# MÉTODOS NUMÉRICOS

M. Cristina C. Cunha

# MÉTODOS NUMÉRICOS

EDITORA UNICAMP

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELO
SISTEMA DE BIBLIOTECAS DA UNICAMP
DIRETORIA DE TRATAMENTO DA INFORMAÇÃO

C914m Cunha, Cristina

*Métodos numéricos* / M. Cristina C. Cunha. – 2ª edição rev. e ampliada 2000 – Campinas, SP: Editora da Unicamp, 2000.

1. Métodos numéricos. 2. Matlab (Programa de computador). 3. Engenharia – Modelos matemáticos. 4. Tecnologia – Modelos matemáticos. 5. Análise numérica. I. Título.

CDD 620.00151
001.6424
620.0042
ISBN 978-85-268-0877-5 519.4

Índices para catálogo sistemático:

| | |
|---|---|
| 1. Métodos numéricos | 620.00151 |
| 2. Matlab (Programa de computador) | 001.6424 |
| 3. Engenharia – Modelos matemáticos | 620.0042 |
| 4. Tecnologia – Modelos matemáticos | 519.4 |



1ª edição, 1993
5ª reimpressão, 2015



Printed in Brazil
Foi feito o depósito legal

Direitos reservados à

Editora da Unicamp
Rua Caio Graco Prado, 50 – Campus Unicamp
CEP 13083-892 – Campinas – SP – Brasil
Tel./Fax: (19) 3521-7718/7728
www.editora.unicamp.br – vendas@editora.unicamp.br

*Dedico este trabalho aos amigos com os quais compartilho esta incrível aventura que é viver...*

*Em especial,*
*nas origens: aos meus pais Miguel e Oiléa;*
*no presente: ao companheiro Euclydes;*
*sempre: aos filhotes Paulinho, Dudu e Gustavo.*

# Sumário

# Algoritmos

# Notações e Definições

$i = 1 : N$ é equivalente a $i = 1, 2, \dots, N$.

$\mathbf{A} = [a_{ij}]$ matriz cujo elemento da $i$-ésima linha e $j$-ésima coluna é $a_{ij}$ (maiúsculas em negrito denotam matrizes).

$\mathbf{A}_{m\times n}$ matriz com $m$ linhas e $n$ colunas.

$\mathbf{x}$ vetor coluna com $n$ componentes $x_1, x_2, \dots, x_n$ (minúsculas em negrito denotam vetores).

$\mathbf{A}^T$ transposta da matriz $\mathbf{A}$, isto é, $\mathbf{A}^T = [a_{ji}]$.

$\mathbf{x}^T$ vetor linha com $n$ componentes $x_1, x_2, \dots, x_n$.

$\mathbf{A}^{-1}$ inversa da matriz $\mathbf{A}$ ($\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$)

$\mathbf{I}$ matriz identidade ($a_{ii} = 1$ e $a_{ij} = 0$, $i \neq j$).

$\mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ = matriz diagonal, com elementos $\sigma_i$.

$f(\mathbf{x})$ função escalar de uma variável vetorial $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$.

$\mathbf{f}(\mathbf{x})$ função vetorial de variável vetorial $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x}))$.

$u_{x_i} = \dfrac{\partial u}{\partial x_i}$ derivada parcial de $u(x_1, x_2, \dots, x_n)$ com relação a $x_i$.

$\mathbf{J}(\mathbf{x})$ matriz Jacobiana de $\mathbf{f}(\mathbf{x})$: $J_{ij} = \dfrac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_j}$.

$\nabla f = \mathrm{grad}\, f(\mathbf{x})$ vetor com componentes $\dfrac{\partial f}{\partial x_1}, \dfrac{\partial f}{\partial x_2}, \dots, \dfrac{\partial f}{\partial x_n}$.

