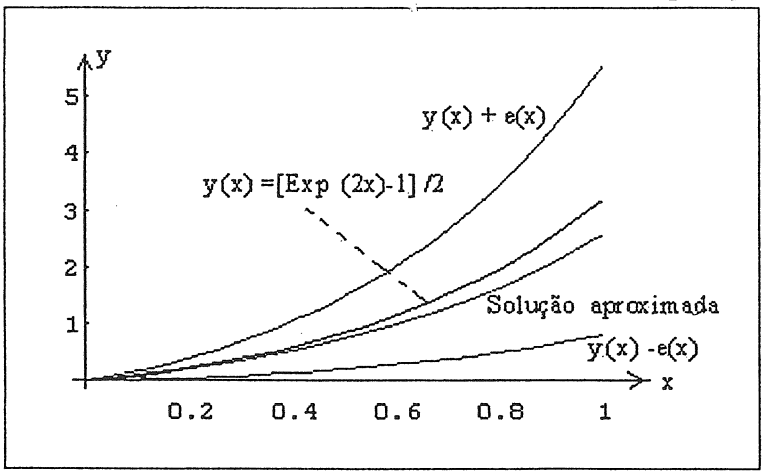

Figura 3

Finalmente, para outros valores de h, elaboramos a tabela seguinte.

h	Aproximação	|Erro|	Estimativa
$\frac{1}{2}$	1.5	1.69453	11.802
$\frac{1}{10}$	2.59587	0.59866	2.3605
$\frac{1}{20}$	2.86375	0.33078	1.1802
$\frac{1}{40}$	3.01999	0.17453	0.5901
$\frac{1}{100}$	3.12232	0.0722	0.2361

Dos valores apresentados concluímos que à medida que h diminui também diminuem o erro e a sua estimativa.

■

Exemplo: Mostrar que se f tem derivadas parciais de primeira e segunda ordens limitadas por uma constante L em $[a,b] \times \mathbb{R}$, então o método de Taylor de ordem 2 é convergente.

1. Atendendo a que para o método em questão se tem

$$\phi(h,x,y) = f(x,y) + \frac{h}{2}[f_x(x,y) + f(x,y)f_y(x,y)]$$

e que f tem derivadas parciais limitadas por L, é fácil verificar que

$$|\phi(h,x,y_1) - \phi(h,x,y_2)| \leq \left(L + \frac{h_0}{2}(L + 2L^2)\right)|y_1 - y_2| = \bar{L}|y_1 - y_2|,$$

para $h \in (0,h_0)$, $x \in [a,b]$ e $y \in \mathbb{R}$, e portanto ϕ é de Lipschitz.

2. Provámos que o método é consistente e tem ordem 2.

Logo, pelo teorema 2.3, o método de Taylor de ordem 2 é convergente.
Podemos ainda, usando o mesmo teorema concluir

$$|e(x_i)| \leq \frac{C}{\bar{L}}h^2[e^{\bar{L}(x_i-a)} - 1], \ i = 1,\ldots,n.$$

onde $C = \frac{1}{6}\max_{x\in[a,b]}|y'''(x)|$. ■

Exemplo: Mostrar que se f do problema com condição (2.1) é de Lipschitz com constante L e tem derivadas parciais de segunda ordem limitadas em $[a,b] \times \mathbb{R}$, então o método de Runge - Kutta de ordem 2 é convergente.

1. A função ϕ do método de Runge - Kutta de ordem 2 é, como vimos anteriormente, definida por

$$\phi(h,x,y) = f(x + \frac{h}{2}, y + \frac{h}{2}f(x,y)),$$

para $(h,x,y) \in (0,h_0)\times[a,b]\times\mathbb{R}$. Atendendo a que f é de Lipschitz relativamente a y então também ϕ é de Lipschitz relativamente a y no conjunto $(0,h_0)\times[a,b]\times\mathbb{R}$ com constante de Lipschitz $L + \frac{h_0}{2}L = \bar{L}$.

