Determinação de Raízes de Funções

INF1608 – Análise Numérica

Departamento de Informática, PUC-Rio

Problema

A velocidade de um paraquedista em queda livre é expressa por:

$$v = \frac{gm}{c}\left(1 - e^{-\frac{c}{m}t}\right)$$

- onde:
  - v: velocidade (m/s)
  - g: aceleração da gravidade (m/s^2)
  - m: massa (kg)
  - c: coeficiente de arrasto (kg/s)
  - t: tempo (s)

Pergunta

- Conhecendo $g\ (= 9.8m/s)$ e $c\ (= 15kg/s)$, qual a massa m do paraquedista para se alcançar $v = 35m/s$ no tempo $t = 9s$?
  - Solução: determinar a raiz da equação

$$f(m) = v - \frac{gm}{c}\left(1 - e^{-\frac{c}{m}t}\right)$$

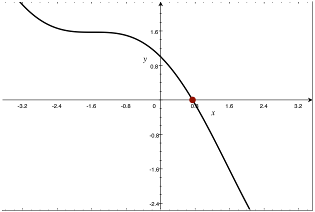
Raízes de Equações

Problema

- Dada $f(x)$, determinar r tal que $f(r) = 0$, isto é, r seja raiz da equação $f(x) = 0$

Métodos

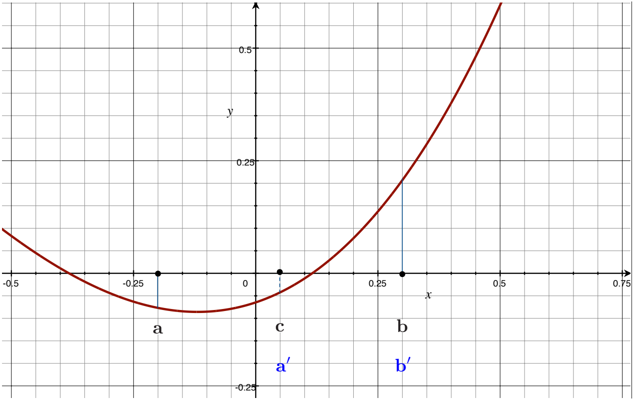
- Bisseção
- Iteração de ponto fixo
- Newton-Raphson
- Secante
- Falsa posição
- Muller
- Interpolação quadrática inversa
- Brent



Método da Bisseção

Método fechado

- A partir de um intervalo $[a, b]$ que contenha a raiz
  - Se $f(x)$ é contínua e $f(a)\,f(b) < 0$, isto é, $f(x)$ tem seu sinal invertido, então $\exists\ r \in [a, b]$



Método da Bisseção

Método iterativo

- Dados $f(x)$ e o intervalo $[a, b]$
- Estima a raiz: $c = \frac{a+b}{2}$
- Ajusta o intervalo: (reduz incerteza da raiz)
  - Se $f(a)f(c) < 0$ entao: $[a, b] \to [a, c]$
  - Senão: $[a, b] \to [c, b]$
- Até que alguma precisão seja alcançada

- Semelhante a uma busca binária
- **Método retorna o meio do intervalo como solução**

Método da Bisseção

Quando terminar a iteração? Como avaliar o erro?

Possíveis formas de **avaliação do erro**:

- Avaliação regressiva (*backward evaluation*)
  - Erro avaliado pela definição do problema (entrada)

$$|f(c)| \approx 0$$

    - Sempre possível, nem sempre preciso
    - Erro na direção "vertical"

- Avaliação progressiva (*forward evaluation*)
  - Erro avaliado pela solução do problema (saída)

$$|r - c| \approx 0$$

    - Sempre preciso, quase nunca possível
    - Erro na direção "horizontal"
    - Requer valor de r

Método da Bisseção

Como avaliar erro progressivo $|r - c|$ para o método da Bisseção?
é possível? (não conhecemos o valor de r)

Método da Bisseção

Como avaliar erro progressivo $|r - c|$ para o método da Bisseção? é possível? (não conhecemos o valor de r)

- No caso do Método da Bisseção, podemos avaliar um limite superior de erro:

$$|r - c| < \frac{b - a}{2}$$

  - Se $r \approx a$ ou $r \approx b$, $|r - c| \approx \frac{b-a}{2}$
  - Esta é uma vantagem do Método da Bisseção, não encontrada na maioria dos método numéricos

Avaliação de erro relativo na bisseção (e maioria dos métodos):

$$\frac{|c^{i-1} - c^i|}{|c^i|}$$

- iteração i

Método da Bisseção

Algoritmo com controle de erro progressivo ϵ:

- Dados $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$:

$$\textbf{while } \frac{b-a}{2} > \epsilon$$

$$c = \frac{a+b}{2}$$

$$\textbf{if } f(a)f(c) < 0$$

$$b = c$$

$$\textbf{else}$$

$$a = c$$

$$\textbf{return } \frac{a+b}{2}$$

Método da Bisseção

Adicionando avaliação regressiva...

