Cálculo Numérico

Notas de aula - Processos Iterativos Escalares

Prof. Yuri Dumaresq Sobral

Departamento de Matemática
Universidade de Brasília

2025

Ao longo deste curso, vamos falar diversas vezes sobre iterações e de convergência, mas ainda não interpretamos estas palavras do ponto de vista matemático. Vamos dar uma olhada nisto agora!

Considere uma função $g : I\!R \to I\!R$ tal que possamos construir, com base nela, a seguinte equação recursiva:

$$x_{n+1} = g(x_n), \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Teremos, claramente:

$$x_1 = g(x_0), \qquad x_2 = g(x_1), \qquad x_3 = g(x_2),$$

$$x_4 = g(x_3), \qquad x_5 = g(x_4), \qquad x_6 = g(x_5),$$

$$\vdots$$

Para inicializarmos o processo iterativo precisamos de uma condição inicial x_0.

De fato, o processo iterativo depende fortemente desta condição inicial, pois:

$$x_1 = g(x_0)$$

$$x_2 = g(x_1) = g\left(g(x_0)\right) = g \circ g(x_0)$$

$$x_3 = g(x_2) = g\left(g(x_1)\right) = g\left(g\left(g(x_0)\right)\right) = g \circ g \circ g(x_0)$$

$$x_4 = g(x_3) = \cdots = g\left(g\left(g\left(g(x_0)\right)\right)\right) = g \circ g \circ g \circ g(x_0)$$

$$\vdots$$

$$x_{n+1} = g(x_n) = \cdots = \underbrace{g \circ g \circ g \circ \cdots \circ g}_{n+1 \text{ vezes}}(x_0)$$

Isto é, o valor da função na iteração n é determinado pelo valor da aplicação da função composta $\underbrace{g \circ g \circ g \circ \cdots \circ g}_{n \ vezes}$ em x_0.

Exemplo 1: Considere o processo iterativo "da calculadora"

$$x_{n+1} = \sqrt{x_n}, \quad x_0 = 100.$$

Realizando as iterações, obtemos os seguintes resultados:

$$x_1 = \sqrt{x_0} = \sqrt{100} = 10$$

$$x_2 = \sqrt{x_1} = \sqrt{10} = 3{,}16227\ldots$$

$$x_3 = \sqrt{x_2} = \sqrt{3{,}16227\ldots} = 1{,}77827\ldots$$

$$x_4 = \sqrt{x_3} = \sqrt{1{,}77827\ldots} = 1{,}33352\ldots$$

$$\vdots$$

$$x_{10} = \sqrt{x_9} = \sqrt{1{,}00903\ldots} = 1{,}00450\ldots$$

$$\vdots$$

$$x_{20} = \sqrt{x_{19}} = 1{,}00000439\ldots$$

$$\vdots$$

$$x_{30} = \sqrt{x_{29}} = 1{,}000000004289\ldots$$

$$\vdots$$

Com este exemplo bem simples, já podemos aprender algumas características importantes de processos iterativos:

- Conhecendo-se a função g que define o processo iterativo, é muito fácil calculá-lo!
- Haverá um potencial problema se a imagem da função g não estiver contida no seu domínio! Se isto acontecer, a função g pode assumir algum valor numa iteração n que não poderá ser usado para calcular o passo seguinte $n+1$.

Exemplo 2: Considere $g(x) = \sqrt{x-5}$. O domínio desta função é o intervalo $\mathcal{D} = [5, \infty)$. Se começarmos o processo iterativo com $x_0 = 9$, teremos $x_1 = \sqrt{9-5} = \sqrt{4} = 2$. O próximo passo seria $x_2 = \sqrt{x_1} = \sqrt{2-5} = \sqrt{-3}$, que não é real. O processo não está mais definido para $n \geq 1$! Note que a imagem deste processo é o intervalo $\mathcal{I} = [0, \infty)$, que não está contido em seu domínio $\mathcal{D}$.

