

 Universidade Federal Fluminense

***Apostila de Introdução
Aos Métodos Numéricos***

PARTE I

2º Semestre - 2002

Prof^a. Salete Souza de Oliveira Buffoni

Índice

<u>INTRODUÇÃO: O QUE SÃO OS MÉTODOS NUMÉRICOS, SUA IMPORTÂNCIA E OS OBJETIVOS DO CURSO</u>	4
O QUE É O CÁLCULO NUMÉRICO?	4
A IMPORTÂNCIA DA DISCIPLINA DE MÉTODOS NUMÉRICOS	5
OBJETIVOS DA DISCIPLINA:.....	6
CONTEÚDO	7
DATA	7
REPRESENTAÇÃO NUMÉRICA	9
INTRODUÇÃO	9
PONTO FIXO E PONTO FLUTUANTE	9
ERROS NUMÉRICOS	11
INTRODUÇÃO	11
TIPOS DE ERROS.....	12
PROPAGAÇÃO E CONDICIONAMENTO DE ERROS NUMÉRICOS.....	13
ERROS NA ARITMÉTICA DE PONTO FLUTUANTE.....	13
ZERO REAIS DE FUNÇÕES REAIS	16
INTRODUÇÃO	16
ZEROS OU RAÍZES DE FUNÇÕES	16
PROCESSOS ITERATIVOS.....	18
ISOLAMENTO DE RAÍZES	19
<i>Exemplo:</i>	19
<i>Teorema de Bolzano.</i>	20
<i>Exemplo:</i>	21
MÉTODO DA DICOTOMIA OU BISSECÇÃO.	21
<i>Exemplo:</i>	23
<u>PRIMEIRA LISTA DE EXERCÍCIOS</u>	25
CRITÉRIOS DE PARADA EM UM PROCESSO ITERATIVO	26

<i>Estimativa do número de iterações no método da biseção.</i>	27
MÉTODO DE ITERAÇÃO LINEAR (MIL)	28
O PROBLEMA DA CONVERGÊNCIA NO MÉTODO DA ITERAÇÃO LINEAR ..	32
CRITÉRIOS DE PARADA NO MÉTODO DA ITERAÇÃO LINEAR	36
MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON	38
CONVERGÊNCIA DO MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON	39
<i>Interpretação Geométrica</i>	39
<u>SEGUNDA LISTA DE EXERCÍCIOS</u>	42
<u>TERCEIRA LISTA DE EXERCÍCIOS</u>	43

Introdução: O que são os Métodos Numéricos, sua importância e os objetivos do curso

O que é o Cálculo Numérico?

Os Métodos Numéricos correspondem a um conjunto de **ferramentas** ou **métodos** usados para se obter a solução de problemas matemáticos de forma **aproximada**. Esses métodos se aplicam a problemas que não apresentam uma solução exata, portanto precisam ser resolvidos **numericamente**.

O que isso quer dizer? Vamos tomar um exemplo para entender melhor os objetivos do Cálculo Numérico.

Seja um circuito elétrico composto de uma fonte de tensão (uma pilha, por exemplo) e um resistor, como ilustrado na Figura 1. Digamos que desejamos obter a corrente que circula no circuito, dado o valor da tensão V e da resistência R . O primeiro passo é formular um **modelo matemático** para o nosso **sistema físico** (o circuito), e encontrar a solução do problema representado por esse modelo.

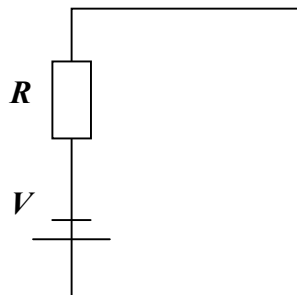


Figura 1: circuito elétrico composto de uma fonte de tensão e um resistor.

No caso do circuito da Figura 1, o modelo matemático também é bastante simples. Utilizando-se a Lei de Kirchoff (não se preocupe com essa lei caso você não a conheça), teremos a seguinte equação para o circuito:

$$V - R \cdot i = 0$$

Esse é o nosso modelo matemático para o circuito (sistema físico). O modelo apresenta uma equação bastante simples que **tem uma solução exata**. Portanto, nosso problema (encontrar a corrente elétrica do circuito) pode ser resolvido de maneira exata, cuja solução é dada por:

$$i = \frac{V}{R}$$

Por exemplo, se $V=10\text{ V}$ e $R=100\ \Omega$, teremos que $i=0,1\text{ A}$.

Como esse problema tem uma solução exata, não é preciso utilizar os métodos do cálculo numérico para resolvê-lo. Porém, digamos que um outro componente eletrônico seja incluído no circuito: um diodo semicondutor. Esse dispositivo tem uma curva característica, isto é, a tensão nesse componente em função da corrente, que é dada por:

$$v(i) = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{i}{I_s} + 1\right)$$

onde k e I_s são constantes, q é a carga do elétron e T a temperatura do dispositivo. Essa equação corresponde ao modelo matemático do diodo (não se preocupe em entender esta equação, pois isto é só um exemplo).

Portanto, ao se incluir o diodo no circuito da Figura 1, tem-se a seguinte equação descrevendo o comportamento da corrente elétrica no circuito:

$$V - R \cdot i - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{i}{I_s} + 1\right) = 0$$

A inclusão desse novo componente no circuito tornou nosso problema mais complicado e de difícil solução analítica. O que isso quer dizer? Tornou-se difícil se obter uma expressão para i , principalmente quando comparado ao caso anterior, quando tínhamos simplesmente $i=V/R$.

Como resolver esse problema então? Como obter o valor de i ? A solução está na utilização de métodos numéricos que serão aprendidos neste curso.

A importância da Disciplina de Métodos Numéricos

Ao resolver um problema matemático numericamente, o mais comum é o profissional utilizar um pacote computacional. Porém, ele terá que tomar uma série de decisões antes de resolver o problema. E para tomar essas decisões, é preciso ter conhecimento de métodos numéricos. O profissional terá que decidir:

- ✓ Pela utilização ou não de um método numérico (existem métodos numéricos para se resolver este problema?);
- ✓ Escolher o método a ser utilizado, procurando aquele que é mais adequado para o seu problema. Que vantagens cada método oferece e que limitações eles apresentam;

- ✓ Saber avaliar a qualidade da solução obtida. Para isso, é importante ele saber exatamente o que está sendo feito pelo computador ou calculadora, isto é, como determinado método é aplicado;

Objetivos da Disciplina:

Os principais objetivos do curso são:

- Apresentar diversos métodos numéricos para a resolução de diferentes problemas matemáticos. Pretende-se deixar bem claro a importância desses métodos, mostrando:
 - ✓ a essência de um método numérico;
 - ✓ a diferença em relação a soluções analíticas;
 - ✓ as situações em que eles devem ser aplicados;
 - ✓ as vantagens de se utilizar um método numérico;
 - ✓ e as limitações na sua aplicação e confiabilidade na solução obtida.
- Melhorar a familiarização e “intimidade” do aluno com a matemática, mostrando seu lado prático e sua utilidade no dia-a-dia de um engenheiro. Rever conceitos já vistos, exercitá-los e utilizá-los de maneira prática;
- Apresentar ao aluno maneiras práticas de se desenvolver e utilizar métodos numéricos. Isso significa mostrar como usar esses métodos numéricos na calculadora e com linguagens e aplicativos computacionais;
- Treinar o aluno a aprender outros métodos numéricos por conta própria. No seu dia-a-dia profissional, ele pode se deparar com um problema cuja solução depende de um método numérico que não foi visto no curso. Portanto, ele deverá ser capaz de encontrar a literatura pertinente, estudar o método e aprender a sua utilização de maneira conceitual e prática (usando um aplicativo computacional) por conta própria.

Plano de Aula

Conteúdo	Data
1) Introdução aos Sistemas Numéricos e Erros	09/10 (qua)
2) Ponto Fixo e Ponto Flutuante	10/10 (qui)
3) Zeros Reais de Funções Reais. Introdução: Sistema de Bolzano	16/10 (qua)
4) Método da Bisseção. Método da Posição Falsa	17/10 (qui)
5) Aula de Laboratório	23/10 (qua)
6) Aula de Laboratório	24/10 (qui)
7) Método da Iteração Linear	30/10 (qua)
8) Método de Newton - Raphson. Método das Cordas	31/10 (qui)
9) Sistemas de Equações Lineares: Métodos diretos e Indiretos	06/11 (qua)
10) Métodos Matriciais. Regra de Cramer.	07/11 (qui)
11) Método de Jacobi. Método de Gauss - Seidel	13/11 (qua)
12) Aceleração da Convergência. Projeção.	14/11 (qui)
13) Entrega do primeiro trabalho individual e prova oral.	20/11 (qua)
14) Interpolação Polinomial. Introdução: Interpolação Linear	21/11 (qui)
15) Interpolação Lagrangeana. Extrapolação.	27/11 (qua)
16) Ajuste de Curvas: Método dos Mínimos quadrados	28/11 (qui)
17) Regressão Linear. Regressão Polinomial.	04/12 (qua)
18) Exercícios/ Aula de dúvidas	05/12 (qui)
19) Aula de laboratório	11/12 (qua)
20) Aula de Laboratório	12/12 (qui)
21) Primeira Prova Escrita	18/12 (qua)
22) Integração Numérica. Introdução: Diferenciação.	19/12 (qui)
23) Regra dos Trapézios. Método da Extrapolação para o limite.	08/01(qua)
24) Regras de Simpson. Integral de Gauss.	09/01(qui)
25) Entrega do Segundo Trabalho Individual e Prova Oral.	15/01(qua)
26) Introdução à Solução Numérica de Equações Diferenciais Ordinárias.	16/01 (qui)
27) Solução para Série de Taylor.	22/01 (qua)
28) Método de Predição-Correção.	23/01 (qui)
29) Método dos passos.	29/01(qua)
30) Métodos de Runge Kutta.	30/01(qui)
31) Aula de Laboratório	05/02 (qua)
32) Aula de Laboratório	06/02 (qui)
33) Entrega do Terceiro Trabalho Individual e Prova Oral	12/02 (qua)
34) Segunda Prova Escrita	13/02(qui)
35) Verificação de Reposição	19/02 (qua)
36) Verificação Suplementar	20/02 (qui)

Objetivos da Parte I

Apresentar a noção de análise numérica: o que é e para que serve. Mostrar o que está por trás da maneira prática como realizamos operações numéricas, isto é, como calculadoras e computadores realizam essas operações. E, finalmente, quais os problemas que podem surgir ao realizar essas operações e o que devemos considerar para realmente compreender o resultado obtido de tais operações.