- Dados $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$:

$$
\begin{aligned}
&\textbf{while } \frac{b-a}{2} > \epsilon \\
&\quad c = \frac{a+b}{2} \\
&\quad \textbf{if } f(c) \approx 0 \\
&\quad\quad \textbf{break} \\
&\quad \textbf{if } f(a)f(c) < 0 \\
&\quad\quad b = c \\
&\quad \textbf{else} \\
&\quad\quad a = c \\
&\textbf{return } \frac{a+b}{2}
\end{aligned}
$$

- **Convergência garantida**
  - Uma das raízes existentes em $[a, b]$ será capturada

Método da Bisseção

Desempenho

- Medido pelo número de avaliações de $f(x)$
  - Avaliação de $f(x)$ pode ser computacionalmente custosa

Quantas avaliações de $f(x)$ são necessárias por iteração?

$$\longrightarrow 1$$

(a implementação não pode avaliar mais)

1 avaliação para cada $f(c)$ + 2 avaliações iniciais para $f(a)$ e $f(b)$

- $f(c)$ atualiza valor de $f(a)$ ou $f(b)$ em cada iteração
- Remove necessidade de reavaliar $f(a)$ e $f(b)$

Número total de avaliações de $f(x)$: $n + 2$ (para n iterações)

Método da Bisseção: Precisão da Solução

Considerando n iterações

$$Erro = |c - r| < \frac{b-a}{2^{n+1}}$$

- Note:

n	$Erro$
0	$\lvert c-r \rvert < \frac{b-a}{2}$
1	$\lvert c-r \rvert < \frac{b-a}{4}$
2	$\lvert c-r \rvert < \frac{b-a}{8}$
...	...

Logo, a cada iteração:

- Faz-se 1 avaliação de $f(x)$
- Reduz-se o erro à metade

$\longrightarrow$ **Convergência linear** $\longrightarrow \dfrac{e_{i+1}}{e_i} = \dfrac{1}{2} = k < 1$

Método da Bisseção

Como predizer o número de iterações necessárias?

- Exemplo: determinar $r \in [0, 1]$ com precisão de 6 casas

$$erro\ |r - c| < \frac{b - a}{2^{n+1}} = \frac{1}{2^{n+1}}$$

Então:

$$\frac{1}{2^{n+1}} < 0.5 \times 10^{-6}$$

$$n \approx 19.93$$

Logo, precisamos de **20 iterações**

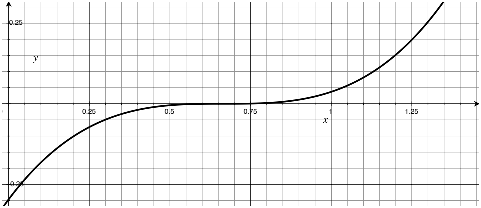
Método da Bisseção

Erros regressivo *vs* progressivo

- Em alguns casos, a falta de precisão para avaliar o erro regressivo impede a obtenção da solução dentro da precisão desejada

Exemplo:

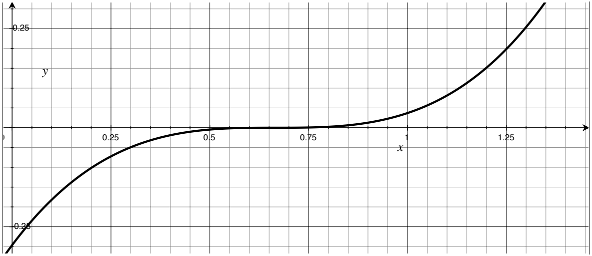
$$f(x) = x^3 - 2x^2 + \frac{4}{3}x - \frac{8}{27}$$



Método da Bisseção

Exemplo:

$$f(x) = x^3 - 2x^2 + \frac{4}{3}x - \frac{8}{27}, \quad \text{com solução} \quad r = \frac{2}{3}$$



Solução do Método da Bisseção é limitada a 10^{-5} de precisão

- Pois $f(0.6666641) = 0$ na precisão *double*

Obs:

- No caso, a raiz tem multiplicidade 3, situação que perdemos precisão, mas isso também pode ocorrer com multiplicidade 1.

