Matemática - RC/UFG

Laboratório de Simulação Matemática

Parte 2[2]

Prof. Thiago Alves de Queiroz

2/2016

[2] [Cap. 2 e 3] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Numerical Analysis (9th ed). Cengage Learning, 2010.

Equação com 1 Variável

- Existem equações que não podem ser resolvidas explicitamente para se obter uma solução. Por exemplo, $1564000 = 1000000e^{\lambda} + \frac{435000}{\lambda}(e^{\lambda} - 1)$.
- Veremos como obter a solução de equações com 1 variável, mas especificadamente, encontrar a raiz (ou solução) da equação $f(x) = 0$.
- A primeira técnica, que é baseada no Teorema do Valor Intermediário, é o *método da Bisseção*.
- Seja f contínua no intervalo $[a, b]$ com $f(a)$ e $f(b)$ tendo sinais opostos.
- Pelo Teorema do Valor Intermediário, então existe um $p \in (a, b)$, tal que $f(p) = 0$.

Método da Bisseção

- O método atua, em cada passo, na metade de subintervalos de $[a, b]$ pegando o ponto médio p.
- No início $a_1 = a$ e $b_1 = b$, tal que p_1 é o ponto médio do intervalo, isto é:

$$p_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}. \tag{1}$$

- Se $f(p_1) = 0$, então $p = p_1$ e método finaliza.

Se $f(p_1) \neq 0$:

- Se $f(p_1)$ tem o mesmo sinal de $f(a_1)$, então $p \in (p_1, b_1)$. Faça: $a_2 = p_1$ e $b_2 = b_1$.
- Se $f(p_1)$ tem o mesmo sinal de $f(b_1)$, então $p \in (a_1, p_1)$. Faça: $a_2 = a_1$ e $b_2 = p_1$.

- Esses passos são repetidos sobre o intervalo $[a_2, b_2]$ e assim por diante.

Método da Bisseção

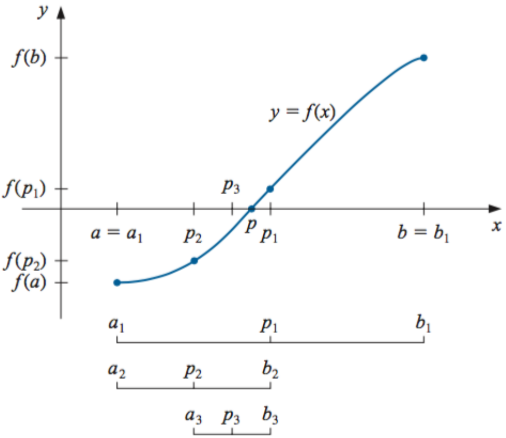

Figura: Exemplo pelo método da Bisseção.

Método da Bisseção

INPUT endpoints a, b; tolerance TOL; maximum number of iterations N_0.

OUTPUT approximate solution p or message of failure.

Step 1 Set $i = 1$;
$FA = f(a)$.

Step 2 While $i \leq N_0$ do Steps 3–6.

Step 3 Set $p = a + (b - a)/2$; (*Compute* p_i.)
$FP = f(p)$.

Step 4 If $FP = 0$ or $(b - a)/2 < TOL$ then
OUTPUT (p); (*Procedure completed successfully.*)
STOP.

Step 5 Set $i = i + 1$.

Step 6 If $FA \cdot FP > 0$ then set $a = p$; (*Compute* a_i, b_i.)
$FA = FP$
else set $b = p$. (*FA is unchanged.*)

Step 7 OUTPUT ('Method failed after N_0 iterations, N_0 =', N_0);
(*The procedure was unsuccessful.*)
STOP.

Figura: Pseudo-código do método da Bisseção.

Método da Bisseção

- Outros critérios de parada podem ser considerados no método. Por exemplo, para uma tolerância $\epsilon > 0$:

$$
\begin{aligned}
|p_N - p_{N-1}| &< \epsilon, \\
\frac{|p_N - p_{N-1}|}{|p_N|} &< \epsilon, \ p_N \neq 0, \\
|f(p_N)| &< \epsilon.
\end{aligned} \tag{2}
$$

- O melhor critério de parada é o segundo apresentado na eq. (2).
- Defina o intervalo inicial $[a, b]$ tão pequeno quanto possível.
- **Exemplo.** Encontre p no intervalo $[1, 2]$ que é solução de $f(x) = x^3 + 4x^2 - 10$. Use uma tolerância $\epsilon = 10^{-1}$.