$\|\mathbf{x}\|$ norma de um vetor $\mathbf{x}$. Algumas normas usuais:

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{x}\|_2 &= (x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_n^2)^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{\frac{1}{2}} \\
\|\mathbf{x}\|_\infty &= \max\{|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_n|\} = \max_{1\le i\le n} |x_i| \\
\|\mathbf{x}\|_1 &= |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_n| = \sum_{i=1}^{n} |x_i|.
\end{aligned}$$

$\|\mathbf{A}\|$ norma de uma matriz $\mathbf{A}$. Algumas normas usuais:

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{A}\|_\infty &= \max_{1\le i\le n} \{|a_{i1}| + |a_{i2}| + \cdots + |a_{in}|\} = \max_{1\le i\le n} \left(\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|\right) \\
\|\mathbf{A}\|_2 &= \max_{\|\mathbf{x}\|_2=1} \|\mathbf{Ax}\|_2 \\
\|\mathbf{A}\|_1 &= \max_{1\le j\le n} \{|a_{1j}| + |a_{2j}| + \cdots + |a_{nj}|\} = \max_{1\le j\le n} \left(\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|\right)
\end{aligned}$$

Autovalor $\lambda$ de $\mathbf{A}$: $\mathbf{Ax} = \lambda\mathbf{x}$ para algum autovetor $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$.

$\rho(\mathbf{A})$ = raio espectral de $\mathbf{A} = \max\{|\lambda|$ onde $\lambda$ é autovalor de $\mathbf{A}\}$.

$\mathcal{O}(\bullet)$ ordem de aproximação ou de convergência: $f = \mathcal{O}(g)$ quando $x \to a$ significa $|f| \le k\,|g|$ quando $x \to a$, para alguma constante $k$.

$\text{cond}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|\,\|\mathbf{A}^{-1}\|$ = número de condição de uma matriz não singular $\mathbf{A}$ relativo à norma $\|\mathbf{A}\|$.

Obs.: Se $\text{cond}(\mathbf{A}) \approx 1$, $\mathbf{A}$ é bem condicionada e, se $\text{cond}(\mathbf{A})$ é muito grande, dizemos que $\mathbf{A}$ é mal condicionada.

$< f, g >$ = produto escalar entre duas funções:

$$\begin{aligned}
< f, g > &= \sum_{i=1}^{m} w(x_i)\, f(x_i)\, g(x_i) \qquad \text{caso discreto} \\
< f, g > &= \int_a^b w(x_i)\, f(x_i)\, g(x_i) \qquad \text{caso contínuo}
\end{aligned}$$

onde $w(x) > 0$ é a função peso.

$(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ = produto escalar entre vetores:

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \sum_{i=1}^{n} u_i \, v_i.$$

Usamos a notação de calculadoras científicas para os números reais, com ponto separando a parte decimal. Assim,

$$2.354\text{e}(-2) = 2.354 \times 10^{-2} = 0.02354,$$

que representa o número 0,02354, na convenção brasileira.

$\square$ = símbolo usado no final de exemplos.

# Prefácio

Por que escrever um livro se existem tantos prontos? Imagino que esta pergunta persegue todos que resolvem se dedicar a um projeto deste tipo. Talvez a resposta esteja no desejo de transmitir uma experiência pessoal, na expectativa de que ela seja útil para alguém.

Este livro foi escrito com base na experiência de lecionar anualmente Métodos Numéricos no curso de Pós Graduação em Engenharia do Petróleo, desde 1987.

A primeira edição é de 1993. Reescrevê-lo é uma tentativa de publicar uma versão melhorada em alguns aspectos. Em primeiro lugar, espero ter diminuído o número de erros de digitação e de conteúdo. Também, ao passar para um editor mais moderno, melhoramos a apresentação.

Outras modificações aparecem nesta nova versão.