- Apesar de ser muito fácil (trivial!) calcular um processo iterativo (ótimo para projetarmos nossos algoritmos de cálculo numérico!), compreender o que está acontecendo com ele é mais complicado... No Exemplo 1, parece que o processo está tendendo a 1... Será verdade? Responder a este tipo de pergunta pode ser realmente complicado!
- Matematicamente, o que estamos perguntando é: o que acontece com o processo iterativo quando $n \to \infty$?

Exemplo 3: Vamos ver três comportamentos distintos que podem acontecer num processo iterativo. Considere $x_{n+1} = g(x_n)$, com um $x_0 > 1$ e

$(i)\ g(x) = \sqrt{x}$ $\qquad (ii)\ g(x) = x$ $\qquad (iii)\ g(x) = x^2.$

- Caso (i): Neste caso, $x_{n+1} = \sqrt{x_n}$ e o valor do processo na iteração n é trivialmente dado por $x_n = \sqrt[2^n]{x_0} = x_0^{\frac{1}{2^n}}$. De Cálculo 2, sabemos que a sequência $\{x_0^{\frac{1}{2^n}}\}$ converge para 1 com $n \to \infty$. Note que isto é válido para qualquer valor de $x_0 > 1$ com o qual o processo seja iniciado. O processo converge para um valor distinto do qual ele começou.
- Caso (ii): Neste caso, $x_{n+1} = x_n$ e o valor do processo na iteração n é trivialmente dado por $x_n = x_0$. Este processo converge trivialmente para o valor de x_0.
- Caso (iii): Neste caso, $x_{n+1} = x_n^2$ e o valor do processo na iteração n é trivialmente dado por $x_n = x_0^{2^n}$. De Cálculo 2, sabemos que a sequência $\{x_0^{2^n}\}$ diverge para qualquer valor $x_0 > 1$ com o qual o processo seja iniciado.

- O nosso interesse está em processos iterativos como o processo (i) do Exemplo 3 e nossos algoritmos devem ser construídos com isto em mente! Eles devem gerar resultados que convirjam para algum lugar!
- O que podemos dizer sobre este algum lugar? Vamos considerar que o processo iterativo $x_{n+1} = g(x_n)$ convirja para uma valor x^*. Então, supondo que a função $g(x)$ seja contínua, temos:

$$x^* = \lim_{n\to\infty} x_{n+1} = \lim_{n\to\infty} g(x_n) = g\left(\lim_{n\to\infty} x_n\right) = g(x^*)$$

- Portanto, a solução convergida do processo iterativo satisfaz a equação $x^* = g(x^*)$. Quando isto acontece, dizemos que x^* é um ponto fixo do processo iterativo.

Observações:

- ATENÇÃO: quando quisermos encontrar o ponto fixo de um processo iterativo, devemos resolver a equação (algébrica)

$$x^* = g(x^*).$$

- Note que a continuidade de $g(x)$ é essencial para que o ponto fixo x^* satisfaça a equação $x^* = g(x^*)$. Sem ela, não é possível passar o limite para dentro da $g(x)$.

- Como $g(x)$ é uma função genérica, é possível que a equação $x^* = g(x^*)$ admita mais de uma solução! Precisamos, portanto, entender não apenas se o processo iterativo converge, mas também para onde ele converge!

- Classificação dos pontos fixos. De acordo com o Exemplo 3, temos três tipos de pontos fixos:
  - Assintoticamente estáveis: o processo iterativo é atraído por estes pontos, isto é, se o processo iterativo começar suficientemente perto destes pontos, ele será atraído para este ponto.
  - Estáveis: os processos iterativos que começarem suficientemente perto destes pontos, permanecerão próximos destes pontos, mas não tenderão para estes pontos.
  - Instáveis: os processos iterativos que começarem arbitrariamente perto destes pontos tenderão a se afastar destes pontos.
- Nossa meta no curso de Cálculo Numérico: queremos construir métodos (algoritmos) iterativos que tenham pontos fixos assintoticamente estáveis nas soluções dos problemas que queremos resolver.