Exemplo

- 1ª iteração: $p_1 = \frac{1+2}{2} = 1,5$, assim $f(1,5) = 2,375 > 0$ e o intervalo fica $[1,\ 1,5]$. O erro é $|2-1| = 1 > 10^{-1}$.
- 2ª iteração: $p_2 = \frac{1+1,5}{2} = 1,25$, assim $f(1,25) = -1,796875 < 0$ e o intervalo fica $[1,25\ 1,5]$. O erro é $|1,5-1| = 0,5 > 10^{-1}$.
- 3ª iteração: $p_3 = \frac{1,25+1,5}{2} = 1,375$, assim $f(1,375) = 0,16211 > 0$ e o intervalo fica $[1,25\ 1,375]$. O erro é $|1,5-1,25| = 0,25 > 10^{-1}$.
- 4ª iteração: $p_4 = \frac{1,25+1,375}{2} = 1,3125$, assim $f(1,3125) = -0,84839 < 0$ e o intervalo fica $[1,3125\ 1,375]$. O erro é $|1,375-1,25| = 0,125 > 10^{-1}$.
- 5ª iteração: $p_4 = \frac{1,3125+1,375}{2} = 1,3437$, assim $f(1,3437) = -0,3518 < 0$ e o intervalo fica $[1,3125\ 1,3437]$. O erro é $|1,375-1,3125| = 0,0625 > 10^{-1}$.
- Como o erro $0,0625 < 0,1$, então o método finaliza com resposta $p_5 = 1,3437$.
- Repita o exemplo para $\epsilon = 10^{-5}$. Quantas iterações foram necessárias?

Método de Newton

- Também conhecido como método de Newton-Raphson, ele é um dos mais eficientes nessa categoria de problemas.
- Seja f, f' e f'' contínuas no intervalo $[a, b]$. Seja p_0 a aproximação para p tal que $f'(p_0) \neq 0$ e $|p - p_0|$ é um valor pequeno.
- O método de Newton é derivado a partir do polinômio de Taylor de ordem 1 em torno de p_0 e avaliado em $x = p$, isto é:

$$f(p) = 0 = f(p_0) + (p - p_0)f'(p_0) + \frac{(p - p_0)^2}{2} f''(\xi(p)). \tag{3}$$

- Assim, o método inicia com uma aproximação inicial p_0 e gera a sequência:

$$p_n = p_{n-1} - \frac{f(p_{n-1})}{f'(p_{n-1})}, \text{ para } n \geq 1. \tag{4}$$

Método de Newton

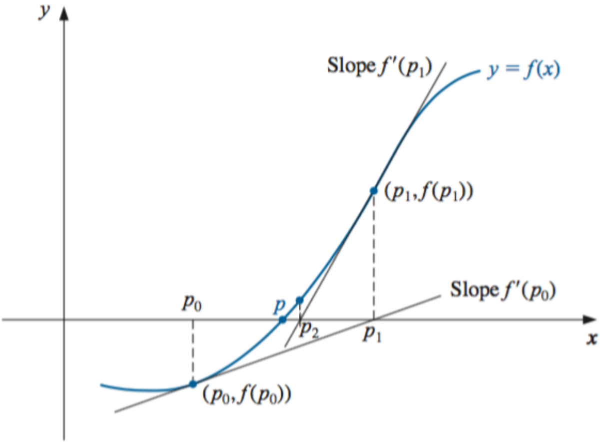

Figura: Exemplo pelo método da Newton.

Método de Newton

INPUT initial approximation p_0; tolerance TOL; maximum number of iterations N_0.

OUTPUT approximate solution p or message of failure.

Step 1 Set $i = 1$.

Step 2 While $i \leq N_0$ do Steps 3–6.

