ANÁLISE NUMÉRICA
NOTAS DE AULAS

T. Diogo e M. Tomé

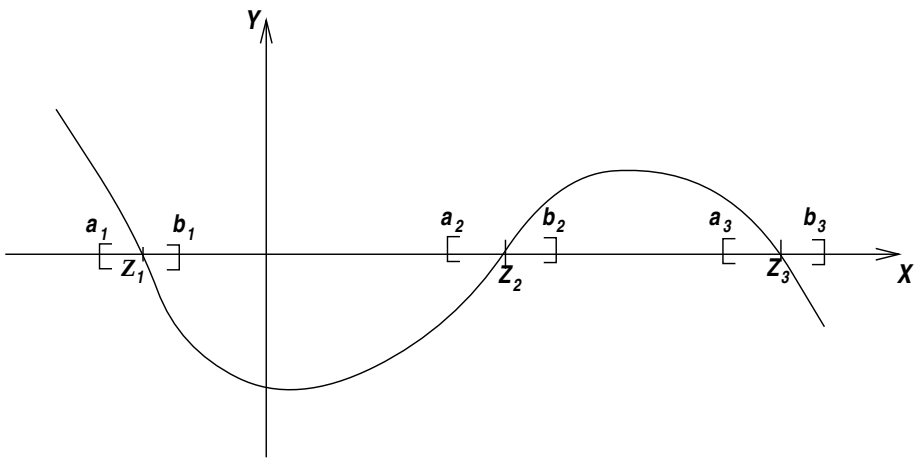
Instituto Superior Técnico
Departamento de Matemática, 1999

1 Resolução de equações não lineares

Dada uma função f definida num intervalo $[a, b]$, pretendemos determinar as *raízes da equação* $f(x) = 0$ (ou os *zeros da função* f), isto é, os valores z tais que $f(z) = 0$. Neste capítulo estudaremos métodos para a obtenção de valores aproximados de z.

1.1 Localização e separação das raízes

Primeiramente há que determinar, para cada raiz, um intervalo que a contenha. Isso pode ser feito recorrendo ao estudo gráfico e teórico de f. Exemplificamos em seguida.



Análise gráfica

Na análise gráfica pode-se esboçar um gráfico de f ou, a partir da equação original $f(x) = 0$, obter uma equação equivalente, para a qual seja mais fácil fazer o gráfico.

Exemplo 1.1 *Pretende-se uma aproximação da raiz positiva da equação*

$$f(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^2 - \sin x = 0. \tag{1.1}$$

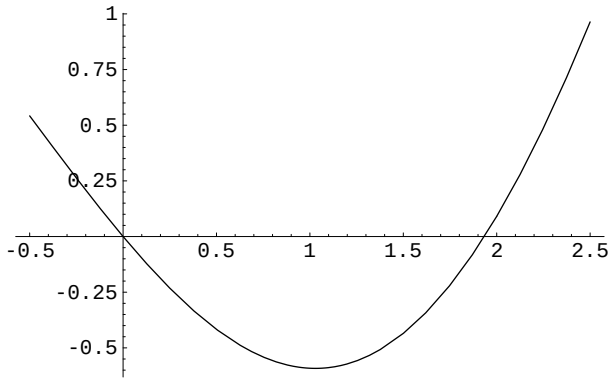


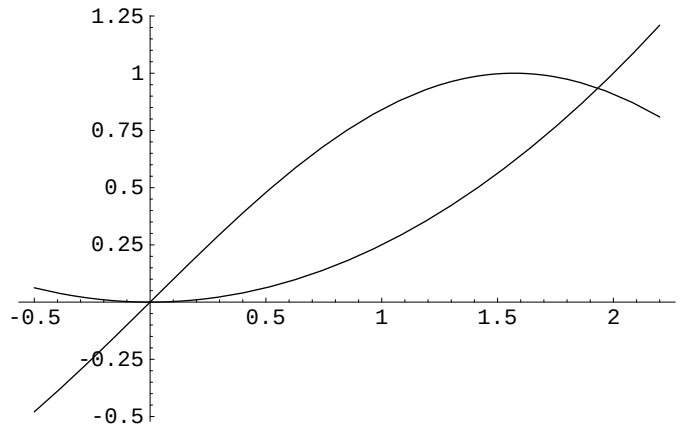
Gráfico da função $f(x) = (x/2)^2 - \sin x$

Neste caso é possível ver pelo gráfico de f que a raiz positiva de $f(x) = 0$ está no intervalo $[\pi/2, 2.0]$. Na verdade, ela parece próxima de 1.9.

Exemplo 1.2 *Uma outra maneira de proceder é reescrever a equação numa forma equivalente. Tem-se*

$$\left(\frac{x}{2}\right)^2 - \sin x = 0 \Longleftrightarrow \left(\frac{x}{2}\right)^2 = \sin x \Longleftrightarrow \begin{cases} y = (x/2)^2 \\ y = \sin x \end{cases}$$

O gráfico sugere que a equação $f(x) = 0$ tem uma raiz no intervalo $[\pi/2, 2.0]$; corresponde à projecção, no eixo dos xx, da intersecção dos gráficos das funções $y = (x/2)^2$ e $y = \sin x$.



Gráficos das funções $y = (x/2)^2$ e $y = \sin x$

Análise teórica

Na análise teórica, são usados os seguintes Teoremas, que são corolários, respectivamente, do Teorema do valor intermédio para funções e do Teorema de Rolle.

Teorema 1.1 *Seja* $f(x) \in C[a,b]$. *Se* $f(a) \times f(b) < 0$ *então existe pelo menos um* $z \in]a,b[$ *tal que* $f(z) = 0$.

Teorema 1.2 *Seja* $f(x) \in C[a,b]$. *Se* $f'(x)$ *existe e tem sinal constante em* $]a,b[$ *então* f *não pode ter mais de um zero em* $]a,b[$.

Para a função $f(x) = (x/2)^2 - \sin x$ do exemplo 1.1, tem-se $f(\pi/2) = (\pi^2)/16 - 1 < 0$ e $f(2) = 1 - \sin 2 > 0$. Logo podemos concluir que f tem pelo menos um zero no intervalo I=$[\pi/2, 2]$. Além disso, tem-se $f'(x) = x/2 - \cos x$ e $f''(x) = 1/2 + \sin x > 0$ em I. Logo $f'(x)$ é monótona crescente em I e, como $f'(\pi/2) = \pi/4 > 0$, enão f' não se anula no intervalo I. Conclui-se que a raiz da equação nesse intervalo é única.

1.2 Métodos iterativos para equações não lineares

Escolhida uma aproximação "grosseira" para a raiz z, contida no intervalo obtido em **I**, pretende-se melhorar essa aproximação utilizando um método iterativo.

Dada a aproximação inicial $x_0 \in [a,b]$, um método iterativo (convergente) permite obter sucessivas aproximações para z:

$$x_1, x_2, x_3, \cdots, x_m, \cdots$$

onde $\lim_{m\to\infty} x_m = z$ O processo pára quando uma certa precisão for atingida; são exemplo de critérios de paragem:

1. $|x_m - z| \leq \epsilon$, ϵ dado (i)

ou

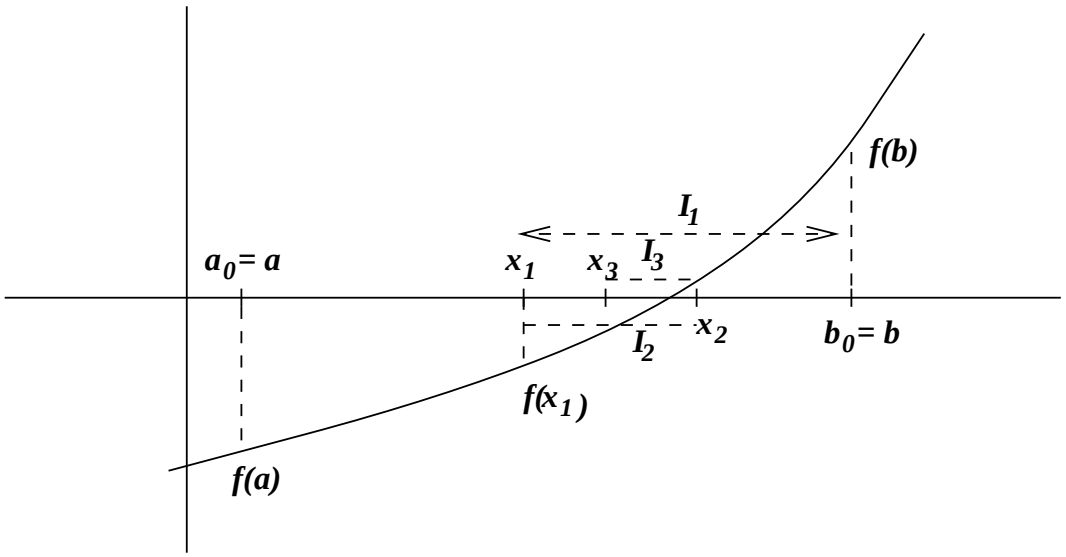
2. $|f(x_m)| \leq \epsilon$ (ii)

Observação É importante notar que os dois critérios acima não são equivalentes, ou seja, que nem sempre é possível satisfazer (i) e (ii) simultâneamente.

1.2.1 Método da bissecção

O método da bissecção é um dos métodos numéricos mais antigos, permitindo uma interpretação geométrica simples.

Seja $f(x)$ contínua em $[a,\ b]$ com $f(a)f(b) < 0$ e suponhamos que z é a única raiz em $[a,\ b]$.

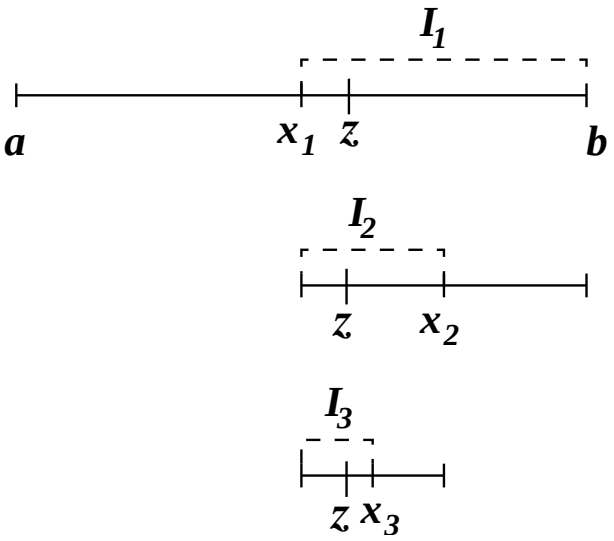


Vai-se construir uma sucessão de intervalos I_k contendo a raiz z, de modo que $I_0 \supset I_1 \supset I_2 \supset I_3 \supset \ldots\ldots \supset I_k \supset \ldots\ldots$ e tomam-se para sucessivas aproximações de z os pontos médios desses intervalos.

Seja $I_0 = [a_0, b_0] = [a,\ b]$ o intervalo dado e seja $x_0 = a$ uma aproximação inicial de z.

Toma-se para aproximação seguinte o ponto médio do intervalo I_0, isto é, faz-se $x_1 = (b + a)/2$. Em seguida analisa-se o sinal da função f nos pontos a, x_1, b para decidir de que lado de x_1 se encontra z. Suponhamos, como é o caso da figura, que $f(x_1) \times f(a) > 0$ e que $f(x_1) \times f(b) < 0$. Então $z \in [x_1, b]$ e define-se $I_1 = [a_1, b_1] = [x_1, b]$. O comprimento de I_1 é agora $(b - a)/2$ e o seu ponto médio é $x_2 = (b_1 + a_1)/2$. Procedendo como para I_0, suponhamos que $f(a_1) \times f(x_2) < 0$ e que $f(x_2) \times f(b_1) > 0$. Então $z \in I_2 = [a_2, b_2] = [a_1, x_2,]$. E o processo continua. Abaixo ilustramos esquematicamente estas ideias.

$$
\begin{array}{ll}
I_0 = [a,\ b], & |I_0| = b - a \\
x_1 = \dfrac{b+a}{2}, & |I_1| = \dfrac{b-a}{2} \\
x_2 = \dfrac{b_1+a_1}{2} & |I_2| = \dfrac{b-a}{2^2} \\
x_3 = \dfrac{b_2+a_2}{2} & |I_3| = \dfrac{b-a}{2^3} \\
\quad\vdots \quad\ \vdots & \\
x_k = \dfrac{b_k+a_k}{2} & |I_k| = \dfrac{b-a}{2^k}
\end{array}
$$



Obtiveram-se intervalos, contendo z, de amplitude cada vez mais pequena. São válidos os seguintes majorantes para os erros das sucessivas aproximações de z.

$$z,\ x_1 \in I_0 \Longrightarrow |e_{x_1}| \ = \ |z - x_1| \leq (b-a)/2$$

$$z,\ x_2 \in I_1 \Longrightarrow |e_{x_2}| \ = \ |z - x_2| \leq (b-a)/2^2$$

$$z,\ x_3 \in I_2 \Longrightarrow |e_{x_3}| \ = \ |z - x_3| \leq (b-a)/2^3$$

$$\vdots$$

de modo geral

$$z,\ x_k \in I_{k-1} \Longrightarrow |e_{x_k}| \ = \ |z - x_k| \leq (b-a)/2^k$$

Da relação

$$0 \leq |e_{x_k}| = |z - x_k| \leq \frac{b-a}{2^k} \quad \longrightarrow \quad 0$$

concluímos que

$x_1, x_2, x_3, \ldots, x_k \ldots \overset{k\to\infty}{\longrightarrow} z$. Temos assim o seguinte resultado.

Teorema 1.3 *Seja $f(x)$ contínua em $[a,\ b]$ com $f(a)f(b) < 0$ e seja z a única raiz de f em*

$[a,\ b]$. *Então o método da bissecção converge e tem-se a seguinte estimativa de erro*

$$|e_{x_k}| = |z - x_k| \leq \frac{b-a}{2^k} \tag{1.2}$$

Qual o número de iterações necessárias para se obter a precisão desejada ?

Dado um número ϵ é possível estimar o número de iterações k de modo a garantir que $|z - x_k| < \epsilon$

Como $|z - x_k| \leq \frac{b-a}{2^k}$ basta impor $\frac{b-a}{2^k} < \epsilon$, ou seja, $b - a < 2^k\epsilon \iff \frac{b-a}{\epsilon} < 2^k \iff \ln\left(\frac{b-a}{\epsilon}\right) < k \ln 2 \iff k > \frac{\ln\left(\frac{b-a}{\epsilon}\right)}{\ln 2}$

Tomando para k o inteiro imediatamente a seguir ao valor acima, temos a garantia de que x_k satisfaz a precisão desejada.

Exemplo 1.3

Finalizamos esta secção com uma tabela que mostra os resultados numéricos obtidos pelo método da bissecção aplicado à equação

$$f(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^2 - \sin x = 0, \quad x \in [1.5, 2].$$

Começando com $I_0 = [1.5, 2]$, foram obtidos os intervalos $I_{k-1} = [a_{k-1}, b_{k-1}]$, cujo ponto médio é $x_k = (b_k + a_k)/2$.

Tabela 1: Aproximações x_k para a raiz z, pelo método da bissecção

k	a_{k-1}	b_{k-1}	x_k	$f(x_k)$
1	1.5	2	1.75	< 0
2	1.75	2	1.875	< 0
3	1.875	2	1.9375	> 0
4	1.875	1.9375	1.90625	< 0
5	1.90625	1.9375	1.921875	

1.2.2 Método do ponto fixo

Começaremos por tratar equações da forma

$$g(x) = x, \tag{1.3}$$

já que, como veremos, os *métodos do ponto fixo* foram concebidos para equações deste tipo especial. Os resultados obtidos poderão depois ser aplicados a qualquer equação geral $f(x) = 0$, depois de esta ser reescrita na forma $g(x) = x$. Notemos que a construção de tal $g(x)$ é sempre possível mas não é única. Vejamos exemplos.

Exemplo 1.4

A equação

$$x^3 - 3\,x + 1 = 0. \tag{1.4}$$

é equivalente a

$$i)\quad \underbrace{\frac{1 + x^3}{3}}_{g(x)} = x$$

Atendendo a que

$$x^3 - 3\,x + 1 = 0 \Longleftrightarrow x(x^2 - 3) + 1 = 0,$$

podemos ainda reescrever (1.4) na forma

$$ii)\quad \underbrace{\frac{1}{3 - x^2}}_{g(x)} = x$$

Exemplo 1.5

A equação $x + \ln x = 0$ pode ser reescrita como:

$$i)\quad \underbrace{-\ln x}_{g(x)} = x \quad \text{ou:} \quad ii)\quad \underbrace{e^{-x}}_{g(x)} = x.$$

Exemplo 1.6

A equação $f(x) = 0$ é equivalente a:

$$i)\ \underbrace{x + f(x)}_{g(x)} = x \quad \text{e ainda, de modo geral, } a: \quad ii)\ \underbrace{x + A(x)\, f(x)}_{g(x)} = x,$$

onde $A(x)$ é uma função que nunca se anula.

