Instituto Politécnico | IPRJ Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Departamento de Modelagem Computacional – DMC
Período: 2023/02
Disciplina: CÁLCULO NUMÉRICO (IPRJ01-07579 e CÁLCULO NUMÉRICO – R (IPRJ 01-11976).
Carga horária: 75 horas
Professor Hermes Alves Filho

MÓDULO 1.1

1) ZEROS REAIS DE FUNÇÕES

O discente será capaz de utilizar conceitos fundamentais de computação e do cálculo diferencial para a obtenção de soluções reais numéricas de equações que não possuam soluções diretas (analíticas).

Objetivos: Neste tópico, introduzimos e discutimos um dos problemas clássicos da análise numérica: encontrar raízes reais de equações a uma variável de problemas que não possuem soluções diretas (analíticas). Este problema consiste em obter valores da variável x que satisfazem a equação f(x) = 0.

1. INTRODUÇÃO

Grande parte dos problemas matemáticos surge da necessidade de solucionar problemas da natureza, sendo que é possível descrever muitos fenômenos naturais por meio de modelos matemáticos na forma de um algoritmo esquemático

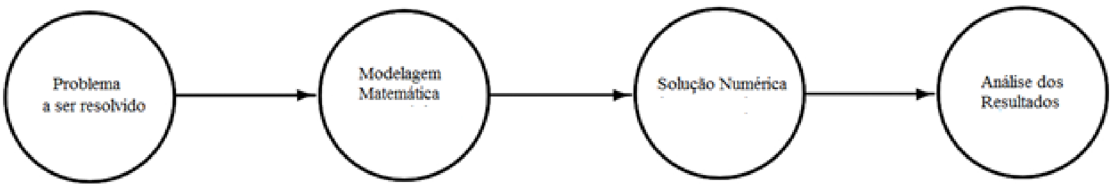

Figura 1: Etapas de solução de um problema

O esquema da Figura 1 mostra duas etapas fundamentais para a solução de um problema:

1. Modelagem do problema: etapa inicial que consiste na representação do problema por um modelo matemático conveniente. Em geral, o modelo é obtido a partir de teorias das áreas específicas que originaram o problema e, com vistas a tornar o modelo um problema matemático resolvível, podem conter simplificações (hipóteses) do problema real. Dependendo da abordagem dada ao problema, é mesmo possível obtermos modelos matemáticos diferentes;
2. Resolução do modelo: etapa em que buscamos encontrar uma solução para o modelo matemático obtido na fase de modelagem. É nesta fase que necessitamos de métodos numéricos específicos para resolver o modelo correspondente.

2) Objetivos

O problema de determinar zeros de uma função aparecerá sempre que tivermos de resolver uma equação do tipo $f(x) = 0$. Nesse caso temos que determinar os valores de x.

O que é preciso para realizar essa tarefa?

Contextualizar o problema de determinar zeros de funções;
Apresentar técnicas para resolver o problema;
Rever conceitos e resultados necessários do cálculo fundamental;
Localizar zeros reais de funções reais.

2.1) Modelo Matemático

Entende-se como modelo matemático a um conjunto de símbolos e relações matemáticas que traduz, de alguma forma, um fenômeno em questão ou um problema de situação real, é denominado de modelo matemático.

Métodos usados para a solução dos modelos matemáticos

a) Diretos: aquele que, a menos de erros de arredondamentos da aritmética finita (computadores, máquinas de calcular, celulares etc), fornece as soluções exatas do problema real.

Obs: Os computadores digitais possuem o número de dígitos finitos para a representão numérica.

Ex. Resolver a equação $ax^2 + bx + c = 0$, os valores de *a*, *b* e *c* são constantes

Solução direta: Fórmula de Bháskara (bastante difundida)

$$x1, x2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Obs: A natureza das raízes vai depender da condição $\Delta = b^2 - 4ac$, com as seguintes possibilidades

$$\Delta \rightarrow \begin{cases} > 0, \ x_1 \text{ e } x_2 \text{ são reais e distintas,} \\ = 0, \text{raízes reais e } x_1 = x_2, \\ < 0, \text{ não existem raízes reais} \end{cases}$$

b) Numéricos: constituídos por uma sequência finita de operações aritméticas, que sob certas condições, levam a uma solução ou a uma aproximação de uma solução do problema.