Step 3 Set $p = p_0 - f(p_0)/f'(p_0)$. *(Compute p_i.)*

Step 4 If $|p - p_0| < TOL$ then
OUTPUT (p); *(The procedure was successful.)*
STOP.

Step 5 Set $i = i + 1$.

Step 6 Set $p_0 = p$. *(Update p_0.)*

Step 7 OUTPUT ('The method failed after N_0 iterations, $N_0 =$', N_0);
(The procedure was unsuccessful.)
STOP.

Figura: Pseudo-código do método de Newton.

Múltiplos Zeros

- **Definição.** A solução p de $f(x) = 0$ é um zero de multiplicidade m, se para $x \neq p$, tem-se: $f(x) = (x - p)^m q(x)$, sendo $\lim_{x \to p} q(x) \neq 0$.
- **Teorema.** A função f com f' contínua em $[a, b]$ tem um único zero em $p \in (a, b)$ se e somente se $f(p) = 0$, mas $f'(p) \neq 0$.
- **Teorema.** A função f com f^m contínua em $[a, b]$ tem um zero de multiplicidade m em $p \in (a, b)$ se e somente se:

$$0 = f(p) = f'(p) = f''(p) = \cdots = f^{m-1}(p), \text{ mas } f^m(p) \neq 0. \tag{5}$$

- **Exemplo.** Verifique que $f(x) = e^x - x - 1$ tem um zero de multiplicidade 2 em $x = 0$.
- **Resposta.** Note que $f'(x) = e^x - 1$ e $f''(x) = e^x$. Além disso: $f(0) = e^0 - 0 - 1 = 0$ e $f'(0) = e^0 - 1 = 0$ e $f''(0) = e^0 = 1$.

Exemplo

- Logo, pelo Teorema anterior, tem-se que f possui um zero de multiplicidade 2 em $x = 0$.

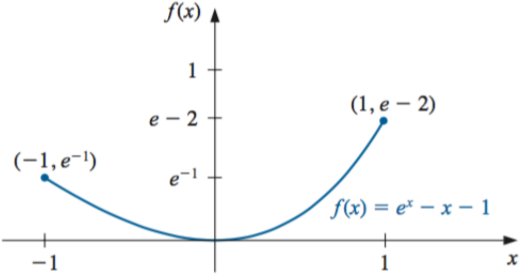

Figura: Gráfico de $f(x) = e^x - x - 1$.

Interpolação e Aproximação Polinomial

- Uma das mais práticas classes de funções que mapeiam reais para reais é a de polinômios algébricos da forma:

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0, \tag{6}$$

  sendo $a_0, \ldots, a_n$ constantes reais e n um inteiro não negativo.
- Dada uma função contínua em um intervalo fechado e limitado, então é possível obter um polinômio "bem" próximo dessa função.

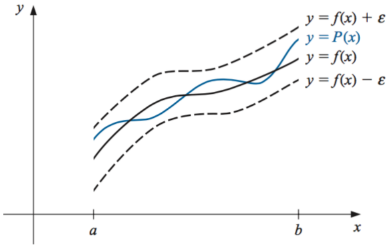

Figura: Aproximação de uma função.

Interpolação e Aproximação Polinomial

- **Teorema.** Seja f definida e contínua em $[a, b]$. Para cada $\epsilon > 0$ existe um polinômio $P(x)$ que satisfaz:

$$|f(x) - P(x)| < \epsilon, \text{ para todo } x \in [a, b]. \tag{7}$$

- Uma boa razão para usar polinômios é que as suas derivadas e integrais são fáceis de serem obtidas.
- Polinômios de Taylor aproximam bem uma função apenas nas proximidades de um dado ponto.

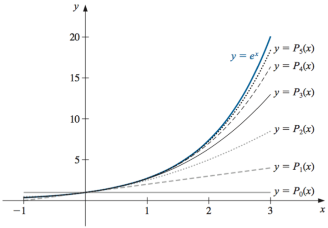

Figura: Aproximação por polinômio de Taylor.