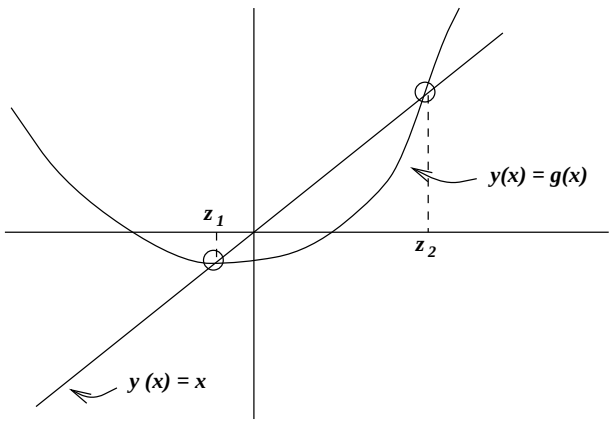
Definição 1.1 *: As raízes de uma equação da forma $g(x) = x$ chamam-se* **pontos fixos** *da função g. Ou seja, z é ponto fixo de g se o valor de g em z for igual ao próprio z.*

Interpretação geométrica

Notemos que se tem

$$x = g(x) \Longleftrightarrow \begin{cases} y = g(x) \\ y = x \end{cases}$$

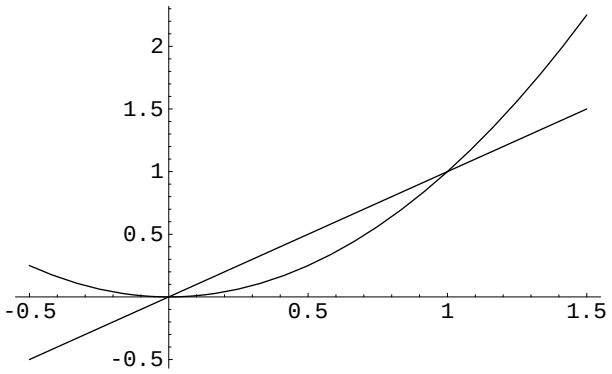
Ou seja, determinar os pontos fixos de g consiste em determinar as projecções, sobre o eixo dos xx, dos pontos de intersecção dos gráficos de $y_1 = g(x)$ e $y_2 = x$.



z_1, z_2 *pontos fixos de* g

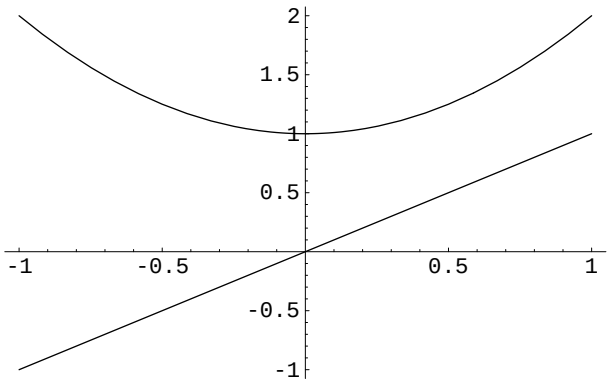
Exemplo 1.7

Seja $g(x) = x^2$. Então os pontos fixos de g são as soluções da equação $x^2 = x$. Trata-se dos valores $x = 0$ e $x = 1$.



Exemplo 1.8

A função $g(x) = x^2 + 1$ não tem pontos fixos, já que a equação $x^2 + 1 = x$ não tem soluções reais.

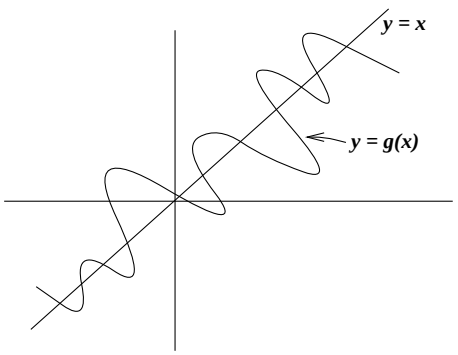


Exemplo 1.9

No caso da função $g(x) = x$, todo o número real é ponto fixo de g. Ou seja, o conjunto dos pontos fixos de g é $\mathcal{R}$.

Exemplo 1.10

Finalmente seja a função g a que corresponde o gráfico abaixo.



A função g tem múltiplos pontos fixos

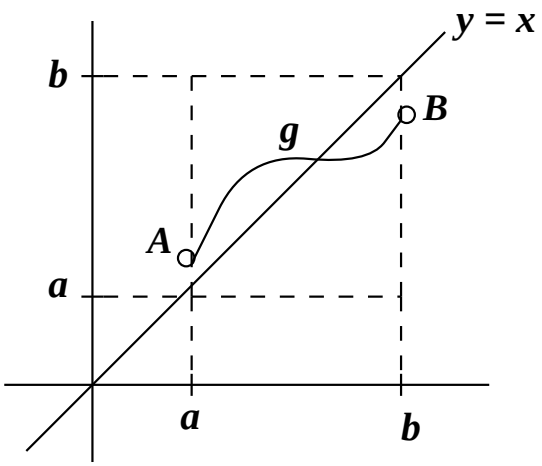
Existência e unicidade

O nosso primeiro objectivo é deduzir condições que garantam que uma dada função g tenha pelo menos um ponto fixo. Ou seja, quando poderemos concluir que o gráfico de g intersecta o gráfico da recta $y = x$ pelo menos uma vez ?

Do exemplo 1.9 concluimos que, para tal, não basta f ser uma função contínua. Mas se juntarmos mais uma condição, obtemos o seguinte.

Teorema 1.4 *(***Existência***) Seja g definida e contínua em $I = [a, b]$ e tal que $g(I) \subset I$. Então g tem pelo menos um ponto fixo $z \in I$.*

Dem: A condição $g(I) \subset I$ significa que o conjunto de valores de $g(x)$, com $a \leq x \leq b$, está também entre a e b. Ou seja, o gráfico de g está contido no quadrado a tracejado, como mostra a figura seguinte.



Intuitivamente, vemos que para ir de A a B, o gráfico de g tem de cortar o da recta $y = x$ pelo menos uma vez. Provemos esta afirmação matematicamente.

Se $g(a) = a$ ou $g(b) = b$, encontrámos um ponto fixo.

Excluído este caso trivial, seja $g(a) \neq a$ e $g(b) \neq b$. Então $g(a) > a$ e $g(b) < b$, donde $g(a) - a > 0$ e $g(b) - b < 0$. Isto implica que a função $h(x) = g(x) - x$ vai ter sinais contrários em a e b. Sendo h contínua, vai existir um $z \in]a, b[$ tal que $h(z) = 0$. Esse z verifica $g(z) - z = 0$, ou seja, trata-se de um ponto fixo de g. $\square$

Para garantir que o gráfico de g intersecte o da recta $y = x$ uma só vez, o exemplo 1.10 sugere que se imponha alguma restrição sobre a variação de g.

Teorema 1.5 *(***Existência e unicidade***) Seja g definida e diferenciável em $I = [a, b]$, tal que:*

$$g(I) \subset I \tag{1.5}$$

$$\max_{x \in [a,b]} |g'(x)| = L, \quad 0 < L < 1. \tag{1.6}$$

Então g tem exactamente um ponto fixo em I. Ou seja, existe um único $z \in [a, b]$ tal que $g(z) = z$.

Dem: Sejam z_1 e z_2 pontos fixos de g distintos. Vem que $z_1 = g(z_1)$ e $z_2 = g(z_2)$ e, recorrendo ao teorema de Lagrange, tem-se $z_1 - z_2 = g(z_1) - g(z_2) = g'(\xi)(z_1 - z_2)$, com ξ entre z_1 e z_2. Tomando módulos

$$|z_1 - z_2| \leq \max_{x\in[a,b]} |g'(x)||z_1 - z_2| \leq L|z_1 - z_2|$$

Como $0 < L < 1$, resulta a relação $|z_1 - z_2| < z_1 - z_2|$. Assim, a hipótese $z_1 \neq z_2$ conduziu a um absurdo, pelo que só poderá ter-se $z_1 = z_2$. $\square$

Estabelecemos condições suficientes para que g tenha um único ponto fixo em $I = [a, b]$. Seja z esse ponto fixo, isto é, $g(z) = z$.

Como determinar uma aproximação para z ?

O método que vamos empregar é chamado método (ou iteração) do ponto fixo e é dado pelo seguinte algoritmo:

Começando com x_0 escolhido em I, faz-se

$$x_{m+1} = g(x_m), \quad m = 0, 1, 2, \ldots \tag{1.7}$$

Obtêm-se assim sucessivas aproximações x_1, x_2, $x_3, \ldots$, para z.

Vamos em seguida mostrar que, nas condições do Teorema 1.5, a sucessão (1.7) converge e determinaremos um majorante para o erro ao fim de m passos.

Teorema 1.6 *(***Teor. do ponto fixo***) Seja g definida no intervalo $I = [a, b]$, tal que:*

(i) $g(x) \in C^1[a, b]$
(ii) $g(I) \subset I$
(iii) $\max_{x\in[a,b]} |g'(x)| = L, \quad 0 < L < 1.$

Então
(a) *g tem exactamente um ponto fixo em I. Ou seja, existe um único $z \in [a, b]$ tal que $g(z) = z$.*

(b) *Dada uma qualquer aproximação inicial $x_0 \in [a, b]$, a sucessão $x_{m+1} = g(x_m), \quad m = 0, 1, 2, \ldots$ converge para o ponto fixo z.*

Dem: A parte (a) já foi provada. Vejamos (b). Começamos por notar que, da condição $g(I) \subset I$, resulta que se $x_0 \in I$, então todas as iteradas $x_m, \quad m = 1, 2, \ldots$ também estão contidas em I. Tem-se

$$\begin{aligned} z - x_{m+1} &= g(z) - g(x_m) \quad (\text{por se ter : } z = g(z),\ g(x_m) = x_{m+1}) && (1.8) \\ &= g'(\xi_m)\,(z - x_m), \quad \text{com } \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m, && (1.9) \\ & && (1.10) \end{aligned}$$

onde se usou o Teorema de Lagrange. Tomando módulos e usando (1.8), vem

$$|z - x_{m+1}| \leq L\,|z - x_m| \quad m = 0, 1, 2, \ldots \tag{1.11}$$

e, sendo $0 < L < 1$, resulta que $|z - x_{m+1}| < |z - x_m|$. Isto permite concluir que x_{m+1} é melhor aproximação para z do que x_m.

Para provar que $x_m \to z$, ou seja, que $z - x_m \longrightarrow 0$, apliquemos sucessivamente (1.11). Vem

$$\begin{aligned} &|z - x_1| \leq L\,|z - x_0| \\ &|z - x_2| \leq L\,|z - x_1| \leq L^2\,|z - x_0| \\ &|z - x_3| \leq L\,|z - x_2| \leq L^2\,|z - x_1| \leq L^3\,|z - x_0| \\ &\text{em geral} \\ &|z - x_m| \leq L^m\,|z - x_0| \quad m = 0, 1, 2, \ldots \end{aligned}$$

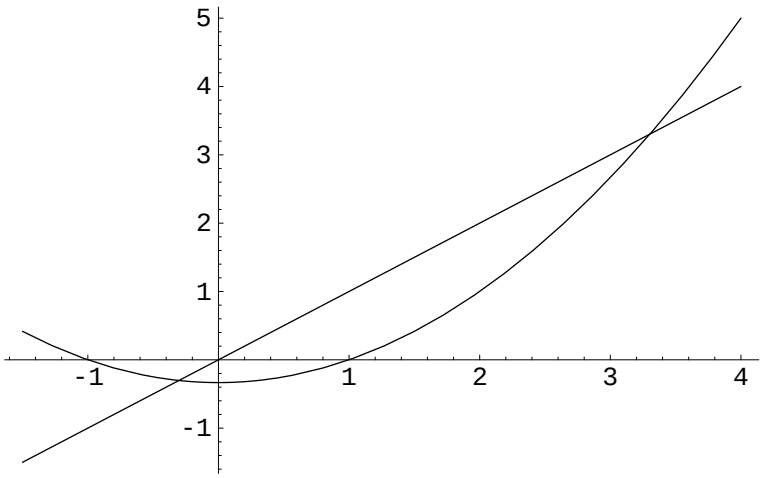
Fazendo $m \longrightarrow \infty$, da relação anterior obtém-se $0 \leq |z - x_m| \leq L^m\,|z - x_0| \to 0$, já que $0 < L < 1 \Longrightarrow L^m \longrightarrow 0$. Então $|z - x_m| \longrightarrow 0 \Longrightarrow x_m \longrightarrow z$. $\square$

Exemplo 1.11

Seja a função $g(x) = (x^2 - 1)/3$. Se g tiver pontos fixos eles são dados resolvendo $\frac{x^2-1}{3} = x$. Tem-se

$$\frac{x^2 - 1}{3} = x \Longleftrightarrow x^2 - 1 - 3x = 0 \Longleftrightarrow x = \frac{3 \pm \sqrt{13}}{2}$$

Da equação anterior concluimos que g tem exactamente 2 pontos fixos. Como $\sqrt{13} \in [3, 4]$, então $\sqrt{13}/2 \in [1.5, 2]$ e uma estimativa grosseira para os pontos fixos de g (ou seja, os zeros de $f(x) = x^2 - 1 - 3x$) será a seguinte: existirá um ponto fixo $z_1 \in [-1, 0]$ e um outro positivo $z_2 \in [3, 4]$.



Consideremos z_1. Verificam-se as condições do Teorema do ponto fixo para o intervalo $I = [-1, 0]$? Em caso afirmativo, além de confirmarmos a localização de z_1, poderemos usar a iteração do ponto fixo para obter um valor aproximado de z_1.

(i) Tem-se $g'(x) = 2x/3$. Então $g \in C^1[-1, 0]$, já que g e g' são funções contínuas.
(ii) $g(I) \subset I$?
Para verificar se $g(I) \subset I$, notemos que, sendo $g'(x) < 0$ para $x \in I$, então g é uma função decrescente em I. Como além disso $g(-1) = 0 \in I$ e $g(0) = -1/3 \in I$, a monotonicidade de g permite concluir que $g(x) \in I$, para qualquer $x \in I$.

(iii) $\max_{x\in[a,b]} |g'(x)| = L, \quad 0 < L < 1$?
Tem-se $|g'(x)| = 2|x|/3$ e, para $-1 \leq x \leq 0$, vem $|g'(x)| \leq 2/3 < 1$. Assim a condição (1.8) é verificada com $L = 2/3$.

Fica assim confirmada a existência de um único ponto fixo $z_1 \in [-1, 0]$ para a função g. Além disso, a sucessão $x_{m+1} = g(x_m) = (x_m^2 - 1)/3$ converge para z_1, qualquer que seja a aproximação inicial $x_0 \in [-1, 0]$. Escolhendo, por exemplo, $x_0 = 0$, obtém-se

$$x_1 = g(x_0) = \frac{0^2 - 1}{3} = -\frac{1}{3} \approx -0.3333333$$
$$x_2 = g(x_1) = \frac{(-1/3)^2 - 1}{3} \approx -0.296296$$
$$x_3 = g(x_2) = \frac{x_2^2 - 1}{3} \approx -0.304069$$
$$x_4 = g(x_3) = \frac{x_3^2 - 1}{3} \approx -0.302514$$
$$x_5 = g(x_4) = \frac{x_4^2 - 1}{3} \approx -0.302828$$
$$x_6 = g(x_5) \approx -0.302765$$
$$x_7 = g(x_6) \approx -0.302778$$
$$x_8 = g(x_7) \approx -0.302775$$

Observações: **Obs I**) o Teorema do ponto fixo fornece apenas condições suficientes para existência de um único ponto fixo.

Exemplo 1.12

Como ilustração da **Obs I**, consideremos de novo a função g do exemplo anterior, mas agora o intervalo $I = [3, 4]$. É fácil de provar que a função $f(x) = x^2 - 1 - 3x$ tem um único zero nesse intervalo. Com efeito, tem-se $f(3)f(4) < 0$ e $f'(x) = 2x - 3 > 0$ em I. Então g tem um único ponto fixo em I. Contudo, se tentarmos aplicar o Teorema do ponto fixo à função g no intervalo I, vemos que falham as condições (ii) e (iii):

(ii) $g(3) = 2.666, g(4) = 5$, donde $g(I)$ não está contido em I.

(iii) Sendo $g'(x) = 2x/3$ crescente e $g'(3) = 2 > 1$, tem-se $g'(x) > 1$ para todo o $x \in I$.

Obs II) o Teorema do ponto fixo fornece condições suficientes para convergência do método iterativo do ponto fixo. Se uma das condições não se verificar não se pode concluir que o método não converge para z.

Apresentamos ainda um teorema com um carácter diferente do Teorema 1.6.

Teorema 1.7 *: (***Convergência local***) Seja $g(x)$ diferenciável num intervalo aberto contendo o ponto fixo z de g. Se $|g^{'}(z)| < 1$, então existe um $\epsilon > 0$ tal que a iteração do ponto fixo $x_{m+1} = g(x_m), m = 0, 1, 2, \ldots$ converge para z qualquer que seja a aproximação inicial x_0 que verifica $|z - x_0| < \epsilon$.*

Dem: Por hipótese $|g^{'}(z)| < 1$. Sendo $g^{'}(x)$ contínua num intervalo aberto que contém z, então existe $\epsilon > 0$ tal que

$$x \in I_\epsilon := [z - \epsilon, z + \epsilon] \Rightarrow |g^{'}(x)| \leq K < 1.$$

Tem-se ainda, usando o Teorema do valor médio,

$$\begin{aligned} |g(x) - z| = |g(x) - g(z)| &= |g^{'}(\xi)||x - z| \\ &\leq K\,\epsilon < \epsilon \quad \text{com } \xi \text{ entre } x \text{ e z.} \end{aligned}$$

Mas a desigualdade anterior significa que $g(I_\epsilon) \subset I_\epsilon$. Estão assim verificadas as hipóteses do Teorema (1.6) para o intervalo I_ϵ, pelo que o resultado fica demonstrado. □

Observação: no Teorema 1.6, conclui-se convergência do método do ponto fixo para x_0 pertencente a um dado intervalo I. Já o Teorema 1.7 apenas nos diz que existe uma vizinhança de z onde a iteração do ponto fixo converge (não indica qual o valor de ϵ). Usando uma linguagem imprecisa: se x_0 estiver "muito próximo" de z então o método converge, desde que $|g'(x)| < 1$ num intervalo contendo z. Diz-se que é um resultado de carácter "local".