Obs. Em um método numérico, uma solução aproximada é, em geral, obtida de forma construtiva: partindo de aproximações iniciais, vão sendo construídas novas aproximações até que uma aproximação considerada “boa” seja obtida. Desse modo, um método numérico pode ser escrito em forma de algoritmo com as operações (ou grupos de operações), podendo ser executadas repetidamente.

Ex. Algoritmo de Eudoxo (matemático grego) para estimar o valor de $\sqrt{2}$

Na máquina de calcular do Hermes $\sqrt{2} = 1{,}414213562$

Algoritmo: Um método numérico para determinar uma aproximação para a raiz quadrada de um número real p, maior que 1, ou seja obter a $\sqrt{p}$

Solução: Se p > 1 temos a seguinte relação $1 < \sqrt{p} < p$

Primeira estimativa da solução: x_0

p = 2

$x_0 = (1+p)/2, \ x_0 = 1{,}5$

Segunda estimativa da solução: x_1

$$x_1 = (x_0 + \frac{p}{x_0})/2, \ x_1 = 1{,}416666667$$

Terceira estimativa: x_2

$$x_2 = (x_1 + \frac{p}{x_1})/2, \ x_2 = 1{,}4142155686$$

Quarta estimativa: x_3

$$x_3 = (x_2 + \frac{p}{x_2})/2, \ x_3 = 1{,}414213562$$

Quinta estimativa: x_4

$$x_4 = (x_3 + \frac{p}{x_3})/2, \ x_4 = 1.414213562$$

Verificação do cálculo da $\sqrt{2}$

$(x_4)^2 = 2$

$(1.414213562)^2 = 2 = 2, \ \text{ok}$

Os resultados obtidos podem ser colocados numa tabela, como apresentados na Tabela 1

Algoritmo de Eudoxo para $\sqrt{2}$		
n	x_n	x_n^2
0	1,50000000000000	2,25000000000000
1	1,41666666666667	2,00694444444444
2	1,41421568627451	2,00000600730488
3	1,41421356237469	2,00000000000451
4	1,41421356237310	2,00000000000000

Tabela 1: Algoritmo de Eudoxo para $\sqrt{2}$. Fonte: de Freitas (2000, p. 11).

Podemos então montar o seguinte algoritmo, considerando as contas realizadas acima

$$x_n = \begin{cases} (1+p)/2, \ \text{se } n = 0, \\ \\ (\frac{p}{x_{n-1}} + x_{n-1})/2, \ \text{se } n \geq 1. \end{cases}$$

Observação:

Nas contas apresentadas foram considerados todos os números no visor de uma calculadora Casio fx-82MS. Esses números apresentam truncamentos na representação da calculadora.

Podemos, então, através dos exemplos citados acima, concluir que:

O cálculo numérico tem por objetivo estudar *técnicas numéricas* ou *métodos numéricos* para obter soluções de problemas reais que possam ser representados por *modelos matemáticos*, ou seja, o cálculo numérico busca produzir respostas numéricas para problemas matemáticos.

Nele, esperamos que você, caro (a) aluno (a), adquira habilidades para:

a) Entender o que são *métodos numéricos* de aproximação, como e por que utilizá-los, e quando é esperado que eles funcionem;

b) Identificar problemas que requerem o uso de técnicas numéricas para a obtenção de sua solução;

c) Conhecer e aplicar os principais métodos numéricos para a solução de certos problemas clássicos, por exemplo, obter zeros reais de funções reais e, além disso, resolver sistemas de equações lineares, fazer uma interpolação e aproximação polinomial e fazer derivação e integração numérica;

d) Estimar e analisar os erros obtidos devido à aplicação de métodos numéricos e propor soluções para minimizá-los ou mesmo, quando possível, eliminá-los.

A aplicação das técnicas desenvolvidas no cálculo numérico para a resolução de problemas envolve, normalmente, um grande volume de cálculos (ou seja, o esforço computacional é alto), tornando imprescindível o trabalho de forma integrada com calculadoras, preferencialmente, científicas, gráficas ou programáveis ou com ambientes computacionais programáveis, os quais normalmente dispõem de ferramentas algébricas, numéricas e gráficas, facilitando e possibilitando o trabalho.