Polinômio Interpolador de Lagrange

- Na interpolação polinomial, busca-se determinar um polinômio que passa por pontos distintos (x_0, y_0) e (x_1, y_1).
- Considere as funções:

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \text{ e } L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}. \tag{8}$$

- O *Polinômio Interpolador de Lagrange* linear que passa em (x_0, y_0) e (x_1, y_1) é:

$$P(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}f(x_1). \tag{9}$$

- **Exemplo.** Determine o Polinômio Interpolador de Lagrange linear que passa pelos pontos $(2, 4)$ e $(5, 1)$

Exemplo

- **Reposta.** Calculando L_0 e L_1, sabendo que $x_0 = 2, x_1 = 5$, $f(x_0) = 4$ e $f(x_1) = 1$:
  $L_0(x) = \frac{x-x_1}{x_0-x_1} = \frac{x-5}{2-5} = -\frac{1}{3}(x-5)$,
  $L_1(x) = \frac{x-x_0}{x_1-x_0} = \frac{x-2}{5-2} = \frac{1}{3}(x-2)$.
- O polinômio é:
  $P(x) = -\frac{1}{3}(x-5)4 + \frac{1}{3}(x-2)1 = -x+6$.

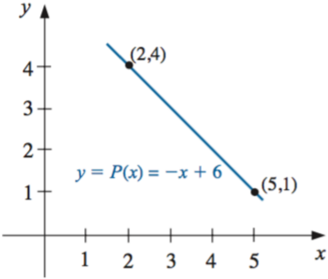

Figura: Polinômio Interpolador de Lagrange Linear para o exemplo.

Polinômio Interpolador de Lagrange

- A generalização do conceito considera um polinômio de grau no máximo n que passa por $n+1$ pontos.
- **Teorema.** Se $x_0, x_1, \ldots, x_n$ são $n+1$ números distintos e f é uma função cujos valores são conhecidos nesses números, então existe um polinômio $P(x)$ de grau no máximo n com $f(x_k) = P(x_k)$, para cada $k = 0, 1, \ldots, n$.
- O polinômio $P(x)$ é dado por:

$$P(x) = f(x_0)L_{n,0}(x) + \cdots + f(x_n)L_{n,n}(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_{n,k}(x), \quad (10)$$

sendo, para cada $k = 0, 1, \ldots, n$:

$$L_{n,k}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}. \quad (11)$$

Polinômio Interpolador de Lagrange

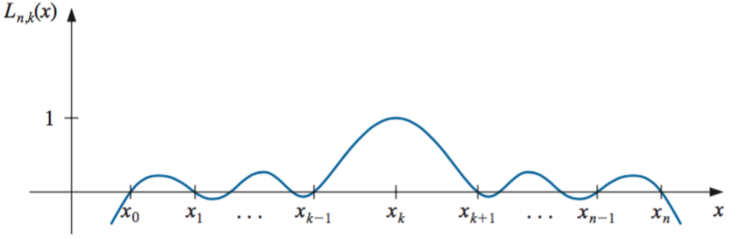

Figura: Representação típica de $L_{n,k}$ quando n é par.

- $L_{n,k}$ (ou $L_k(x)$) é chamado de *n-ésimo Polinômio Interpolador de Lagrange*.
- **Exemplo.** Seja $x_0 = 2$, $x_1 = 2,75$ e $x_2 = 4$. Encontre o segundo Polinômio Interpolador de Lagrange para $f(x) = \frac{1}{x}$. Aproxime $f(3)$ por tal polinômio.

Exemplo

- **Resposta.** Calcula-se inicialmente os coeficientes de $L_0(x)$, $L_1(x)$ e $L_2(x)$:
  $L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} = \frac{(x-2{,}75)(x-4)}{(2-2{,}5)(2-4)} = \frac{2}{3}(x-2,75)(x-4)$.
  $L_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} = \frac{(x-2)(x-4)}{(2{,}75-2)(2{,}75-4)} = -\frac{16}{15}(x-2)(x-4)$.
  $L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} = \frac{(x-2)(x-2{,}75)}{(4-2)(4-2{,}5)} = \frac{2}{5}(x-2)(x-2,75)$.
- Sabendo que $f(x_0) = \frac{1}{2}$, $f(x_1) = \frac{4}{11}$ e $f(x_2) = \frac{1}{4}$. Então:
  $P(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x) =$
  $= \frac{1}{3}(x-2,75)(x-4) - \frac{64}{165}(x-2)(x-4) + \frac{1}{10}(x-2)(x-2,75) =$
  $= \frac{1}{22}x^2 - \frac{35}{88}x + \frac{49}{44}$.
- Como $f(3) = \frac{1}{3}$, sua aproximação por $P(x)$ é:
  $f(3) \approx P(3) = \frac{9}{22} - \frac{105}{88} + \frac{49}{44} = \frac{29}{88} \approx 0,32955$.