Se tomarmos para aproximação de z o valor x_m, precisamos estimar o erro $|z - x_m|$. Vamos supor que são verificadas as condições do Teorema (1.6).

I. Erro na iterada x_m, $m > 0$, em função do erro em x_0

Na demonstração do Teorema 1.6, obtivémos a fórmula:

$$|z - x_m| \leq L^m \, |z - x_0|. \tag{1.12}$$

Trata-se de uma fórmula que permite estimar o erro numa certa iterada x_m, *à priori*, isto é, sem ter de se calcular x_m. É preciso aqui uma (boa) estimativa para o erro na iterada inicial.

II. Erro na iterada x_{m+1}, $m > 0$, em função da distância entre as iteradas x_{m+1} e x_m

É válida a seguinte fórmula:

$$|z - x_{m+1}| \leq \frac{L}{1-L} \, |x_{m+1} - x_m|, \quad m \geq 0. \tag{1.13}$$

Trata-se de uma fórmula de majoração *à posteriori*, isto é, pressupõe termos já calculado x_m e x_{m+1}.

Dem: Tem-se, aplicando (1.11) e depois somando e subtraindo x_{m+1}

$$\begin{aligned} |z - x_{m+1}| &\leq L \, |z - x_m| \\ &= L \, |(z - x_{m+1}) + (x_{m+1} - x_m)| \\ &\leq L \, (|z - x_{m+1}| + |x_{m+1} - x_m|) \end{aligned}$$

Então $|z - x_{m+1}|(1 - L) \leq |x_{m+1} - x_m|$ e, sendo $0 < L < 1$, $1 - L > 0$. Dividindo ambos os membros da desigualdade acima por $1 - L$, obtém-se (1.13). □

A fórmula (1.13) pode ser generalizada como se segue.

III. Erro na iterada $x_{m+1},\ m>0$, em função da distância entre as iteradas x_1 e x_0

$$|z - x_{m+1}| \leq \frac{L^{m+1}}{1-L}\,|x_1 - x_0|, \quad m \geq 0. \tag{1.14}$$

Dem: basta usar (1.11) e (1.13) do seguinte modo

$$\begin{aligned} |z - x_{m+1}| &\leq L^m |z - x_1| \text{ por (1.11)} \\ &\leq L^m \left(\frac{L}{1-L}|x_1 - x_0|\right) \text{ por (1.13)}, \end{aligned}$$

donde o resultado. □

Critério de paragem

Qualquer das fórmulas de erro anteriores pode ser usada como teste para se parar o processo iterativo.

Em geral, dado $\epsilon > 0$ (pequeno), o processo iterativo deve parar quando $|z - x_{m+1}| \leq \epsilon$. Da fórmula (1.13) temos:

$$|z - x_{m+1}| \leq \frac{L}{1-L}|x_{m+1} - x_m|$$

donde vemos que se $\dfrac{L}{1-L}|x_{m+1} - x_m| < \epsilon$ então teremos $|z - x_{m+1}| \leq \epsilon$. Logo, para que tenhamos um erro inferior a ϵ na iterada x_{m+1} é suficiente que

$$|x_{m+1} - x_m| < \frac{1-L}{L}\epsilon$$

Obs: Se $L < 1/2$ então $\dfrac{L}{1-L} < 1$ e nesse caso usa-se o critério de paragem:

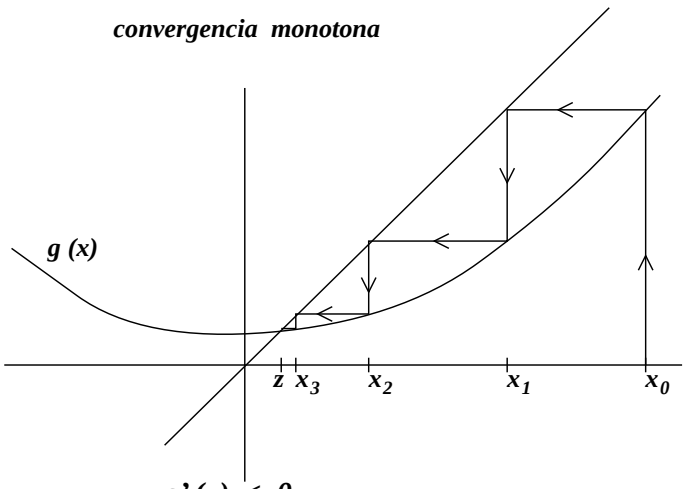
$$|x_{m+1} - x_m| < \epsilon.$$

Ilustração Geométrica da Convergência do Método do Ponto Fixo.

- Convergência monótona: $0 \leq g'(x) < 1$.
- Convergência alternada: $-1 < g'(x) \leq 0$.
- Divergência: $|g'(z)| > 1$.

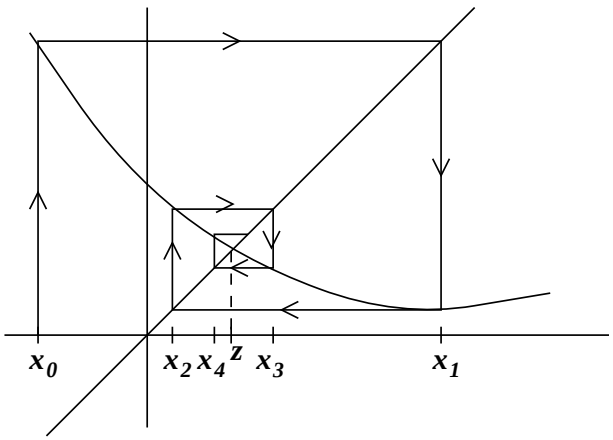
g' (x) > 0

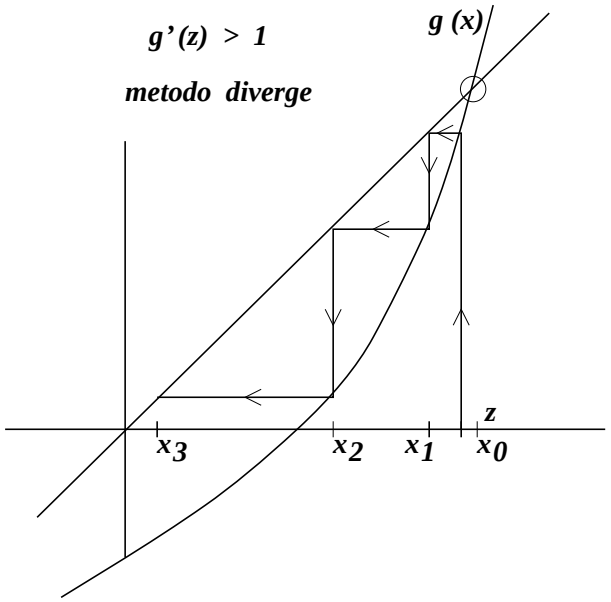
convergencia monotona



g' (x) < 0

convergencia alternada





Definição 1.2 (ordem de convergência): *Seja* $\{x_n\}$ *uma sucessão que converge para* z *e seja* $e_m := z - x_m$. *Se existirem constantes reais* $p \geq 1$ *e* $K_\infty > 0$ *tais que*

$$\lim_{m\to\infty} \frac{|e_{m+1}|}{|e_m|^p} = K_\infty \tag{1.15}$$

então dizemos que $\{x_m\}$ *converge para* z *com ordem de convergência* p.

K_∞ *chama-se coeficiente assimptótico de convergência*
Se $p = 1$ *e* $K_\infty < 1$, *dizemos que a convergência é linear*
Se $p > 1$ *dizemos que a convergência é supralinear*
Em particular, se $p = 2$ *dizemos que a convergência é quadrática*

Obs: De (1.15), atendendo à definição de limite, resulta a seguinte igualdade assimptótica:

$$|e_{m+1}| \approx |e_m|^p K_\infty, \quad m \text{ suf. grande}$$

A igualdade anterior permite-nos a seguinte conclusão. Como a sucessão $\{x_m\}$ converge para z, temos que a sucessão dos erros e_m tende para 0 quando $m \longrightarrow \infty$. Para m suficientemente grande, e_m estará muito "próximo" de zero. Então, quanto maior for p, mais pequeno será o valor $|e_m|^p$ e, consequentemente, mais pequeno será o erro da iterada seguinte: $e_{m+1} = K_\infty |e_m|^p$.

Somos assim conduzidos ao seguinte conceito.

Rapidez de convergência: rapidez com que os erros decrescem para zero. Depende de K_∞ e p. Quanto maior for p e quanto menor for K_∞, maior é a rapidez de convergência.

Exemplo: Sejam $\{x_m\}$ e $\{\bar{x}_m\}$ duas sucessões satisfazendo

$$\text{I) } \lim_{m\to\infty} \frac{|e_{m+1}|}{|e_m|} = K_\infty > 0 \qquad (p = 1, \text{ conv. linear})$$

$$\text{II) } \lim_{m\to\infty} \frac{|\bar{e}_{m+1}|}{|\bar{e}_m|^2} = \bar{K}_\infty > 0 \qquad (p = 2, \text{ conv. quadrática})$$

a) Suponhamos por simplicidade, que para o método I (conv. linear) se tem:
$|e_{m+1}| \approx |e_m|\, K_\infty, \quad \forall m.$

Então, para $n = 0, 1, 2, \ldots$ tem-se:

$$|e_1| \approx K_\infty |e_0|$$

$$|e_2| \approx K_\infty |e_1| \approx K_\infty (K_\infty |e_0|) \approx K_\infty^2 |e_0|$$

$$|e_3| \approx K_\infty |e_2| \approx K_\infty (K_\infty^2 |e_0|) \approx K_\infty^3 |e_0|$$

$$\vdots \quad \vdots$$

$$\vdots \quad \vdots$$

Em geral obtem-se que: $|e_{m+1}| \approx K_\infty^{(m+1)} |e_0|, \quad n \geq 1 \qquad (1)$

b) Para o método quadrático (método II), suponhamos que: $|\bar{e}_{m+1}| \approx \bar{K}_\infty |\bar{e}_m|^2, \quad \forall m.$ Então,

$$|\bar{e}_1| \approx \bar{K}_\infty |\bar{e}_0|^2$$

$$|\bar{e}_2| \approx \bar{K}_\infty |\bar{e}_1|^2 \approx \bar{K}_\infty (\bar{K}_\infty |\bar{e}_0|^2)^2 \approx \bar{K}_\infty^3 |\bar{e}_0|^4$$

$$|\bar{e}_3| \approx \bar{K}_\infty |\bar{e}_2^2| \approx \bar{K}_\infty (\bar{K}_\infty^3 |\bar{e}_0|^4)^2 \approx \bar{K}_\infty^7 |\bar{e}_0|^8$$

$$\vdots \quad \vdots$$

$$\vdots \quad \vdots$$

Em geral obtem-se que: $|e_{m+1}| \approx \bar{K}_\infty^{(2^{m+1}-1)} |\bar{e}_0|^{(2^{m+1})}, \qquad n \geq 1 \qquad (3)$

Suponhamos agora que $K_\infty = \bar{K}_\infty = 0.75$ e $|e_0| = |\bar{e}_0| = 0.5$ e calculemos e_3 e $\bar{e}_3$ utilizando (2) e (3) respectivamente. Então, temos:

$$|e_3| \approx (0.75)^3|0.5| \approx 0.2109375 \text{ (para o método I)}$$
$$|\bar{e}_3| \approx (0.75)^7|0.5|^8 \approx \frac{1}{0.75}(0.75 \times 0.5)^8 \approx 5.2 \times 10^{-4} \text{ (para o método II)}$$

donde vemos que o erro no método quadrático é muito menor que o erro obtido pelo método linear!!

Teorema 1.8 (ordem de conv. mét. ponto fixo) *: Seja $g(x)$ uma função verificando as condições do teorema do ponto fixo (teor. 1.6) para o intervalo $[a,\ b]$, ou seja,*

i) $g \in C^1[a,\ b]$

ii) $g([a,\ b]) \subset [a,\ b]$

iii) $\max\limits_{x\in[a,\ b]} |g'(x)| \leq L < 1$

Então, a sucessão definida por $x_{m+1} = g(x_m),\ m = 0, 1, \ldots$ converge para z, $\forall x_0 \in [a,\ b]$ e tem-se:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{m+1}|}{|z - x_m|} = |g'(z)| \tag{1.16}$$

Dem:

A convergência de x_m já foi provada (ver teorema do ponto fixo). Mostremos que o limite acima é válido:

Tem-se

$$z - x_{m+1} = g(z) - g(x_m) = g'(\xi_m)(z - x_m), \quad \xi_m \text{ entre } x_m \text{ e } z,\ \forall m$$

onde se usou o teorema do valor médio de Lagrange.

Então $\dfrac{z - x_{m+1}}{z - x_m} = g'(\xi_m), \forall m$. Tomando módulos e passando ao limite, tem-se:

$$\lim_{m\to\infty} \frac{|z - x_{m+1}|}{|z - x_m|} = \lim_{m\to\infty} |g'(\xi_m)| = {}^1|g'(\lim_{m\to\infty} \xi_m)| = {}^2|g'(z)|$$

[1] Continuidade de g'

[2] Como ξ_m está entre x_m e z $\forall m$ e $\{x_m\} \longrightarrow z \implies \{\xi_m\} \longrightarrow z$

Portanto, se $|g'(z)| \neq 0$, tem-se uma relação do tipo (1.15), com com $p = 1$ e $K_\infty = |g'(z)| > 0$. A convergência é, pois, linear.

E se

$$\lim_{m\to\infty} \frac{|z - x_{m+1}|}{|z - x_m|} = |g'(z)| = 0 \quad ?$$

Vamos mostrar que a ordem de convergência deixa de ser linear passando a supralinear.

Teorema 1.9 *(**conv. supralinear do mét. ponto fixo**): Seja $z = g(z)$ com $g \in C^p[a,\ b]$, $p \geq 2$ verificando as condições do* **teorema do ponto fixo** *em $[a,\ b]$ e $z \in [a,\ b]$. Se*

$$g'(z) = g''(z) = \ldots = g^{(p-1)}(z) = 0 \text{ e } g^{(p)}(z) \neq 0$$

Então $$\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{m+1}|}{|e_m|^p} = \frac{|g^{(p)}(z)|}{p!}$$

e portanto a sucessão $\{x_m\}$ tem ordem de convergência p e coeficiente assimptótico de convergência $K_\infty = \dfrac{|g^{(p)}(z)|}{p!}$.

Dem: Considerando a fórmula de Taylor de g em torno de z vem:

$$g(x) = g(z) \ + \ (x-z)g'(z) \ + \ (x-z)^2\frac{g''(z)}{2!} \ + \ \ldots \ + \ (x-z)^{(p-1)}\,\frac{g^{(p-1)}(z)}{(p-1)!} + (x-z)^p\,\frac{g^{(p)}(\xi)}{p!} \quad , \ \xi \text{ entre } x \text{ e } z.$$

Para $x = x_m$, temos

$$g(x_m) = g(z) \ + \ (x_m-z)g'(z) \ + \ (x_m-z)^2\frac{g''(z)}{2!} \ + \ \ldots \ + \ (x_m-z)^{(p-1)}\,\frac{g^{(p-1)}(z)}{(p-1)!} + (x_m-z)^p\,\frac{g^{(p)}(\xi_m)}{p!} \quad , \ \xi_m \text{ entre } x_m \text{ e } z.$$

Usando as hipóteses $x_{m+1} = g(x_m)$, $g(z) = z$ e $g'(z) = g''(z) = \ldots = g^{(p-1)}(z) = 0$, obtém-se

$$x_{m+1} = z \ + \ (x_m-z)^p\,\frac{g^{(p)}(\xi_m)}{p!} \quad , \ \xi_m \text{ entre } x_m \text{ e } z.$$

Daqui vem

$$\begin{aligned} z - x_{m+1} &= -(x_m - z)^p \frac{g^{(p)}(\xi_m)}{p!} \quad , \ \xi_m \text{ entre } x_m \text{ e } z. \\ &= (-1)^{(p+1)} (z - x_m)^p \frac{g^{(p)}(\xi_m)}{p!} \quad , \ \xi_m \text{ entre } x_m \text{ e } z. \end{aligned}$$

Então

$$\begin{aligned} &\frac{z - x_{m+1}}{(z - x_m)^p} = (-1)^{(p+1)} \frac{g^{(p)}(\xi_m)}{p!} \quad , \ \xi_m \text{ entre } x_m \text{ e } z. \\ \Longrightarrow \ &\frac{|z - x_{m+1}|}{|z - x_m|^p} = \frac{|g^{(p)}(\xi_m)|}{p!} \quad , \ \xi_m \text{ entre } x_m \text{ e } z. \end{aligned}$$

Passando ao limite e usando a continuidade de $g^{(p)}$, vem:

$$\lim_{m\to\infty} \frac{|e_{m+1}|}{|e_m|^p} = \lim_{m\to\infty} \frac{|g^{(p)}(\xi_m)|}{p!} \frac{|g^{(p)}(\lim_{m\to\infty} \xi_m)|}{p!} = \frac{|g^{(p)}(z)|}{p!},$$

donde vemos que a sucessão $\{x_m\}$ converge para z com ordem de convergência p e factor assimptótico de convergência $K_\infty = \dfrac{|g^{(p)}(z)|}{p!}$ $\square$

1.2.3 Método de Newton

Seja $f \in C^2[a,\ b]$ e suponhamos que $f'(x) \neq 0,\ \forall\ x \in [a,\ b]$, e que existe $z \in [a,\ b]$ tal que $f(z) = 0$. Como vimos anteriormente (**Teorema 1.9**), sendo uma sucessão do ponto fixo $x_{m+1} = g(x_m)$ convergente para z, se $g'(z) = 0$ então a convergência é supralinear. Ou seja, nesse caso a ordem é um número $p \geq 2$ (conv. pelo menos quadrática).