2. Mais ainda, também provámos que se f tem derivadas parciais de segunda ordem em $[a,b] \times \mathbb{R}$, então o erro de truncatura do método anterior tem a seguinte expressão

$$\begin{aligned} T_{i+1} &= h^2 \,[\frac{1}{6}y'''(\xi_{i,2}) - \frac{1}{8}f_{xx}(\xi_{i,1}, y(x_i) + \frac{h}{2}f(x_i, y(x_i))) \\ &\quad - \frac{1}{4}f_{xy}(x_i, \eta_{i,1})f(x_i, y(x_i)) - \frac{1}{8}f_{yy}(x_i, \eta_{i,2})f^2(x_i, y(x_i))\,]. \end{aligned}$$

Logo, se as derivadas parciais são limitadas, pelo teorema anterior o método é convergente e o erro verifica

$$|e(x_i)| \leq \frac{C}{L}h^2[e^{L(x_i-a)} - 1], i = 1, \ldots, n.$$

■

Observação: Embora se tenha definido erro de truncatura para métodos explícitos, este conceito é ainda válido para métodos implícitos. Assim, se o método implícito é da forma

$$y_{i+1} = y_i + h\phi(h, x_{i+1}, y_{i+1}),\ i = 0, \ldots, n-1,$$

então o erro de truncatura é definido por

$$T_{i+1} = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \phi(h, x_{i+1}, y(x_{i+1})),\ i = 0, \ldots, n-1.$$

■

A análise da convergência efectuada para os métodos explícitos não é facilmente generalizável a métodos implícitos. Estudemos seguidamente o erro para o método de Euler implícito

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_{i+1}, y_{i+1}), i = 0, \ldots, n-1,$$

em que $y_0 = y(a)$. Este erro verifica a equação

$$e(x_{i+1}) = e(x_i) + h[f(x_{i+1}, y(x_{i+1})) - f(x_{i+1}, y_{i+1})] + hT_{i+1}, i = 0, \ldots, n-1,$$

em que

$$T_{i+1} = \frac{h}{2}y''(\xi_i),\ \xi_i \in (x_i, x_{i+1}).$$

Da equação para o erro vem ainda,

$$e(x_{i+1}) = \frac{1}{1 - h\frac{\partial f}{\partial y}(x_{i+1}, \eta_i)}e(x_i) + \frac{h}{1 - h\frac{\partial f}{\partial y}(x_{i+1}, \eta_i)}T_{i+1}, i = 0, \ldots, n-1, \qquad (2.26)$$

em que η_i pertence ao intervalo aberto definido por $y(x_{i+1})$ e y_{i+1}.

Vejamos seguidamente qual a estimativa que podemos estabelecer para o erro $e(x_i)$. Para o efeito e por simplificação, admitamos que f é tal que $\frac{\partial f}{\partial y} = L$. Neste caso a equação (2.26) é equivalente a

$$e(x_{i+1}) = \frac{1}{1-hL}\left[e(x_i) + hT_{i+1}\right], \; i = 0, \ldots, n-1, \tag{2.27}$$

e portanto, obtemos a seguinte estimativa

$$|e(x_i)| \leq \frac{Ch^2}{|1-hL|^i} \frac{|1-hL|^i - 1}{|1-hL| - 1}, \; i = 1, \ldots, n, \tag{2.28}$$

onde $C = \max_{x \in [a,b]} \frac{1}{2}|y''(x)|$.

Se $L < 0$ então

$$|e(x_i)| \leq \frac{Ch}{(1-hL)^i} \frac{(1-hL)^i - 1}{-L}, \; i = 1, \ldots, n, \tag{2.29}$$

isto é,

$$|e(x_i)| \leq \frac{Ch}{-L}\left[1 - \frac{1}{(1-hL)^i}\right], \; i = 1, \ldots, n. \tag{2.30}$$

Podemos então concluir que, nas condições impostas, o método de Euler implícito é convergente.

3 Problemas com condição de fronteira

Alguns fenómenos físicos são modelizados pela equação diferencial de segunda ordem

$$y''(x) = f(x, y, y'), x \in (a, b), \tag{3.31}$$

sendo exigida a $y(x)$ restrições em $x = a$ e $x = b$ (fronteira do intervalo $[a, b]$). Estas restrições podem ser do seguinte tipo

$$\begin{aligned} \alpha_1 y(a) + \beta_1 y'(a) &= \gamma_1 \\ \alpha_2 y(b) + \beta_2 y'(b) &= \gamma_2, \end{aligned} \tag{3.32}$$

em que $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2$. As condições (3.32) são chamadas *condições de fronteira.* Seja $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2)$ e $\beta = (\beta_1, \beta_2)$.