Com o desenvolvimento de rápidos e eficientes computadores digitais e de avançados ambientes de programação, a importância dos métodos numéricos tem aumentado significativamente na resolução de problemas.

2.2) Uso de gráficos

Plotar os gráficos das funções sempre ajuda na perspectiva de se achar os zeros da equação do tipo $f(x) = 0$. Para que tenhamos sucesso nessa tarefa faz-se necessário relembrar alguns conceitos básicos sobre funções (domínio, imagem etc). Só devemos tomar cuidado com a escala em que esses gráficos são montados

Ex1. Considerando o gráfico apresentado na Figura 2 os valores de x que satisfazem a relação $f(x) = 0$, são os valores x_1, x_2 e x_3

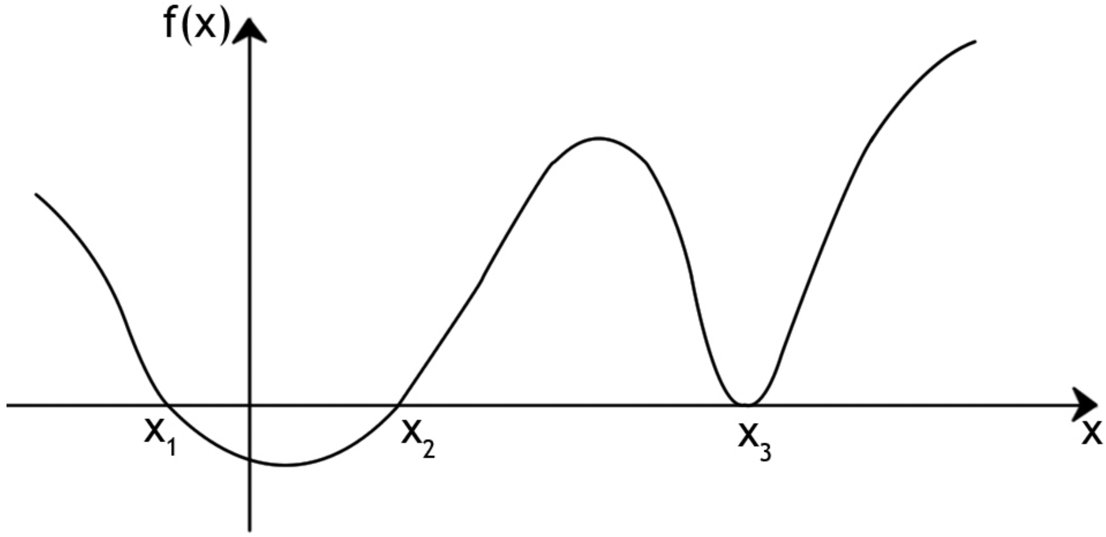

Figura2: Representação gráfica da f(x)

Ex2. $f(x) = x^2 - \cos(x) = 0$

Nesse caso o problema envolve duas funções de naturezas diferentes:

a) x^2, função do segundo grau cuja representação é uma parábola passando no ponto (0;0);
b) $\cos(x)$, função periódica com período de 2π

