

cod. 20020013
44602466

ALGORITMOS NUMÉRICOS

2.^o edição

Frederico Ferreira Campos, filho
Professor do Departamento de Ciência da Computação da
Universidade Federal de Minas Gerais



LTC
EDITORA

No Capítulo 4 são descritas as técnicas de regressão linear simples e múltipla, por quadrados mínimos, para ajuste de curvas. Também é mostrada uma forma alternativa de estimar os parâmetros de regressão via decomposição em valores singulares, bem como a diferença entre regressão e interpolação.

O Capítulo 5 apresenta os métodos de integração numérica de Newton-Cotes (trapézio, $1/3$ e $3/8$ de Simpson) e quadratura de Gauss-Legendre, sendo proposta uma técnica iterativa para integração. É feita a análise de erro para cada uma dessas regras de integração. São também demonstradas as fórmulas de Newton-Cotes e Gauss-Legendre para integração dupla.

O Capítulo 6 mostra, inicialmente, como isolar raízes de equações algébricas e transcendent. Em seguida, são descritos métodos para fazer o refinamento de uma raiz: bisseção, métodos baseados em interpolação linear (secante, *regula falsi* e pégas), métodos baseados em interpolação quadrática (Muller e van Wijngaarden-Dekker-Brent) e métodos baseados em tangentes (Newton e Schröder). Para cada método é feita uma análise da sua ordem de convergência.

O Capítulo 7 é dedicado às equações diferenciais ordinárias (EDO). São apresentados o problema de valor inicial e os métodos de Runge-Kutta e de Adams para resolvê-lo. Também se mostra como resolver sistemas de EDO, o que possibilita a solução de equações diferenciais ordinárias de ordem superior.

Após a descrição dos métodos são mostrados dois exemplos de aplicação para a solução de problemas reais. Ao final de cada capítulo são propostos exercícios de fixação. Em todos os capítulos são apresentados algoritmos dos métodos, descritos na notação algorítmica proposta, tornando fácil a sua implementação em qualquer linguagem de programação.

Nos apêndices é mostrado como implementar os algoritmos em diversas linguagens de programação: FORTRAN (Apêndice A), Pascal (Apêndice B) e MATLAB (Apêndice C). O Apêndice D apresenta as respostas de alguns exercícios propostos.

O autor gostaria de agradecer, a todas as pessoas que tornaram possível a elaboração de Algoritmos Numéricos, em especial a Lílíam César de Castro Medeiros, Silvana Bocanegra, Jones Oliveira de Albuquerque, Daniela Dias Rodrigues, Helton Fábio de Matos, Marcos Augusto dos Santos e Letícia Pereira Pinto.

As sugestões para aprimorar o presente texto, bem como para efetuar correções, serão bem-vindas pelo *e-mail*: ffcampos@dcc.ufmg.br. O *site* de Algoritmos Numéricos é www.dcc.ufmg.br/algoritmosnumericos. Nele os professores poderão encontrar um vasto material de suporte às aulas.

Belo Horizonte, janeiro de 2007

Frederico Ferreira Campos, filho

Sumário

1	Computação numérica	1
1.1	Etapas na solução de um problema	2
1.1.1	Definição do problema	2
1.1.2	Modelagem matemática	2
1.1.3	Solução numérica	2
1.1.4	Análise dos resultados	4
1.2	Notação algorítmica	4
1.2.1	Estrutura do algoritmo	4
1.2.2	Variáveis e comentários	5
1.2.3	Expressões e comando de atribuição	6
1.2.4	Comandos de entrada e saída	8
1.2.5	Estruturas condicionais	8
1.2.6	Estruturas de repetição	10
1.2.7	Falha no algoritmo	11
1.2.8	Exemplos de algoritmos	12
1.3	Notação matemática	14
1.4	Complexidade computacional	17
1.5	Implementação de algoritmos	19
1.6	Tipos de erros	21
1.7	Aritmética de ponto flutuante	23
1.8	Exercícios	27
2	Sistemas lineares	29
2.1	Conceitos fundamentais	29
2.1.1	Alguns tipos de matrizes	30
2.1.2	Operações matriciais	31
2.1.3	Noções sobre autovalores e autovetores	35
2.1.4	Normas	39
2.1.5	Sistemas de equações lineares	42
2.1.6	Classificação de sistemas	42
2.2	Sistemas triangulares	45
2.2.1	Sistema triangular inferior	45
2.2.2	Sistema triangular superior	47
2.2.3	Complexidade computacional	49
2.3	Eliminação de Gauss	50