Exemplo

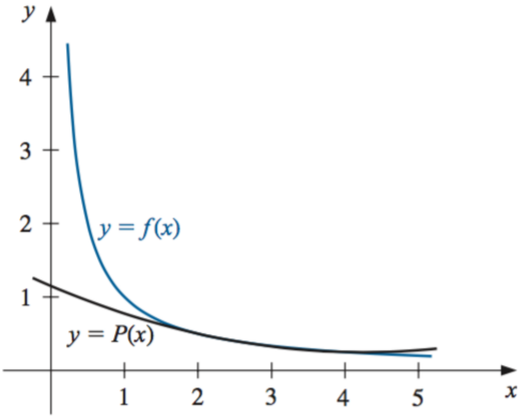

Figura: Gráfico do polinômio $P(x)$ em comparação com $f(x)$.

Diferenças Divididas

- As diferenças divididas de f com respeito a $x_0, x_1, \ldots, x_n$ são usadas para expressar $P_n(x)$ na forma:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \ldots + a_n(x - x_0)\cdots(x - x_{n-1}), \quad (12)$$

  para constantes apropriadas $a_0, a_1, \ldots, a_n$.

- Na notação de diferença-dividida, tem-se que $f[x_i] = f(x_i)$. Além disso:
  $f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}$,
  $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i}$,
  $f[x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k-1}, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \ldots, x_{i+k}] - f[x_i, x_{i+1}, \ldots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$.

- O processo finaliza ao calcular a n-ésima diferença divida:

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_n] = \frac{f[x_1, x_2, x_n] - f[x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}. \quad (13)$$

Diferenças Divididas

- O polinômio $P_n(x)$ pode ser escrito na forma de Diferenças Divididas de Newton:

$$P_n(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^{n} f[x_0, x_1, \ldots, x_k](x - x_0)\cdots(x - x_{k-1}). \qquad (14)$$

x	$f(x)$	First divided differences	Second divided differences	Third divided differences
x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0,x_1] = \dfrac{f[x_1]-f[x_0]}{x_1-x_0}$		
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0,x_1,x_2] = \dfrac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$	
		$f[x_1,x_2] = \dfrac{f[x_2]-f[x_1]}{x_2-x_1}$		$f[x_0,x_1,x_2,x_3] = \dfrac{f[x_1,x_2,x_3]-f[x_0,x_1,x_2]}{x_3-x_0}$
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1,x_2,x_3] = \dfrac{f[x_2,x_3]-f[x_1,x_2]}{x_3-x_1}$	
		$f[x_2,x_3] = \dfrac{f[x_3]-f[x_2]}{x_3-x_2}$		$f[x_1,x_2,x_3,x_4] = \dfrac{f[x_2,x_3,x_4]-f[x_1,x_2,x_3]}{x_4-x_1}$
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2,x_3,x_4] = \dfrac{f[x_3,x_4]-f[x_2,x_3]}{x_4-x_2}$	
		$f[x_3,x_4] = \dfrac{f[x_4]-f[x_3]}{x_4-x_3}$		$f[x_2,x_3,x_4,x_5] = \dfrac{f[x_3,x_4,x_5]-f[x_2,x_3,x_4]}{x_5-x_2}$
x_4	$f[x_4]$		$f[x_3,x_4,x_5] = \dfrac{f[x_4,x_5]-f[x_3,x_4]}{x_5-x_3}$	
		$f[x_4,x_5] = \dfrac{f[x_5]-f[x_4]}{x_5-x_4}$		
x_5	$f[x_5]$			

Figura: Tabela de diferenças divididas para $x_0, x_1, \ldots, x_5$.