SME0104 Cálculo Numérico
Aula 4

Maria Luísa Bambozzi de Oliveira
marialuisa @ icmc . usp . br
Sala: 3-241
Página: tidia-ae.usp.br

5 de março de 2015

Aula Anterior

- Sistema $F(\beta, t, m, M)$
  - Arredondamento
- Operações Aritméticas
- Efeitos Numéricos:
  - Cancelamento
  - Propagação de erro

OBJETIVO

Calcular raízes de equações da forma

$$f(x) = 0$$

com $f(x)$ sendo um polinômio em x ou função *transcendente*.

Em raros casos, conseguimos obter raízes exatas (polinômios fatoráveis).

Numericamente, obtemos solução aproximada através de sequência de aproximações, cada uma mais precisa que a anterior, através de ***métodos iterativos para aproximar raízes isoladas***.

Equações Não-Lineares (cont.)

Teorema

Se uma função contínua $f(x)$ assume valores de sinais opostos (ou zero) nos pontos extremos do intervalo $[a, b]$, i.e., se $f(a) \times f(b) \leq 0$, então existe pelo menos um ponto $\overline{x} \in [a, b]$ tal que $f(\overline{x}) = 0$.

Definições

(1) Se $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função dada, um ponto $\overline{x} \in [a, b]$ é um **zero** (ou raiz) de f se $f(\overline{x}) = 0$.

(2) Um ponto $\overline{x} \in [a, b]$ é uma **raiz de multiplicidade** m da equação $f(x) = 0$ se $f(x) = (x - \overline{x})^m g(x)$, com $g(\overline{x}) \neq 0$ em $[a, b]$.

Métodos numéricos para calcular a raiz de $f(x) = 0$: *método da Bissecção*; *método Iterativo Linear*; *método de Newton*; *método das Secantes*; *método Regula-Falsi*.

Método da Bissecção

Para cada passo k:

1. Consideramos intervalo $[a_k, b_k]$ onde $f(a_k) \times f(b_k) < 0$.
2. Calculamos $f(x)$ no ponto médio $x_{k+1} = \dfrac{a_k + b_k}{2}$.
3. Três possibilidades:
   - $f(x_{k+1}) = 0 \to x_{k+1}$ é zero; TERMINAMOS.
   - $f(a_k) \times f(x_{k+1}) < 0 \to f$ tem zero entre a_k e x_{k+1}. Repetimos processo (1,2,3) com intervalo $[a_k, x_{k+1}]$ e $k = k + 1$.
   - $f(b_k) \times f(x_{k+1}) < 0 \to f$ tem zero entre x_{k+1} e b_k. Repetimos processo (1,2,3) com intervalo $[x_{k+1}, b_k]$ e $k = k + 1$.

Cada repetição é uma ***iteração***, e aproximações sucessivas são *termos iterados*.

Método da Bissecção (cont.)

Exemplo: Seja $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Calcule uma aproximação para a raiz de $f(x) = x^2 + 4x + 1$ no intervalo $[-1, 0]$.

Raízes: $x = -3{,}73205; x = -0{,}267949$

Com o Método da Bissecção:

$$f(x) = x^2 + 4x + 1; \quad a_0 = -1; \quad b_0 = 0.$$

$$f(a_0) = f(-1) = (-1)^2 + 4(-1) + 1 = -2 \neq 0;$$
$$f(b_0) = f(0) = (0)^2 + 4(0) + 1 = 1 \neq 0$$

$$f(a_0) \times f(b_0) = (-2) \times (1) = -2 < 0$$

- $k = 1$:

$$a_0 = -1; \quad f(a_0) = -2; \quad b_0 = 0; \quad f(b_0) = 1;$$
$$x_1 = \frac{-1+0}{2} = -0{,}5; \quad f(x_1) = -0{,}75 \neq 0;$$
$$f(a_0) \times f(x_1) = (-2) \times (-0{,}75) = +1{,}5 > 0$$
$$f(x_1) \times f(b_0) = (-0{,}75) \times (1) = -0{,}75 < 0$$
$$\text{Intervalo escolhido: } [x_1, b_0] = [a_1, b_1] = [-0{,}5, 0]$$

- $k = 2$:

$$a_1 = -0{,}5; \quad f(a_1) = -0{,}75; \quad b_1 = 0; \quad f(b_1) = 1;$$
$$x_2 = \frac{-0{,}5+0}{2} = -0{,}25; \quad f(x_2) = +0{,}0625 \neq 0;$$
$$f(a_1) \times f(x_2) = (-0{,}75) \times (0{,}0625) = -0{,}046875 < 0$$
$$f(x_2) \times f(b_1) = (0{,}0625) \times (1) = +0{,}0625 > 0$$
$$\text{Intervalo escolhido: } [a_1, x_2] = [a_2, b_2] = [-0{,}5, -0{,}25]$$

e assim por diante.