Em cada capítulo, introduzimos uma seção sobre uso e aplicação do pacote computacional **Matlab**. O objetivo é tentar colaborar na divulgação e utilização de pacotes computacionais como ferramenta auxiliar em tarefas que demandam métodos numéricos. A combinação de métodos numéricos com métodos matemáticos é uma fonte de desafios e descobertas. O aperfeiçoamento dos pacotes tem nos permitido realizar cálculos rápidos, testar com facilidade a influência dos parâmetros presentes nos modelos, testar simplificações, diferentes discretizações etc. Não é por acaso que se tornam mais freqüentes expressões como experimentos computacionais, laboratórios computacionais e matemática numérica. Alguns exemplos foram resolvidos usando programas na linguagem **Matlab**; incluímos alguns destes programas no Apêndice, ou nas seções correspondentes à utilização do **Matlab** no assunto do capítulo.

Ampliamos o tópico "Métodos numéricos para equações diferenciais parciais", incluindo alguns métodos destinados às equações cujas soluções apresentam descontinuidades ou variações bruscas, cada vez mais freqüentes nas aplicações. O assunto foi então desdobrado em dois capítulos. Também desdobramos o capítulo de métodos para sistemas de equações lineares em dois, separando os métodos diretos dos métodos iterativos.

Algumas notas históricas foram incluídas com o objetivo de fornecer parte da evolução histórica dos métodos numéricos. Gostaríamos de ter mais informações históricas, mas não as conseguimos no tempo disponível. Como veremos, alguns métodos são muito antigos, como por exemplo o método de Newton (1687), e outros são mais recentes, como o método TVD, para leis de conservação, que é da década de 80 deste século.

O objetivo do livro continua o mesmo: apresentar os métodos que têm sido mais usados e que devem continuar úteis num futuro próximo. Como a utilização de um método numérico depende de sua eficiência, o desenvolvimento tecnológico dos computadores tem feito a seleção dos melhores métodos.

Tentamos apresentar nosso texto da maneira mais objetiva e clara possível. Evitamos, sempre que possível, a notação matemática carregada, na tentativa de ampliar o público alvo: usuários de métodos numéricos em suas tarefas profissionais. Poucas demonstrações são apresentadas, mas nas referências os interessados podem encontrar mais detalhes matemáticos do assunto. Muitos algoritmos foram incluídos para permitir uma programação rápida do método.

Seria impossível agradecer a todas as pessoas que me ajudaram e incentivaram neste trabalho. Mas seria injusto deixar de agradecer àlgumas pessoas. Agradeço aos colegas do Departamento de Engenharia do Petróleo, em especial Bonet e Antônio Cláudio, aos colegas do Departamento de Matemática Aplicada, em especial Valéria, Silvio e Sônia, Anamaria e Suely, sempre me incentivando nesta tarefa. Agradeço ao Euclydes pelas inúmeras e frutíferas discussões no dia-a-dia desta versão. Não teria palavras para agradecer a Cantão e Luiza pelo trabalho e dedicação na digitação; sem eles, esta versão do livro dificilmente sairia. Agradeço ao Pronex do Petróleo pelo suporte financeiro. Também devo agradecimentos à Fátima, secretária do Departamento de Matemática Aplicada, que digitou a primeira edição, fonte para a atual, e que me auxiliou em muitas tarefas desta segunda edição.

Campinas, setembro de 2000.

# Capítulo 1

# Erros, Representação de Números

## 1.1 Origem das Incertezas

A utilização de simuladores matemáticos ou numéricos requer a execução de uma seqüência de etapas que procuramos descrever brevemente nesta seção.

Inicialmente, é necessário equacionar o processo que pretendemos estudar, isto é, decidir quais são as variáveis relevantes e como elas se relacionam. Por exemplo, para descrever o movimento de fluidos, em geral são usadas as componentes da velocidade e a pressão, em cada ponto da região considerada. As leis de conservação (da massa, da quantidade de movimento, da energia etc.), bem como as equações constitutivas, são requisitadas para estabelecer as relações que existem entre as variáveis escolhidas. Como nem tudo que influi no fenômeno pode ser levado em consideração, algumas simplificações são introduzidas na modelagem já neste estágio.