Colocamos agora a questão: podemos determinar uma função $A(x)$ (dependente de f) tal que a sucessão do ponto fixo gerada por

$$g(x) = x + A(x)f(x)$$

convirja para z com ordem de convergência $p \geq 2$? A resposta é afirmativa. Com efeito, calculemos $g'(x)$ e imponha-se a condição $g'(z) = 0$. Tem-se

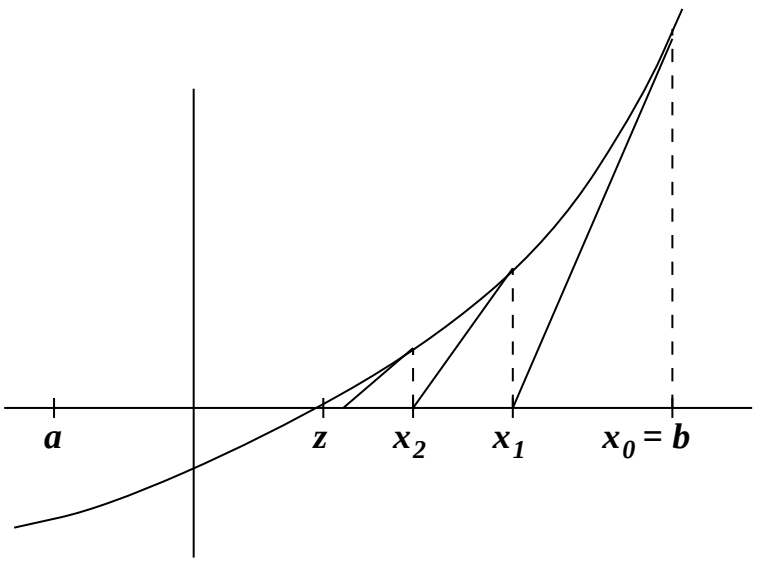
$$g'(x) = 1 + A'(x)f(x) + A(x)f'(x)$$

logo $g'(z) = 1 + A'(z)f(z) + A(z)f'(z) = 1 + A(z)f'(z)$, visto $f(z) = 0$. Impondo $g'(z) = 0$ para se ter convergência supralinear, resulta a condição $A'(z) = -1/f'(z)$. Com a escolha $A(x) = -1/f'(x)$ somos conduzidos ao método

$$x_{m+1} = x_m - \frac{f(x_m)}{f'(x_m)}, \quad m = 0, 1, \ldots \tag{1.17}$$

a que se chama método de Newton.

Interpretação Geométrica



O ponto $x_{m+1}, m \geq 0$ é calculado como sendo o ponto de intersecção, com o eixo dos xx, da recta passando por $(x_m, f(x_m))$ com declive $f'(x_m)$. Essa recta é a tangente ao gráfico de f no ponto $(x_m, f(x_m))$) e a sua equação é dada por

$$y = f'(x_m)(x - x_m) + f(x_m)$$

Seja x_{m+1} o ponto de intersecção com o eixo dos xx. Vem

$$0 = f'(x_m)(x_{m+1} - x_m) + f(x_m)$$

donde

$$x_{m+1} - x_m = -\frac{f(x_m)}{f'(x_m)}$$

e obtém-se o método de Newton

$$x_{m+1} = x_m - \frac{f(x_m)}{f'(x_m)}, m \geq 0$$

Exemplo 1.13

Calcular $\sqrt[3]{100}$ pelo método de Newton.

Solução: Seja $f(x) = x^3 - 100 = 0$ e seja z um zero de f. Então, $z^3 = 100 \implies z = \sqrt[3]{100}$. Para calcularmos z, procedemos como segue:

Seja $I = [4,\ 5]$. Então, $\begin{cases} f(4) = 64 - 100 = -36 \\ f(5) = 125 - 100 = 25 \\ \text{logo, } f(4)f(5) < 0 \overset{Teor1.1}{\Longrightarrow} z \in [4,\ 5] \end{cases}$

Temos que $f'(x) = 3x^2$ e o método de Newton é dado por: $x_{m+1} = x_m - \dfrac{x_m^3 - 100}{3x_m^2}$. Tomando $x_0 = 4$ vem:

$$\begin{cases} x_1 = x_0 - \dfrac{x_0^3 - 100}{3x_0^2} = 4 + \dfrac{36}{48} = 4.750 \\ x_2 = x_1 - \dfrac{x_1^3 - 100}{3x_1^2} = 4.750 - \dfrac{7.171875}{67.68750} = 4.644044 \\ x_3 = x_2 - \dfrac{x_2^3 - 100}{3x_2^2} = 4.644044 - \dfrac{0.158769}{64.701434} = 4.641590 \\ x_4 = x_3 - \dfrac{x_3^3 - 100}{3x_3^2} = 4.641590 - \dfrac{0.0000837}{64.633073} = 4.6415887 \end{cases}$$

Fórmula do erro para o método de Newton:

Teorema 1.10 *Se $f \in C^2[a,\ b]$ então as iteradas do método de Newton satisfazem:*

$$|e_{m+1}| = |z - x_{m+1}| \leq \frac{\max\limits_{x\ \in[a,\ b]} |f''(x)|}{2|f'(x_m)|}|z - x_m|^2$$

Dem:

Comecemos por provar a seguinte relação:

$$|z - x_{m+1}| = |(z - x_m)|^2 \frac{|f''(\xi_m)|}{2|f'(x_m)|},\ \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m \tag{1.18}$$

Pela fórmula de Taylor de f em torno de x_m obtemos:

$$f(x) = f(x_m) + (x - x_m)f'(x_m) + \frac{(x - x_m)^2}{2!}f''(\xi_m),\ \xi_m \text{ entre } x \text{ e } x_m$$

Para $x = z$ tem-se:

$$\begin{aligned}
& f(z) = f(x_m) + (z - x_m)f'(x_m) + \frac{(z - x_m)^2}{2!}f''(\xi_m),\ \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m \\
\implies\ & 0 = f(x_m) + (z - x_m)f'(x_m) + \frac{(z - x_m)^2}{2}f''(\xi_m),\ \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m \\
\implies\ & 0 = \frac{f(x_m)}{f'(x_m)} + z - x_m + (z - x_m)^2\frac{f''(\xi_m)}{2f'(x_m)},\ \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m \\
\implies\ & z = \underbrace{x_m - \frac{f(x_m)}{f'(x_m)}}_{x_{m+1}} - (z - x_m)^2\frac{f''(\xi_m)}{2f'(x_m)},\ \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m \\
\implies\ & z - x_{m+1} = -(z - x_m)^2\frac{f''(\xi_m)}{2f'(x_m)},\ \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m \\
\implies\ & |z - x_{m+1}| = |(z - x_m)|^2\frac{|f''(\xi_m)|}{2|f'(x_m)|},\ \xi_m \text{ entre } z \text{ e } x_m
\end{aligned}$$

Como em geral não se conhece ξ_m, toma-se um majorante de —f"— e resulta finalmente

$$|z - x_{m+1}| \leq |(z - x_m)|^2\frac{\max\limits_{x\in[a,b]}|f''(x)|}{2|f'(x_m)|}$$

□

Corolário 1.1 *As iteradas do método de Newton satisfazem*

$$|\underbrace{z - x_{m+1}}_{e_{m+1}}| \leq K|\underbrace{z - x_m}_{e_m}|^2 \quad onde\ K = \frac{\max\limits_{x\in[a,b]}|f''(x)|}{2\min\limits_{x\in[a,b]}|f'(x)|}$$

Número de iterações necessárias p/ obter uma precisão ϵ na iterada x_{m+1}.

Fazendo sucessivamente, $m = 0, 1, 2, \ldots$, na equação $|e_{m+1}| \leq K|e_m|^2$ obtém-se a seguinte relação:

$$|e_{m+1}| \leq K^{(2^{m+1}-1)}|e_0|^{2^{m+1}} \quad \text{onde } e_{m+1} = z - x_{m+1} \quad \text{e} \quad K = \frac{\max\limits_{x\in[a,b]}|f''(x)|}{2\min\limits_{x\in[a,b]}|f'(x)|}\ .$$

OBS: conhecendo-se $|e_0|$ é possível prever os erros em $x_1, x_2, \ldots, x_{m+1}$.

Logo, para que o método de Newton forneça um erro inferior a ϵ na iterada x_{m+1}, é suficiente que:

$$K^{(2^{m+1}-1)}|e_0|^{2^{m+1}} < \epsilon \Longrightarrow K^{-1}(K|e_0|)^{2^{m+1}} < \epsilon \Longrightarrow (K|e_0|)^{2^{m+1}} < K\epsilon \Longrightarrow$$

$$2^{m+1}\underbrace{ln(K|e_0|)} < ln(K\epsilon) \Longrightarrow 2^{m+1} > \frac{ln(K\epsilon)}{ln(K|e_0|)} \Longrightarrow m > \frac{ln\left[\dfrac{ln(K\epsilon)}{ln(K|e_0|)}\right]}{\ln(2)} - 1$$

□

Para os resultados que se seguem, é importante relembrar que o método de Newton é um método do ponto fixo, ou seja, a sucessão (1.17) é uma sucessão da forma $x_{m+1} = g(x_m)$, com $g(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$.

Teorema 1.11 (Convergência local do Mét. Newton): *Seja $f \in C^2(I)$, $I = [a,\ b]$ e suponhamos que $f'(x) \neq 0$, $\forall\ x \in [a,\ b]$ e $\exists\ z \in [a,\ b]$ tal que $f(z) = 0$. Então, existe $r > 0$ tq. $\forall\ x_0 \in I_r = [z - r,\ z + r] \subset I$ o método de Newton converge para z e a convergência é pelo menos quadrática.*

Dem:

Convergência

Sabendo que o método de Newton é um método do ponto fixo, vamos mostrar que $\exists\ r > 0$ tq. $g(x)$ satisfaz as condições do teorema do ponto fixo em $I_r = [z - r,\ z + r] \subset I$. Isso vai

permitir concluir que a sucessão $x_{m+1} = g(x_m)$, ou seja, o método de Newton, converge para z , $\forall x_0 \in I_r$.

Tem-se

$i)$ $g(z) = z - \underbrace{\overbrace{f(z)}^{=0}}_{\neq 0} = z$ e $g \in C^1(I)$. (desde que $f \in C^2(I)) \Longrightarrow z$ é ponto fixo de g.

$ii)$ $g'(x) = 1 - \left(\dfrac{1}{f'(x)} f'(x) - f(x)\dfrac{f''(x)}{(f'(x))^2}\right) = 1 - \left(1 - f(x)\dfrac{f''(x)}{(f'(x))^2}\right) = f(x)\dfrac{f''(x)}{(f'(x))^2}.$

Portanto, $g'(z) = \underbrace{f(z)}_{=0} \dfrac{f''(z)}{(f'(z))^2} = 0$

(Note-se que o resultado $g'(z) = 0$ já se sabia ser válido. Porquê ?)

$iii)$ Como $g'(z) = 0$ e g' é continua[3], g está nas condições do Teorema (1.7). Logo a sucessão definida por $x_{m+1} = x_m - \dfrac{f(x_m)}{f'(x_m)}, \quad n = 0, 1, \ldots$ converge para z qualquer que seja a aproximação inicial $x_0 \in I_r$. Ou seja, o método de Newton converge para a solução de $f(x) = 0$ em I_r, $\forall x_0 \ \in I_r$.

Ordem de convergência

Se aplicarmos limites à igualdade (1.18), vem

$$\lim_{m\to\infty} |z - x_{m+1}| = \lim_{m\to\infty} |(z - x_m)|^2 \frac{|f''(\xi_m)|}{2|f'(x_m)|}$$

donde

$$\lim_{m\to\infty} \frac{|z - x_{m+1}|}{|(z - x_m)|^2} = \frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|}$$

Se $f''(z) \neq 0$, resulta da definição de ordem de convergência que a ordem é 2. Se $f''(z) = 0$, então a ordem será superior a 2. Neste caso, para se determinar a ordem exacta de convergência, investiga-se qual a primeira derivada de g que não se anula em z, como exemplificamos a seguir. □

Sobre a ordem de convergência do método de Newton

Sendo o método de Newton um método do ponto fixo, pode-se considerar a aplicação do Teorema geral da ordem de convergência do método do ponto fixo (teor 1.9). Da expressão

[3] f é contínua em $\bar{x} \Longleftrightarrow$ dado $\epsilon > 0$ (arbitrário), $\exists\ \delta > 0$ tq. $|f(x) - f(\bar{x})| < \epsilon$, sempre que $|x - \bar{x}| < \delta$

de $g'(x)$ obtida acima, vem

$$g''(x) = \frac{f(x)}{f'^2(x)} f'''(x) + f''(x) \left[\frac{f'(x)}{f'^2(x)} - 2f(x) \frac{f''(x)}{f'^3(x)} \right]$$

donde

$$g''(z) = \frac{\overbrace{f(z)}^{=0}}{f'^2(z)} f'''(z) + f''(z) \left[\frac{f'(z)}{f'^2(z)} - 2\overbrace{f(z)}^{=0} \frac{f''(z)}{f'^3(z)} \right] = \frac{f''(z)}{f'(z)}$$

Segue-se a conclusão já obtida anteriormente de que se $f''(z) \neq 0$ então a convergência é quadrática. Se $f''(z) = 0$, a ordem será superior a 2. A análise, nesse caso, prosseguiria calculando $g'''(x)$, etc, e a ordem seria p tal que $g^{(p)}(z) \neq 0$.

Condições suficientes de convergência para o método de Newton.

O teorema da convergência local garante convergência do método de Newton para z se escolhermos x_0 "suficientemente próximo" de z. Contudo não diz exactamente onde escolher x_0.

Por outro lado, apesar de o método de Newton ser um método do ponto fixo, ou seja uma sucessão da forma $x_{m+1} = g(x_m)$, é em geral difícil mostrar que g satisfaz as condições do **teorema do ponto fixo**.

Apresentamos as seguintes condições suficientes para que o método convirja:

Critério 1: Seja $f \in C^2[a,\ b]$ satisfazendo:

1. $f(a)f(b) < 0$ (existência da raiz)
2. $f'(x) \neq 0,\ \forall\ x \in [a,\ b]$ (unicidade da raiz)
3. $f''(x) \geq 0$ ou $f''(x) \leq 0,\ \forall\ x \in [a,\ b]$ ($f(x)$ não muda o sentido da concavidade em $[a,\ b]$)
4. $\frac{|f(a)|}{|f'(a)|} < b - a$ e $\frac{|f(b)|}{|f'(b)|} < b - a$

Então o método de Newton converge para a solução de $f(x) = 0$, qualquer que seja $x_0 \in [a,\ b]$.

Critério 2: Se as condições 1., 2. e 3. do **critério 1** são válidas e x_0 é escolhido de modo que

$$f(x_0)f''(x) \geq 0\ ,\ \forall\ x \in [a,\ b]$$

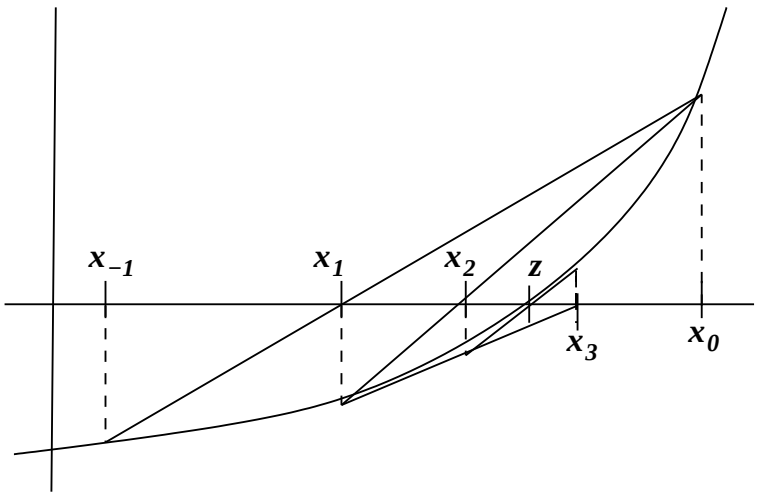
Então o método de Newton converge para a solução de $f(x) = 0$ e a convergência será monótona.

1.2.4 Método da secante

Um dos inconvenientes do método de Newton é o facto de se calcular $f'(x_n)$ a cada iteração, o que pode exigir um grande esforço computacional. Exemplo:

$$\begin{aligned} f(x) &= e^{x^5-2x}\sin(3x)\cos(x^2-1) \\ f'(x) &= e^{x^2}\left(-3\cos(3x)\cos(x^2-1)+\sin(3x)\left(\sin(x^2-1)2x\right)\right) \\ &\quad +\sin(3x)\cos(x^2-1)e^{x^2}(5x^4-2) \end{aligned}$$

O método da secante, em vez de "rectas tangentes", utiliza "rectas secantes" evitando assim o cálculo de $f'(x)$.



