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 1.2

1) ZEROS REAIS DE FUNÇÕES: (Continuação)

2.3-b1. Métodos (iterativos) para calcular zeros reais de equações

A) Método da bisseção (partição)

Inspirado no teorema de Bolzano, o método da bisseção é um método bem intuitivo para achar o zero de uma função f (x) em um intervalo [a,b], que contém um único zero de f(x). A cada iteração, o método da bisseção obtém um novo intervalo com um tamanho igual à metade do tamanho do intervalo anterior.

Na Figura 8 apresentamos uma ilustração gráfica hipotética que nos ajuda na compreensão do algoritmo do método da bisseção

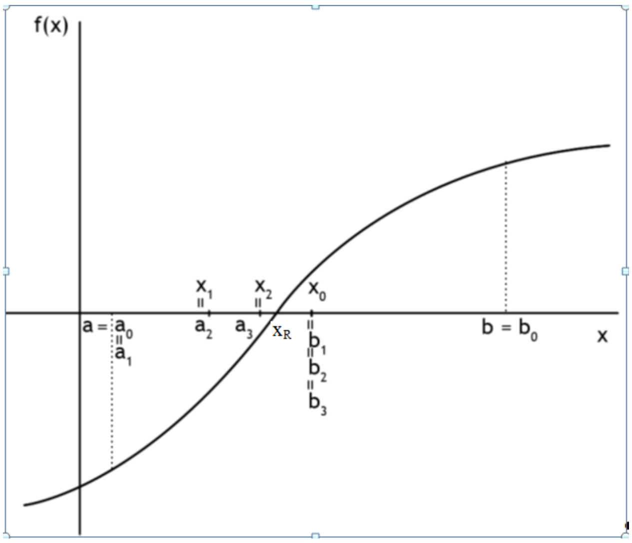


Figura 8: Método da Bisseção

Algoritmo do Método da Bisseção – Raiz a ser obtida x_R

Uma vez obtido o intervalo [a,b] onde $f(a) * f(b) < 0$ (caso da função representada de forma hipotética na Figura 8) procedemos com a primeira estimativa (iteração) do método. Observe também que f´(a) > 0 e f´(b) > 0.

a) Primeira estimativa ("chute inicial"): x_0

$$x_0 = a + \frac{(b-a)}{2} = \frac{(a+b)}{2}$$

a.1) Teste se a estimativa x_0 é a raiz da equação f(x) = 0

$|f(x_0)| \cong 0$. Observando a Figura 8, intuitivamente, verificamos que $f(x_0)$ está longe de ser aproximadamente igual a zero. Assim é preciso realizar o próximo cálculo (iteração)

b) Segunda Estimativa: x_1

Mas antes de fazermos esse cálculo procedemos a seguinte análise

$$\begin{cases} a \to f(a) \\ x_0 \to f(x_0) \to f(a) * f(x_0) < 0 \\ b \to f(b) \to f(x_0) * f(b) > 0 \end{cases}$$

Baseado na análise realizada acima e na Figura 8, vemos que a raiz (x_R) está entre "a" e "x_0". Então, fazemos

$$x_1 = \frac{(a + x_0)}{2}$$

b.1) Teste se a estimativa x_1 é a raiz da equação $f(x_1) = 0$

$|f(x_1)| \cong 0$. Observando também a Figura 8 verificamos que $f(x_1)$ também está longe de ser aproximadamente igual a zero. Assim precisamos realizar o próximo cálculo (iteração)

Aqui também procedemos a seguinte análise

$$\begin{cases} a \to f(a) \\ x_1 \to f(x_1) \to f(a) * f(x_1) > 0 \\ x_0 \to f(x_0) \to f(x_1) * f(x_0) < 0 \\ b \to f(b) \to f(x_0) * f(b) > 0 \end{cases}$$

Obs: Esses cálculos repetidos (iterativos) irão produzir uma sequência convergente de estimativas para a raiz da equação f(x) = 0, que pode ser representada na forma:

$x_0, x_1, x_2, ...x_n \rightarrow x_R$

Porém, como estamos sempre dividindo os intervalos onde está a raiz $x_{R,}$ pela sua metade, o método da Bisseção, apesar se sempre convergir para o valor da raiz, gera uma convergência de forma muito lenta. Outra coisa importante é que podemos "escolher" a velocidade da convergência definindo o critério de parada na forma mais adequada

$|f(x_n)| < \varepsilon$, sendo que o valor preestabelecido de ε é denominado de precisão.