Uma vez estabelecidas as equações que descrevem matematicamente o nosso objeto de estudo, o passo seguinte será resolvê-las. Aqui, a aspiração maior seria obter soluções através de expressões analíticas, de preferência envolvendo poucos cálculos na sua avaliação. Infelizmente, nem sempre no estágio de desenvolvimento da matemática as técnicas disponíveis nos permitem atingir este alvo. Devemos então optar por simplificações no equacionamento ou utilizar métodos numéricos para calcular uma aproximação para a solução desejada. Na escolha da solução numérica, abre-se um novo leque de procedimentos alternativos, e a cada um deles está associada uma nova fonte de erros.

Uma vez decidido o método numérico adequado, torna-se necessário sua implementação computacional para que tenhamos resultados palpáveis. Como a máquina trabalha com um número finito de dígitos, insuficientes para representar os números reais, novos erros serão introduzidos na simulação.

O conjunto de todas estas incertezas certamente vai contaminar o resultado final. Se esta contaminação é desprezível, ou se ela compromete o resultado, é uma análise necessária na validação de todo processo adotado. Assim, torna-se necessário que tenhamos algum controle sobre os erros que foram sendo introduzidos no processo de simulação e como eles se propagam.

Como nestas notas pretendemos abordar apenas alguns métodos numéricos, na seção seguinte caracterizaremos alguns tipos de erros que ocorrem com freqüência na solução numérica de problemas matemáticos.

## 1.2 Erros e Representação de Números

Podemos caracterizar os erros que aparecem no processo de simulação numérica localizando suas fontes. Chamamos *erro inicial* à soma das incertezas introduzidas no equacionamento do problema, na medição dos parâmetros, nas condições iniciais etc. A influência destas perturbações no resultado final vai depender da estabilidade do problema. Em algumas situações, conhecidas como problemas malpostos ou malcondicionados, sua influência pode ser desastrosa e inviabilizar completamente soluções numéricas. Neste caso, são necessárias técnicas especializadas, objeto de uma área da matemática que se encontra em pleno progresso: *Problemas Inversos*.

Chamamos de *erro de truncamento* aquele associado ao truncamento de um processo infinito. Explicando melhor: como um processo infinito não se conclui, em geral somos forçados a adotar uma aproximação obtida após a execução de número finito de passos.

Vamos apresentar dois exemplos clássicos que ilustram fontes de erro de truncamento: a utilização de séries no cálculo de funções e o uso de diferenças finitas para aproximar derivadas.

**Exemplo 1.2.1.** Para calcular o valor de $\mathrm{e}^{0.5}$ podemos lançar mão da série de Taylor da função exponencial

$$\mathrm{e}^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} + \cdots .$$

Entretanto, no cálculo efetivo de $\mathrm{e}^{0.5}$, precisamos *truncar* a série, usando apenas um número finito de termos desta série. Por exemplo, usando os seis primeiros termos como aproximação, o erro de truncamento será $\alpha^6/6!$, $0 \leq \alpha \leq 0.5$, como prediz a expressão do erro da série de Taylor. □

**Exemplo 1.2.2.** A derivada de uma função $f(x)$ pode ser calculada pela diferença centrada:

$$f'(x) \cong \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Veremos que o erro de truncamento da fórmula de diferenças centradas é $h^2 f''(\alpha)$, $x - h < \alpha < x + h$. □

Definimos como *erro de arredondamento* a soma das incertezas associadas à representação do sistema de numeração na máquina calculadora. Para melhor entender como ocorre o erro de arredondamento, vejamos como se dá a representação dos números no computador.

Os cálculos nos computadores são efetuados com base nos pulsos elétricos. Assim, só dois estados podem ocorrer: presença e ausência de corrente elétrica. Assim, é conveniente