Começamos com 2 aproximações iniciais: x_{-1}, x_0. Considera-se os pontos $(x_{-1}, f(x_{-1}))$ e $(x_0, f(x_0))$ e traça-se a recta passando por esses 2 pontos. A intersecção desta recta com o eixo x fornece então o valor de x_1. Tem-se

$$\begin{aligned} & y = \frac{f(x_0)-f(x_{-1})}{(x_0-x_{-1})}(x-x_0)+f(x_0) \\ & y=0 \implies x=x_1 \implies 0 = \frac{f(x_0)-f(x_{-1})}{(x_0-x_{-1})}(x_1-x_0)+f(x_0) \\ & \text{donde obtem-se } x_1 = x_0 - f(x_0)\frac{(x_0-x_{-1})}{f(x_0)-f(x_{-1})} \end{aligned}$$

Para o cálculo de x_2, considera-se a recta passando por $(x_0, f(x_0))$ e $(x_1, f(x_1))$. A intersecção desta recta com o eixo x fornece x_2:

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

Em geral, x_{n+1} é o zero da recta secante passando por $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$ e $(x_n, f(x_n))$ donde obtem-se a fórmula geral do método da secante:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)\frac{(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$

Condições Suficientes de Convergência para o Método da Secante

Critério A1: Se as condições 1., 2., 3. e 4. do critério I do método de Newton forem verificadas então o método da Secante converge para a raiz de $f(x) = 0 \ \forall \ x_{-1}, x_0 \ \in [a,\ b]$.

Critério A2: Se forem verificadas as condições 1., 2. e 3. do critério I do método de Newton e além disso:

4*b*) x_0 e x_{-1} são tais que
$f(x_0)f''(x) \geq 0$
$f(x_{-1})f''(x) \geq 0$

então o método da Secante converge para a única raiz de $f(x) = 0$.

Fórmula do erro do método da Secante

Pode mostrar-se que o erro no método da Secante satisfaz as seguintes fórmulas:

$$z - x_{n+1} = -\frac{f''(\xi_{n1})}{2f'(\xi_{n2})}\,(z - x_{n-1})\,(z - x_n) \quad \xi_{n1} \ \in \ int\,(x_n, x_{n-1}, z) \quad \xi_{n2} \in int\,(x_n, x_{n-1})\,.$$

$$|z - x_{n+1}| \leq K|z - x_{n-1}||z - x_n| \qquad \text{onde } K = \frac{\max\limits_{x\in[a,\ b]}|f''(x)|}{2\min\limits_{x\in[a,\ b]}|f'(x)|}$$

Pode ainda mostrar-se que

$$\lim_{n\to\infty}\frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|^p} = \left(\frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|}\right)^{1/p} \qquad p = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \approx 1.618\ldots$$

Então, se $f'(z) \neq 0$ e $f''(z) \neq 0$, a ordem de convergência é $p = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{5}) \approx 1.618\ldots$,

Exemplo 1.14

Considere a equação

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

a) Mostre que essa equação tem 2 duas raizes, z_1 e z_2 onde $z_1 \in [-1,\ 0]$ e $z_2 \in [0,\ 1]$.

b) Calcule z_2 pelo método da secante tendo como aproximações iniciais $x_{-1} = 0$ e $x_0 = 1$. Faça iteradas até que $|f(x_{n+1})| < 10^{-4}$.

1a) Temos que

$$\begin{cases} f(-1) = f(1) = -1 + e^{-1} = -0.63212, \\ f(0) = e^0 = 1.0... \end{cases} \Longrightarrow \begin{cases} f(-1)f(0) < 0 \\ f(0)f(1) < 0 \end{cases}$$

Como f é contínua, pelo teorema do valor intermediário existe $z_1 \in [-1,\ 0]$ e $z_2 \in [0,\ 1]$ tq. $f(z_1) = f(z_2) = 0$. Agora, $f'(x) = -2xe^{-x^2} - 2x = -2x(\underbrace{1 + e^{-x^2}}_{>0}) = 0 \iff x = 0$. Como $f'(x)$ tem somente 1 zero $\Longrightarrow f(x)$ tem no máximo 2 zeros. Portanto, z_1 e z_2 são os únicos zeros de $f(x)$.

1b) Pelo método da secante temos: $x_{n+1} = x_n - f(x_n)\dfrac{(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$. Tomando $x_{-1} = 0$ e $x_0 = 1$, tem-se:

$$x_1 = x_0 - f(x_0)\frac{(x_0 - x_{-1})}{f(x_0) - f(x_{-1})} = 1 + 0.632121 \times \frac{(1-0)}{-0.632121 - 1.0} = 0.61270$$
$$x_2 = 0.61270 - 0.31161 \times \frac{(0.61270 - 1.0)}{0.31161 + 0.63212} = 0.74058$$
$$x_3 = 0.74058 - 0.02940 \times \frac{0.74058 - 0.61270}{0.02940 - 0.31161} = 0.75390$$
$$x_4 = 0.75390 + 0.00191 \times \frac{(0.75390 - 0.74058)}{-0.00191 - 0.02940} = 0.75309$$

Como $f(x_4) = 0.0000020$ temos que x_4 tem a precisão desejada.

2 Aproximação de funções

2.1 Introdução

Começamos por rever resultados que mostram a importância dos polinómios para aproximar funções contínuas.

Teorema (Weierstrass): Se f é definida e contínua em $[a,\ b]$ então, dado $\epsilon > 0$, existe um polinómio de grau P, definido em $[a,\ b]$, tal que

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon, \quad \forall\ x\ \in\ [a,\ b]$$

Polinómio de Taylor: Seja $f(x)$ uma função definida em $[a,\ b]$ e suponhamos que $f(x)\ \in C^{n+1}[a,\ b]$. Então, um polinómio que pode ser usado para aproximar $f(x)$ é o polinómio de Taylor de grau n em torno de x_0:

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(x_0)\frac{(x - x_0)^2}{2} + \cdots + f^{(n)}(x_0)\frac{(x - x_0)^n}{n!} \tag{2.1}$$

e o erro é dado pelo resto de ordem n:

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = f^{(n+1)}(\xi_x)\frac{(x - x_0)^{n+1}}{(n+1)!} \qquad \xi_x \ \text{ entre } \ x \text{ e } x_0 \tag{2.2}$$

Exemplo 2.1 *Obtenha o polinómio de Taylor de grau 3 da função $f(x) = \sqrt{1+x}$, em torno de $x_0 = 0$, e calcule uma aproximação para $\sqrt{1.1}$.*

Solução:

$$P_3(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(x_0)\frac{(x - x_0)^2}{2} + f'''(x_0)\frac{(x - x_0)^3}{3!}$$

$$\begin{aligned}
f(x) &= (1+x)^{1/2}, & f(x_0) &= f(0) = 1 \\
f'(x) &= \frac{1}{2}(1+x)^{-1/2}, & f'(x_0) &= f'(0) = 1/2 \\
f''(x) &= -\frac{1}{4}(1+x)^{-3/2}, & f''(x_0) &= f''(0) = -1/4 \\
f'''(x) &= \frac{3}{8}(1+x)^{-5/2}, & f''(x_0) &= f''(0) = 3/8
\end{aligned}$$

Portanto,

$$P_3(x) = 1 + \frac{1}{2}x + \frac{-1}{4}\frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{8}\frac{1}{3!}x^3 \quad = \quad 1 + \frac{1}{2}x + \frac{-1}{8}x^2 + \frac{1}{16}x^3$$

donde obtemos

$$f(1.1) = \sqrt{1.1} \approx P_3(1.1) = 1 + \frac{1}{2}(0.1) + \frac{-1}{8}0.1^2 + \frac{1}{16}0.1^3 = 1.0488125$$

2.2 Interpolação polinomial

Considere a seguinte tabela de dados sobre a população dos EUA:

Ano	1930	1940	1950	1960	1970	1980
Pop. (milhões)	123.203	131.669	150.697	179.323	203.212	226.505

Com base nestes dados, pergunta-se:

i) Pode-se obter uma estimativa para a população em 1965?

i) Qual seria a população no ano 2000?

Podemos responder a estas duas perguntas utlizando uma função interpoladora.

Definição 2.1 *: (***função interpoladora***)*

Seja f uma função definida num intervalo $[a, b]$. Sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n$ $n+1$ pontos distintos de $[a, b]$ e defina-se $f_j := f(x_j), \quad j = 0, 1, \ldots, n$. Uma função g tal que

$$g(x_j) = f_j, \qquad j = 0, 1, \ldots, n. \tag{2.3}$$

é chamada função interpoladora. Os pontos x_j são chamados pontos de interpolação ou nós e os valores f_j os valores interpolados.

Em particular, vão ser do nosso interesse funções interpoladoras polinomiais.

Existência e unicidade do polinómio interpolador

Teorema 2.1 *Sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n$ $n+1$ pontos distintos do intervalo $[a, b]$ e sejam $f_0, f_1, \cdots, f_n$ os correspondentes valores de uma função f nesses pontos. Existe um único polinómio p_n de grau $\leq n$ que interpola f nos pontos $x_j, j = 0, 1, \cdots, n$, ou seja, tal que:*

$$p_n(x_j) = f_j, \qquad j = 0, 1, \cdots, n. \tag{2.4}$$

Dem.:

Seja

$$p_n(x) := a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n, \tag{2.5}$$

onde os coeficientes a_j são constantes a determinar. As condições (2.4) traduzem-se nas $n+1$ equações

$$p_n(x_j) = a_0 + a_1 x_j + a_2 x_j^2 + \cdots + a_n x_j^n, \qquad j = 0, 1, \cdots, n.$$

Estas constituem um sistema da forma $\mathbf{Va} = \mathbf{f}$, onde $\mathbf{V}$ é a matriz definida por

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

e onde $\mathbf{a} = [a_0 a_1 \cdots a_n]^T$ e $\mathbf{f} = [f_0 f_1 \cdots f_n]^T$. A matriz $\mathbf{V}$ é uma matriz de Vandermonde e pode verificar-se que o seu determinante é dado por

$$det\mathbf{V} = \prod_{0 \le j < i \le n} (x_i - x_j)$$

Sendo os x_j distintos, será $det\mathbf{V} \neq 0$. Então $\mathbf{V}$ é não singular e o sistema $\mathbf{Va} = \mathbf{f}$ tem uma solução única $\mathbf{a}$. Fica provada a existência dum único polinómio interpolador de grau $\le n$. Para se obter os coeficientes $a_0, a_1, \cdots, a_n$ que devem ser inseridos em (2.5), é necessário resolver o sistema $\mathbf{Va} = \mathbf{f}$. Este processo de determinar uma expressão para p_n é pouco conveniente do ponto de vista computacional. Outros modos de construir p_n serão tratados neste capítulo. □

A fórmula de Lagrange

Vamos em seguida obter uma expressão explícita para o polinómio interpolador.

Para cada $0 \le j \le n$, seja l_j o poliómio de grau n definido por

$$l_j(x) := \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{j-1})(x - x_{j+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_j - x_0)(x_j - x_1) \cdots (x_j - x_{j-1})(x_j - x_{j+1}) \cdots (x_j - x_n)}.$$

Os l_j são chamados *polinómios base de Lagrange*.

Facilmente se verifica que

$$l_j(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{se } i = j \\ 0 & \text{se } i \neq j \end{cases} \tag{2.6}$$

Vamos provar que p_n pode ser representado na seguinte forma

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f_j l_j(x).$$

Seja $q(x)$ a expressão do lado direito, isto é

$$q(x) = \sum_{j=0}^{n} f_j l_j(x).$$

Quer-se provar que $p_n(x) = q(x)$. Comecemos por notar que a soma de polinómios de grau n é um polinómio de grau $\leq n$. Além disso, atendendo a (2.6) tem-se, para $0 \leq i \leq n$,

$$\begin{aligned} q(x_i) &= f_0 l_0(x_i) + \cdots + f_n l_n(x_i) \\ &= f_i l_i(x_i) = f_i, \end{aligned}$$

o que prova tratar-se dum polinómio interpolador de grau $\leq n$. Atendendo à unicidade do polinómio interpolador (teorema 2.1), concluimos a igualdade pretendida.

A fórmula

$$p_n(x) = \sum_{j=0}^{n} f_j l_j(x), \tag{2.7}$$

com

$$l_j(x) := \prod_{\substack{0 \leq i \leq n \\ i \neq j}} \frac{(x - x_i)}{(x_j - x_i)} \tag{2.8}$$

é chamada *fórmula de Lagrange* para o polinómio interpolador.

Exemplo 2.2 *Determine o polinómio interpolador de grau ≤ 2 duma certa função f nos seguintes pontos tabelados*

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

Solução

Tem-se

$$l_0(x) = \frac{(x+1)(x-2)}{(1+1)(1-2)} = \frac{x^2 - x - 2}{-2}$$

$$l_1(x) = \frac{(x-1)(x-2)}{(-1-1)(-1-2)} = \frac{x^2 - 3x + 2}{6}$$

$$l_2(x) = \frac{(x-1)(x+1)}{(2-1)(2+1)} = \frac{x^2 - 1}{3}$$

A fórmula (2.7) dá-nos então

$$p_2(x) = 0 - 3\frac{x^2 - 3x + 2}{6} + 4\frac{x^2 - 1}{3}.$$

Se quisermos representar p_2 em potências de x, basta-nos efectuar os cálculos na expressão obtida. Tem-se, neste caso, $p_2(x) = \frac{1}{6}(5x^2 + 9x - 14)$, que está na forma (2.5). $\square$

É importante distinguir entre a *função* p_n e as várias *representações* de p_n. Pelo teorema anterior, sabemos que p_n é único, para cada conjunto de $n+1$ valores. Contudo, poderá haver muitas maneiras de representar explicitamente p_n e cada uma dessas *fórmulas* sugere um dado algoritmo para calcular p_n. Mais adiante estudaremos outra representação para p_n.

Erro de interpolação polinomial

Como pretendemos usar o polinómio interpolador para aproximar a função f em pontos distintos dos *pontos de interpolação* x_j, interessa-nos uma estimativa da diferença $f(x) - p_n(x)$, para $x \in [a, b]$.

Teorema 2.2 *Seja $p_n \in \mathcal{P}_n$ o polinómio interpolador de f em $n+1$ pontos distintos $x_0, x_1, \cdots, x_n$ de $[a, b]$. Se $f \in C^{n+1}[a, b]$, então para cada $x \in [a, b]$ existe um ponto $\xi = \xi(x)$ no intervalo* $\text{int}(x_0, \ldots, x_n, x) := (\min\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x\}, \max\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x\})$, *tal que*

$$e_n(x) := f(x) - p_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} W(x), \tag{2.9}$$

onde

$$W(x) := (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n).$$

Dem.:

Se $x = x_j$, para algum j, o resultado do teorema é trivialmente válido.
Seja x um valor diferente dos x_j e considere-se a função auxiliar F definida por

$$F(t) := f(t) - p_n(t) - CW(t), \tag{2.10}$$

onde

$$C = \frac{f(x) - p_n(x)}{W(x)}.$$

Tem-se

$$F(x_j) = f(x_j) - p_n(x_j) - CW(x_j) = 0, \quad j = 0, 1, \cdots, n,$$

e também

$$F(x) = f(x) - p_n(x) - CW(x) = 0,$$

atendendo à definição de C. A função F tem pelo menos $n+2$ zeros distintos em $[a, b]$. Pelo teorema de Rolle, a derivada F' tem pelo menos $n+1$ zeros no intervalo $I_p(x_0, x_1, \ldots, x_n, x)$.

A segunda derivada terá pelo menos n zeros e, por um processo indutivo, concluimos que a derivada de ordem $(n+1)$ tem pelo menos um zero. Seja ξ esse zero. Derivando $n+1$ vezes a equação (2.10) e fazendo $t = \xi$, obtemos

$$0 = F^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - C(n+1)!,$$

o que, depois de substituir C pela sua expressão, conduz ao resultado pretendido. □

É evidente que a equação (2.9) não pode ser usada para calcular o valor exacto do erro $e_n(x)$, visto que $\xi = \xi(x)$ é em geral uma função desconhecida. (Uma excepção é o caso em que a derivada de ordem $(n+1)$ de f é uma constante).

Porém, sendo $f^{(n+1)}$ contínua, existirá uma constante M_{n+1} tal que $|f^{(n+1)}(\xi)| \leq M_{n+1}$ para qualquer $\xi \in [a, b]$. Isto, juntamente com a equação (2.9), resulta na fórmula

$$|e_n(x)| = |f(x) - p_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}|W(x)| \tag{2.11}$$

Fórmula interpoladora de Newton com diferenças divididas

Uma outra forma de representar o polinómio interpolador é usando diferenças divididas, que a seguir definiremos. Este método, devido a Isaac Newton (1642-1727), permite passar dum polinómio interpolador dum certo grau $n-1$ para o polinómio de grau superior n, a partir do polinómio de grau inferior.

Mais precisamente, sejam $p_{n-1} \in \mathcal{P}_{n-1}$ e $p_n \in \mathcal{P}_n$ os polinómios interpoladores de f nos pontos x_i, para $i = 0, 1, \cdots, n-1$ e $i = 0, 1, \cdots, n$, respectivamente. Vamos provar que é possível escrever

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + C_n(x), \tag{2.12}$$

onde C_n é uma função que a seguir caracterizamos.

Como $C_n \in \mathcal{P}_n$ e $C_n(x_i) = 0, i = 0, 1, \cdots, n-1$, então C_n é da forma

$$C_n(x) = A_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})$$

com A_n constante real. Substituindo em (2.12), vem

$$p_n(x) = p_{n-1}(x) + A_n(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1}). \tag{2.13}$$

Começando com $p_0(x) = f_0$, obtém-se desta relação

$$p_1(x) \;=\; f_0 + A_1(x - x_0) \tag{2.14}$$

$$
\begin{aligned}
p_2(x) &= p_1(x) + A_2(x-x_0)(x-x_1) \\
&= f_0 + A_1(x-x_0) + A_2(x-x_0)(x-x_1) \qquad (2.15)\\
p_3(x) &= p_2(x) + A_3(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \\
&= f_0 + A_1(x-x_0) + A_2(x-x_0)(x-x_1) + A_3(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \qquad (2.16)\\
&\vdots \\
p_n(x) &= f_0 + A_1(x-x_0) + A_2(x-x_0)(x-x_1) + A_3(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) + \cdots \\
&+ A_n(x-x_0)\cdots(x-x_{n-1}) \qquad (2.17)
\end{aligned}
$$

Substituindo x por $x_1, x_2, \cdots, x_n$, respectivamente nas equações (2.14) ,..., (2.17), obtemos um sistema de equações (de matriz triangular) nas incógnitas $A_1, \cdots, A_n$. É fácil de verificar que este sistema tem uma solução única.