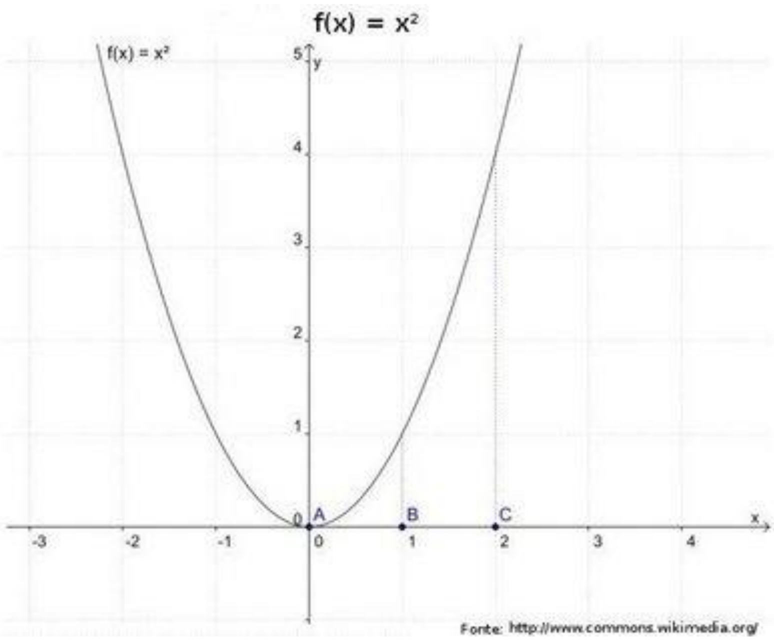

Figura3: Representação gráfica da x^2

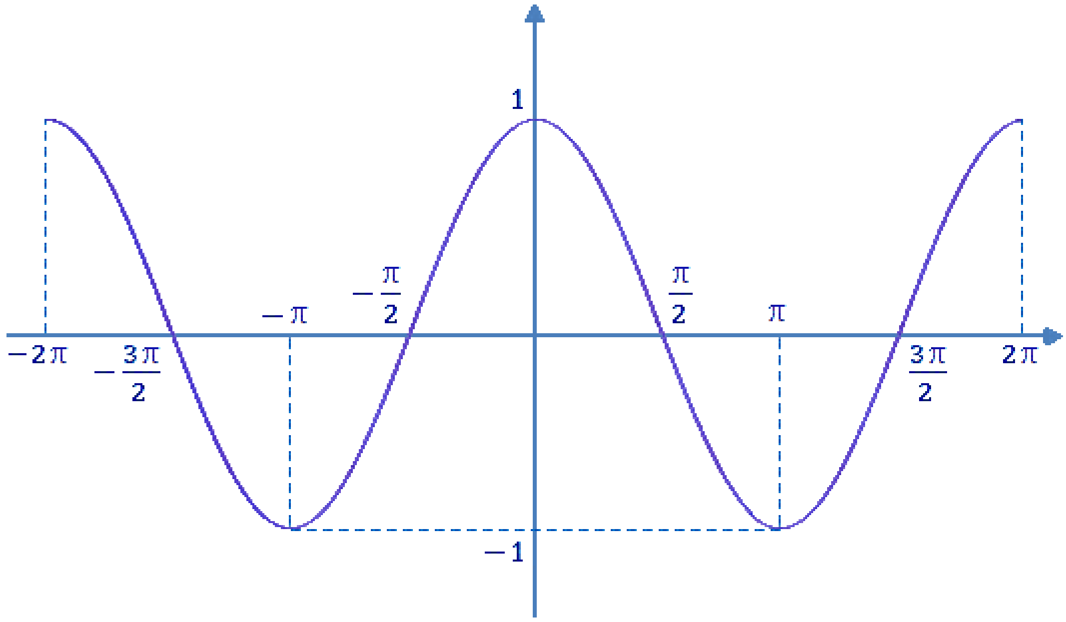

Figura4: Representação gráfica da função cos(x)

Solução: a solução do problema consiste em fazer $x^2 = \cos(x)$. As raízes são as intercessões das duas curvas representadas pelas Figuras 3 e 4.

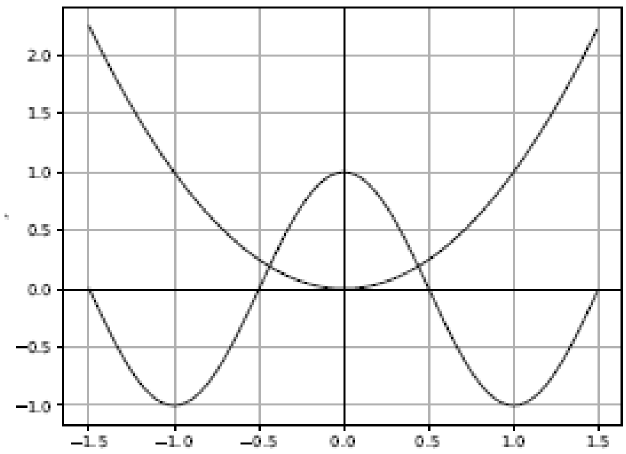

Figura 5: Representação gráfica da interseção das funções f1(x) = x^2e f2(x) = cos(x).

Pode ser observado, usando a Figura 5, considerando a interseção das curvas, que o problema possui duas raízes reais e simétricas, ou seja, $x_2 = - x_1$. Essas raízes não podem ser obtidas através de métodos diretos restando à alternativa do uso das metodologias numéricas (iterativas).