1. Se $\beta = 0$ então as condições de fronteira (3.32) são ditas *condições de Dirichlet* ou *condições do primeiro tipo.*

2. Se $\alpha = 0$ então as condições de fronteira (3.32) são ditas *condições de Neumann* ou *condições do segundo tipo.*

3. Se $\alpha \neq 0$ e $\beta \neq 0$ então as condições de fronteira (3.32) são ditas *condições mistas* ou *condições do terceiro tipo.*

O problema diferencial ordinário composto pela equação diferencial (3.31) com a condição de fronteira (3.32) é chamado *problema diferencial ordinário com condição de fronteira.*

Tal como referimos relativamente aos problemas com condição inicial, só para alguns tipos de problemas diferenciais ordinários com condição de fronteira é possível determinar a solução. É portanto importante, para estes problemas, o estudo de processos numéricos que permitem determinar uma aproximação para a solução.

A determinação de uma aproximação para $y(x)$ definida em $[a, b]$ pode ser feita utilizando diferentes métodos. Vamos apenas considerar o método de diferenças finitas que está associado à derivação numérica já estudada no capítulo anterior.

Comecemos por considerar o problema diferencial com condições de fronteira em que f é do tipo

$$f(x, y, y') = a(x)y'(x) + b(x)y(x) + c(x), x \in (a, b), \tag{3.33}$$

e com condições de Dirichlet para a fronteira com $\alpha = (1, 1)$.

Definamos em $[a, b]$ uma partição de pontos igualmente espaçados de espaçamento $h = (b-a)/n$ e sejam $x_i, i = 0, \ldots, n$, os pontos desta partição. O método de diferenças finitas é estabelecido tendo por base a aproximação das derivadas $y''(x_i), y'(x_i)$ por formas de aproximação que foram estudadas no capítulo anterior.

A título exemplificativo, consideremos a aproximação de $y''(x_i)$ pela fórmula centrada para a segunda derivada

$$y''(x_i) \simeq \frac{y(x_{i+1}) - 2y(x_i) + y(x_{i-1})}{h^2}, \; i = 1, \ldots, n-1,$$

e a aproximação da derivada de primeira pela fórmula centrada

$$y'(x_i) \simeq \frac{y(x_{i+1}) - y(x_{i-1})}{2h}, \; i = 1, \ldots, n-1.$$

Tomando na equação diferencial, (3.31), f definida por (3.33) e $x = x_i$ obtemos, utilizando as fórmulas de aproximação anteriores,

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = a(x_i)\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + b(x_i)y_i + c(x_i), i = 1, \ldots, n-1$$

em que $y_0 = \gamma_1, y_n = \gamma_2$. A última igualdade é equivalente a

$$[1 + \frac{h}{2}a(x_i)]y_{i-1} + [-2 - b(x_i)h^2]y_i + [1 - \frac{h}{2}a(x_i)]y_{i+1} = h^2c(x_i), i = 1, \ldots, n-1.$$

Para determinar o vector das aproximações $Y^t = [y_1\, y_2\, \ldots\, y_{n-1}]^t$ temos de resolver o sistema linear

$$AY = B \tag{3.34}$$

em que

$$A = \begin{bmatrix} -2 - b_1h^2 & 1 - a_1\frac{h}{2} & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ 1 + a_2\frac{h}{2} & -2 - b_2h^2 & 1 - a_2\frac{h}{2} & \ldots & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 + a_{n-2}\frac{h}{2} & -2 - b_{n-2}h^2 & 1 - a_{n-2}\frac{h}{2} \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 + a_{n-1}\frac{h}{2} & -2 - b_{n-1}h^2 \end{bmatrix}$$

e

$$B = \begin{bmatrix} h^2c_1 - \gamma_1(1 + a_1\frac{h}{2}) \\ h^2c_2 \\ \ldots \\ h^2c_{n-2} \\ h^2c_{n-1} - \gamma_2(1 - a_{n-1}\frac{h}{2}) \end{bmatrix}$$

em que $a_i = a(x_i), b_i = b(x_i)$ e $c_i = c(x_i)$ para $i = 1, \ldots, n-1$. Da resolução do sistema linear anterior (matriz do sistema tridiagonal), por um qualquer método directo ou iterativo, obtemos y_i que denota a aproximação de $y(x_i)$ para $i = 1, \ldots, n-1$.

Exemplo: Determinar a solução do problema com condições de Dirichlet para a fronteira

$$\begin{aligned} &-y'' + 25y' = 25e^{-x},\ x \in (0,1), \\ &y(0) = y(1) = 0. \end{aligned} \tag{3.35}$$

considerando na aproximação das derivadas diferenças centradas.