Obs: A variável ε pode assumir, por exemplo, valores como 10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-6}. Esse valor vai depender da natureza do problema a ser resolvido

Conclusão:

Note que para se iniciar o algoritmo da bisseção, um intervalo [a,b] onde f(a)*f(b) < 0 deve ser encontrado. A cada passo do algoritmo da bisseção, o comprimento do intervalo disponível, que contém um zero de f(x), é dividido ao meio. Portanto, é vantajoso escolher o intervalo inicial. [a,b] tão pequeno quanto possível. O algoritmo da bisseção apresenta algumas desvantagens:

i) é muito lento para convergir, i.e.., N pode ficar muito grande antes que o desvio seja satisfatoriamente pequeno;
ii) não existem critérios gerais para a escolha do intervalo inicial [a,b];
iii) as sucessivas estimativas, para x são dadas por x=a+(b-a)/2. Quando a < b forem muito próximos, a diferença (b-a) pode resultar um grande erro de aritmética finita usada pelos computadores digitais.

Entretanto, o algoritmo é estável e é sempre convergente para uma solução. Em geral, o algoritmo da bisseção é usado como inicializador de outros algoritmos mais eficiente (mais rápidos) que serão estudados mais para frente no curso..

Exemplo: Obter uma aproximação para $\sqrt{2}$, que já resolvemos usando o algoritmo de Eudoxo, considerando $\varepsilon = 10^{-2}$.

Solução: Esse problema pode ser resolvido considerando a equação $x^2 - 2 = 0$. Aqui só devemos tomar um cuidado, pois existem dois valores de x que satisfazem a equação, no caso, $x = \pm\sqrt{2}$

Pelos nossos conhecimentos do cálculo básico podemos plotar o gráfico da função (Figura 9)