2.3.1	Sistemas equivalentes	50
2.3.2	Operações l-elementares	51
2.3.3	Sistema triangular equivalente	51
2.3.4	Cálculo do determinante	54
2.3.5	Pivotação parcial	56
2.4	Decomposição LU	57
2.4.1	Cálculo dos fatores	58
2.4.2	Pivotação parcial	59
2.4.3	Cálculo do determinante	61
2.4.4	Sistema com matriz singular	64
2.4.5	Algoritmos e complexidade	66
2.4.6	Sistemas lineares complexos	69
2.5	Decomposição de Cholesky e LDL^T	71
2.5.1	Cálculo do fator	72
2.5.2	Cálculo do determinante	73
2.5.3	Algoritmo e complexidade	77
2.5.4	Fatoração LDL^T	79
2.6	Decomposição espectral	82
2.6.1	Cálculo dos autovetores	83
2.6.2	Solução de sistema linear	84
2.7	Uso da decomposição	85
2.7.1	Refinamento da solução	85
2.7.2	Cálculo da matriz inversa	87
2.8	Métodos iterativos estacionários	88
2.8.1	Condição de convergência	89
2.8.2	Critério de parada	89
2.8.3	Método de Jacobi	90
2.8.4	Método de Gauss-Seidel	96
2.8.5	Método da sobre-relaxação sucessiva	102
2.8.6	Análise de convergência	105
2.8.7	Comparação dos métodos iterativos estacionários	107
2.8.8	Refinamento como método estacionário	109
2.9	Análise de erro na solução de sistemas	110
2.9.1	Malcondicionamento	111
2.9.2	Número de condição	112
2.9.3	Sensibilidade da solução	115
2.10	Exemplos de aplicação	117
2.10.1	Tensões em circuito elétrico	117
2.10.2	Estequiometria de reação química	118
2.11	Exercícios	121
3	Interpolação polinomial	125
3.1	Polinômios interpoladores	125

3.1.1	Interpolação linear	126
3.1.2	Interpolação quadrática	127
3.2	Polinômios de Lagrange	128
3.2.1	Fórmula de Lagrange	128
3.2.2	Dispositivo prático	130
3.2.3	Algoritmo e complexidade computacional	131
3.3	Polinômios de Newton	133
3.3.1	Operador de diferença dividida	133
3.3.2	Fórmula de Newton	134
3.3.3	Algoritmo e complexidade computacional	136
3.4	Polinômios de Gregory-Newton	139
3.4.1	Operador de diferença finita ascendente	139
3.4.2	Fórmula de Gregory-Newton	140
3.4.3	Algoritmo e complexidade computacional	142
3.5	Escolha dos pontos para interpolação	144
3.6	Erro de truncamento da interpolação polinomial	145
3.7	Comparação das complexidades	148
3.8	<i>Splines</i> cúbicos	149
3.8.1	Cálculo dos coeficientes	149
3.8.2	Sistema linear subdeterminado	150
3.9	<i>Splines</i> cúbicos naturais	151
3.9.1	Cálculo das derivadas	151
3.9.2	Algoritmo e complexidade	155
3.10	<i>Splines</i> cúbicos extrapolados	157
3.10.1	Cálculo das derivadas	157
3.10.2	Algoritmo e complexidade	161
3.11	Avaliação dos <i>splines</i> cúbicos	163
3.11.1	Algoritmo e complexidade	164
3.11.2	Avaliação	164
3.12	Comparação dos <i>splines</i> cúbicos	166
3.13	Exemplos de aplicação	168
3.13.1	Curva de titulação	168
3.13.2	Interpolação inversa	171
3.14	Exercícios	173
4	Ajuste de curvas	177
4.1	Regressão linear simples	178
4.1.1	Diagrama de dispersão	178
4.1.2	Retas de regressão	178
4.1.3	Método dos quadrados mínimos	181
4.2	Qualidade do ajuste	183
4.2.1	Coefficiente de determinação	183
4.2.2	Variância residual	185