Atendendo ao exposto anteriormente e com $h = 1/n$, $x_i = ih, i = 0, \ldots, n$ e $y_i \simeq y(x_i), i = 1, \ldots, n-1$, é fácil estabelecer,

$$(-1 - \frac{25}{2}h)y_{i-1} + 2y_i + (-1 + \frac{25}{2}h)y_{i+1} = 25h^2e^{-x_i},\ i = 1, \ldots, n-1, \tag{3.36}$$

em que $y_0 = y_n = 0$.

Tomando, por exemplo $h = \frac{1}{3}$, e atendendo a que vector das aproximações $Y^t = [y_1\ y_2]^t$ é solução do sistema linear

$$\begin{bmatrix} 2 & \frac{19}{6} \\ -\frac{31}{6} & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{25}{9}e^{-\frac{1}{3}} \\ \frac{25}{9}e^{-\frac{2}{3}} \end{bmatrix}$$

obtemos $Y^t = [-0.0263 \quad 0.6451]^t$.

As figuras seguintes ilustram o comportamento da solução exacta e aproximada para $h = \frac{1}{5}$ - figura 4a- e $h = \frac{1}{15}$ - figura 4b.

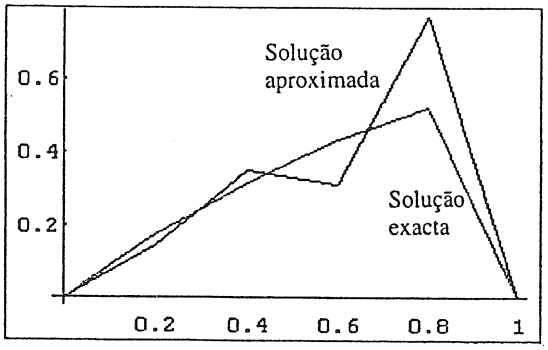

Figura 4a

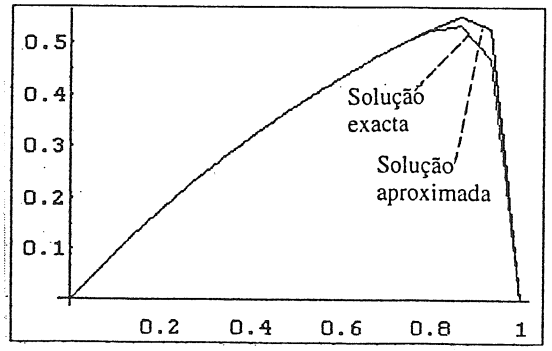

Figura 4b

■

Exemplo: Estabelecer o sistema linear que permite determinar a solução do seguinte problema diferencial com condições de fronteira

$$y''(x) = c_1 y'(x) + c_2 y(x) + g(x), x \in (a,b)$$
$$y'(a) = \gamma_1,\ y'(b) = \gamma_2$$

considerando a aproximação das derivadas de segunda e primeira ordens por diferenças centradas, e a aproximação de $y'(a)$ e $y'(b)$ respectivamente por fórmulas (diferenças) progressiva e regressiva com 2 pontos.

Procedendo como anteriormente, é fácil estabelecer

$$(1 + \frac{h}{2}c_1)y_{i-1} + (-2 - c_2h^2)y_i + (1 - \frac{h}{2}c_1)y_{i+1} = h^2 g(x_i), i = 1, \ldots, n-1.$$

Assim, quando consideramos $i = 1$ e $i = n-1$, obtemos respectivamente

$$(1 + \frac{h}{2}c_1)y_0 + (-2 - c_2h^2)y_1 + (1 - \frac{h}{2}c_1)y_2 = h^2 g(x_1) \tag{3.37}$$

e

$$(1 + \frac{h}{2}c_1)y_{n-2} + (-2 - c_2h^2)y_{n-1} + (1 - \frac{h}{2}c_1)y_n = h^2 g(x_{n-1}). \tag{3.38}$$