Introduzir a idéia de processos iterativos, chamando a atenção para suas características básicas. Apresentar três métodos numéricos utilizados na obtenção de zeros de função, procurando ressaltar as características, vantagens e desvantagens de cada método, como avaliar o resultado obtido (erros) e problemas que podem ser encontrados durante a resolução.

- **Conceitos introduzidos:** representação numérica em equipamentos digitais (calculadoras e computadores); erros numéricos; métodos iterativos e suas características (estimativa inicial, convergência, critérios de parada).
- **Conceitos revistos:** representação de números em matemática elementar; funções e raízes de funções.

Metodologia:

- **Métodos numéricos abordados:** bissecção, iteração linear, Newton-Raphson.
- **Aplicativo computacional:** programação C e Excel.

Aproveitamento:

- **Fundamental:** entendimento da natureza e objetivo do cálculo numérico. Saber definir e identificar as conseqüências de erros numéricos. Entendimento do conceito de raízes de uma equação, processos iterativos e capacidade de encontrar raízes de equações simples utilizando o Método da Bissecção.
- **Bom:** representação de números. Capacidade de encontrar raízes de equações simples utilizando qualquer um dos métodos abordados.
- **Excelente:** compreender o mecanismo que leva aos erros numéricos durante operações em calculadoras e computadores. Saber avaliar o erro da raiz encontrada.

Representação Numérica

Introdução

A fim se realizarmos de maneira prática qualquer operação com números, nós precisamos representá-los em uma determinada base numérica. O que isso significa? Vamos tomar como exemplo o número $\sqrt{2}$. A fim de calcularmos, por exemplo, o valor de $\sqrt{2} - 1$, nós precisamos escrever o número $\sqrt{2}$ de alguma outra forma, caso contrário não é possível realizar essa operação. Podemos escrevê-lo na **base decimal**, por exemplo, que é a base mais usada na história da humanidade (graças a nossa anatomia). O valor de $\sqrt{2}$ na base decimal pode ser escrito como *1,41* ou *1,4142* ou ainda *1,41421356237*. Qual é a diferença entre essas várias formas de representar $\sqrt{2}$? A diferença é a quantidade de **algarismos significativos** usados em cada representação. Agora podemos realizar a operação proposta: $\sqrt{2} - 1 = 0.41$ ou *0.4142* ou ainda *0.41421356237*, conforme o número de algarismos significativos adotados na nossa representação.

Em uma máquina digital, como uma calculadora ou um computador, os números não são representados na base decimal. Eles são representados na base binária, ou seja, usam o número 2 como base ao invés do número 10. Como na base decimal existem 10 algarismos diferentes (0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9), na base binária existem somente 2 números: 0 e 1. Portanto, a base binária é usada porque essas máquinas utilizam-se de sinais elétricos, sendo o 0 correspondente a ausência de sinal e o número 1 a presença do sinal elétrico.

Ponto fixo e Ponto Flutuante

A princípio, toda vez que escrevemos um número, deveríamos mencionar a base numérica a qual estamos nos referindo. Obviamente, isso não se faz necessário na prática, pois estamos sempre representando os números na base decimal, portanto sabemos exatamente o seu significado. Por exemplo, quando escrevemos o número 1532, o que realmente queremos dizer? Estamos dizendo que esse número representa uma quantidade equivalente a $1 \times 1000 + 5 \times 100 + 3 \times 10 + 2$, ou, escrevendo a base de outra forma, $1 \times 10^3 + 5 \times 10^2 + 3 \times 10^1 + 2 \times 10^0$. Essa é a chamada **representação posicional** de números.

Na base binária, o mecanismo é o mesmo, porém, ao invés de potências de 10, utilizamos potências de 2. Portanto, um número binário como 1011 (lembre-se que na base binária só existem os algarismos 0 e 1) significa $1 \times 2^3 + 0 \times 2^2 + 1 \times 2^1 + 1 \times 2^0$.

Essa idéia que está por trás da representação dos números em bases numéricas é utilizada para representar números no computador. A fim de tornar a manipulação de números mais eficiente, os computadores fazem a distinção entre números inteiros e números reais. Um número inteiro apresenta a chamada representação de **ponto fixo**, onde a posição do ponto “decimal” está fixa e todos os dígitos são usados para representar o número em si, com exceção do primeiro dígito usado para representar o sinal desse número.

A figura abaixo ilustra essa representação:

Sinal	dígitos
-------	---------

Para um número real qualquer (inteiro ou não inteiro) é utilizada a representação de **ponto flutuante**, que é dada pela expressão:

$$\pm(0.d_1d_2d_3\dots d_t) \times b^e$$

onde:

$0.d_1d_2d_3\dots d_t$ é uma fração na base b , também chamada de **mantissa**, com $0 \leq d_i \leq b-1$, para todo $i = 1, 2, 3, \dots, t$, sendo t o número máximo de dígitos da mantissa que é determinado pelo comprimento de palavra do computador;

e é um expoente que varia em um intervalo dado pelos limites da máquina utilizada.

Esse tipo de representação é chamada de **ponto flutuante** pois o ponto da fração “flutua” conforme o número a ser representado e sua posição é expressa pelo expoente e . A figura abaixo ilustra essa representação:

Sinal	posição do ponto = expoente e	dígitos = mantissa
-------	------------------------------------	--------------------

Alguns exemplos da representação de ponto flutuante pode ser visto na tabela abaixo.

Número na base decimal	representação em ponto flutuante	mantissa	base	expoente
1532	0.1532×10^4	0.1532	10	4
15.32	0.1532×10^2	0.1532	10	2
0.00255	0.255×10^{-2}	0.255	10	-2
10	0.10×10^2	0.10	10	1
10	0.1010×2^4	0.1010	2	4

Erros Numéricos

Introdução

Vamos supor o seguinte problema: como calcular o valor de $\sqrt{2}$? Provavelmente, a primeira resposta que vem a mente de qualquer pessoa que nasceu no século XX será: utilizando uma calculadora ou um computador. Indiscutivelmente, essa é a resposta mais sensata e prática. Porém, um profissional que utilizará o resultado fornecido pela calculadora para projetar, construir ou manter pontes, edifícios, máquinas, dispositivos eletrônicos, etc., não pode aceitar o valor obtido antes de fazer alguns questionamentos (pelo menos uma vez na sua vida profissional).

Quando calculamos, por exemplo, o valor de $\sqrt{2}$ em uma calculadora ou em um computador, o que realmente estamos fazendo? Em outras palavras, o que a calculadora fez para obter o resultado? Para um engenheiro, ainda mais importante é a pergunta: qual é a confiabilidade do resultado que obtemos?

Essa pergunta faz sentido pois $\sqrt{2}$ é um número irracional, isto é, não existe uma forma de representá-lo com um número finito de algarismos. Portanto, o número apresentado pela calculadora é uma **aproximação** do **valor real** de $\sqrt{2}$, já que ela não pode mostrar infinitos algarismos. E quão próximo do valor real está o resultado mostrado?

Podemos criar algumas definições a fim de facilitar as discussões e trocas de informação sobre esse problema. Vamos definir a diferença entre o valor real da grandeza que queremos calcular e o valor aproximado que efetivamente calculamos como sendo o **erro**, ou seja:

$$\text{erro} = \text{valor real} - \text{valor aproximado} \quad (1)$$

Quanto menor for esse erro, mais **preciso** será o resultado da operação. Essa definição corresponde ao **erro absoluto** de um cálculo.

Porém, se estivermos lidando com números muito grandes, o erro pode ser grande em termos absolutos, mas o resultado ainda será preciso. E o caso inverso também pode ocorrer: um erro absoluto pequeno, mas um resultado impreciso. Por exemplo, digamos que o resultado de uma operação nos forneça o valor $2.123.542,7$ enquanto o valor real que deveríamos obter é $2.123.544,5$. O erro absoluto neste caso é $1,8$. Comparada com o valor real, essa diferença (o erro) é bem pequena, portanto, podemos considerar o resultado preciso. Em um outro caso, digamos que o resultado da operação seja $0,234$ e o resultado esperado era $0,128$. Desta vez o erro será igual a $0,106$, porém o resultado é bastante impreciso.

A fim de evitar esse tipo de ambigüidade, podemos criar uma nova definição. Podemos definir o **erro relativo**, que corresponde ao quociente entre o erro absoluto e o valor aproximado da grandeza a ser calculada, ou seja:

$$erro = \frac{\text{valor}_{\text{real}} - \text{valor}_{\text{aproximado}}}{\text{valor}_{\text{aproximado}}} \quad (2)$$

O erro relativo é uma forma muito mais geral de se avaliar a **precisão** de um cálculo efetuado. No exemplo acima, teremos um erro relativo de $0,0000008$ ou $0,00008\%$ no primeiro caso e um erro relativo igual a $0,83$ ou 83% no segundo caso.