4.3	Regressão linear múltipla	187
4.3.1	Equações normais	187
4.3.2	Regressão polinomial	189
4.3.3	Algoritmo e complexidade	189
4.3.4	Transformações não lineares	195
4.3.5	Malcondicionamento	196
4.4	Ajuste via decomposição em valores singulares	197
4.4.1	Cálculo dos parâmetros	197
4.4.2	Decomposição em valores singulares	198
4.4.3	Algoritmo e complexidade	200
4.4.4	Comparação dos métodos computacionais para RLM	203
4.5	Diferença entre regressão e interpolação	204
4.6	Exemplos de aplicação	205
4.6.1	Tensão-deformação de aço	205
4.6.2	Produto iônico da água	206
4.7	Exercícios	209
5	Integração numérica	211
5.1	Fórmulas de Newton-Cotes	211
5.1.1	Regra do trapézio	216
5.1.2	Regra do 1/3 de Simpson	218
5.1.3	Regra dos 3/8 de Simpson	220
5.1.4	Erro de integração dos métodos de Newton-Cotes	222
5.1.5	Algoritmo e complexidade	226
5.2	Quadratura de Gauss-Legendre	229
5.2.1	Fórmula para dois pontos	229
5.2.2	Fórmula geral	234
5.2.3	Erro de integração da fórmula de Gauss-Legendre	239
5.2.4	Algoritmos e complexidade	240
5.3	Comparação dos métodos de integração simples	244
5.4	Integração numérica iterativa	247
5.5	Integração dupla pelas fórmulas de Newton-Cotes	248
5.5.1	Fórmulas simples	249
5.5.2	Fórmulas compostas	252
5.5.3	Algoritmo	253
5.6	Integração dupla via fórmulas de Gauss-Legendre	256
5.6.1	Fórmula para dois pontos	256
5.6.2	Fórmula geral	258
5.6.3	Algoritmo	260
5.7	Comparação dos métodos para integração dupla	262
5.8	Exemplos de aplicação	263
5.8.1	Distribuição de probabilidade	264
5.8.2	Integral imprópria	265

5.9	Exercícios	268
6	Raízes de equações	271
6.1	Isolamento de raízes	272
6.1.1	Equações algébricas	272
6.1.2	Equações transcendententes	284
6.1.3	Convergência da raiz	287
6.2	Método da bisseção	288
6.3	Métodos baseados em aproximação linear	292
6.3.1	Método da secante	293
6.3.2	Método da <i>regula falsi</i>	295
6.3.3	Método pégaso	297
6.3.4	Ordem de convergência	300
6.4	Métodos baseados em aproximação quadrática	301
6.4.1	Método de Muller	301
6.4.2	Método de van Wijngaarden-Dekker-Brent	305
6.5	Métodos baseados em tangente	308
6.5.1	Método de Newton	308
6.5.2	Método de Schröder	313
6.6	Comparação dos métodos para cálculo de raízes	314
6.7	Exemplos de aplicação	316
6.7.1	Juros de financiamento	316
6.7.2	Cabo suspenso	319
6.8	Exercícios	321
7	Equações diferenciais ordinárias	323
7.1	Solução numérica de EDO	324
7.1.1	Problema de valor inicial	324
7.1.2	Método de Euler	325
7.1.3	Definições	326
7.2	Métodos de Runge-Kutta	328
7.2.1	Métodos de segunda ordem	328
7.2.2	Métodos de quarta ordem	331
7.2.3	Método de Dormand-Prince	333
7.3	Métodos de Adams	335
7.3.1	Métodos de passo dois	336
7.3.2	Métodos de passo três	338
7.3.3	Método de Adams-Bashforth-Moulton de quarta ordem	339
7.4	Comparação de métodos para EDO	341
7.4.1	Métodos de Runge-Kutta	341
7.4.2	Métodos de Adams	342
7.4.3	Comparação de métodos para EDO	342
7.5	Sistemas de equações diferenciais ordinárias	343

7.5.1	Algoritmo de Runge-Kutta para sistema de ordem dois	344
7.5.2	Equações diferenciais de segunda ordem	345
7.6	Exemplos de aplicação	347
7.6.1	Controle de poluição	347
7.6.2	Deflexão de viga	349
7.7	Exercícios	351
A	Linguagem FORTRAN	353
A.1	Estrutura de um programa FORTRAN	353
A.2	Variáveis e comentários	354
A.3	Expressões e comando de atribuição	355
A.4	Comandos de entrada e saída	357
A.5	Estruturas condicionais	360
A.6	Estruturas de repetição	362
A.7	Falha no programa	364
A.8	Subprogramas	364
A.9	Exemplos de programas	367
B	Linguagem Pascal	371
B.1	Estrutura de um programa Pascal	371
B.2	Variáveis e comentários	372
B.3	Expressões e comando de atribuição	373
B.4	Comandos de entrada e saída	375
B.5	Estruturas condicionais	379
B.6	Estruturas de repetição	381
B.7	Falha no programa	384
B.8	Subprogramas	384
B.9	Exemplos de programas	386
C	Linguagem MATLAB	391
C.1	Estrutura de um programa MATLAB	391
C.2	Variáveis e comentários	391
C.3	Expressões e comando de atribuição	392
C.4	Comandos de entrada e saída	394
C.5	Estruturas condicionais	400
C.6	Estruturas de repetição	401
C.7	Falha no algoritmo	403
C.8	Subprogramas	403
C.9	Exemplos de programas	405
D	Respostas dos exercícios	409
	Referências Bibliográficas	419
	Índice	423

ALGORITMOS NUMÉRICOS

Uma
um
par

O C
de u
via C
um p
uma p
solu
das c

gra
ente
tern
o ser
im c

ca g
ão
ranç
zar, e
bra
erke
akone