Algoritmo (Método da Bissecção) – Versão 1:

Entrada: $a_0, b_0, f(x)$
Saída: $\overline{x}$ ou mensagem de erro

[P1] Calcular $f(a_0)$ e $f(b_0)$ e verificar:

- Se $f(a_0) = 0$, RETORNAR a_0 e PARAR (com sucesso).
- Se $f(b_0) = 0$, RETORNAR b_0 e PARAR (com sucesso).
- Se $f(a_0) \times f(b_0) > 0$, PARAR com erro (não tem sinais opostos)

[P2] Definir $x_0 = a_0$.
[P3] Para $k = 1, 2, \ldots$

- Calcular $x_k = \frac{a_{k-1}+b_{k-1}}{2}$ e $f(x_k)$;
- Se $f(x_k) = 0$, RETORNAR x_k e PARAR (com sucesso);
- Se $f(a_{k-1}) \times f(x_k) > 0$, $a_k = x_k$ e $b_k = b_{k-1}$; senão, $a_k = a_{k-1}$ e $b_k = x_k$.

Processo de Parada

Como o computador determina que a aproximação x_k está perto o suficiente da solução exata $\overline{x}$, se não sabemos qual é a solução exata?

Definimos um **processo de parada** para métodos numéricos.

Para obter raiz com precisão $\varepsilon = 10^{-m}$ (m escolhido: número de casas decimais corretas), fazemos o seguinte teste durante o processo iterativo.

Se

$$\frac{|x_k - x_{k-1}|}{|x_k|} < \varepsilon, \quad \text{(erro relativo)}$$

então x_k é raiz procurada ($\overline{x} = x_k$).

Por que não utilizar

$$|f(x_k)| < \varepsilon \quad \text{ou} \quad |x_k - x_{k-1}| < \varepsilon$$

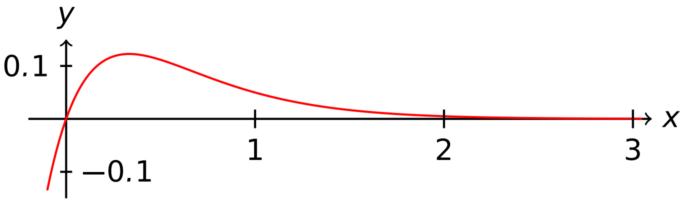
como método de parada?

Explicação:

1) Um valor de $f(x_k)$ menor que ε não implica em valor de x_k próximo da raiz.

Exemplo: $f(x) = xe^{-3x} \Rightarrow \bar{x} = 0.$

Mas $f(2) = 0{,}4958 \times 10^{-2}$; $f(3) = 0{,}3702 \times 10^{-3}, \ldots$



Processo de Parada (cont.)

2) A utilização do *erro absoluto* $|x_k - x_{k-1}|$ como teste de parada pode causar problemas se os valores de $x_{k-1},\ x_k$ são muito maiores em relação a ε.

Exemplo: $f(x) = x^2 - 381x + 36180 = (x-180)(x-201)$.

Se escolhermos $\varepsilon = 10^{-6}$, quantos passos k serão necessários para o método parar com a solução aproximada $\overline{x} = x_k$?

Para **implementar** erro relativo em programa computacional, escrever como

$$|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon \cdot \max\{1, |x_k|\}.$$

Por segurança, adicionar também *número máximo de iterações* (MAXITER).

Método da Bissecção – Com Método de Parada

Entrada: $f(x), a_0, b_0, \varepsilon$, MAXITER
Saída: $\overline{x}$ ou mensagem de ERRO

[P1] Calcular $f(a_0)$ e $f(b_0)$ e verificar:

- Se $f(a_0) = 0$, RETORNAR a_0;
  se $f(b_0) = 0$, RETORNAR b_0; PARAR (com sucesso).
- Se $f(a_0) \times f(b_0) > 0$, PARAR com erro (mesmo sinal)

[P2] Definir $x_0 = a_0$.
[P3] Para $k = 1, 2, \dots$, MAXITER :

- Calcular $x_k = \frac{a_{k-1}+b_{k-1}}{2}$ e $f(x_k)$;
- Se $f(x_k) = 0$ ou $|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon \cdot \max\{1, |x_k|\}$,
  RETORNAR x_k e PARAR (com sucesso);
- Se $f(a_{k-1}) \times f(x_k) > 0$, $a_k = x_k$ e $b_k = b_{k-1}$;
  senão, $a_k = a_{k-1}$ e $b_k = x_k$.