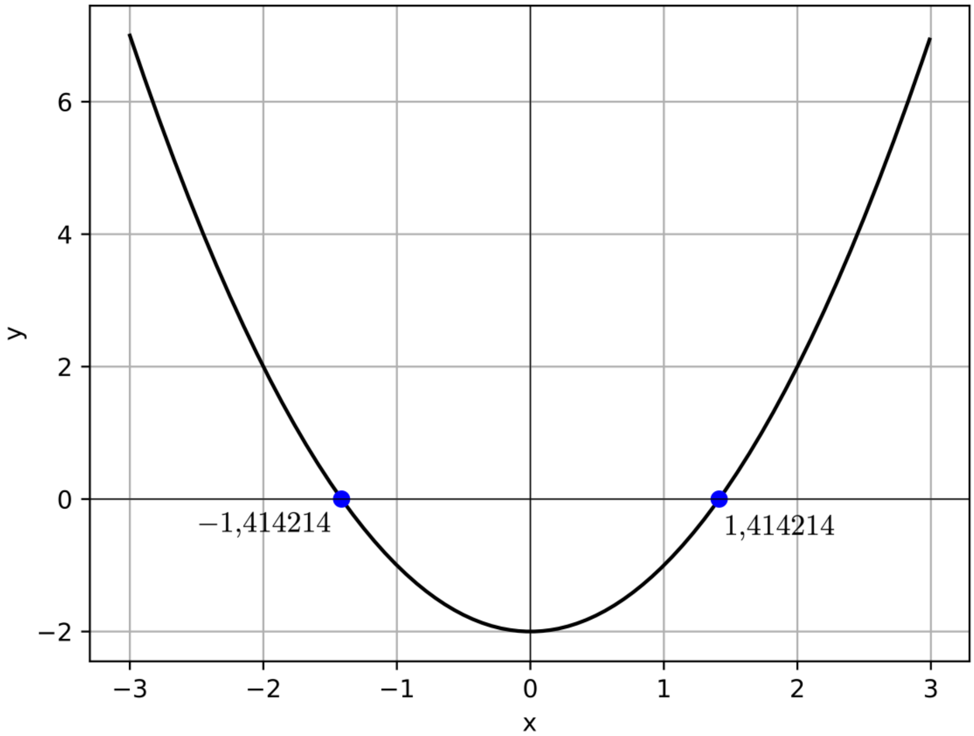


Figura 9. Gráfico da função $x^2 - 2 = 0$.

Obs. Os valores das raízes referências da equação $x^2 - 2 = 0$ são $\pm\sqrt{2} \cong \pm 1{,}41$ e foram obtidas, truncando os algarismos no segundo dígito após a vírgula, numa calculadora Casio (fx-82MS), para ficar compatível com a precisão de $\varepsilon = 10^{-2} = 0{,}01$, dada no problema.

Pela Figura 9 pode-se observar que a raiz positiva da equação $x^2 - 2 = 0$ se encontra entre as abscissas x = 1 e x = 2, portanto vamos escolher como intervalo inicial $(a;b) = (1;2)$

Verificação:

$$\begin{cases} f(1) = -1 \\ f(2) = 2 \\ f(1) * f(2) = -2 < 0 \end{cases}$$

$$f'(x) = 2x = \begin{cases} f'(1) = 2 > 0 \\ f'(2) = 4 > 0 \end{cases}$$

Conclusão: A equação $x^2 - 2 = 0$ possui uma única raiz no intervalo $(a;b) = (1;2)$.

Na Tabela 4 apresentamos a solução do problema

Tabela 4: Cálculo da raiz x_n usando o método da Bisseção

n	a_n	b_n	x_n	$f(x_n)$	$\|f(x_n)\|$
0	1	2	1,5	-0,25	0,25
1	1	1,5	1,25	-0,4375	0,4375
2	1,25	1,5	1,375	-0,109375	0,109375
3	1,375	1,5	1,4375	-0,6640625	0,6640625
4	1,375	1,4375	1,40625	-0,22460937	0,22460937
5	1,40625	1,4375	1,421875	-0,021728515	0,021728515
6	1,40625	1,421875	1,4140625	-0,0004272461	0,0004272461 < 0,01

Obs: $|f(x_6)| \cong 0{,}0004272461 < 10^{-2}$, então o problema convergiu.

Consideração:

a) Observem que até a segunda casa após a vírgula os dois resultados, considerando o obtido pela bisseção (1,41) e
b) é o resultado obtido pela calculadora (1,41) são iguais;

b) Se considerarmos como valor de referência o valor (r = 1,414214) obtido pela calculadora eletrônica e o valor apresentado pelo método da bisseção ($r^* = 1{,}4140625$) temos seguintes desvios

A.1) Desvio absoluto (DA)

$$DA = |r - r^*| = 1{,}515 * 10^{-5}$$

A.2) Desvio Relativo Percentual (DRP)

$$DRP = \left|\frac{r - r^*}{r}\right| * 100 = 0{,}0011\%$$

Onde r = valor referência e o r^* é o valor da aproximação

Obs: Em alguns livros essas medidas aparecem como Erro Absoluto (EA) e Erro Relativo Percentual (ERP), porém vamos manter a nomenclatura introduzida (desvio) pois no caso do erro a referência teria que ser um dado absoluto (experimental), o que não é o caso dos nossos exemplos.

Uma forma de melhorar o cálculo da $\sqrt{2}$ em relação ao cálculo da referência seria colocar o valor de $\varepsilon = 10^{-5}$, mas com isso o número de iterações feitas pelo método da Bisseção irá aumentar.