Tipos de Erros

O erro cometido ao se calcular o valor de $\sqrt{2}$, por exemplo, é apenas um tipo de erro que pode surgir ao se resolver um problema real. Outros tipos de erros também podem aparecer devido a outros tipos de problemas ou limitações.

A solução matemática de um determinado problema envolve diversas etapas, como discutido na introdução desta apostila. A solução do problema se inicia com a criação de um modelo matemático do sistema em questão. Esse modelo sempre apresentará aproximações e limitações. Além disso, na grande maioria das vezes, dados experimentais serão utilizados para se obter a solução. Como toda medida experimental apresenta uma incerteza, a solução do problema será influenciada pelas mesmas. Portanto, logo de início, existem diversos fatores que introduzem incertezas na solução numérica do problema. Esse tipo de erro é chamado de **erro inicial**.

O problema discutido na introdução desta aula para o cálculo de $\sqrt{2}$, que se refere a inevitável limitação na representação de números irracionais (por exemplo), introduz erros no resultado. Esse tipo de erro é chamado de **erro de arredondamento**.

Vamos considerar um outro tipo de problema prático que pode surgir ao realizarmos determinadas operações. Digamos que precisamos calcular o valor de e^x . Mais uma vez, iremos utilizar uma máquina digital (calculadora ou computador). Porém. Como esse equipamento irá realizar essa operação? Sabemos que a *exponencial* é uma função que pode ser representada por uma série infinita dada por:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots$$

Como a *exponencial* é uma série infinita, na prática é impossível calcular seu valor exato. Portanto, mais uma vez, teremos que fazer uma aproximação, que levará a um erro no resultado

final de e^x . Neste caso, faremos um **truncamento** dessa série, e o erro gerado no valor de e^x é chamado de **erro de truncamento**.

Propagação e Condicionamento de Erros Numéricos

Vamos supor que queremos calcular o valor de $\sqrt{2} - e^3$. Como vimos anteriormente, ao calcularmos o valor de $\sqrt{2}$, teremos que realizar um arredondamento, que leva a um resultado aproximado de $\sqrt{2}$, ou seja, existe um erro de arredondamento associado ao resultado. Para calcularmos o valor de e^3 teremos que fazer um truncamento, que também irá gerar um erro no resultado obtido. Portanto, o resultado da operação de subtração entre $\sqrt{2}$ e e^3 apresentará um erro que é proveniente dos erros nos valores de $\sqrt{2}$ e e^3 separadamente. Em outras palavras, os erros nos valores de $\sqrt{2}$ e e^3 se **propagam** para o resultado de $\sqrt{2} - e^3$. Podemos concluir então que, ao se resolver um problema numericamente, a cada etapa e a cada operação realizada, devem surgir diferentes tipos de erros gerados das mais variadas maneiras, e estes erros se propagam e determinam o erro no resultado final obtido.

A propagação de erros é muito importante pois, além de determinar o erro final de uma operação numérica, ela também determina a **sensibilidade** de um determinado problema ou método numérico. Se uma pequena variação nos dados de entrada de um problema levar a uma grande diferença no resultado final, considera-se que essa operação é **mal-condicionada**, ou seja, existe uma grande propagação de erros nessa operação. Por outro lado, se uma pequena variação nos dados de entrada leva a apenas uma pequena diferença no resultado final, então essa operação é **bem-condicionada**.

Erros na Aritmética de Ponto Flutuante

Nós vimos nas seções anteriores que ao manipularmos os números de maneira prática, estaremos sempre lidando com erros, devido a diversos fatores. Vamos agora examinar os erros mais comuns que aparecem quando um computador manipula os números.

O primeiro tipo de erro que está presente na forma como computadores lidam com números corresponde aos erros de arredondamento e truncamento. Como citado anteriormente, esses erros estão presentes pois os computadores precisam representar os números com uma **quantidade finita de algarismos**.

Vamos supor, para simplificação, um computador com uma representação de ponto flutuante na base decimal ($b=10$) e uma mantissa de 4 algarismos ($t=4$). A fim de representarmos em ponto flutuante nesse computador, por exemplo, o número 734,68, teríamos que trunca-lo para $0,7346 \times 10^3$ ou arredonda-lo para $0,7347 \times 10^3$. Portanto, no truncamento, estaríamos cometendo um erro de $0,8 \times 10^{-1}$ e no arredondamento, um erro de $0,2 \times 10^{-1}$. Podemos generalizar esse exemplo e dizer que, em uma representação de ponto flutuante na base b e mantissa de t algarismos, os erros de truncamento serão dados por:

$$erro < b^{e-t}$$

onde o número em questão foi representado na forma $x=f_x \times b^e$. E os erros de arredondamento serão dados por:

$$erro < \frac{1}{2} \times b^{e-t}$$

Portanto, para uma representação numérica com $t=24$ ou $t=53$ (como no caso da maioria dos computadores) esse erro é muito pequeno.

Apesar de pequeno, é importante lembrar que ele se propagará nas operações aritméticas realizadas pelo computador. Vamos tomar como exemplo a soma dos números 6563 (= $0,6563 \times 10^4$) e 3,375 (= $0,3375 \times 10^1$) no nosso computador fictício de mantissa com 4 algarismos. A soma desses dois números corresponde a 6566,375. Como nosso computador pode representar com apenas 4 algarismos, o resultado dessa operação será $0,6566 \times 10^4 = 6566$. Ou seja, apesar de partirmos de dois números exatos, o resultado da soma não será exata. Mais uma vez, para um computador real, esse erro é pequeno, porém, se um número muito grande de operações for realizado e se existir a necessidade de se obter um resultado bastante preciso, será preciso se levar em consideração esse tipo de erro para avaliar o resultado obtido.

Existe mais um tipo de erro que aparece quando computadores manipulam números. Esse erro se refere à conversão de números de uma base para a outra. O tipo de conversão mais comum é da base decimal (usada por humanos) para a base binária (usada por computadores) e vice-versa. Um exemplo bastante peculiar é o número 0,1. Ao convertermos esse número da base decimal para a base binária (existem diversos algoritmos para se realizar essa conversão, mas não vamos entrar nesse detalhe aqui), obtemos como resposta:

$$(0,1)_{10} = (0,0001100110011...)_2$$

onde representamos com um subscrito a base em que esse número está escrito.

Portanto, notamos que, ao se converter o número 0,1 da base decimal para a base binária, obtemos um número com infinitos algarismos! Como esse número não pode ser representado pelo

computador, ele será truncado, introduzindo um erro na sua representação. Uma forma interessante de constatar esse problema é escrevendo um pequeno programa que calcule o valor de $\sum_{i=1}^{1000} 0,1$. Você verá que esse número não é igual a 100 !

Zero Reais de Funções Reais

Introdução

No exemplo usado na introdução desta apostila, vimos que ao tentar calcularmos a corrente elétrica de um circuito simples contendo apenas uma bateria, um resistor e um diodo, já nos deparamos com um problema matemático de difícil solução. Esse problema corresponde ao cálculo do valor da corrente i que satisfaz a equação

$$V - R \cdot i - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{i}{I_s} + 1\right) = 0$$

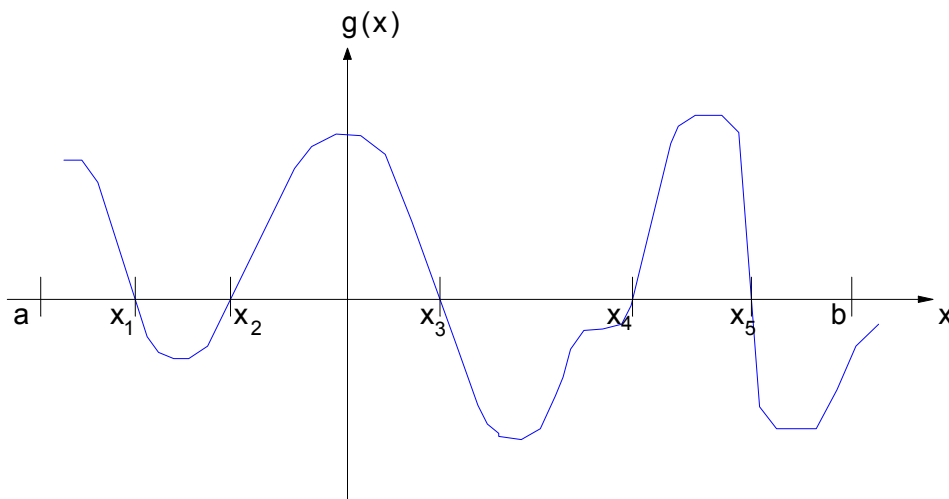
Em outras palavras, precisamos resolver ou encontrar o **zero** da função acima.

Nesta aula iniciaremos o estudo de métodos numéricos que nos permitirão resolver problemas como esse.

Zeros ou Raízes de Funções

Dada uma função $f(x)$, dizemos que α é raiz, ou zero de f se e somente $f(\alpha)=0$.

Graficamente, os zeros de uma função correspondem ao ponto x em que a função intercepta o eixo do gráfico, como mostrado no exemplo abaixo:



A função $g(x)$ acima tem 5 raízes no intervalo $[a,b]$: x_1, x_2, x_3, x_4, x_5 .