2.3) Como estimar o valor das raízes de forma numérica (aproximada)

1. Em geral, um método (processo ou procedimento) numérico iterativo calcula uma sequência de aproximações de um zero de f(x), cada uma mais precisa que a anterior. Assim, a repetição do processo fornece, em um número finito de vezes, uma aproximação a qual difere do valor exato do zero por alguma precisão (tolerância) prefixada.

2. O cálculo de cada nova aproximação é feito utilizando aproximações anteriores, porém, as aproximações iniciais que o processo exigir devem ser fornecidas.

2.3-a) Primeiro passo – Isolamento das raízes

Para conseguirmos fazer essa tarefa nos baseamos nos seguintes teoremas

Teorema 1 (Teorema de Bolzano): Seja $f:\Re \to \Re$ uma função contínua num intervalo fechado $[a,b]$. Se $f(a)*f(b)<0$, então f tem pelo menos um zero (raiz) no intervalo aberto (a,b).

Teorema 2: Sob as hipóteses do teorema 1, se a derivada de $f'(x)$ existir e preservar o sinal no intervalo aberto (a,b), então f tem um único zero em (a,b).

A condição de $f'(x)$ existir e preservar o sinal no intervalo aberto (a,b), significa

$$f'(x)=\begin{cases} >0, \forall\, x \in (a,b) \to f(x) \text{ crescente}, \\ <0, \forall\, x \in (a,b) \to f(x) \text{ descrescente}. \end{cases}$$

Ex. Vamos verificar se existe pelo menos uma raiz da equação $f(x)=-x+2e^{-x}=0$ no intervalo [0;2].

Solução:

$$f(0)=2>0$$
$$f(2)=-2+2*e^{-2}\cong -1{,}73<0$$
$$f(0)*f(2)<0$$

Cálculo da derivada $f'(x)$ em (0,2)

$$f'(x)=-1-2*e^{-x}$$
$$f'(0)=-1-2*e^{-0}=-3<0$$
$$f'(2)=-1-2*e^{-2}\cong -1{,}27<0\,.$$

Conclusão: como $f(0)*f(2)<0$ e a $f'(x)$ não muda de sinal no intervalo (0;2) a equação $f(x)=-x+2e^{-x}=10^{-8}=0{,}00000001\cong 0$ possui pelo menos uma raiz real no intervalo aberto (0;2).

Na Figura 6 apresentamos o gráfico da função $f(x)=-x+2e^{-x}=0$. Às vezes, para conseguirmos fazer um gráfico, fazemos o uso de programas profissionais como o MatLab ou uma linguagem de programação específica como o C, C^{++} ou o Phyton.

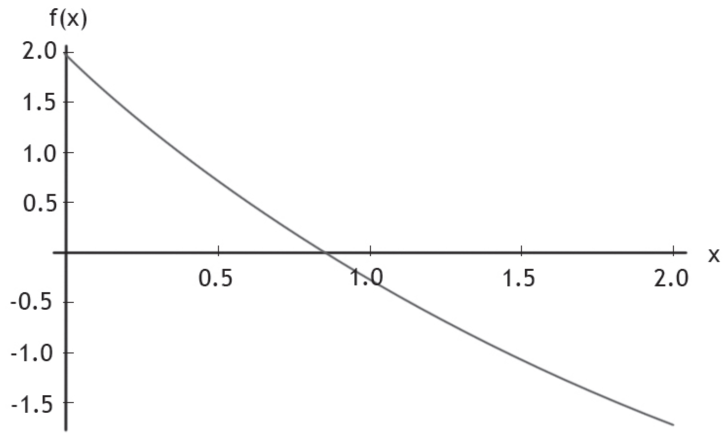

Figura 6. Representação gráfica de $f(x) = -x + 2e^{-x}$

Podemos observar, olhando a Figura 6, que realmente temos uma raiz real da equação no intervalo (0;2).
Obs. Caso que não consigamos desenhar o gráfico apresentado na Figura 6 temos que tentar fazer o gráfico das duas funções $f_1(x) = -x$ e $f_2(x) = 2e^{-x}$ e buscarmos fazer a interseção das curvas com a relação a condição $x = 2e^{-x}$, como mostrado no exemplo da Figura 5.