A.3. Número mínimo de iterações usando o algoritmo da bisseção para a obtenção de raízes reais de equações

Teorema 3. – Seja f(x) $\in$ C [a,b] e suponha que $f(a) * f(b) < 0$. O algoritmo da bisseção gera uma sequência { $x_0, x_1, x_2, ...x_n \rightarrow x_R$ } que aproxima x com a propriedade.

$$|x_n - x_{n-1}| \leq \frac{|b-a|}{2^n}, \; n \geq 1.$$

Considerando ε como a precisão da aproximação, o número mínimo de iterações *n* determinado pela aplicação do método da Bisseção na solução do problema aparece na forma

$$\frac{|b-a|}{2^n} < \varepsilon$$

Ex. $x^2 - 2 = 0$, $(a;b) = (1;2)$, $\varepsilon = 10^{-2}$

$\frac{|2-1|}{10^{-2}} < 2^n$. Multiplicando de forma cruzada obtemos

$$2^n > 100$$

Aplicando a propriedade do ln em ambos os lados da desigualdade, obtemos

$$\ln(2^n) = n * \ln(2) > \ln(100)$$

$$n > \frac{\ln(100)}{\ln(2)} > 6{,}64$$

Como n representa o número mínimo de iterações quando se usa o método da bisseção para o cálculo da raiz da equação, usando $\varepsilon = 10^{-2}$, podemos aproximar o número mínimo de iterações para n = 7. Realmente o problema precisou de 7 iterações para alcançar a precisão exigida.

B) MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO (FP)

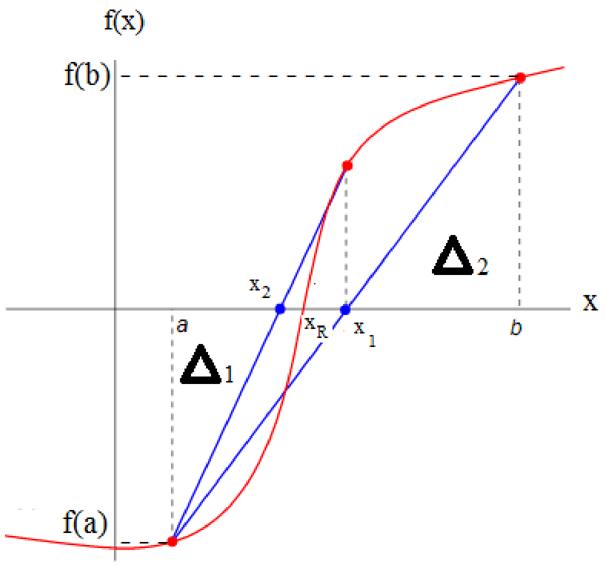


Figura 10: Método da Falsa Posição

No método da Falsa Posição (FP) é tomada como a primeira estimativa (x_1) a média ponderada entre (a;b). Observando a Figura 10, verificamos que os triângulos 1 e 2, formados pelos pontos [a,x_1,f(a)] e [x_1,b,f(b)] são semelhantes. Então podemos escrever a relação

$$\frac{f(b)}{(b-x_1)} = \frac{f(a)}{(x_1-a)}$$

Multiplicando de forma cruzada, obtemos

$$(x_1-a)f(b) = (b-x_1)f(a)$$

Isolando o valor de x_1, obtemos

$$x_1 = \frac{a*f(b)+b*f(a)}{f(b)+f(a)}$$

Mas como f(a) < 0, para que f(a)*f(b) < 0, então podemos escrever

$$x_1 = \frac{a*f(b)-b*f(a)}{f(b)-f(a)}.$$

Teste de parada

$|f(x_1)| \cong 0$. Observando a Figura 10 verificamos que $f(x_1)$ também está longe de ser aproximadamente igual a zero. Assim precisamos realizar o próximo cálculo (iteração) Aqui também procedemos a seguinte análise

$$\begin{cases} a \to f(a) \\ x_1 \to f(x_1) \to f(a) * f(x_1) < 0 \\ b \to f(b) \to f(x_0) * f(b) > 0 \end{cases}$$