As raízes de uma função podem ser encontradas analiticamente, ou seja, resolvendo a equação $f(x)=0$ de maneira exata, como mostrado nos exemplos abaixo:

$$1-) f(x) = x - 3$$

$x = 3$ é raiz de $f(x)$ pois:

$$f(3) = 3 - 3 = 0$$

$$2-) g(x) = \frac{8}{3}x - 4$$

$$\frac{8}{3}x - 4 = 0 \Rightarrow \frac{8}{3}x = 4 \Rightarrow x = \frac{12}{8} = \frac{3}{2}$$

$$g\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{8}{3} \cdot \frac{3}{2} - 4 = 0$$

$$3-) h(x) = x^2 - 5x + 6$$

$$x^2 - 5x + 6 = 0$$

$$\Delta = 25 - 24 = 1$$

$$x = \frac{5 \pm \sqrt{1}}{2}$$

$$x_1 = 3$$

$$x_2 = 2$$

$$h(3) = 3^2 - 5 \cdot 3 + 6 = \\ = 15 - 15 = 0$$

$$h(2) = 2^2 - 5 \cdot 2 + 6 = \\ = 10 - 10 = 0$$

Porém, nem sempre é possível encontrar analiticamente a raiz de uma função, como nos casos abaixo:

$$1-) f(x) = x^3 + 2x^2 - x + 1$$

$$2-) g(x) = \text{sen}(x) + e^x$$

$$3-) h(x) = x + \ln(x)$$

Nestes casos precisamos de um método numérico para encontrar **uma estimativa** para a raiz da função estudada.

Um método numérico para se encontrar os zeros de uma função deve envolver as seguintes etapas:

- (a) Determinar um intervalo em x que contenha pelo menos uma raiz da função $f(x)$, ou seja, isolar as raízes;
- (b) Calcular a raiz aproximada através de um processo iterativo até a precisão desejada.

Processos Iterativos

Existe um grande número de métodos numéricos que são processos iterativos. Como o próprio nome já diz (consulte um dicionário para verificar o significado de *iterativo*), esses processos se caracterizam pela **repetição** de uma determinada operação. A idéia nesse tipo de processo é repetir um determinado cálculo várias vezes, obtendo-se a cada repetição ou **iteração** um resultado mais preciso que aquele obtido na iteração anterior. E, a cada iteração utiliza-se o resultado da iteração anterior como parâmetro de entrada para o cálculo seguinte.

Existem diversos aspectos comuns a qualquer processo iterativo, que iremos discutir abaixo:

- ✓ **Estimativa inicial:** como um processo iterativo se caracteriza pela utilização do resultado da iteração anterior para o cálculo seguinte, a fim de se iniciar um processo iterativo, é preciso ter uma estimativa inicial do resultado do problema. Essa estimativa pode ser conseguida de diferentes formas, conforme o problema que se deseja resolver;
- ✓ **Convergência:** a fim de obtermos um resultado próximo do resultado real esperado, é preciso que a cada passo ou iteração, nosso resultado esteja mais próximo daquele esperado, isto é, é preciso que o método **convirja** para o resultado real. Essa convergência nem sempre é garantida em um processo numérico. Portanto, é muito importante estar atento a isso e verificar a convergência do método para um determinado problema antes de tentar resolvê-lo;
- ✓ **Critério de Parada:** obviamente não podemos repetir um processo numérico infinitamente. É preciso pará-lo em um determinado instante. Para isso, devemos utilizar um certo critério, que vai depender do problema a ser resolvido e da precisão que precisamos obter na solução. O critério adotado para **parar** as iterações de um processo numérico é chamado de critério de parada.

Para encontrarmos as raízes ou zeros de uma função iremos utilizar métodos numéricos iterativos. Portanto, teremos que abordar todos esses aspectos nos métodos que utilizaremos. Como mencionado acima, o primeiro passo para resolver um processo iterativo corresponde a obtenção de

uma estimativa inicial para o resultado do problema. No caso de zeros de funções, essa operação é chamada de **isolamento de raízes**, que veremos na seção seguinte.

Isolamento de Raízes

Para determinarmos o número e a localização aproximada de raízes de uma função para obtermos uma estimativa inicial a ser usada nos processo iterativos, podemos examinar o comportamento dessa função através de um esboço gráfico.

Por exemplo, seja uma função $f(x)$ tal que:

$$f(x) = g(x) - h(x)$$

As raízes de $f(x)$, são tais que:

$$g(x) - h(x) = 0$$

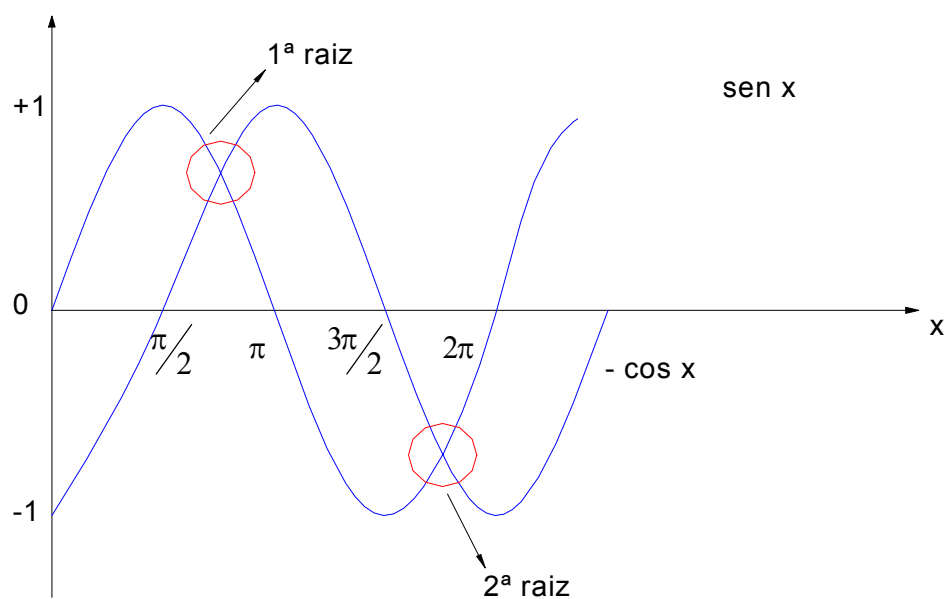
ou seja, os valores de x em que o gráfico $g(x)$ intercepta o gráfico de $h(x)$ é a raiz de $f(x)$.

Exemplo:

$$f(x) = \text{sen}(x) - [-\cos(x)]$$

$$\text{sen}(x) - [-\cos(x)] = 0$$

$$\text{sen}(x) = -\cos(x)$$



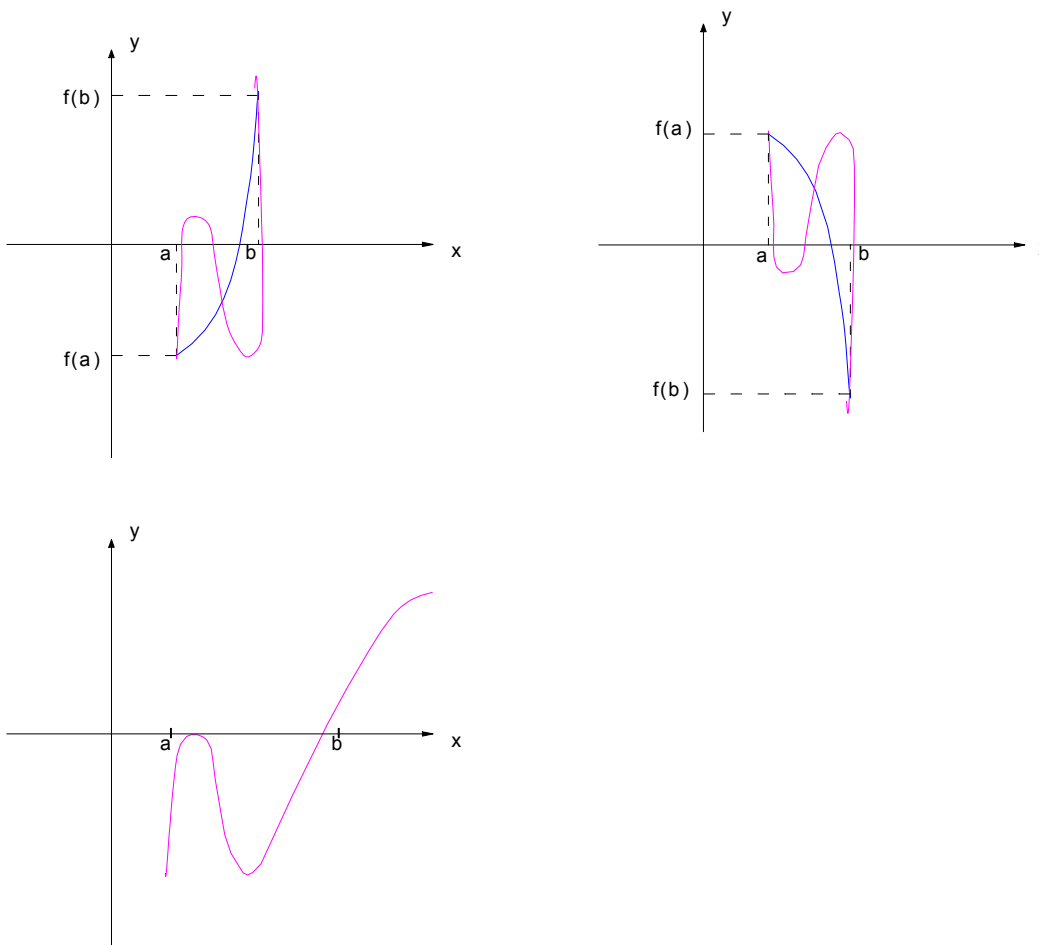
Pelo gráfico acima, vemos que a função $g(x)$ irá interceptar a função $h(x)$ entre $\pi/2$ e π e entre $3\pi/2$ e 2π . Portanto, podemos afirmar que existe uma raiz de $f(x)$ no intervalo $[\pi/2, \pi]$ e no intervalo $[3\pi/2, 2\pi]$. Esses intervalos podem ser utilizados como estimativa inicial nos processos iterativos que veremos a seguir.