Exemplo 4: Considere o processo iterativo linear

$$x_{n+1} = ax_n, \quad a > 0, \quad x_0 \in I\!R.$$

- Cálculo do ponto fixo: Devemos resolver a equação do ponto fixo

$$x^* = ax^* \Leftrightarrow (a-1)x^* = 0,$$

Temos duas possibilidades. Se $a = 1$, então qualquer $x^* \in I\!R$ é ponto fixo do sistema (infinitos pontos fixos). Se $a \neq 1$, então $x^* = 0$ é o único ponto fixo do sistema. Apenas o segundo caso é relevante. Então, neste caso, o processo iterativo é dado por:

$$x_{n+1} = ax_n = a(ax_{n-1}) = a^2(ax_{n-2}) = \cdots = a^{n+1}x_0.$$

- Se $a < 1$, então temos que

$$\lim_{n\to\infty} x_{n+1} = \lim_{n\to\infty} a^{n+1} x_0 = x_0 \lim_{n\to\infty} a^{n+1} = 0.$$

Assim, $x^* = 0$ é ponto fixo assintóticamente estável do processo iterativo linear quando $a < 1$.

- Se $a > 1$, então temos que

$$\lim_{n\to\infty} x_{n+1} = \lim_{n\to\infty} a^{n+1} x_0 = x_0 \lim_{n\to\infty} a^{n+1} = \infty.$$

Assim, $x^* = 0$ é ponto fixo instável do processo iterativo linear quando $a > 1$.

- Este exemplo será importante para os passos seguintes.
- Dever de casa: estude o caso $a < 0$.

- No Exemplo 4, conseguimos resolver o processo iterativo e calcular na mão a estabilidade dos pontos fixos. Mas nem sempre isto é possível ou prático. Será que existe alguma maneira mais elegante de determinarmos a estabilidade dos pontos fixos de um processo iterativo?
- Vamos considerar um processo iterativo $x_{n+1} = g(x_n)$ e, assumindo que g seja uma função bem comportada (isto é, seja contínua e tenha todas as derivadas que precisamos), podemos linearizar o processo nas vizinhanças do ponto fixo x^*:

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

- Vamos desprezar os termos de alta ordem da expressão acima, isto é:

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

$$\alpha = g(x^*) - g'(x^*)x^* \qquad \beta = g'(x^*).$$

- Note que a linearização não altera o ponto fixo do processo, pois

$$x^* = \alpha + \beta x^* = g(x^*) + g'(x^*)(x^* - x^*) \Leftrightarrow x^* = g(x^*).$$

- Podemos definir o erro do processo iterativo na iteração n como sendo $e_n = x_n - x^*$ (distância da iteração n para o ponto fixo). Assim, voltando ao processo iterativo linearizado, podemos subtrair dos dois lados da equação x^*:

$$x_{n+1} = \alpha + \beta x_n \Leftrightarrow x_{n+1} - x^* = \alpha + \beta x_n - x^* \Leftrightarrow$$

$$x_{n+1} - x^* = \alpha + \beta x_n - (\alpha + \beta x^*) \Leftrightarrow x_{n+1} - x^* = \beta(x_n - x^*) \Leftrightarrow$$

$$e_{n+1} = \beta e_n$$

- O erro e_n é governado por um processo iterativo linear (como no Exemplo 4 e dever de casa)!

- Portanto, já sabemos que o ponto fixo deste processo é $e^* = 0$ e ele será assintoticamente estável se e somente se $|\beta| = |g'(x^*)| < 1$. Neste caso, $e_n \to 0$ quando $n \to \infty$.

- CONCLUSÃO: para x^* ser ponto fixo assintoticamente estável, precisamos que $|g'(x^*)| < 1$. Já sabemos caracterizar o ponto fixo sem precisarmos calcular o processo iterativo!

- PROBLEMA: em situações reais, não conhecemos o ponto fixo x^*! Na verdade, queremos construir um método para encontrá-lo! Então, precisamos usar este resultado com cautela!