Considerando a aproximação de $y'(a)$ e $y'(b)$ pelas fórmula (diferenças) progressiva e regressiva com 2 pontos obtemos, respectivamente,

$$y_0 = y_1 - h\gamma_1 \tag{3.39}$$

e

$$y_n = y_{n-1} + h\gamma_2. \tag{3.40}$$

Conjugando (3.37) com (3.39) e (3.38) com (3.40), obtemos a primeira e última equações do sistema linear

$$(-1 + c_1\frac{h}{2} - c_2h^2)y_1 + (1 - c_1\frac{h}{2})y_2 = h^2g(x_1) + h\gamma_1(1 + c_1\frac{h}{2}) \tag{3.41}$$

$$(1 + c_1\frac{h}{2})y_{n-2} + (-1 - c_2h^2 - c_1\frac{h}{2})y_{n-1} = h^2g(x_{n-1}) - h\gamma_2(1 - c_1\frac{h}{2}). \tag{3.42}$$

Deste modo, obtemos o sistema linear (3.34) em que a matriz A difere da matriz deduzida, quando considerámos condições de Dirichlet, apenas na primeira e última linhas. Neste caso, esta matriz tem a primeira e última linhas com os coeficientes das duas últimas equações e o vector dos termos independentes tem como primeira e última componentes iguais aos segundos membros das equações (3.41) e (3.42).

Da resolução do sistema linear obtemos o vector das aproximações $Y^t = [y_1\ y_2\ \ldots y_{n-1}]^t$ e, para finalizar, a determinação de y_0 e y_n é feita atendendo às equações (3.39) e (3.40).

■

Exemplo: Determinar a solução do problema de com condições de fronteira mistas

$$\begin{aligned} &y''(x) - 3y'(x) + 2y(x) = x, x \in (0,1) \\ &y(0) = 1,\ y'(1) = 2 \end{aligned}$$

considerando, a aproximação das derivadas de primeira e segunda ordens por fórmulas centradas e a aproximação de $y'(1)$ por diferença regressiva com 2 pontos.

A tabela seguinte contém os valores obtidos considerando $h = 0.1$.

x_i	y_i	$y(x_i)$
0	1	1
0.1	1.08525	1.07805
0.2	1.17622	1.15943
0.3	1.27398	1.24459
0.4	1.37979	1.33402
0.5	1.4952	1.42831
0.6	1.62203	1.52812
0.7	1.76252	1.63422
0.8	1.91937	1.74751
0.9	2.09582	1.86903
1	2.29582	2

■

Consideremos de novo (3.31) e suponhamos que f é não linear em y ou em y'. Mais ainda, consideremos as condições de fronteira do primeiro tipo, isto é, condições de Dirichlet.

Aproximando as derivadas intervenientes na equação diferencial por diferenças centradas - $y''(x_i)$ - e diferenças progressivas - $y'(x_i)$ - obtemos

$$y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} - h^2 f(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_i}{h}) = 0, i = 1, \ldots, n-1.$$

Para determinar o vector das aproximações $Y^t = [y_1\, y_2\, \ldots\, y_{n-1}]^t$ deveremos resolver o sistema não linear

$$F(X, Y) = 0$$

em que $X = (x_1, \ldots, x_{n-1})$, $F = (f_1, f_2, \ldots, f_{n-1})$ e

$$f_1(X, Y) = -2y_1 + y_2 - h^2 f(x_1, y_1, \frac{y_2 - y_1}{h}) + \gamma_1$$

$$f_i(X, Y) = y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1} - h^2 f(x_i, y_i, \frac{y_{i+1} - y_i}{h}),\ i = 2, \ldots, n-2,$$

$$f_{n-1}(X, Y) = y_{n-2} - 2y_{n-1} - h^2 f(x_{n-1}, y_{n-1}, \frac{\gamma_2 - y_{n-1}}{h}) + \gamma_2.$$

A determinação de Y deverá ser feita utilizando um método para a resolução de sistemas não lineares, por exemplo, o método de Newton.

Bibliografia

- K.E. Atkinson, 1978, **An Introduction to Numerical Analysis**, J. Wiley.

- R.L. Burden, J.D. Faires, 1985, **Numerical Analysis**, 3rd Edition, Prindle, Weber and Schmidt.

- S.C. Chapra, R.P. Canale, 1989, **Numerical Methods for Engineers**, 2nd Edition McGraw-Hill International Editions, Applied Mathematics Serie.

- G. Dalquist, A. Björck, 1974, **Numerical Methods**, Prentice-Hall.

- H. Pina, 1995, **Métodos Numéricos**, McGraw-Hill de Portugal.

- M. Rosa, **Tópicos de Análise Numérica : Métodos Numéricos**, Texto de Apoio às Lições de Análise Numérica, Departamento de Matemática.

- J. Stoer, R. Bulirsh, 1993, **Introduction to Numerical Analysis**, Springer Verlag.