Porém, o esboço gráfico nem sempre é a forma mais prática de se obter um intervalo que contém pelo menos uma raiz da função $f(x)$. Muitas vezes é preciso se utilizar um método algébrico. Para isso, vamos recorrer ao teorema de Bolzano.

Teorema de Bolzano.

Seja uma função $f(x)$ contínua em um intervalo $[a, b]$, tal que, $f(a) \cdot f(b) < 0$. Então a função $f(x)$ possui pelo menos uma raiz no intervalo $[a, b]$.

Podemos verificar este teorema graficamente:



Exemplo:

Seja a função $f(x)=x \cdot \ln(x)-3.2$. Podemos calcular o valor de $f(x)$ para valores arbitrários de x , como mostrado na tabela abaixo:

x	1	2	3	4
$f(x)$	-3.20	-1.81	0.10	2.36

Pelo teorema de Bolzano, concluímos que existe pelo menos uma raiz real no intervalo $[2,3]$.

Método da Dicotomia ou Bissecção.

O método da dicotomia ou bissecção é a forma mais intuitiva de se obter a raiz de uma função. Seja uma função $f(x)$ contínua em um intervalo $[a,b]$, e α uma raiz de $f(x)$ isolada neste intervalo através de um dos métodos descritos no item anterior.

Inicialmente, subdividimos este intervalo em suas duas metades, ou seja:

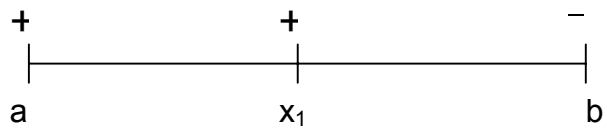
$$\left[a; \frac{a+b}{2} \right] \text{ e } \left[\frac{a+b}{2}; b \right]$$

Verificamos se a raiz está contida na primeira ou na segunda metade do intervalo inicial, usando o teorema de Bolzano. Ou seja, se a função $f(x)$ mudar de sinal entre a e $a + \frac{b}{2}$ saberemos que a raiz está nessa primeira metade do intervalo $[a,b]$. Caso a função $f(x)$ mude de sinal entre $a + \frac{b}{2}$ e b , a raiz deverá estar na segunda metade do intervalo original.

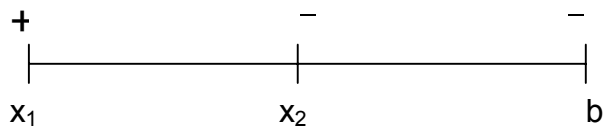
Em seguida repetimos o processo para aquela metade que contém a raiz de $f(x)$: dividimos o intervalo ao meio e verificamos em qual metade está a raiz. E podemos continuar repetindo esse processo indefinidamente.

A estimativa da raiz α em cada etapa será o ponto médio do intervalo em estudo onde sabemos que existe uma raiz. E, como todo processo numérico, é importante estimarmos o erro nesse resultado obtido. No caso do método da bissecção, o erro na estimativa será dado pela metade do comprimento do intervalo em estudo.

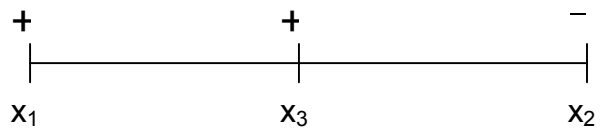
A seguir, uma ilustração desse processo:



$$x_1 = \left(\frac{a + b}{2} \right) \pm \frac{|b - a|}{2}$$



$$x_2 = \left(\frac{x_1 + b}{2} \right) \pm \frac{|b - x_1|}{2}$$

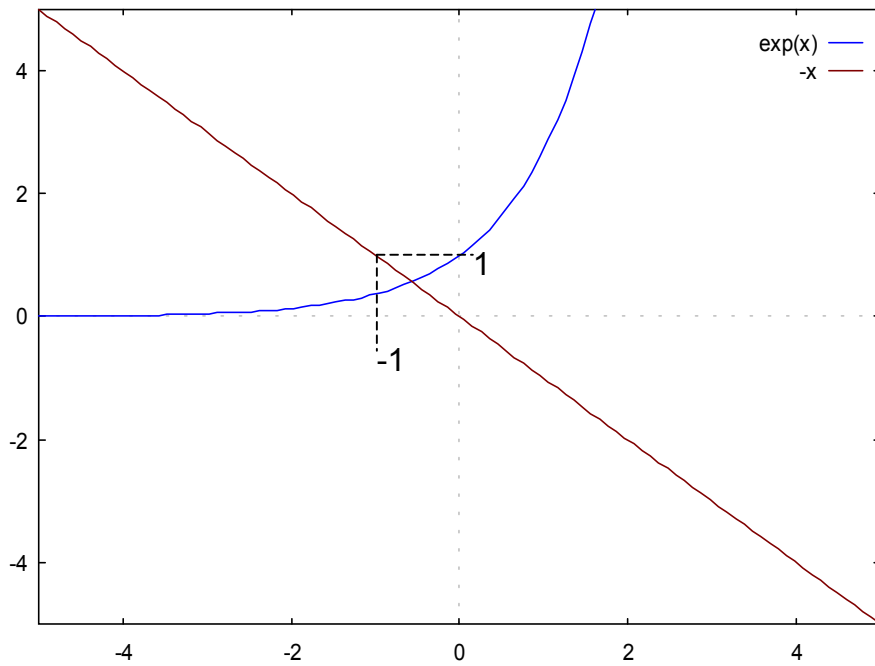


$$x_3 = \left(\frac{x_1 + x_2}{2} \right) \pm \frac{|x_2 - x_1|}{2}$$

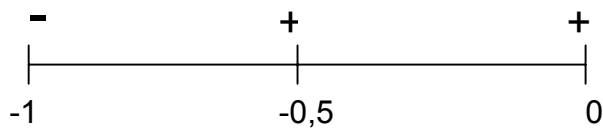
Exemplo:

Encontre uma estimativa para a raiz de:

$f(x) = e^x + x$, com um erro menor ou igual a 0,050.



A raiz de $f(x) \in [-1,0]$;



$f(-1) = -0,63$

$f(0) = 1$

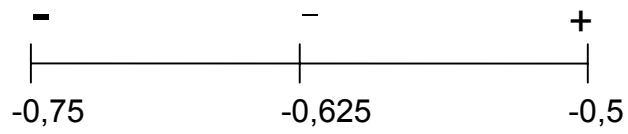
$x_1 = -0,5 \pm 0,5$

$f(-0,5) = 0,11$



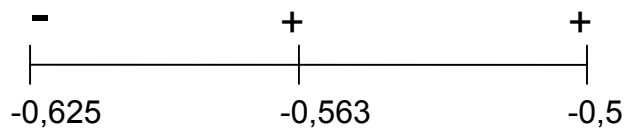
$f(-0,75) = -0,28$

$x_2 = -0,75 \pm 0,25$



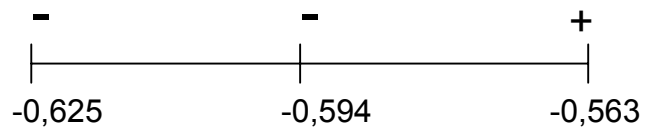
$$x_3 = -0,625 \pm 0,125$$

$$f(-0,625) = -0,09$$



$$x_4 = -0,563 \pm 0,063$$

$$f(-0,563) = 0,01$$



$$x_5 = -0,594 \pm 0,032$$

$$f(-0,594) = -0,04$$

Portanto, a raiz da função $f(x) = e^x + x$ é igual a $-0,594 \pm 0,032$.

Primeira Lista de Exercícios

- 1) Quais são as 3 causas mais importantes de erros numéricos em operações realizadas em computadores e calculadoras?
- 2) Cite as características básicas de todo processo iterativo.
- 3) Como você poderia usar o método da bissecção para estimar o valor de $\sqrt{7}$? Estime esse valor com uma precisão de (ou erro menor que) 0,1.
- 4) Dada a função $f(x) = \sin(x) - x^2 + 4$:
 - (a) Determine o intervalo em x que contém pelo menos uma raiz de $f(x)$ (graficamente ou aritmeticamente usando o Teorema de Bolzano);
 - (b) Partindo-se desse intervalo, utilize o método da bissecção para determinar o valor dessa raiz após 4 iterações.
 - (c) Qual é o erro no seu resultado final?