Os Teoremas 1 e 2 são grandes aliados para o isolamento dos zeros reais de uma função real f(x) via tabelamento da função. Esta estratégia consiste em construir uma tabela com valores de f(x) para diversos valores de *x* e observar as mudanças de sinal de f(x) e o sinal da derivada f´(x) nos intervalos em que f(x) mudou de sinal nos extremos. Algumas vezes, certas características próprias das funções ajudarão.

Ex.1. $f(x) = x^4 - 9x^3 - 2x^2 + 120x - 130 = 0$

A função polinomial f(x) é contínua e possui f´(x) em todo o seu domínio, ou seja, o conjunto dos números reais $(-\infty;+\infty)$. Vamos então construir a tabela que segue em alguns pontos "x" do domínio da f(x)

Tabela 2: Mudança de sinal no domínio da $f(x) = x^4 - 9x^3 - 2x^2 + 120x - 130$

x	-10	-5	-4	-3	0	1	2	3	4	5	7	10
f(x)	17470	970	190	-184	-130	-20	46	50	-2	-80	-74	1870
Sinal	+	+	+	-	-	-	+	+	-	-	-	+

Observando a Tabela 2 podemos afirmar que a equação $x^4 - 9x^3 - 2x^2 + 120x - 130 = 0$ possui quatro raízes reais distintas e que estão localizadas nos intervalos (-4;-3), (1;2), (3;4) e (7;10)

$f'(x) = 4x^3 - 27x^2 - 4x + 120$

Teste da f´(x) no intervalo (-4;-3)

$f'(-4) = -552 < 0$
$f'(-3) = -219 < 0$

Conclusão: A derivada f´(x) no intervalo (-4;-3) não muda de sinal. Deixo para os alunos fazerem o teste dos outros intervalos

Ex.2. $f(x) = \ln(x) + x\sqrt{x} = 0$

Obs. Nesse caso exemplo vamos construir também uma tabela com as mudanças de sinais, mas antes temos que verificar o domínio da função f(x).

a) Domínio da parte $\ln(x)$. Por definição os valores de x tem que maiores que zero e não existe $\ln(x)$ para valores de x < 0, então x > 0;
b) Domínio da parte $x\sqrt{x}$. Como estamos trabalhando só com os números reais, então nessa parte $x \geq 0$ para não termos raízes quadradas complexas.

Então, de forma a atender as partes (a) e (b), o domínio da $f(x) = \ln(x) + x\sqrt{x}$ é definido como: $\{x \in \Re / x > 0\}$. Portanto, podemos construir a Tabela 3 a seguir

Tabela 3: Mudanças de sinal no domínio da $f(x) = \ln(x) + x\sqrt{x}$

x	0,01	0,1	0,5	1	2	3	5	10
f(x)	-9,60	-7,27	-5,34	-4	-1,48	1,29	7,79	28,93
Sinal [f(a)*f(b)]	-	-	-	-	-	+	+	+

F(a)*f(b) = f(2)*f(3) = -1,48*1,29 = -1,9092 < 0

$$f'(x) = \frac{1}{x} + \frac{3\sqrt{x}}{2}$$

Teste da f´(x) no intervalo (2;3)

$f'(2) \cong 2{,}62 > 0$
$f'(3) \cong 2{,}93 > 0$

Conclusão: A f´(x) não muda de sinal no intervalo (2;3)

2.3-b) Cálculo das raízes reais de equações

Uma vez descoberto os intervalos [a,b] onde se localizam as Raízes da equação f(x) = o próximos passo é calcular esses valores

Objetivos

Saber utilizar métodos numéricos iterativos (aproximados)
Calcular aproximações para zeros reais de funções reais
Conhecer critérios de parada de algoritmos

Os métodos iterativos são compostos, basicamente, de pelo menos três módulos:

a) **Inicialização:** onde são fornecidos os dados iniciais (como aproximações iniciais ou intervalos iniciais) e/ou feitos alguns cálculos iniciais.
b) **Atualização:** aqui se calcula (geralmente, por meio de alguma fórmula matemática) uma nova aproximação.
c) **Critério de Parada:** módulo que estabelece quando parar o processo iterativo (repetição de cálculos). Nesse curso será adotado o critério de parada na forma

$|f(x_R)| < \varepsilon$, onde x_R é o valor da raiz procurada e ε é um valor prefixado, também chamado de precisão. Geralmente, os métodos iterativos geram uma sequência convergente na forma $x_0, x_1, x_2, \ldots\ldots\ldots, x_R$. O valor de x_0 é comumente denominado de primeira estimativa ou no jargão mais popular "chute inicial".