Pela Figura 10 concluímos que b passa assumir o valor de x_1 a segunda iteração assume a forma

$$x_2 = \frac{a * f(x_1) - x_1 * f(a)}{f(x_1) - f(a)}$$

O método da Falsa Posição também vai gerar uma sequência convergente $x_0, x_1, x_2, ...x_n \to x_R$ onde a raiz x_n será alcançada quando

$$|f(x_n)| < \varepsilon$$

Observação importante:

A diferença ente os métodos da bisseção e da falsa posição é a forma de dividir o intervalo a cada iteração. No método da bisseção, quebra-se o intervalo [a;b] ao meio, enquanto no método da falsa posição se toma o ponto de intersecção da reta que une os pontos (a;f(a)) e (b,f(b)) com o eixo x

Exemplo 1: Encontrar uma aproximação da raiz da equação $f(x) = 3\sqrt{x} + \ln(x) - 4 = 0$, no intervalo [1;2]. Considerar $\varepsilon = 10^{-4}$ e fazer as contas com aproximação de 5 dígitos após a vírgula na calculadora.

Avaliação:

$$f(1) = 3\sqrt{1} + \ln(1) - 4 \cong -1 < 0,$$
$$f(2) = 3\sqrt{2} + \ln(2) - 4 \cong 0,935788 > 0,$$
$$f(1) * f(2) < 0.$$

$f'(x) = \dfrac{3}{2\sqrt{x}} + \dfrac{1}{x}$. A $f'(x) > 0$ no intervalo (1;2). Portanto a raiz é única

Obs: Número mínimo de iterações, caso o método usado fosse o da Bisseção (partição)

$$\frac{|b-a|}{2^n} < \varepsilon \to \frac{|2-1|}{2^n} < 10^{-4} \to 2^n = 10^4$$

$$n > \frac{\ln(10^4)}{\ln} \cong 13,29 \to n = 14 \text{ iterações no mínimo}$$

Na Tabela 5 apresentamos os cálculos para a raiz

Tabela 5. Cálculo da raiz x_n usando o método da Falsa Posição

n	a_n	b_n	x_n	$f(x_n)$	$\lvert f(x_n)\rvert$
0	1	2	1,51658	0,11094	0,11094
1	1	1,51658	1,46499	0,01295	0,01295
2	1	1,46499	1,45905	0,00152	0,00152
3	1	1,45905	1,45835	0,00017	0,00017
4	1	1,45835	1,45827	0,00002	0,00002

Exercício 2: Calcular de forma aproximada a $\sqrt{2}$ usando o método da Falsa Posição. Usar $\varepsilon = 10^{-2}$ e comparar (número de iterações) com a solução obtida pelo método da Bisseção

C) MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

Parte-se de uma aproximação inicial que denominados de x_0. Após isso, calcula-se a equação da reta tangente (por meio da **derivada primeira f´(x)**) da função nesse ponto e a interseção dela com o eixo das abscissas, considera-se como aproximação para a raiz x_1. Repetindo-se o processo, cria-se um **método iterativo** para encontrarmos a raiz da função. Na Figura11 apresentamos de forma ilustrativa e hipotética duas iterações do método de Newton-Raphson para o cálculo aproximado de uma raiz de uma função f(x) arbitrária

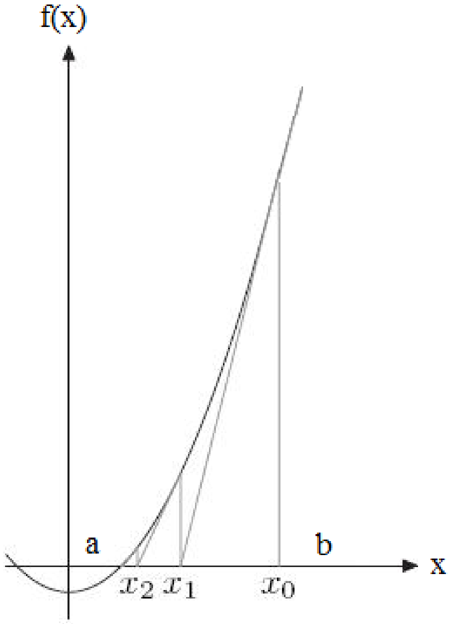


Figura 11: As duas primeiras iterações do método de Newton (Wikipédia)

Observando a Figura 11, temos que $f(a)*f(b)<0$ e $f'(x)$ não muda de sinal no intervalo [a;b]. Conclui-se então que existe uma única raiz em (a;b).