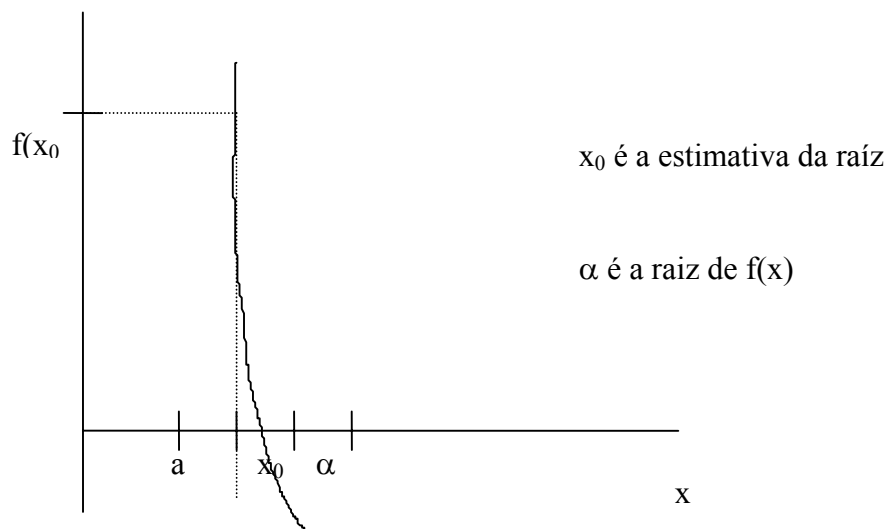
Critérios de Parada em um Processo Iterativo

Foi usado, até o momento, o seguinte critério de parada:

$$|b_k - a_k| \leq \text{erro estipulado} \quad (1)$$

onde $[a_k, b_k]$ é o intervalo que contém a raiz da função após k iterações.

No entanto, se tivermos uma função do seguinte tipo:



Podemos estar satisfazendo (1) e, entretanto, $f(x_0)$ pode ser muito maior que zero. Assim, em certos casos pode-se usar a seguinte condição:

$$|f(x_0)| \leq \text{erro estipulado} \quad (2)$$

Tanto o critério (1), quanto o critério (2), podem levar a um número muito grande de iterações. Uma maneira de se contornar este problema é tomar como um critério de parada adicional, um certo número de iterações máximo.

Estimativa do número de iterações no método da bisseção.

Como em cada passo, dividimos o intervalo por 2, temos:

$$|b_k - a_k| = \left| \frac{b_0 - a_0}{2^k} \right| \quad (3)$$

onde k é o número de iterações e $[a_0, b_0]$ é o intervalo inicial que isola a raiz da função.

Dado o seguinte critério de parada:

$$\varepsilon \geq |b_k - a_k| \quad (4)$$

onde ε é o erro estipulado. Assim de (3) em (4):

$$2^k \geq \left| \frac{b_0 - a_0}{\varepsilon} \right| \quad (5)$$

e re-arranjando os termos:

$$k \log 2 \geq \log |b_0 - a_0| - \log |\varepsilon| \quad (6)$$

Assim,

$$k \geq \frac{\log |b_0 - a_0| - \log |\varepsilon|}{\log 2} \quad (7)$$

A expressão (7) dá o número de iterações necessárias para que o critério de parada, definido em (5), seja satisfeito.

Método de Iteração Linear (MIL)

O método da iteração linear é um processo iterativo que apresenta vantagens e desvantagens em relação ao método da bissecção estudado na aula passada.

Seja uma função $f(x)$ contínua em um intervalo $[a, b]$ que contenha uma raiz de $f(x)$. O Método de Iteração Linear inicia-se reescrevendo a função $f(x)$ como,

$$f(x) = \varphi(x) - x$$

Essa forma de escrever $f(x)$ é bastante útil. No ponto x que corresponde à raiz de $f(x)$, isto é, $f(x) = 0$, teremos que:

$$f(x) = \varphi(x) - x = 0$$

$$\varphi(x) = x$$

Ou seja, no ponto x que corresponde à raiz de $f(x)$, ao substituirmos o valor de x na função $\varphi(x)$, teremos como resultado o próprio valor de x . Portanto, a raiz de $f(x)$ será o **ponto fixo** de $\varphi(x)$, ou seja, o valor que ao ser substituído em $\varphi(x)$ retorna o próprio valor de x .

Por exemplo, a função

$$f(x) = x^2 - x - 2$$

pode ser reescrita como,

$$f(x) = x^2 - 2 - x = \varphi(x) - x,$$

onde $\varphi(x) = x^2 - 2$. Essa função tem como ponto fixo o valor $x=2$, pois $\varphi(2) = 2^2 - 2 = 2$. E esse é exatamente o valor da raiz de $f(x)$, pois $f(2) = 2^2 - 2 - 2 = 0$.

Portanto, para encontrarmos a raiz de $f(x)$, podemos encontrar o valor numérico que ao substituirmos em $\varphi(x)$, essa função retorna o próprio valor de x . Para encontrarmos esse valor de x , vamos utilizar um processo iterativo, onde começamos a calcular o valor de $\varphi(x)$ com um valor inicial de x , e recalculamos repetidamente o valor de $\varphi(x)$ sempre usando o resultado de uma dada iteração como a nova estimativa de x , ou seja, fazendo:

$$x_{k+1} = \varphi(x_k)$$

onde, k é a ordem da iteração em que estamos ($k = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$). A função $\varphi(x)$ é chamada de **função de iteração**. Ela não é única para uma dada

função $f(x)$, mas, como veremos na próxima aula, o bom resultado deste método depende de uma boa escolha de $\varphi(x)$.

Exemplo 1:

Encontre algumas funções de iteração a partir de:

$$f(x) = x^2 + \ln(x) - x + 1$$

$$f(x) = 0$$

$$x^2 + \ln(x) - x + 1 = 0$$

$$x = x^2 + \ln(x) + 1$$

$$\therefore \varphi(x) = x^2 + \ln(x) + 1$$

Ou então,

$$x^2 + \ln(x) - x + 1 = 0$$

$$\ln(x) = x - x^2 - 1$$

$$x = e^{(x-x^2-1)}$$

$$\therefore \varphi(x) = e^{(x-x^2-1)}$$

Ou ainda,

$$x^2 + \ln(x) - x + 1 = 0$$

$$x \cdot x = x - \ln(x) - 1 \quad \div x$$

$$x = \frac{x - \ln(x) - 1}{x}$$

$$\therefore \varphi(x) = \frac{x - \ln(x) - 1}{x}$$

Mais um exemplo,

$$\begin{aligned}
 x^2 + \ln(x) - x + 1 + \cos x - \cos x &= 0 \\
 \cos x &= \cos x - x^2 - \ln(x) + x - 1 \\
 x &= \text{arc cos}(\cos x - x^2 - \ln(x) + x - 1) \\
 \therefore \varphi(x) &= \text{arc cos}(\cos x - x^2 - \ln(x) + x - 1)
 \end{aligned}$$

Exemplo 2:

Encontre uma estimativa para a raiz de :

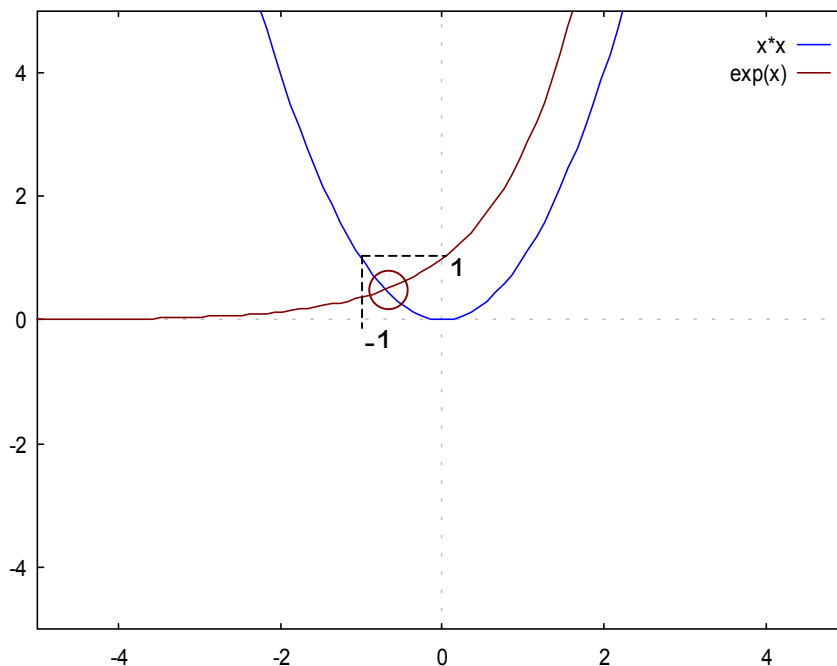
$$f(x) = x^2 - e^x$$

usando o método da iteração linear.

Vamos iniciar a solução encontrando uma boa estimativa inicial para o valor da raiz de $f(x)$.

Para isso, vamos usar o método gráfico para o isolamento de raízes. Escrevendo:

$$f(x) = g(x) - h(x) \Rightarrow g(x) = x^2 \text{ e } h(x) = e^x$$



A partir do esboço gráfico acima, conclui-se que a raiz encontra-se no intervalo $[-1, 0]$.