O fluxograma seguinte mostra como os métodos iterativos fazem o refinamento dos zeros.

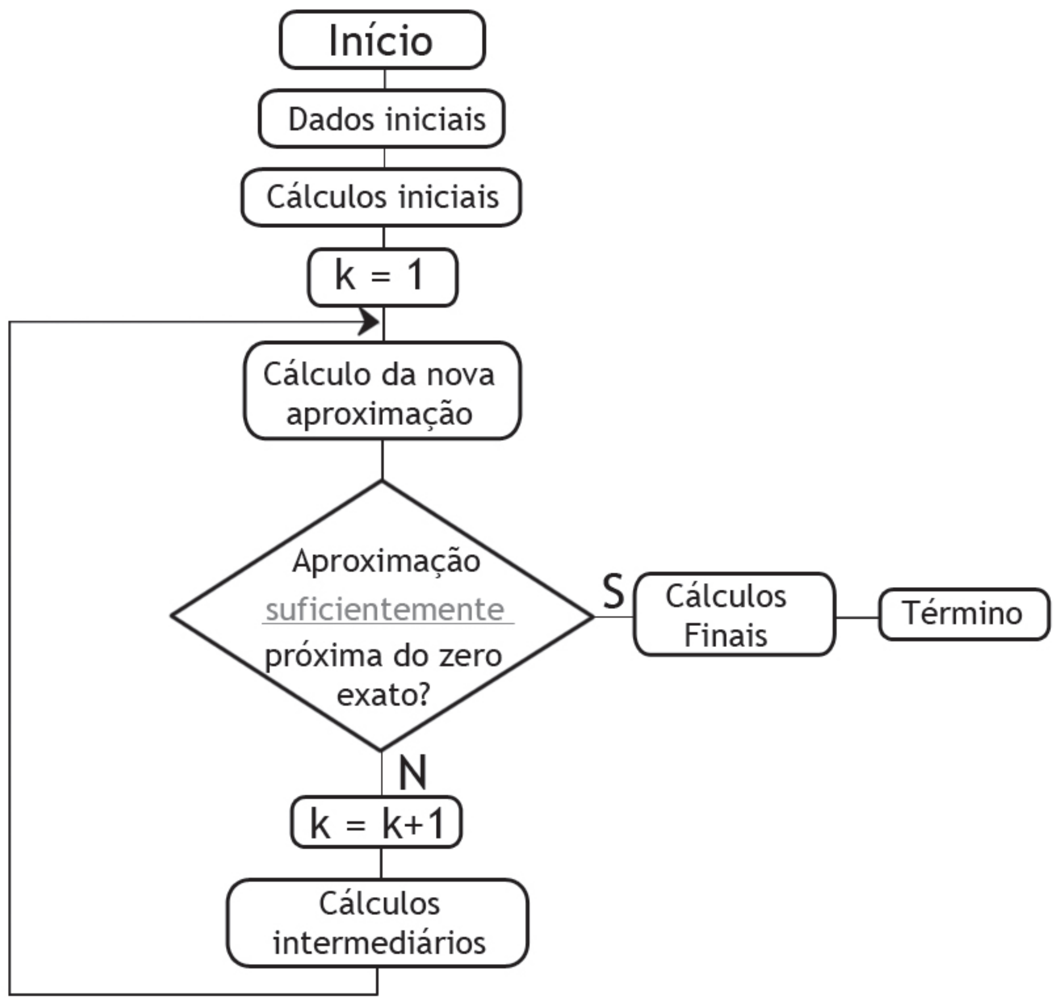

Figura 7: Fluxograma da fase de refinamento

Referências Bibliográficas

1) Cálculo Numérico – Aspectos Teóricos e Computacionais – Segunda Edição
Autores: Maria A. Gomes Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes
Editora: Pearson

2) Cálculo Numérico – Licenciatura Matemática
Autores: Francisco Gêvane Muniz Cunha e Jânio Kléo de Sousa Castro
https://educapes.capes.gov.br/bitstream/capes/430185/2/Calculo%20Numerico.pdf