A derivada primeira $f'(x_0)$ pode ser aproximada usando a fórmula

$f'(x_0) \cong \dfrac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$. Como podemos observar na Figura 11 $f(x_1) \cong 0$, então, podemos escrever

$f'(x_0) = \dfrac{-f(x_0)}{x_1-x_0}$, após uma pequena álgebra obtemos

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Fazendo um procedimento análogo podemos obter

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

Pode-se observado que os pontos x_0 e x_1 são àqueles onde as tangentes (derivadas primeiras) a curva f(x) tocam o eixo-x.

Conclusão: O Método de Newton-Raphson também vai gerar uma sequência convergente do tipo $x_0, x_1, x_2, ...x_n \to x_R$.

Baseado nas expressões para x_0 e x_1 obtidas acima podemos por indução escrever a fórmula de Newton-Raphson para x_N na forma:

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}, \; n \geq 1$$

Observação: O Método de Newton-Raphson, quando usado de forma correta apresenta uma velocidade de convergência maior que os dois métodos anteriormente desenvolvidos mas envolve alguns cuidados em sua aplicação?

a) O aluno tem que saber fazer a f´(x) da função e essa derivada não pode ter valor igual a zero;

b) Algumas estimativas podem ficar fora do intervalo [a;b]

c) A primeira estimativa pode ser calculada pelo método da bisseção, ou seja,

$x_0 = \frac{(a+b)}{2}$. A primeira estimativa também pode ser os valores dos extremos do intevalo, por exemplo, x_0 = a ou x_0 = b.

Exemplo: Determinar, usando o método de Newton-Raphson, uma aproximação para o para a raiz da equação $f(x) = x * \ln(x) - 1 = 0$, com $\varepsilon = 10^{-3}$. Considere as contas com os números aproximados com 4 dígitos após a vírgula

Solução: A raiz da equação é a interseção das curvas

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

Na Figura 12 temos plotadas as curvas 1/x e ln(x) no intervalo de (0;5]

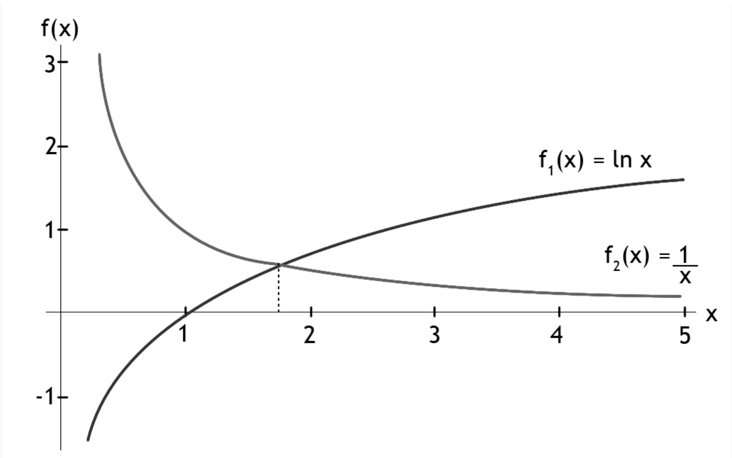


Figura 12. Interseção das curvas $f_1(x)$ = 1/x e $f_2(x)$ = ln(x)

Podemos observar qua a raiz aproximada está no intervalo [1;2]