[P4] RETORNAR erro (MAXITER atingido sem sucesso).

Iteração Linear

Queremos escrever $f(x) = 0$ na forma $x = \psi(x)$, tal que as soluções $\overline{x}$ são iguais, isto é,

$$f(\overline{x}) = \overline{x} - \psi(\overline{x}) = 0.$$

Para qualquer ψ, qualquer solução de $x = \psi(x)$ é chamada de **ponto fixo** de $\psi(x)$.

Como determinar $\psi(x)$?

$$\psi(x) = x + f(x)$$
$$\psi(x) = x - 3f(x)$$
$$\psi(x) = \dots$$

Iteração Linear (cont.)

Queremos raiz de $f(x) = 0$, tal que $\bar{x}$ é raiz:

$$f(x) = 0 \Rightarrow$$
$$A(x)f(x) = 0 \quad [A(\bar{x}) \neq 0] \Rightarrow$$
$$\psi(x) = x + A(x)f(x)$$

para qualquer $A(x)$ tal que $A(\bar{x}) \neq 0$.

Exemplo: $f(x) = x^5 - 2x^3 + 2$.
Raiz real: $\bar{x} \approx -1{,}58258581424$

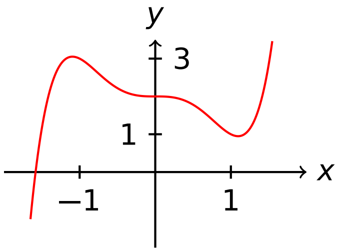
$\psi(x) = x - x^5 + 2x^3 - 2$

$\psi(x) = -\sqrt{2 - \frac{2}{x^3}}$

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

$\psi(x) = x - \frac{x^5 - 2x^3 + 2}{5x^4 - 6x^2}$

$\psi(x) = \ldots$



Método Iterativo Linear

Se supormos que $\overline{x}$ é uma raiz de f, com $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ contínuas num intervalo que contém a raiz, e escolhermos um x_0 que é uma *aproximação inicial* para a raiz $\overline{x}$ de $x = \psi(x)$, determinamos aproximações sucessivas x_k de $\overline{x}$ obtidas usando o processo iterativo

$$x_{k+1} = \psi(x_k), \quad k = 0, 1, \ldots$$

Essa sequência deve convergir (cada aproximação x_{k+1} chega mais perto de $\overline{x}$), e se $x_k = \overline{x}$, $x_{k+1} = \psi(\overline{x}) = \overline{x}$.

Como garantir que sequência converge?

Existem **condições suficientes** para convergência do método.

Método Iterativo Linear (cont.)

Teorema: Seja $\psi(x)$ uma função contínua, com derivadas primeira e segunda contínuas num intervalo fechado $I = \left[\overline{x} - h, \overline{x} + h\right]$, com centro $\overline{x}$ sendo a solução de $x = \psi(x)$. Se $x_0 \in I$ e M é um limitante tal que

$$|\psi'(x)| \leq M < 1$$

em I, então:

1. A iteração $x_{k+1} = \psi(x_k),\ k = 0, 1, \ldots$ pode ser executada indefinidamente, pois $x_k \in I, \forall k$.
2. $|x_k - \overline{x}| \to 0$.
3. Se $\psi'(\overline{x}) \neq 0$, ou se $\psi'(\overline{x}) = 0$ e $\psi''(\overline{x}) \neq 0$, e se $|x_0 - \overline{x}|$ for suficientemente pequeno, então a sequência $x_1, x_2, \ldots$ é monotônica ou oscilante.

Método Iterativo Linear (cont.)

Algoritmo: Método Iterativo Linear

Entrada: $\psi(x)$, x_0, ε, MAXITER;
Saída: $\overline{x}$ ou mensagem de ERRO

[P1] Para $k = 1, \ldots, \text{MAXITER}$:

- Calcular $x_k = \psi(x_{k-1})$;
- Se $|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon \cdot \max\{1, |x_k|\}$, RETORNAR x_k e PARAR (com sucesso).

[P2] RETORNAR erro (número máximo de iterações atingido sem sucesso).

Exemplo: Raiz de $f(x) = x^3 + 4x^2 - 10 = 0$ no intervalo $[1, 2]$.
Raiz real: $\overline{x} \approx 1{,}365230013$.

a) $\psi(x) = x - x^3 - 4x^2 + 10$