Assim, de $p_1(x_1) = f_1$, sai que

$$A_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}, \qquad (2.18)$$

Repare-se que A_1 é o declive da recta que passa pelos pontos $(x_0, f(x_0))$ e $(x_1, f(x_1))$. Chama-se a A_1 *diferença dividida de 1ª ordem da função* f, *associada aos pontos* x_0, x_1, e designa-se por

$$A_1 = f[x_0, x_1] \qquad (2.19)$$

Em seguida, substitui-se A_1 pela expressão (2.18) na equação (2.15). Para se determinar A_2, basta fazer $x = x_2$ em (2.15) e usar o facto de $p_2(x_2) = f_2$ (por p_2 interpolar f em x_0, x_1, x_2. Assim, obtém-se

$$f_2 = p_2(x_2) = f_0 + \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}(x_2 - x_0) + A_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) \qquad (2.20)$$

o que, depois de simplificados os cálculos, conduz a

$$A_2 = \frac{f_0}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{f_1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \qquad (2.21)$$

Chama-se a A_2 *diferença dividida de 2ª ordem da função* f, *associada aos pontos* x_0, x_1, x_2, e designa-se por

$$A_2 = f[x_0, x_1, x_2] \qquad (2.22)$$

Conhecidas A_1 e A_2, de modo análogo se obteria A_3 da equação (2.16). E assim sucessivamente, até obter todas as constantes até A_n.

Notando que se pode reescrever

$$A_1 = \frac{f_0}{x - x_1} + \frac{f_1}{x - x_0}$$

e comparando com a expressão de A_2, é fácil de compreender que a expressão geral de A_n seja dada por

$$A_n = \sum_{j=0}^{n} \frac{f_j}{\prod\limits_{\substack{0 \leq i \leq n \\ i \neq j}} (x_j - x_i)} \tag{2.23}$$

No seguimento do que foi definido atrás, usa-se a seguinte notação para designar o valor A_n,

$$A_n = f[x_0, x_1, \cdots, x_n] \tag{2.24}$$

a que se chama *diferença dividida de ordem n da função f, associada aos pontos* $x_0, x_1, \cdots, x_n$.

De (2.17), podemos ainda concluir: A_n, ou seja, $f[x_0, x_1, \cdots, x_n]$, é *o coeficiente do termo em* x^n *de* p_n.

Com a notação das diferenças divididas, podemos escrever o polinómio interpolador p_n na forma

$$\begin{aligned} p_n(x) &= f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \\ &\quad \cdots + f[x_0, x_1, \cdots, x_n](x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) \end{aligned} \tag{2.25}$$

a que se chama *fórmula de Newton com diferenças divididas*. Por uma questão de uniformidade, no lugar de $f(x_i)$ usa-se $f[x_i]$, a que se chama diferença de ordem zero.

Exemplos

Resulta de (2.23) e (2.24) que

$$f[x_0, x_1] = \frac{f_0}{x_0 - x_1} + \frac{f_1}{x_1 - x_0}$$

o que confirma a expressão já obtida em (2.18). De modo geral, a diferença dividida de ordem 2, nos pontos x_i, x_{i+1}, é dada por

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

Como exemplo de diferença de ordem 3, tem-se

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f_0}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + \frac{f_1}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} + \frac{f_2}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

A seguinte propriedade permite relacionar diferenças de uma certa ordem k com diferenças de ordem $k - 1$.

$$f[x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}] - f[x_i, , \cdots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i} \tag{2.26}$$

Resulta também de (2.23) que $f[x_0, \cdots, x_n]$ é uma função simétrica de $x_0, \cdots, x_n$, isto é, qualquer permutação dos x_i conduz ao mesmo valor da diferença dividida.

A fórmula (2.26) permite calcular as diferenças divididas usando um esquema recursivo que é em geral apresentado sob a forma duma tabela.

Tabela de diferenças divididas

x_i	$f[x_i]$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[\ ,\ ]$	$f[\ ,\ ,\ ]$	$f[\ ,\ ,\ ,\ ]$
x_0	$f[x_0]$				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$	
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4]$		
		$f[x_3, x_4]$			
x_4	$f[x_4]$				

Na 1^a coluna escrevem-se os pontos x_i e na 2^a coluna os valores $f(x_i), 0 \leq i \leq n$. Depois de obter a terceira coluna da tabela, ou seja, as diferenças de 1^a ordem, por aplicação de (2.26)

podem obter-se as diferenças de 2^a ordem na coluna seguinte, e assim sucessivamente. Por exemplo, depois de se calcular

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0}, \quad f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1}$$

$$f[x_2, x_3] = \frac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2}, \quad f[x_3, x_4] = \frac{f[x_4] - f[x_3]}{x_4 - x_3}$$

pode-se obter

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}, \quad f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1}$$

Exemplo 2.3 *Considere-se a função f dada pela tabela*

x_i	*0*	*1*	*2*
f_i	*1*	*1*	*2*

Obtenha um valor aproximado de $f(1.5)$ utilizando um polinómio interpolador de grau ≤ 2.

Utilizando a fórmula de Newton para o polinómio interpolador temos:

$$p_2(x) = f(x_0) + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1)$$

onde $x_0 = 0, x_1 = 1, x_2 = 2$.

Cálculo da diferenças divididas:

x_i	$f(x_i)$	$f[x_i, x_{i+1}]$	$f[x_0, x_1, x_2]$
0	1		
		$f[x_0, x_1] = \frac{1-1}{1-0} = 0$	
1	1		$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{1-0}{2-0} = 0.5$
		$f[x_1, x_2] = \frac{2-1}{2-1} = 1$	
2	2		

Logo, $p_2(x) = 1 + 0.5x(x - 1)$ e $f(1.5) \approx p_2(1.5) = 1.375$.

Relação entre as diferenças divididas e as derivadas de f

Seja $f \in C^{n+1}[a,b]$ e sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n$ pontos distintos de $[a,b]$. Usando a fórmula de Newton com diferenças divididas, podemos escrever a igualdade

$$f(x) = f[x_0] + f[x_0,x_1](x-x_0) + \cdots + f[x_0,x_1,\cdots,x_n](x-x_0)\cdots(x-x_{n-1}) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}W(x), \tag{2.27}$$

onde $W(x) = (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$ e $\xi \in \text{int}(x_0,\ldots,x_n,x)$. O último termo do lado direito da equação representa o erro de interpolação (ver eq. (2.9)).

Comparando (2.27) com a fórmula de Taylor

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \cdots + f^{(n)}(x_0)\frac{(x-x_0)^n}{n!} + f^{(n+1)}(\gamma)\frac{(x-x_0)^{n+1}}{(n+1)!},$$

com γ entre x_0 e x, constatamos uma certa semelhança entre as duas fórmulas, sugerindo a *existência duma relação entre as diferenças divididas e as derivadas de f*. Com efeito, basta notar por exemplo que sendo

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

resulta do Teorema do valor médio de Lagrange que $f[x_0,x_1]$ coincidirá com o valor da derivada f' nalgum ponto situado entre x_0 e x_1.

É possível generalizar este resultado às diferenças divididas de ordem superior.

Teorema 2.3 *Seja $f \in C^n[a,b]$ e $x_0, x_1, \cdots, x_n$ quaisquer pontos distintos de $[a,b]$. Então*

$$f[x_0,x_1,\cdots,x_n] = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}, \qquad \xi \in \text{int}(x_0,\ldots,x_n,x_n). \tag{2.28}$$

Nota

Conclui-se de (2.28) que se $f \in \mathcal{P}_n$, as diferenças divididas de f de ordem superior a n são zero.

2.3 Aproximação segundo o critério dos mínimos quadrados

Nesta secção, consideraremos outros tipos de funções aproximadoras para $f(x)$, sem a exigência de que elas interpolem f. Com efeito, em muitas situações não é conveniente que a função aproximadora seja uma função interpoladora.

Por exemplo, suponhamos que a função f traduz uma relação entre duas grandezas físicas, x e $f(x)$.

Seja um conjunto de dados $(x_0, f_0), (x_1, f_1), \ldots, (x_n, f_n)$, onde os valores f_i $i = 0, 1, \ldots, n$ foram obtidos experimentalmente; ou seja, apenas dispomos dos valores $f(x_i) + \epsilon_i$, $i = 0, 1, \ldots, n$, onde os erros ϵ_i são desconhecidos. Neste caso, não seria razoável aproximar f por um polinómio passando por $(x_i, f(x_i) + \epsilon_i)$, $i = 0, 1, \ldots, n$, a não ser que os erros ϵ_i fossem pequenos. Uma solução mais adequada será utilizar uma função aproximadora, que poderá ser polinomial ou não, com a forma

$$g(x) = \alpha_0\phi_0(x) + \alpha_1\phi_1(x) + \ldots + \alpha_m\phi_m(x) \tag{2.29}$$

que se aproxime o "mais possível" de $f(x)$, sem contudo a imposição de passar pelos pontos (x_i, f_i).

Os parâmetros $\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_m$ são determinados de modo que os desvios

$$d_i = f_i - g_i, \quad i = 0, 1, \cdots, n$$

onde $g_i = g(x_i)$, sejam tão pequenos quanto possível, segundo algum critério. Se impusermos

$$d_i = 0$$

caimos no caso da interpolação (o que não queremos).

Designando por $\overline{d}$, $\overline{f}$ e $\overline{g}$ os vectores de $\mathbb{R}^{n+1}$ com componentes d_i, f_i e g_i e escolhendo em $\mathbb{R}^{n+1}$ uma norma vectorial $\|.\|$, os parâmetros $\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_m$ podem ser determinados de modo que

$$\|\overline{d}\| = \|\overline{f} - \overline{g}\|$$

seja mínima. Como exemplos de normas de $\mathbb{R}^{n+1}$ tem-se:

$$\|\overline{d}\|_1 = \sum_{i=0}^{n} |d_i|, \quad \|\overline{d}\|_\infty = \max_{0\le i\le n} |d_i|, \quad \|\overline{d}\|_2 = \left(\sum_{i=0}^{n} |d_i|^2\right)^{1/2}$$

De entre essas normas, a norma euclidiana $\|.\|_2$ é a que conduz a uma técnica mais simples. Então **no método dos mínimos quadrados**, os parâmetros $\alpha_0, \ldots, \alpha_m$ são determinados

de modo a **minimizar**

$$||\overline{d}||_2 = \left(\sum_{i=0}^{n}(d_i)^2\right)^{1/2} = \left(\sum_{i=0}^{n}(f_i - g_i)^2\right)^{1/2}$$

Isso equivale a **minimizar** simplesmente a quantidade

$$D = ||\overline{d}||_2^2 = \sum_{i=0}^{n}(f_i - g_i)^2$$

Exemplo 2.4

Considere a seguinte tabela de valores de uma função f

x_i	2	4	6	8
$f(x_i)$	2	11	28	40

Determine a recta $g(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x$ que melhor se aproxima de f segundo o critério dos mínimos quadrados. Considerando-se

$$D = \sum_{i=0}^{3}(f_i - \alpha_0 - \alpha_1 x_i)^2$$

como uma função das variáveis α_0 e α_1, pretende-se os valores de α_0 e α_1 que tornam D mínima. O sistema de estacionaridade para D é o seguinte

$$\frac{\partial D}{\partial \alpha_0} = 0; \quad \frac{\partial D}{\partial \alpha_1} = 0 \tag{2.30}$$

Depois de calculadas as derivadas parciais e substituídos os valores dos x_i e dos f_i, em (2.30), obtém-se o sistema

$$\begin{aligned} &4\alpha_0 + 20\alpha_1 = 81 \\ &20\alpha_0 + 120\alpha_1 = 536, \quad \text{cuja solução é } \alpha_0 = -12.5,\ \alpha_1 = 6.55. \end{aligned} \tag{2.31}$$

Caso teórico geral; equações normais

Consideremos agora o caso geral de obter uma função da forma (2.29), onde os valores dos parâmetros $\alpha_0, \ldots, \alpha_n$ pretendidos são os que tornam mínima a função

$$D(\alpha_0, \ldots, \alpha_m) = \sum_{i=0}^{n} (f_i - g_i)^2$$

Pela teoria das funções reais em $\mathbb{R}^m$, impomos agora as seguintes condições sobre D:

$$\frac{\partial D}{\partial \alpha_j} = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, m$$

Fazendo como no exemplo acima, obtém-se o sistema:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial D}{\partial \alpha_0} = 0 &\Leftrightarrow \sum_{i=0}^{n} 2[f_i - \alpha_0\phi_0(x_i) - \ldots \alpha_m\phi_m(x_i)](-\phi_0(x_i)) = 0 \\
\frac{\partial D}{\partial \alpha_1} = 0 &\Leftrightarrow \sum_{i=0}^{n} 2[f_i - \alpha_0\phi_0(x_i) - \ldots \alpha_m\phi_m(x_i)](-\phi_1(x_i)) = 0 \\
&\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
\frac{\partial D}{\partial \alpha_m} = 0 &\Leftrightarrow \sum_{i=0}^{n} 2[f_i - \alpha_0\phi_0(x_i) - \ldots \alpha_m\phi_m(x_i)](-\phi_m(x_i)) = 0
\end{aligned}$$

que se pode reescrever na forma

$$\begin{aligned}
&\alpha_0 \sum_{i=0}^{n} \phi_0(x_i)\phi_0(x_i) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} \phi_0(x_i)\phi_1(x_i) + \ldots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} \phi_0(x_i)\phi_m(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f_i\phi_0(x_i) \\
&\alpha_0 \sum_{i=0}^{n} \phi_1(x_i)\phi_0(x_i) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} \phi_1(x_i)\phi_1(x_i) + \ldots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} \phi_1(x_i)\phi_m(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f_i\phi_1(x_i) \\
&\qquad\vdots \qquad\qquad\qquad\vdots \qquad\qquad\qquad\vdots \qquad\qquad\vdots \qquad\qquad\vdots \\
&\alpha_0 \sum_{i=0}^{n} \phi_m(x_i)\phi_0(x_i) + \alpha_1 \sum_{i=0}^{n} \phi_m(x_i)\phi_1(x_i) + \ldots + \alpha_m \sum_{i=0}^{n} \phi_m(x_i)\phi_m(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f_i\phi_m(x_i)
\end{aligned}$$

Trata-se de um sistema linear de $m + 1$ equações nas $m + 1$ incógnitas $\alpha_0, \ldots, \alpha_m$, a que se chama *sistema de equações normais* ou *sistema normal*.

Sejam os vectores de $\mathbb{R}^{n+1}$:

$$\overline{\phi}_0 = [\phi_0(x_0), \ldots, \phi_0(x_n)]^T, \overline{\phi}_1 = [\phi_1(x_0), \ldots, \phi_1(x_n)]^T, \ldots, \overline{\phi}_m = [\phi_m(x_0), \ldots, \phi_m(x_n)]^T$$

Com o produto interno usual em $\mathbb{R}^{n+1}$:

$$\overline{u}, \overline{v} \in \mathbb{R}, \quad < \overline{u}, \overline{v} >= \sum_{i=0}^{n} u_i v_i$$

o sistema de equações normais toma a forma

$$\begin{bmatrix} < \overline{\phi}_0, \overline{\phi}_0 > & < \overline{\phi}_0, \overline{\phi}_1 > & < \overline{\phi}_0, \overline{\phi}_2 > & \cdots & < \overline{\phi}_0, \overline{\phi}_m > \\ < \overline{\phi}_1, \overline{\phi}_0 > & < \overline{\phi}_1, \overline{\phi}_1 > & < \overline{\phi}_1, \overline{\phi}_2 > & \cdots & < \overline{\phi}_1, \overline{\phi}_m > \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ < \overline{\phi}_m, \overline{\phi}_0 > & < \overline{\phi}_m, \overline{\phi}_1 > & < \overline{\phi}_m, \overline{\phi}_2 > & \cdots & < \overline{\phi}_m, \overline{\phi}_m > \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} < \overline{f}, \overline{\phi}_0 > \\ < \overline{f}, \overline{\phi}_1 > \\ \vdots \\ < \overline{f}, \overline{\phi}_m > \end{bmatrix} \tag{2.32}$$

Trata-se de um sistema não homogéneo de $n+1$ equações lineares nas $n+1$ incógnitas $\alpha_k, k = 0, 1, \ldots, n$. Note-se que a matriz do sistema é simétrica. Prova-se que se as funções $\phi_0(x), \phi_1(x), \ldots, \phi_m(x)$ forem linearmente independentes então o sistema tem uma solução única, a qual é ponto de mínimo de D.

Exercício

Defina os vectores $\overline{f}, \overline{\phi}_j, j = 0, 1$ e obtenha o sistema normal (2.32) para resolver o problema de mínimos quadrados do exemplo 2.4. Deverá coincidir com o sistema já obtido (2.31).

3 Integração numérica

Seja $f \in C[a,\ b]$ e considere o integral definido

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx.$$

Suponha que $f(x)$ é uma "função complicada" (não se conhece uma primitiva) ou que f é conhecida somente num número finito de pontos. Uma aproximação para $I(f)$ pode ser obtida como segue.