Devemos agora escolher uma função de iteração $\varphi(x)$. Para isso, escrevemos:

$$f(x) = 0$$

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

$$x = \pm\sqrt{e^x}$$

Ou seja, podemos ter como função iteração, os dois casos abaixo:

$$\varphi(x) = \sqrt{e^x}$$

$$\varphi(x) = -\sqrt{e^x}$$

Usando $\varphi(x) = -\sqrt{e^x}$ e $x_0 = -1$, temos :

$$x_0 = -1 \rightarrow \varphi(x_0) = \varphi(-1) = -\sqrt{e^{-1}} = -0,606$$

$$x_1 = -0,606 \rightarrow \varphi(x_1) = \varphi(-0,606) = -\sqrt{e^{-0,606}} = -0,738$$

$$x_2 = -0,738 \rightarrow \varphi(x_2) = \varphi(-0,738) = -\sqrt{e^{-0,738}} = -0,691$$

$$x_3 = -0,691 \rightarrow \varphi(x_3) = \varphi(-0,691) = -\sqrt{e^{-0,691}} = -0,707$$

$$x_4 = -0,707$$

Substituindo os valores de x_k em $f(x)$ para cada iteração k , vemos que a cada etapa nos aproximamos mais da raiz de $f(x)$, pois o valor dessa função fica mais próximo de zero a cada iteração, como mostrado na tabela abaixo:

x	$f(x) = x^2 - e^x$
-1	0,632
-0,606	-0,178
-0,738	0,067
-0,691	-0,024
-0,707	0,007

O problema da convergência no Método da Iteração Linear

Como discutido na aula 03, para se obter um resultado coerente e preciso com um processo iterativo, é preciso que a cada iteração a resposta se aproxime mais e mais da solução real, ou seja, que o método convirja para o valor real. No caso do método da bissecção, nós não precisamos nos preocupar com a convergência, pois com esse método ela está sempre garantida, já que isolamos a raiz em um dado intervalo e nunca deixamos esse intervalo inicial. Já no método da iteração linear, a convergência não é garantida a priori. A cada iteração podemos nos aproximar ou nos afastar da solução real. Portanto, antes de resolver um problema através desse método é preciso se verificar se haverá ou não a convergência.

O seguinte Teorema coloca condições suficientes, porém não necessárias para que o método de iteração linear seja convergente.

Seja uma função $f(x)$ contínua em um intervalo $[a, b]$ e α uma raiz de $f(x)$ contida em $[a, b]$.

Seja $\varphi(x)$ uma função de iteração obtida a partir de $f(x)$.

Se:

- i) $\varphi(x)$ e $\varphi'(x)$ forem contínuas em $[a, b]$;
- ii) $|\varphi'(x)| < 1$ (para todo) $\forall x \in [a, b]$;
- iii) $x_0 \in [a, b]$.

Então:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} x_n = \alpha$$

Exemplos:

1) Deseja-se encontrar a raiz de $f(x) = x^2 + 0,96x - 2,08$.

Para isto, pretende-se usar uma das seguintes funções de iteração:

$$\varphi_1(x) = \frac{2,08}{x + 0,96}$$

$$\varphi_2(x) = x^2 + 1,96x - 2,08$$

Verifique se $\varphi_1(x)$ e $\varphi_2(x)$ satisfazem as condições (i) e (ii) do Teorema de convergência no intervalo $[1,2]$.

Vamos iniciar verificando a condição (i) para a função $\varphi_1(x)$.

$$\varphi_1(x) = \frac{2,08}{x + 0,96}$$

$$\varphi_1'(x) = 2,08 \cdot (x + 0,96)^{-1}$$

$$\varphi_1'(x) = 0 \cdot (x + 0,96)^{-1} - 2,08 \cdot (x + 0,96)^{-2} \cdot 1$$

$$\varphi_1'(x) = -\frac{2,08}{(x + 0,96)^2}$$

Ambas as funções $\varphi_1(x)$ e $\varphi_1'(x)$ são contínuas (para todo) $\forall x \in \mathbf{R}$ com $x \neq -0,96$.

Em seguida, vamos verificar a condição (ii) para $\varphi_1(x)$.

$$|\varphi_1'(x)| < 1$$

$$\left| -\frac{2,08}{(x + 0,96)^2} \right| < 1$$

$$\frac{|-2,08|}{|(x + 0,96)^2|} < 1$$

$$\frac{2,08}{(x + 0,96)^2} < 1$$

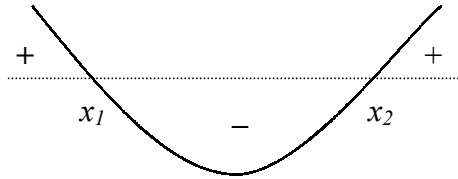
$$2,08 < (x + 0,96)^2$$

$$2,08 < x^2 + 1,92x + 0,9216$$

$$x^2 + 1,92x + 0,9216 > 2,08$$

$$x^2 + 1,92x - 1,1584 > 0$$

Portanto, para os valores de x que satisfazem a equação acima, teremos $|\varphi_1(x)| < 1$, ou seja, a condição (ii) do teorema da convergência satisfeita. Vamos encontrar as raízes da função acima $(x^2 + 1,92x - 1,1584)$ e, como ela se trata de uma parábola com concavidade para cima, sabemos que a função será positiva para valores menores que a raiz de menor valor (x_1) e valores maiores que a raiz de maior valor (x_2), como ilustrado abaixo.



As raízes dessa função são:

$$x^2 + 1,92x - 1,1584 = 0$$

$$\Delta = 8,32$$

$$x = \frac{-1,92 \pm \sqrt{8,32}}{2} =$$

$$x_1 = -2,40$$

$$x_2 = 0,48$$

Portanto:

$$|\varphi_1'(x)| < 1 \quad \text{para} \quad x < -2,40 \quad \text{ou} \quad x > 0,48.$$

Finalmente, concluímos que as condições (i) e (ii) do Teorema de Convergência são satisfeitas por:

$$\varphi_1(x) = \frac{2,08}{x + 0,96}$$

no intervalo $[1,2]$.

Vamos verificar se essas condições são satisfeitas para a função $\varphi_2(x)$. Para a condição (i), temos:

$$\varphi_2(x) = x^2 + 1,96x - 2,08$$

$$\varphi_2'(x) = 2x + 1,96$$

Portanto, $\varphi_2(x)$ e $\varphi_2'(x)$ são contínuas $\forall x \in \mathbb{R}$. Para a condição (ii) ser satisfeita, devemos ter:

$$|\varphi_2'(x)| < 1$$

$$|2x + 1,96| < 1$$

$$-1 < 2x + 1,96 < 1$$

$$-1 - 1,96 < 2x + 1,96 - 1,96 < 1 - 1,96$$

$$-2,96 < 2x < -0,96 \quad (\div 2)$$

$$-1,48 < x < -0,48$$

Ou seja:

$$\varphi_2'(x) < 1 \quad \text{para} \quad -1,48 < x < -0,48.$$

Temos, portanto, que $\varphi_2(x)$ não satisfaz a condição (ii) do Teorema de Convergência, no intervalo $[1,2]$.

2) Na aula 05, calculamos o valor da raiz da função $f(x) = x^2 - e^x$, utilizando:

$$\varphi(x) = -\sqrt{e^x}$$

Vamos verificar se essa função satisfaz as condições do teorema da convergência. Para a condição (i), temos:

$$\varphi(x) = -\sqrt{e^x} = -(e^x)^{\frac{1}{2}}$$

$$\varphi'(x) = -\frac{1}{2}(e^x)^{-\frac{1}{2}} \cdot e^x = -\frac{1}{2} \cdot e^{-\frac{x}{2}} \cdot e^x = -\frac{1}{2} \cdot e^{\frac{1}{2}x}$$

Portanto, $\varphi(x)$ e $\varphi'(x)$ são contínuas para $\forall x \in \mathbf{R}$.

Para a condição (ii), devemos ter $|\varphi'(x)| < 1$, ou seja:

$$\left| -\frac{1}{2} e^{\frac{x}{2}} \right| < 1$$

$$\frac{1}{2} e^{\frac{x}{2}} < 1$$

$$e^{\frac{x}{2}} < 2$$

$$\frac{x}{2} < \ln 2$$

$$x < 2 \cdot \ln 2$$

$$x < 1,386$$

O Teorema de convergência será satisfeito se $x < 1,386$.

E, finalmente, para a condição (iii), devemos ter $x_0 < 1,386$, que tem se satisfaz para $x_0 = -0.5$, que foi o valor usado.

Ainda nesse exemplo, vimos que a função $\varphi(x) = \sqrt{e^x}$, a princípio, também poderia ser usada. Mas, será que ela satisfaz todas as condições do teorema da convergência. Devido sua semelhança com a função $\varphi(x) = -\sqrt{e^x}$, podemos concluir que ela satisfaz o teorema da convergência também para valores de $x < 1,386$.

Ao tentarmos resolver este problema usando a função $\varphi(x) = -\sqrt{e^x}$, notamos que essa condição não é satisfeita em todas as etapas do problema. A tabela abaixo mostra o que acontece ao tentarmos encontrar a raiz de $f(x)$ usando $\varphi(x) = \sqrt{e^x}$. A tabela apresenta o índice das iterações que estamos (i), o valor de $\varphi(x_i)$ e de $f(x_i)$ para cada iteração:

i	x_i	$\varphi(x_i)$	$f(x_i)$
0	-0.5	0.778801	-0.35653
1	0.778801	1.476095	-1.57233
2	1.476095	2.091848	-2.19697
3	2.091848	2.846027	-3.72404
4	2.846027	4.149606	-9.11936
5	4.149606	7.962976	-46.1898

Notamos que o processo está divergindo, isto é, se afastando da raiz de $f(x)$, já que o valor de $f(x)$ é cada vez mais distante de zero. Também podemos notar que isso acontece devido ao fato de usarmos valores de $x > 1,386$ a partir da iteração $i=2$. Portanto, essa função não satisfaz o teorema da convergência em todas as iterações.

Cr terios de Parada no m todo da itera o linear

No caso do m todo da itera o linear, podemos usar qualquer uma (ou todas simultaneamente) das condi es abaixo como crit rio de parada:

1. Varia o de x_k :

$$|x_k - x_{k-1}| < \epsilon$$

Conforme avançamos no número de iterações, se as estimativas da raiz de $f(x)$ começam a variar muito pouco, podemos concluir que estamos bem próximos da raiz de $f(x)$ e o processo iterativo pode ser parado.