- Note que a análise linear nos diz que, nas vizinhanças do ponto fixo, o processo iterativo tem um erro que decai com uma taxa $|g'(x^*)|$. Portanto, a taxa mais rápida de decaimento seria quando $g'(x^*) = 0$, que é o menor valor que $|g'(x^*)|$ pode assumir!
- Neste caso, a estimativa linear deixa de valer e precisamos considerar o próximo termo na expansão do processo iterativo em torno do ponto fixo. Usando o termo do erro de Lagrange (Cálculo 2), existe um $\xi \in (x_n, x^*)$ tal que

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

Como $g(x^*) = x^*$ e $g'(x^*) = 0$, podemos reescrever o processo como:

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

- O teorema do resto de Lagrange para séries de Taylor não fornece exatamente qual é o valor de ξ. Então, podemos tomar
$$\tau = \max_{x \in (x_n, x^*)} \left| \frac{1}{2!} g''(x) \right| \geq \frac{1}{2!} g''(\xi)$$
e, então,
$$x_{n+1} - x^* = e_{n+1} = \frac{1}{2!} g''(\xi)(x_n - x^*)^2 \leq \tau (x_n - x^*)^2 = \tau e_n^2$$
$$\Leftrightarrow e_{n+1} \leq \tau e_n^2$$

- Quando isto acontece, dizemos que o processo iterativo tem convergência quadrática! Quando x_n estiver muito próximo de x^*, o erro do processo vai decair para zero MUITO mais rapidamente do que no processo linear!

- Esta é uma propriedade desejável para nossos futuros métodos!

- Os processos iterativos que estudamos até agora são do tipo

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

ou seja, dado um único valor inicial x_0, podemos começar o processo iterativo e os próximos valores do processo já estarão definidos...

- Este tipo de processo iterativo é chamado de processo iterativo de primeira ordem. CUIDADO: a palavra ordem terá diversos significados ao longo do curso!
- É possível definir processos iterativos mais gerais! Por exemplo, podemos pensar num processo iterativo do tipo

$$x_{n+1} = g(x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, \ldots, x_{n-(m-2)}, x_{n-(m-1)}), \quad m \in I\!N.$$

Equivalentemente, podemos escrever este processo como:

$$x_{n+m} = g(x_{n+m-1}, x_{n+m-2}, x_{n+m-3}, \ldots, x_{n+1}, x_n), \quad m \in I\!N.$$

- Chamamos este tipo de processo de processo iterativo de ordem m.

$$x_{n+m} = g(x_{n+m-1}, x_{n+m-2}, x_{n+m-3}, \ldots, x_{n+1}, x_n), \quad m \in I\!N.$$

- Para estes processos, a função $g : I\!R^m \to I\!R$ e precisamos de m valores iniciais para iniciar o processo, isto é, precisamos conhecer:

$$x_0, x_1, x_2, \ldots, x_{m-1}$$

para poder calcular x_{n+m}.

- Processos gerais deste tipo são muito difíceis de estudar de forma genérica. Vamos estudar apenas os processos iterativos lineares de ordem m:

$$x_{n+m} + a_{m-1}x_{n+m-1} + a_{m-2}x_{n+m-2} +$$

$$+ a_{m-3}x_{n+m-3} + \cdots + a_1 x_{n+1} + a_0 x_n = f(n),$$

em que $a_{m-1},\ a_{m-2},\ a_{m-3}, \ldots,\ a_1,\ a_0$ são constantes reais e $f(n)$ uma função qualquer de n (não-homogeneidade).

- Para simplificar a apresentação, vamos considerar apenas o caso geral de processo iterativo de ordem 2, isto é:

$$x_{n+2} + a_1 x_{n+1} + a_0 x_n = f(n),$$

com a_1 e a_0 conhecidos e $f(n)$ qualquer, e tomando x_0 e x_1 valores iniciais conhecidos.