Verificação

$$\begin{cases} f(1) = 1 * \ln(1) - 1 = -1 < 0 \\ f(2) = 2 * \ln(2) - 1 = 0,37 > 0 \\ f(1) * f(2) < 0 \end{cases}$$

$$f(x) = x * \ln(x) - 1 = 0$$

$$\begin{cases} f'(x) = \ln(x) + 1 \\ f'(1) = 1 > 0 \\ f'(2) = \ln(2) + 1 = 1,69 \end{cases}$$

Conclusão: A f´(x) não muda de sinal no intervalo (1;2), então a equação $x * \ln(x) - 1 = 0$ possui uma única raiz no intervalo (1;2).

Primeira estimativa

$$x_0 = \frac{(a+b)}{2} = \frac{(1+2)}{2} = 1,5$$

$$f(x_0) = f(1,5) = 1,5 * \ln(1,5) - 1 = -0,3918$$

$$|f(1,5)| = 0,3918 > 10^{-3}$$

$$f'(x_0) = f'(1,5) = \ln(1,5) + 1 = 1,4055$$

Primeira Iteração: x_1

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 1,5 - \left[\frac{-0,3918}{1,4055}\right] = 1,7787$$

$$f(x_1) = f(1,7787) = 1,7787 * \ln(1,7787) - 1 = 0,0243$$

$$|f(x_1) = |f(1,7787)|| = 0,0243 > 10^{-3}$$

$$10^{-3} = 0,001$$

$$f'(x_1) = f'(1,7787) = \ln(1,7787) + 1 = 1,5759$$

Segunda Iteração: x_2

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 1,7787 - \left[\frac{0,0243}{1,5759}\right] = 1,7633$$

$$f(x_2) = 1,7633 * \ln(1,7633) - 1 = 1,2093 * 10^{-4}$$

$$|f(x_2)| = |f(1,7633| = 1,2093 * 10^{-4} < 10^{-3}$$

Conclusão: O problema convergiu na segunda iteração e valor da raiz aproximada é

$$x_2 = 1,7633$$

D) MÉTODO DA SECANTE

O Método de Newton-Raphson é extremamente eficiente mas representa um grande inconveniente representado pela necessidade da obtenção da derivada primeira f´(x) da função f(x) em cada iteração do processo numérico. Ás vezes a obtenção da f´(x) envolve um grande número de operações algébricas. Vejamos os exemplos abaixo

$$f(x) = x^2 * 3^x * \cos(2x) = 0$$

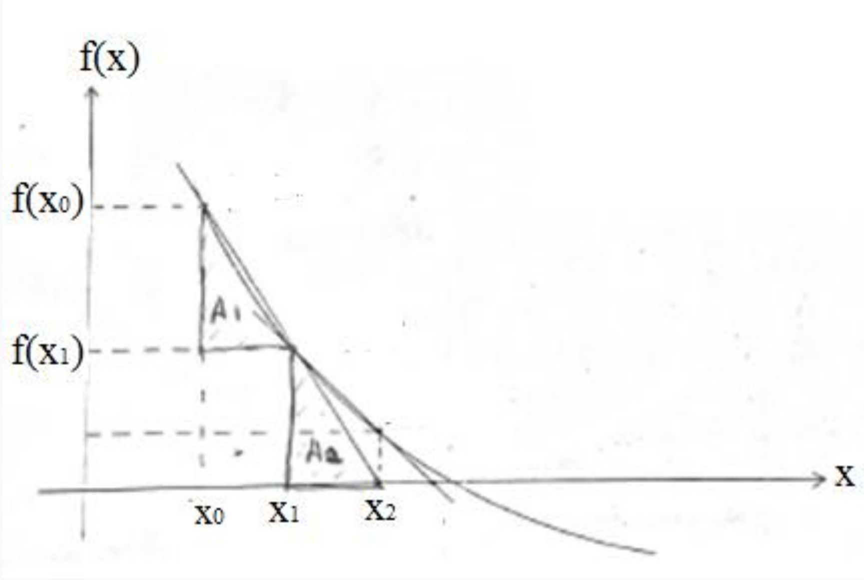
A derivada primeira da f(x) é obtida na forma

$$f'(x) = 2x * 3^x * \cos(2x) + x^2 * 3^x * \ln(3) * \cos(2x) + x^2 * 3^x * (-2) * \mathrm{sen}(2x)$$