2. Valor de $f(x_k)$ (como discutido na aula 04):

$$|f(x_k)| < \epsilon$$

3. Número de Iterações (também discutido na aula).

Método de Newton-Raphson.

O Método de Newton-Raphson é um caso particular do método de iteração linear.

O método de iteração linear consiste em estimar a raiz de uma função $f(x)$ usando o processo iterativo:

$$x_{n+1} = \varphi(x_n) \quad (1)$$

Essa expressão define a forma de $\varphi(x)$. Podemos escrever uma forma geral para essa função dada por:

$$\varphi(x) = x + A(x).f(x) \quad (2)$$

pois, para x igual à raiz de $f(x)$, tem-se $f(x)=0$, ou seja $x=\varphi(x)$ para qualquer $A(x)\neq 0$.

Para haver a convergência no método da iteração linear é preciso que $|\varphi'(x)| < 1$ em um intervalo $[a,b]$ que contém a raiz de $f(x)$. Portanto, **a idéia no método de Newton-Raphson é escolher uma função $\varphi(x)$ tal que $\varphi'(\alpha)=0$ onde α é a raiz de $f(x)$ e $\alpha \in [a,b]$** . Com isso, teremos $|\varphi'(x)| < 1$ desde que não nos afastemos muito do valor de α durante o processo de resolução do problema.

Derivando $\varphi(x)$ dada pela expressão (2) em relação a x , temos:

$$\varphi'(x) = 1 + A'(x).f(x) + A(x).f'(x)$$

Exigindo que $\varphi'(x)=0$, tem-se:

$$0 = 1 + A'(x).f(x) + A(x).f'(x)$$

Portanto:

$$1 + A'(x).f(x) + A(x).f'(x) = 0$$

$$A(x).f'(x) = -1$$

$$A(x) = -\frac{1}{f'(x)}$$

Escolhendo:

$$A(x) = -\frac{1}{f'(x)} \quad (3)$$

De (3) em (2):

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad (4)$$

O Método de Newton-Raphson consiste em usar o processo iterativo $x_{n+1} = \varphi(x_n)$ e como função de iteração a expressão (4).

Convergência do Método de Newton-Raphson

Apesar de obtermos a forma da função $\varphi(x)$ procurando garantir a convergência do processo iterativo, esta não está sempre garantida para este método (mas quase sempre). A convergência no método de Newton-Raphson está sempre garantida para **um certo intervalo $[a,b]$ que contém a raiz de $f(x)$** , desde que $f(x)$ e $f'(x)$ sejam contínuas nesse intervalo e que $f'(\alpha) \neq 0$, onde α é a raiz de $f(x)$ ($f(\alpha) = 0$). Portanto, se utilizarmos uma estimativa inicial x_0 tal que $x_0 \in [a,b]$, a convergência estará garantida. Em outras palavras, para o método de Newton-Raphson convergir, é preciso que nossa estimativa inicial esteja próxima da raiz de $f(x)$. A proximidade exigida para a convergência vai depender de caso a caso e nem sempre é simples de determinar.

Interpretação Geométrica

Dado x_n , o ponto x_{n+1} será dado pela intercessão da reta tangente a $f(x)$ no ponto x_n com o eixo x (a abscissa). Podemos ilustrar isso matematicamente. A reta tangente a $f(x)$ em x_n é dada por:

$$f'(x_n) = \frac{f(x_n) - 0}{x_n - x_{n+1}}$$

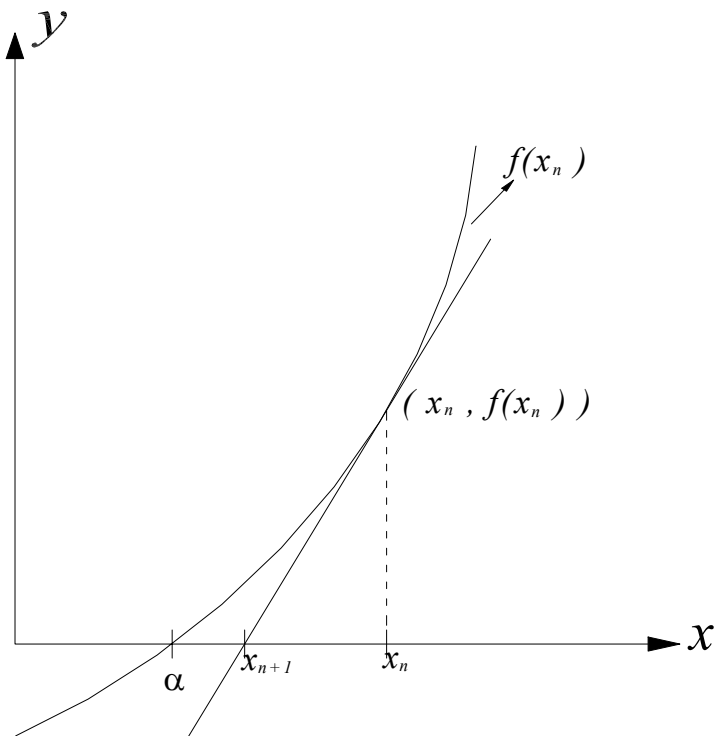
A partir dessa expressão, obtemos a fórmula de Newton-Raphson, ou seja:

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

$$x_{n+1} = \left| x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \right|$$

Portanto, a cada iteração do nosso processo, nos aproximamos cada vez mais da raiz de $f(x)$ através da tangente (ou seja, da derivada) da função $f(x)$.

A figura abaixo ilustra essa interpretação geométrica do Método de Newton-Raphson.



Exemplo:

Calcule a raiz de $f(x) = x^2 + x - 6$, usando o método de Newton-Raphson, $x_0 = 3$ como estimativa inicial e como critério de parada $|f(x_n)| \leq 0,020$.

Para encontrar a raiz de $f(x)$ usando o método de Newton-Raphson, devemos ter:

$$x_{n+1} = \varphi(x_n)$$

onde,

$$\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

$$\varphi(x) = x - \frac{x^2 + x - 6}{2 \cdot x + 1} = \frac{2 \cdot x^2 + x - x^2 - x + 6}{2 \cdot x + 1} = \frac{x^2 + 6}{2 \cdot x + 1}$$

Portanto, temos que:

x_n	$f(x_n)$	$\varphi(x_n)$
3	6	2,1429
2,1429	0,7349	2,0039
2,0039	0,0195	

A estimativa da raiz de $f(x)$ é:

$$\bar{x} = 2,0039$$

Segunda Lista de Exercícios

- 1)** O que significa a convergência de um método iterativo? Que condições garantem a convergência no método da iteração linear? O que fazer caso seja constatado que o método da iteração linear não irá convergir para um dado problema?
- 2)** Como você estimaria o erro da raiz obtida através do método da iteração linear?
- 3)** Dada a função $f(x) = \ln(x) - x^2 + 4$, mostre 3 formas para a função $\varphi(x)$ que poderiam ser usadas para se estimar a raiz de $f(x)$.
- 4)** Seja a função $f(x) = e^x - 4x^2$.
- (a)** Encontre o intervalo que deve possuir pelo menos uma raiz de $f(x)$;
- (b)** Usando $\varphi(x) = \frac{1}{2} e^{x/2}$, estime a raiz de $f(x)$ com $|x_n - x_{n-1}| < 0,001$.
- (c)** Faça a mesma estimativa usando o método de Newton-Raphson. Qual dos dois métodos converge mais rapidamente?
- (d)** Um outro critério de parada que poderia ser usado corresponde à verificação se o valor de $f(x)$ está próximo de zero. Qual resultado para a raiz de $f(x)$ se obteria caso se usasse como critério de parada a condição $|f(x)| < 0.001$?

Terceira Lista de Exercícios

1) Descreva a representação de ponto flutuante utilizada por computadores e calculadoras? Que palavra(s) chave(s) define(m) um tipo de variável que utilizaria essa representação na Linguagem C?

2) O que é um zero ou raiz de função?

3) Dada a função $f(x) = e^{-x} + x^2 - 2$:

- (a) Determine graficamente o intervalo em x que contém pelo menos uma raiz de $f(x)$;
- (b) Faça a mesma estimativa, mas desta vez aritmeticamente usando o Teorema de Bolzano;
- (c) Partindo-se desse intervalo, utilize o método da bissecção para determinar o valor dessa raiz com uma precisão de 0,05.
- (d) Compare o resultado obtido aqui com a solução dada pelo programa que você escreveu na linguagem C.

4) Seja: $f(x) = x^3 - 3x + 1$

- (a) Mostre que $f(x)$ possui uma raiz em $[0,1]$.
- (b) Mostre que $\varphi(x) = \frac{x^3 + 1}{3}$, é uma possível função de iteração obtida a partir de $f(x)$.
- (c) Verifique se $\varphi(x)$ satisfaz as condições (i) e (ii) do Teorema de Convergência.
- (d)** Encontre uma estimativa para a raiz de $f(x)$ através do método da iteração linear e usando a função $\varphi(x)$ do item (c), tal que $|f(x)| < 0,0070$.
- (e) Faça a mesma estimativa, mas desta vez ao invés de utilizar a função $\varphi(x)$ do item (c), utilize o método de Newton-Raphson.

Referências Bibliográficas

RUGGIERO/LOPES - Cálculo Numérico. Makron Books

CHAPRA/CARRALE - Numerical Methods for Engineers. Ed. McGrawHill

CONTE - Elementos de Análise Numérica. Ed. Globo

BARROSO - Cálculo Numérico - Ed. Harper & How do Brasil

MARCELO G. MUNHOZ- Apostila de Cálculo Numérico - FACENS