Sejam $x_0 = a < x_1 < \cdots < x_n = b,\ \ n+1$ pontos em $[a,\ b]$ e seja $p_n(x)$ o polinómio de grau $\leq n$ interpolador de $f(x)$ nesses pontos. As fórmulas que consideraremos baseiam-se na aproximação

$$I(f) \simeq I(p_n)$$

Se $f \in C^{(n+1)}[a,b]$, então $f(x) = p_n(x) + e_n(x)$, onde $e_n(x)$ é o erro de interpolação, dado por (2.9). Ou seja,

$$f(x) = p_n(x) + (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a,\ b].$$

Logo,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_n(x)dx + \underbrace{\int_a^b e_n(x)dx}_{E_n(f)}, \tag{3.1}$$

onde

$$E_n(f) := \int_a^b e_n(x)dx = \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}dx \tag{3.2}$$

Se desprezarmos o termo $E_n(f)$ obtemos a aproximação

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_n(x)dx; \tag{3.3}$$

o termo $E_n(f)$ é o erro cometido ao fazer-se essa aproximação (é um erro de truncatura), também chamado *erro de integração*. Vemos de (3.2) que o erro de integração é o integral do erro de interpolação associado a p_n.

Vamos em seguida obter uma expressão para $\int_a^b p_n(x)dx$.

Utilizando a fórmula de Lagrange do polinómio interpolador, vem:

$$\begin{aligned}\int_a^b p_n(x)dx &= \int_a^b \left(\sum_{k=0}^{n} l_k(x)f(x_k)\right)dx \\ &= \sum_{k=0}^{n}\int_a^b l_k(x)f(x_k)dx = \sum_{k=0}^{n}\underbrace{\left(\int_a^b l_k(x)dx\right)}_{A_k} f(x_k).\end{aligned}$$

Substituindo em (3.3) obtém-se a aproximação

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \tag{3.4}$$

Chama-se *fórmula de quadratura* à soma no lado direito; os pontos $x_0, \cdots, x_n$ são os *nós de integração* e os

$$A_k = \int_a^b l_k(x)dx, 0 \leq k \leq n,$$

são chamados os *pesos da fórmula de quadratura*.

3.1 Fórmulas de Newton-Cotes fechadas

As fórmulas de Newton-Cotes fechadas são obtidas através de (3.4), considerando os pontos $x_0, x_1, \cdots, x_n$, igualmente espaçados em $[a,\ b]$, com $x_0 = a$ e $x_n = b$, ou seja,

$$x_j = a + jh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad j = 0, 1, \cdots, n$$

As fórmulas de Newton-Cotes fechadas mais conhecidas são a "Fórmula dos Trapézios" e a "Fórmula de Simpson".

Fórmula dos Trapézios

Esta fórmula resulta de aproximar $f(x)$ pelo polinómio interpolador em $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Nesse caso, fazendo $n = 1$ em (3.4), obtemos:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\simeq A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1) \quad \text{onde} \quad x_0 = a, x_1 = b \text{ e } h = x_1 - x_0 \\ & A_0 = \int_a^b l_0(x)dx, \qquad A_1 = \int_a^b l_1(x)dx\end{aligned}$$

Cálculo de A_0 e A_1

$$\begin{aligned} A_0 &= \int_a^b \frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}dx = -\frac{1}{h}\int_a^b (x-x_1)dx = -\frac{1}{h}\frac{(x-x_1)^2}{2}|_{x_0}^{x_1} \\ &= \frac{1}{h}\frac{(x_0-x_1)^2}{2} = \frac{1}{h}\frac{h^2}{2} = \frac{h}{2} \\ A_1 &= \int_a^b \frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}dx = \frac{1}{h}\int_a^b (x-x_0)dx = \frac{1}{h}\frac{(x-x_0)^2}{2}|_{x_0}^{x_1} \\ &= \frac{1}{h}\frac{(x_1-x_0)^2}{2} = \frac{1}{h}\frac{h^2}{2} = \frac{h}{2} \end{aligned}$$

Logo, a fórmula de quadratura é dada por:

$$T(f) = \frac{h}{2}f(x_0) + \frac{h}{2}f(x_1) = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + f(x_1)\right]$$

Erro de integração: $E^T(f) = I(f) - T(f)$

Como vimos, a fórmula dos trapézios foi deduzida aproximando $I(f) = \int_a^b f(x)dx$ pelo integral do polinómio interpolador de $f(x)$ nos pontos $x_0 = a$ e $x_1 = b$. Para obtermos uma expressão do erro cometido procedemos como segue:

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

logo,

$$\begin{aligned} &\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_1(x)dx + \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx \\ &\Longrightarrow \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_1(x)dx = \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx \\ &\Longrightarrow I(f) - T(f) = \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx \end{aligned}$$

Portanto o erro é dado por:

$$E^T(f) = \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx \tag{3.5}$$

É claro que poderíamos ter usado directamente (3.2), con $n = 1$. Para simplificarmos a equação acima, faremos uso do seguinte resultado da Análise:

Teorema do valor médio para integrais: Se $f \in C[a,\ b]$ e g é uma função integrável em $[a,\ b]$ que não muda de sinal em $[a,\ b]$ então existe $z \in (a,\ b)$ tal que

$$\int_a^b f(x)g(x)dx = f(z)\int_a^b g(x)dx$$

No caso do integral (3.5), tem-se $W(x) = (x-x_0)(x-x_1) \leq 0\ \forall\ x \in [x_0,\ x_1]$. Aplicando o teor. valor médio para integrais

$$\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)\frac{f''(\xi(x))}{2!}dx = \frac{f''(c)}{2!}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)dx,\ z \in [x_0, x_1],$$

onde

$$\begin{aligned}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)dx &= (x-x_0)\frac{(x-x_1)^2}{2}|_{x_0}^{x_1} - \int_a^b \frac{(x-x_1)^2}{2}dx \\ &= -\frac{(x-x_1)^3}{6}|_{x_0}^{x_1} = \frac{(x_0-x_1)^3}{6} = -\frac{h^3}{6}\end{aligned}$$

Obtem-se assim a seguinte fórmula para o erro da regra dos Trapézios:

$$E^T(f) = -\frac{h^3}{12}f''(c) \quad z \in [a,b]\ .$$

Fórmula de Simpson

A fórmula de Simpson é obtida ao aproximarmos $I(f)$ por $I(p_2)$, onde $p_2(x)$ é o polinómio interpolador de $f(x)$ nos pontos $x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}$ e $x_2 = b$. Nesse caso temos:

$$f(x) = p_2(x) + (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}, \quad \text{com} \quad \xi(x) \in [a,\ b],$$

$$\text{com } p_2(x) = l_0(x)f(x_0) + l_1(x)f(x_1) + l_2(x)f(x_2)\ .$$

Logo,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_2(x)dx + \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a,\ b] \tag{3.6}$$

e, desprezando o segundo termo do lado direito, que representa o erro de integração, resulta a seguinte aproximação para o integral de f

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_2(x)dx$$

Calculando $\int_a^b p_2(x)dx$ vem:

$$\begin{aligned}\int_a^b p_2(x)dx &= \int_a^b l_0(x)f(x_0)dx + \int_a^b l_1(x)f(x_1)dx + \int_a^b l_2(x)f(x_2)dx \\ &= f(x_0)\int_a^b l_0(x)dx + f(x_1)\int_a^b l_1(x)dx + f(x_2)\int_a^b l_2(x)dx\end{aligned}$$

Cálculo de A_0, A_1, A_2

$$\begin{aligned}A_0 &= \int_a^b \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}dx = \frac{1}{2h^2}\int_a^b (x-x_1)(x-x_2)dx \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[(x-x_1)\frac{(x-x_2)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \int_a^b \frac{(x-x_2)^2}{2}dx\right] \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[(x-x_1)\frac{(x-x_2)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \frac{(x-x_2)^3}{6}|_{a=x_0}^{b=x_2}\right] \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[h\frac{4h^2}{2} - \frac{8h^3}{6}\right] = \frac{1}{2h^2}\left[2h^3 - \frac{4}{3}h^3\right] = \frac{1}{2h^2}\left[\frac{2}{3}h^3\right] = \frac{1}{3}h\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}A_1 &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}dx - \frac{1}{h^2}\int_a^b (x-x_0)(x-x_2)dx \\ &= -\frac{1}{h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_2)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \int_a^b \frac{(x-x_2)^2}{2}dx\right] \\ &= -\frac{1}{h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_2)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \frac{(x-x_2)^3}{6}|_{a=x_0}^{b=x_2}\right] \\ &= -\frac{1}{h^2}\left[-\frac{8h^3}{6}\right] = \frac{4}{3}h\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}A_2 &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}dx = -\frac{1}{2h^2}\int_a^b (x-x_0)(x-x_1)dx \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_1)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \int_a^b \frac{(x-x_1)^2}{2}dx\right] \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[(x-x_0)\frac{(x-x_1)^2}{2}|_{a=x_0}^{b=x_2} - \frac{(x-x_1)^3}{6}|_{a=x_0}^{b=x_2}\right] \\ &= \frac{1}{2h^2}\left[2h\frac{h^2}{2} - \left(\frac{h^3}{6} - \left(-\frac{h^3}{6}\right)\right)\right] = \frac{1}{2h^2}\left[h^3 - \frac{1}{3}h^3\right] = \frac{1}{3}h\end{aligned}$$

Portanto, a fórmula de Simpson é dada por:

$$S(f) = \frac{1}{3}hf(x_0) + \frac{4}{3}hf(x_1) + \frac{1}{3}hf(x_2) = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)].$$

Observamos que esta fórmula é da forma (3.4) com

$$A_0 = \frac{h}{3}, \qquad A_1 = \frac{4h}{3}, \qquad A_2 = \frac{h}{3}\ .$$

Erro de integração

Tal como no caso da fórmula dos trapézios, o erro de integração é dado pelo integral do erro de interpolação (compare-se (3.6)). Ou seja, supondo $f \in C^2[a,b]$,

$$\begin{aligned} E^S(f) &= \int_a^b f(x)dx - \int_a^b p_2(x)dx \\ &= \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\frac{f^{(3)}(\xi(x))}{3!}, \quad \text{onde} \quad \xi(x) \in [a,\ b] \end{aligned}$$

Pode contudo mostrar-se que, se $f \in C^4[a,b]$, é válida a seguinte fórmula para o erro de integração:

$$E^S(f) = -\frac{h^5}{90}f^4(\xi)\ , \xi \in [a,\ b]$$

Um **majorante para o erro** é então dado por:

$$|E^S(f)| \leq \frac{h^5}{90}\max_{x\in[a,b]}|f^4(x)|$$

3.2 Fórmulas de quadraturas compostas

A obtenção de uma fórmula de quadratura para um intervalo $[a,\ b]$ pode ser feita de 2 modos:

1. Tomando um grande número de nós de integração de modo a que a fórmula

$$Q(f) = \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j)$$

represente o integral do polinómio interpolador em $x_0, x_1, \cdots, x_n$. Essa técnica não convém visto que o polinómio terá grau elevado e a interpolação pode não resultar em uma boa aproximação para $f(x)$.

2. Dividir o intervalo $[a,\ b]$ em vários subintervalos $[x_j,\ x_{j+1}]$, aplicar uma fórmula com poucos nós em cada subintervalo e somar os resultados de modo a obter uma aproximação para $I(f)$. Obtém-se assim uma fórmula ou regra de *quadratura composta*.

Sejam $x_0, x_1, \cdots, x_N,\ N+1$ pontos em $[a,\ b]$ com $x_0 = a$ e $x_N = b$. Então,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{N-1}}^{x_N} f(x)dx = \sum_{j=0}^{N} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$$

Assim, para obter uma aproximação para $I(f)$ aplica-se a cada integral $\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$ uma fórmula de quadratura com poucos pontos e somam-se as contribuições.

Fórmula dos Trapézios composta

Esta fórmula é obtida dividindo o intervalo $[a,\ b]$ em N subintervalos e aproximando cada integral $\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$ pela regra dos trapézios.

Sejam $x_j = a + jh, \quad x_0 = a, \quad h = \frac{b-a}{N}, \quad j = 0, 1, \cdots, N$. Então,

$$\begin{aligned}
\int_a^b f(x)dx &= \sum_{j=0}^{N} \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{N} \left[\frac{h}{2}\left(f(x_j) + f(x_{j+1})\right)\right] \\
&= \left[\frac{h}{2}\left(f(x_0) + f(x_1)\right)\right] + \left[\frac{h}{2}\left(f(x_1) + f(x_2)\right)\right] + \cdots + \left[\frac{h}{2}\left(f(x_{N-1}) + f(x_N)\right)\right] \\
&= \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{N-1}) + f(x_N)\right] \\
&= \frac{h}{2}\left[f(x_0) + +f(x_N) \sum_{j=1}^{N-1} 2f(x_j)\right] = T_N(f)
\end{aligned}$$

Erro de integração:

Começamos por notar que o erro $E_N^T(f) = I(f) - T^N(f)$ é a soma dos erros cometidos em cada subintervalo $[x_j,\ x_{j+1}]$. Logo, supondo $f \in C^2[a,\ b]$,

$$E_N^T(f) = I(f) - T_N(f) = \sum_{j=0}^{N-1} -\frac{h^3}{12} f''(\xi_j) \tag{3.7}$$

Majorante para o erro

Um majorante para o erro pode ser facilmente obtido de (3.7). Tomando módulos e usando $h = (b-a)/N$, vem

$$|E_N^T(f)| \leq \frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{N-1} |f''(\xi_j)| \leq \frac{(b-a)}{12} N \; h^3 \max_{x\in[a,b]} |f''(x)| \tag{3.8}$$

Fórmula do erro

Vejamos agora como simplificar a fórmula (3.7). Tem-se

$$E_N^T(f) = \sum_{j=0}^{N-1} -\frac{h^3}{12} f''(\xi_j) = -N\frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{N-1} \frac{f''(\xi_j)}{N} \quad \text{onde } \xi_j \in [x_j,\ x_{j+1}] \tag{3.9}$$

Como $f \in C^2[a,\ b]$, então existe $m = \min_{x\in[a,b]} f''(x)$ e $M = \max_{x\in[a,b]} f''(x)$. Logo,

$$m \leq f''(\xi_j) \leq M \quad j = 0, 1, \cdots, N-1. \implies Nm \leq \sum_{j=0}^{N-1} f''(\xi_j) \leq NM$$

$$\implies m \leq \sum_{j=0}^{N-1} \frac{f''(\xi_j)}{N} \leq M \implies \min_{x\in[a,b]} f''(x) \leq \sum_{j=0}^{N-1} \frac{f''(\xi_j)}{N} \leq \max_{x\in[a,b]} f''(x)$$

Pelo teorema do valor intermédio, existe $\xi \in [a,\ b]$ tal que

$$f''(\xi) = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{f''(\xi_j)}{N}$$

e substituindo em (3.7) obtemos (visto que $h = (b-a)/N$):

$$E_N^T(f) = -N\frac{h^3}{12} f''(\xi) = -\frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\xi) \quad \text{onde } \xi \in [a,\ b]\ . \tag{3.10}$$

Fórmula de Simpson composta

Esta fórmula é obtida aplicando a fórmula de Simpson em cada subintervalo da forma $[x_j,\ x_{j+2}]$. Sejam $x_0 = a, x_1, \cdots, x_{N-2}, x_{N-1}, x_N = b$ onde N é um número par. Então,

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \cdots + \int_{x_{N-2}}^{x_N} f(x)dx = \sum_{j=1}^{N/2} \int_{x_{2j}-2}^{x_{2j}} f(x)dx$$

e, aplicando a formula de Simpson a cada integral, obtemos

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx \frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)]+\frac{h}{3}[f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)]\\ &\qquad +\cdots+\frac{h}{3}[f(x_{N-2})+4f(x_{N-1})+f(x_N)]\\ &= \frac{h}{3}\left[f(x_0)+f(x_N)+4\sum_{j=1}^{N/2}f(x_{2j-1})+2\sum_{j=1}^{N/2-1}f(x_{2j})\right]=S_N(f)\end{aligned}$$

Erro de integração $I(f)-S_N(f)$

De maneira análoga como se fez na fórmula dos trapézios composta, pode-se mostrar que é válida a seguinte fórmula do erro para a fórmula de Simpson composta:

$$E_N^S(f)=-\frac{h^5}{90}\sum_{j=1}^{N/2}f^{(4)}(\xi_i)=-\frac{Nh^5}{180}f^{(4)}(\xi)\qquad \xi\ \in\ [a,\ b].$$

Majorante para o erro

Um majorante para o erro é dado por:

$$|E_N^S(f)|\leq\frac{Nh^5}{180}\max_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|$$

3.3 Grau de precisão de uma fórmula de quadratura

Seja a igualdade $I(f)=Q(f)+E^Q(f)$ onde $Q(f)$ é uma fórmula de quadratura que aproxima $I(f)$ e $E^Q(f)$ é o erro de integração. O grau de precisão da fórmula $Q(f)$ é um número r tal que:

$$E^Q(P_r)=0\ \ \forall P_r,\ \text{polinómio de grau}\leq r,\qquad \text{e}\qquad E^Q(x^{r+1})\neq 0$$

Exemplo 1: Ao aproximarmos $I(f)$ pela fórmula dos trapézios temos:

$$\int_a^b f(x)dx=\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)\qquad \xi\ \in\ [a,\ b]$$

donde vemos que se $f(x)=P_1(x)$ (um polinómio de grau ≤ 1) então $f''(x)=0\implies E^T(f)=0$ e portanto a fórmula dos trapézios dá o valor exacto para os polinómios de garu $\leq 1\implies$ grau de precisão de $T(f)$ é $r\geq 1$. Mas para $f(x)=x^2$ temos que

$$E^T(f)=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)=-\frac{(b-a)^3}{12}2\neq 0\qquad I(f)\neq T(f)$$

e portanto o grau de precisão de $T(f)$ é $r = 1$.