Pode ser observado que a obtenção dessa f´(x) exige uma grande trabalho algébrico e o uso de teoremas do cálculo fundamental para a obtrenção de derivadas. Para contornarmos esse problema desenvolvemos um método que evita o cálculo de f´(x) e apresenta uma velocidade de convergência maior que os métodos numéricos da Bisseção e da Falsa Posição.

Obs. Apesar da velocidade de convergência poder ser avaliada través de cálculos específicos, para os métodos numéricos apresentados nesse curso, deixaremos que os estudantes tenham essa percepção através dos uso das metodologias, nos exercícios que serão resolvidos no decorrer do curso.

Vamos agora considerar a Figura 13



amos

Figura 13. Esquema para a obtenção do método numérico da Secante.

Início: Através dos pontos (x_0;f(x_0)) e (x_1;f(x_1)) é traçada uma reta secante e o ponto onde essa reta toca o eixo-x é a abscissa x_2 com f(x_2) = 0. Observando a Figura 13, podemos verificar que os triângulos retângulos A1 e V2 são semelhantes. Podemos, então, estabelecer a seguinte razão de semelhança

$$\frac{f(x_1)}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{x_1 - x_0}$$

Multiplicando essa expressão de forma cruzada obtemos

$$[f(x_0) - f(x_1)] * (x_2 - x_1) = f(x_1) * (x_1 - x_0)$$

Após um apequena álgebra obtemos

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1) * (x_1 - x_0)}{f(x_1) - f(x_0)}$$

Como visto na Figura 13, f(x_2) = 0, a abscissa x_2 é considerada como uma aproximação da raiz da equação f(x) = 0. Os valores de x_0 e x_1 como valores iniciais (estimativas).

O Método da Secante também vai gerar uma sequência convergente para a raiz na forma $x_0, x_1, x_2, ...x_n \to x_R$. De forma geral podemos escrever o termo de recorrência do método na forma

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1}) * (x_{n-1} - x_{n-2})}{f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}, \; n \geq 2.$$

O critério de parada adotado para o Método da Secante também tem o formato $|f(x_N)| \leq \varepsilon$

Conclusão final dos Módulos 1 e 2 para o cálculo de raízes reais para equações do tipo f(x) = 0.

Algoritmo para solução de equações do tipo f(x) = 0.

1) Primeiro Passo

a) Obtenção dos intervalos [a;b]

a.1) Teorema de Bolzano

f(a)f(b) < 0 e verificação de f´(x) não muda de sinal em (a;b) (independe do método numérico a ser usado)

a.2) Teorema 2

2) Segundo Passo

a) Escolha do método Numérico

a.1) Método da Bisseção (partição)
a.2) Método da Falsa Posição (FP)
a.3) Método de Newton-Raphson
a.4) Método da Secante

Obs: Em ambos os métodos numéricos usar como critério de para do processo iterativo

$$|f(x_n)| \leq \varepsilon$$

Exercício de verificação.

1) Calcule as raízes numéricas das seguintes equações

a) $x^3 - e^{-2x} = 0$
b) $x^2 - \text{sen}(2x) = 0$
c) $\ln(3x) - \cos(3x) = 0$

d) $\sqrt{x^2-4}-\text{sen}(x)=0$

Usando os métodos numéricos apresentados. Considerar para ambos os casos

$\varepsilon = 10^{-5}$

Obs. Os alunos deverão achar os intervalos [a;b] onde estão as raízes. Verificar qual dos métodos numéricos converge mais rápido

2) Nos casos (a-d) calcular o número mínimo de iterações do método da bisseção para achar a raiz usando o método da bisseção (aqui não é para calcular as raízes)

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