- Vamos tomar, inicialmente, o caso homogêneo, isto é, $f(n) = 0$. Para encontrarmos a solução geral deste processo iterativo, olhamos para a solução do processo iterativo linear de primeira ordem, $x_{n+1} = a x_n$, dada por $x_n = a^n x_0$. Podemos propor uma solução geral do tipo

$$x_n = r^n, \quad r \ \text{constante}, \quad r \neq 0, \quad n \geq 1$$

com o valor de r a ser determinado.

- Desta forma, temos que:

$$r^{n+2} + a_1 r^{n+1} + a_0 r^n = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad r^2 + a_1 r + a_0 = 0.$$

Sabemos resolver esta equação característica para encontrar o valor r!!

- Do resultado clássico para equações algébricas quadráticas:

$$r = \frac{-a_1 \pm \sqrt{{a_1}^2 - 4a_0}}{2}.$$

- Teremos três possibilidades:
  1. ${a_1}^2 - 4a_0 > 0$: duas soluções reais distintas, dando origem à solução geral do processo iterativo

     $$x_n = C_1 r_1^n + C_2 r_2^n, \quad n \geq 1$$

     com C_1 e C_2 constantes que dependem das condições iniciais x_0 e x_1.
  2. ${a_1}^2 - 4a_0 < 0$: duas soluções complexas conjugadas, dando origem à solução geral do processo iterativo

     $$x_n = \rho^n \Big(C_1 \cos(n\theta) + C_2 \sin(n\theta) \Big), \quad n \geq 1,$$

     $$\rho = \sqrt{a_0}, \quad \theta = \operatorname{atan}\left(-\frac{\sqrt{4a_0 - {a_1}^2}}{a_1} \right).$$
  3. ${a_1}^2 - 4a_0 = 0$: duas soluções reais idênticas, dando origem à solução geral do processo iterativo

$$x_n = C_1 r^n + C_2 n r^n, \quad n \geq 1$$

- Neste terceiro caso, a construção de duas soluções linearmente independentes a partir de uma solução para a equação característica se parece ao que conhecemos para EDOs de segunda ordem.

- E o que podemos falar sobre a estabilidade deste ponto fixo? É fácil mostrar que ponto fixo será assintóticamente estável quando
  1. ${a_1}^2 - 4a_0 > 0$: $|r_1|, \ |r_2| < 1$
  2. ${a_1}^2 - 4a_0 < 0$: $\rho < 1$
  3. ${a_1}^2 - 4a_0 = 0$: $|r| < 1$

- Esta análise pode ser extendida a processos iterativos de ordem superior a dois! Porém, as contas ficam muito mais tediosas!

- Para os processos lineares de ordem superior homogêneos, claramente temos que $x^* = 0$ será o único ponto fixo possível, pois

$$x^* = g(x^*,\ x^*,\ \dots, x^*) \Leftrightarrow$$

$$x^* + a_{m-1}x^* + a_{m-2}x^* + a_{m-3}x^* + \cdots + a_1x^* + a_0x^* = 0 \Leftrightarrow$$

$$x^*(1 + a_{m-1} + a_{m-2} + a_{m-3} + \cdots + a_1 + a_0) = 0 \Leftrightarrow$$

$$x^* = 0, \quad \text{para} \ \ 1 + a_{m-1} + a_{m-2} + a_{m-3} + \cdots + a_1 + a_0 \neq 0.$$

- O mesmo descrito anteriormente se aplica para encontrarmos soluções gerais para processos iterativos não-homogêneos! Usaremos o método dos coeficientes indeterminados para encontrar uma solução particular para o processo iterativo. A solução geral será a combinação linear da solução do processo homogêneo com a solução particular obtida.
- Note que o ponto fixo neste caso só existe quando $f(n) = b$ (constante) e é dado por

$$x^* = \frac{b}{1 + a_{m-1} + a_{m-2} + a_{m-3} + \cdots + a_1 + a_0},$$

novamente com $1 + a_{m-1} + a_{m-2} + a_{m-3} + \cdots + a_1 + a_0 \neq 0$.

- A estabilidade assintótica deste ponto fixo será obtida quando critérios semelhantes aos propostos acima para processos de ordem 2 valerem para a solução homogênea do processo iterativo!