Exemplo2: Pela regra de Simpson tem-se:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] - \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{1}{90} f^{(4)}(\xi) \qquad \xi \in [a,\ b]\ .$$

Como $f^{(4)}(x) = 0$ se $f(x)$ é um polinómio de grau $\leq 3 \implies E^S(f) = 0$ para polinómios de grau $\leq 3 \implies S(f)$ é exacta para polinómios de grau ≤ 3 e portanto grau de precisão de $S(f)$ é $r \geq 3$. Porém, para $f(x) = x^4$ temos que

$$f^{(4)}(x) = 4!\ \forall\ x \implies E_S(f) = -\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{1}{90} 4! \neq 0$$

e portanto $S(f)$ não é exacta para polinómios de grau $4 \implies$ grau de precisão de $S(f)$ é $r = 3$.

3.4 Métodos dos coeficientes indeterminados

Sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n$, $(n+1)$pontos em $[a,\ b]$ e suponhamos conhecidos os valores de f nesses pontos. As fórmulas de quadratura que considerámos, do tipo

$$Q(f) = \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) \approx \int_a^b f(x)dx. \tag{3.11}$$

foram deduzidas integrando o polinómio interpolador. Isto é, por construção, $Q(f) = I(p_n)$, onde p_n é o polinómio interpolador de grau $\leq n$ de f. O método dos coeficientes indeterminados é uma maneira alternativa de obter os pesos da fórmula de quadratura.

Comecemos por notar que, se f for um polinómio de grau $\leq n$, ou seja $f(x) = P_n(x)$, então a fórmula Q dó valor **exacto** do integral de f. Tem-se assim

$$I(P_n) = Q(P_n),\ \forall P_n \tag{3.12}$$

A igualdade acima resulta da unicidade do polinómio interpolador: sendo f um polinómio de grau $\leq n$, então f coincide com o seu polinómio interpolador p_n. Ou seja, tem-se $f(x) = p_n(x)$, donde $I(f) = I(p_n) = Q(f)$.

Veremos posteriormente que, impondo a condição $I(P_n) = Q(P_n)$, para qualquer polinómio de grau $\leq n$, resulta num sistema de equações lineares nos coeficientes A_j.

Comecemos por provar o

Lema: A fórmula de quadratura definida por (3.11) é uma aplicação linear.

Dem.:

Sejam $x_0, x_1, \cdots, x_n, \in [a,\ b]$, f e g duas funções contínuas em $[a,\ b]$ e $\lambda \in I\!R$. Então

$$\begin{aligned} Q(f+g) &= \sum_{j=0}^{n} A_j[(f+g)(x_j)] = \sum_{j=0}^{n} A_j[f(x_j)+g(x_j)] = \sum_{j=0}^{n}[A_j f(x_j) + A_j g(x_j)] \\ &= \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) + \sum_{j=0}^{n} A_j g(x_j) = Q(f) + Q(g) \\ Q(\lambda f) &= \sum_{j=0}^{n} A_j[(\lambda f)(x_j)] = \sum_{j=0}^{n} A_j \lambda f(x_j) = \lambda \sum_{j=0}^{n} A_j f(x_j) = \lambda Q(f) \end{aligned}$$

Obtenção de $A_0, A_1, \cdots, A_n$

Seja $P_n(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 \cdots + \alpha_n x^n$ um polinómio de grau $\leq n$. Então

$$Q(P_n) = Q(\alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 \cdots + \alpha_n x^n) = \alpha_0 Q(1) + \alpha_1 Q(x) + \alpha_2 Q(x^2) + \cdots + \alpha_n Q(x^n)$$

e

$$I(P_n) = I(\alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2 \cdots + \alpha_n x^n) = \alpha_0 I(1) + \alpha_1 I(x) + \alpha_2 I(x^2) + \cdots + \alpha_n I(x^n)$$

Então, para se ter uma fórmula com a propriedade (3.12)

$$Q(P_n) = I(P_n), \forall P_n$$

é necessário e suficiente que verifique:

$$Q(x^k) = I(x^k), \quad k = 0, 1, \cdots, n$$

Ou seja, para que a fórmula Q dê o valor exacto do integral de qualquer polinómio de grau $\leq n$ é necessário e suficiente que dê o valor exacto dos integrais dos monómios $1, x, x^2, \ldots, x^n$. Impondo esta condição somos conduzidos ao sistema de equações:

$$
\begin{aligned}
Q(1) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(1) = I(1) = \int_a^b dx = b-a \\
&\Longrightarrow \quad A_0 + A_1 + \cdots + A_n = b-a \\
Q(x) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(x_j) = I(x) = \int_a^b x dx = \frac{x^2}{2}|_a^b = \frac{b^2-a^2}{2} \\
&\Longrightarrow \quad A_0x_0 + A_1x_1 + \cdots + A_nx_n = \frac{b^2-a^2}{2} \\
Q(x^2) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(x_j^2) = I(x^2) = \int_a^b x^2 dx = \frac{x^3}{3}|_a^b = \frac{b^3-a^3}{3} \\
&\Longrightarrow \quad A_0x_0^2 + A_1x_1^2 + \cdots + A_nx_n^2 = \frac{b^3-a^3}{3} \\
\vdots &= \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \qquad\qquad \vdots \\
Q(x^n) &= \sum_{j=0}^{n} A_j(x_j^n) = I(x^n) = \int_a^b x^n dx = \frac{x^{n+1}}{n+1}|_a^b = \frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1} \\
&\Longrightarrow \quad A_0x_0^n + A_1x_1^n + \cdots + A_nx_n^n = \frac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1}
\end{aligned}
$$

Pode-se reescrever este sistema numa forma mais compacta

$$
\begin{bmatrix}
1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\
x_0 & x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\
x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
x_0^n & x_1^n & x_2^n & \cdots & x_n^n
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
A_0 \\ A_1 \\ A_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ A_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
b-a \\
\dfrac{b^2-a^2}{2} \\
\dfrac{b^3-a^3}{3} \\
\vdots \\
\vdots \\
\dfrac{b^{n+1}-a^{n+1}}{n+1}
\end{bmatrix}
\tag{3.13}
$$

A matriz acima é conhecida como "Matriz de Vandermonde" e sabe-se que, se os pontos forem distintos, ela é não-singular $\Longrightarrow$ esse sistema tem solução única $A_j,\ j = 0, 1, \cdots, n$.

Exemplo 3.1

Considere-se a função f dada pela tabela

x_i	0	1	2
f_i	1	1	2

a) Pelo método dos coeficientes indeterminados, pretende-se obter uma fórmula de quadratura do tipo

$$Q(f) \;=\; A_0 f(0) + A_1 f(1) + A_2 f(2)$$

que permita aproximar o integral $I(f) = \int_{-1}^{3} f(x)dx$.

Obtenha os parâmetros A_0, A_1 e A_2 de modo que $Q(f)$ tenha grau de precisão $r \geq 2$.

Solução: Utilizando o método dos coeficientes indeterminados, pretende-se que $Q(f)$ tenha grau de precisão $r \geq 2$, ou seja, que $I(a_0 + a_1x + a_2x^2) = Q(a_0 + a_1x + a_2x^2),\ \forall a_0, a_1, a_2$. Para se ter esta igualdade é necessário e suficiente que

$$Q(1) = I(1) = \int_{-1}^{3} dx, \qquad Q(x) = I(x) = \int_{-1}^{3} x dx, \qquad Q(x^2) = I(x^2) = \int_{-1}^{3} x^2 dx$$

donde obtemos as equações

$$\begin{array}{r} A_0 + A_1 + A_2 = 4 \\ A_1 + 2A_2 = 4 \\ A_1 + 4A_2 = \frac{28}{3} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \text{Elimin. Gauss:} \\ m_{32} = 1 \\ (L_3 - m_{32}L_2) \to L_3 \end{array} \right. \Longrightarrow \quad \left[\begin{array}{ccc} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} 4 \\ 4 \\ \frac{16}{3} \end{array} \right]$$

donde obtemos: $A_0 = \dfrac{8}{3},\ A_1 = -\dfrac{4}{3}$ e $A_2 = \dfrac{8}{3}$. Logo,

$$Q(f) = \frac{4}{3}\left[2f(0) - f(1) + 2f(2)\right]$$

b) Obtenha o valor aproximado do integral, no caso de f ser a função tabelada.

Solução: Utilizando os valores da tabela dada obtemos:

$$I(f) \approx Q(f) = \frac{4}{3}\left[2(1) - 1(1) + 2(2)\right] = 20/3$$

c) Seja f um polinómio de grau não superior a 3. Prove que o valor obtido pela regra considerada na alínea **a)** é o mesmo que se obteria pela regra de Simpson.

Solução: A fórmula de Simpson é exacta para polinomios de grau ≤ 3 e portanto, basta mostrarmos que o grau de precisão da fórmula obtida é $r \geq 3$. Como $Q(f)$ tem grau de precisão $r \geq 2$ é suficiente mostrarmos que $Q(x^3) = I(x^3)$. De facto, temos

$$Q(x^3) = \frac{4}{3}\left[2(0^3) - (1^3) + 2(2^3)\right] = 20$$

e

$$I(x^3) = \int_{-1}^{3} x^3 dx = \left.\frac{x^4}{4}\right|_{-1}^{3} = \frac{3^4 - (-1)^4}{4} = 20$$

donde vemos que $Q(f)$ tem grau de precisão $r \geq 3$. Logo, se $f(x) = P_3(x)$, temos:

$$S(P_3) = I(P_3) = Q(P_3)$$

Exercícios propostos:

1. Considere a equação
$$f(x) = x^2 - \cos^2(x) = 0. \tag{3.14}$$
   (a) Mostre que a equação (1) tem (apenas) duas raízes.
   (b) Para resolver numericamente a equação (1) vai-se considerar um método do ponto fixo associado a uma função iteradora da forma $g(x) = x + A(x)(\cos(x) - x)$, onde $A(x)$ é uma função que nunca se anula.
      i. Mostre que as raízes da equação (1) e os pontos fixos de g coincidem para $x > 0$.
      ii. Fazendo $A(x) = 1/2$, prove que o método do ponto fixo associado a g converge para a raiz z pertencente ao intervalo $[0, 1]$, qualquer que seja a aproximação inicial x_0 escolhida nesse intervalo.
      iii. Utilizando o método obtido em a) e $x_0 = 1$, calcule uma aproximação x_{k+1} da raiz z, parando a iteração quando $|x_{k+1} - x_k| < 10^{-3}$. Indique ainda uma estimativa para o erro $|z - x_{k+1}|$.
      iv. Determine a ordem de convergência p do método e uma aproximação da constante K_∞, tal que seja verificada a igualdade assimptótica
$$|z - x_{m+1}| \approx K_\infty |z - x_m|^p, \qquad m \text{ suf. grande}$$

2. Considere a equação $F(x) = 0$, onde $F(x) = (x - \alpha)^m h(x)$, ($m > 1$ inteiro), com $h(\alpha) \neq 0$ e tal que h é uma função de classe C^2 num intervalo aberto contendo α. Prove que o método iterativo $x_{m+1} = g(x_m), m = 0, 1, \ldots$, em que

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

converge para α se a aproximação inicial x_0 estiver suficientemente próxima de α. Determine a ordem de convergência do método e o factor assimptótico da convergência.

3. Considere a equação

$$\sin(x) + 1 - ax = 0$$

onde a é um número real conhecido.

   (a) Diga, justificando, para que valores de a esta equação tem uma única raiz no intervalo $I = [0, \frac{\pi}{2}]$.

   (b) Para os valores de a considerados na alínea anterior, mostre que o método do ponto fixo, com a função iteradora $g(x) = \dfrac{1 + \sin(x)}{a}$, converge para a z, qualquer que seja $x_0 \in I$.

   (c) No caso de $a = 2$, diga qual o número mínimo de iterações do método do ponto fixo que deverá efectuar para garantir que o erro absoluto da aproximação obtida seja inferior a 10^{-3} se x_0 é qualquer número em I.

   (d) No caso de $a = 0$, mostre que a equação tem uma única raiz w no intervalo $[-\pi, 0]$. Mostre que, se x_0 estiver suficientemente próximo da raiz, então o método de Newton converge para z, e determine a ordem de convergência.

4. Considere a família de sucessões da forma

$$x_{m+1} = \frac{\lambda\ x_m + 1 - \sin(x_m)}{1 + \lambda}, \quad m = 0, 1, \ldots, \tag{3.15}$$

com λ parâmetro real.

   (a) Faça $\lambda = 1$ e, usando o teorema do ponto fixo, mostre que a sucessão (1) converge para um certo valor real z, qualquer que seja x_0 pertencente ao intervalo $[0, 1]$. Qual a ordem de convergência deste método iterativo ?

   (b) Conclua, utilizando a questão anterior, que z é a única raiz da equação $1 - x - \sin x = 0$ no intervalo $[0, 1]$. Utilizando o método obtido em a) e $x_0 = 1$, determine, sem efectuar iterações, qual o valor de k de modo que se tenha $|z - x_k| < 10^{-5}$.

(c) Como deveria ser λ por forma a sucessão (1) convergir para z o mais rápido possível? Qual a ordem de convergência nesse caso? **[1.0]**

5. Prove que, com $x_0 = 1$, o método de Newton aplicado à equação $1 - x - \sin x = 0$ converge para a única raiz z da equação .

6. Considere a família de funções da forma

$$g_\alpha(x) = \frac{1}{\alpha}\left[(\alpha - 1)x + \frac{78.8}{x}\right], \tag{3.16}$$

onde α é um parâmetro real.

(a) Mostre que os pontos fixos de g_α são as raizes da equação $x^2 - 78.8 = 0$, independentemente do valor do parâmetro α.

(b) Com o objectivo de aproximar a **raiz positiva** z dessa equação, considere a iteração do ponto fixo, $x_{m+1} = g_\alpha(x_m)$, associada a (3.16). A tabela seguinte mostra algumas iteradas das sucessões correspondentes aos valores $\alpha = 3/2$ e $\alpha = 1/2$, com iterada inicial $x_0 = 9$.

	$m=0$	$m=1$	$m=2$	$m=3$	$m=4$	$m=5$
$x_{m+1} = g_{3/2}(x_m)$	8.837037	8.890356	?	8.78425	8.876441	8.877102
$x_{m+1} = g_{1/2}(x_m)$	8.51111	10.00586	5.74491	21.68807	-14.42104	3.49320

i. No caso de $\alpha = 3/2$, preencha o espaço em branco (obtenha x_3). Diga o que indicam os resultados, no que respeita à convergência ou divergência das sucessões para a raiz z acima referida. **Confirme teoricamente**, em cada caso.

ii. No caso de $\alpha = 3/2$, ob obtenha um majorante para o erro absoluto da iterada x_3.

iii. Como deveria escolher α de modo a obter convergência quadrática, supondo x_0 suf. próximo de z ?

7. Considere a seguinte tabela de valores de uma função $f(x)$

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

(a) Utilizando a fórmula de Newton com diferenças divididas, determine o polinómio de grau ≤ 2, $p_2(x)$, que interpola $f(x)$ nos pontos $x_0 = -2$, $x_2 = 0$ e $x_4 = 2$.

(b) Suponha que pretendemos aproximar o valor $I(f) = \int_{-2}^{2} f(x)dx$ por $\int_{-2}^{2} p_2(x)dx$. Sabendo que as derivadas de f verificam $|f^{(j)}(x)| \leq j/2,\ j = 1, 2, 3, 4$ no intervalo $[-2, 2]$, determine um majorante para o erro de integração. Justifique.

(c) Determine uma aproximação para $I(f) = \int_{-2}^{2} f(x)dx$ usando a regra de Simpson composta e todos os pontos da tabela.

8. Considere-se a função f dada pela tabela

x_i	0	1	2
f_i	1	1	2

a) Obtenha um valor aproximado de $f(1.5)$ utilizando:

i) um spline de grau 1.

ii) um polinómio interpolador de grau 2.

ii) Sabendo que f é um polinómio do tipo

$$f(x) = a\,x^3 + b\,x^2 + c\,x + d,$$

determine uma expressão do erro da última aproximação obtida, em função dos coeficientes de f.

b. Obtenha a função g, do tipo $g(x) = \beta\,x(x-1) + \alpha$, que melhor se ajusta a f (dada na tabela acima), no sentido dos mínimos quadrados.

Bibliografia

Atkinson, K., *An Introduction to Numerical Analysis*, Wiley & Sons, NY,1978.

Burden, R. & Faires, J., *Numerical Analysis*, 5th ed., PWS Publishing, Boston, 1993.

Chapra, S. & Canale, R., *Numerical Methods for Engineers*, Mc Graw Hill, 2002

Cheney, W. & Kincaid, D. *Numerical Mathematics and Computing*, 2ed ed., Brooks/Cole, Monterey, CA, 1994.

Hildebrand, F.B., *Introduction to Numerical Analysis*, Dover Publications, NY, 1974.

Henrici, P., *Elements of Numerical Analysis*, Wiley & Sons, 1964.

Isaacson, E. & Keller, H. B., *Analysis of Numerical Methods*, Wiley & Sons, 1966.

Johnson, L. W. & Riess, R. D., *Numerical Analysis*, Addison-Wesley, 1977.

Stroud, A. H., *Numerical Quadrature and Solution of Ordinary Differential Equations*, Applied Mathematical Sciences, vol. 10, Springer-Verlag, NY, 1974.

Valença, M. R., *Métodos Numéricos*, Instituto Nacional de Investigação Científica, 1990.