Método da Bisseção

Método intervalar: $r \in [a, b]$

- Vantagem: convergência garantida
- Desvantagem: necessidade de conhecer $[a, b]$

Determinação de intervalos iniciais

- Busca incremental: δ

$$x_{i+1} = x_i + \delta$$

  - até encontrar $f(x_i)f(x_{i+1}) < 0$
- Qual δ usar?
  - Questão em aberto: eficiência *vs* eficácia
- Se possível, usar $f'(a)$ e $f'(b)$:
  - Troca de sinal indica mínimo ou máximo da função
  - Intervalo deve ser melhor inspecionado

Métodos Abertos

Métodos abertos

- Não exigem $r \in [a, b]$
- Partem de uma **estimativa inicial**
  - Quanto mais perto de r, melhor
  - Menos restritivo que intervalar
- Podem não convergir

Iteração de Ponto Fixo

Exemplo

- Avaliação contínua de $\cos x$
- Na forma $x = \cos x$, com $x_0 = 1$

Iteração de Ponto Fixo

Exemplo

- Avaliação contínua de $\cos x$
- Na forma $x = \cos x$, com $x_0 = 1$

Resultado: ≈ 0.739

Logo, $x = \cos x$ para $x = 0.739...$

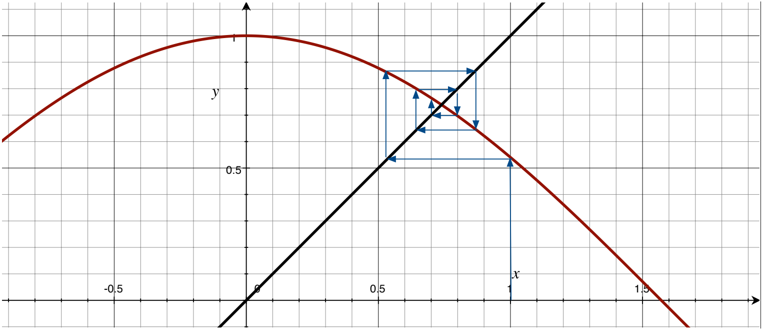
- Diz-se que 0.739... é **ponto fixo** da função $f(x) = \cos x$

$x_0 = 1$
0.54030230586814
0.85755321584639
0.65428979049778
0.79348035874257
0.70136877362276
0.76395968290065
0.72210242502671
0.75041776176376
0.73140404242251
0.74423735490056
0.73560474043635
0.74142508661011
0.73750689051324
0.74014733556788
0.73836920412232
0.73956720221226
0.73876031987421

Iteração de Ponto Fixo

Graficamente (diagrama de cobweb)

- $f(x) = x$
- $g(x) = \cos(x)$

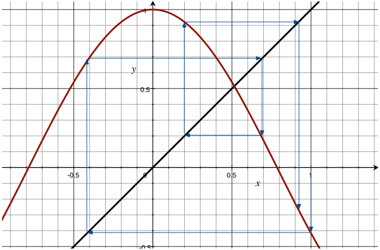


$$|f'(r)| < 1 \Rightarrow \text{há convergência}$$

Iteração de Ponto Fixo

Graficamente

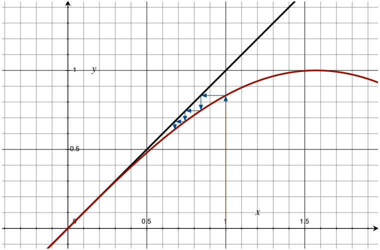
- $f(x) = \cos(2x)$



$|f'(r)| > 1$

=> não há convergência

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



$|f'(r)| = 1$

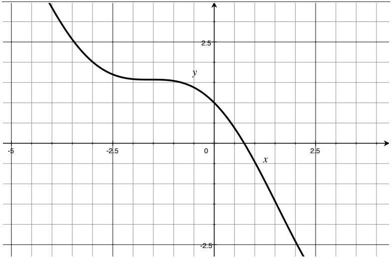
=> limite da convergência

Iteração de Ponto Fixo

Método por iteração de ponto fixo

- Quando há convergência, podemos usar para determinar raízes

Exemplo: $f(x) = cos(x) - x$



$$cos(x) - x = 0$$
$$x = cos(x)$$

- Logo: $r = 0.739$

Iteração de Ponto Fixo

Método por iteração de ponto fixo

- Transformação: $f(x) \Rightarrow g(x) - x$
  - Achar ponto fixo de $g(x)$
- Algoritmo
  - Dado x_0

$$
\begin{aligned}
& x = x_0 \\
& \textbf{while } |g(x) - x| > \epsilon \\
& \qquad x = g(x) \\
& \textbf{return } x
\end{aligned}
$$

- Apenas avaliação regressiva é possível

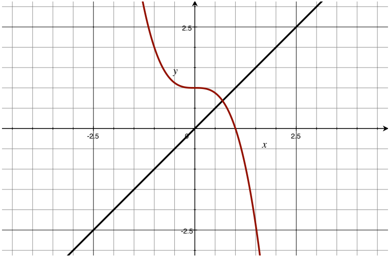
Iteração de Ponto Fixo

Exemplo: $x^3 + x = 1$, transformando para diferentes $x = g(x)$

Iteração de Ponto Fixo

Exemplo: $x^3 + x = 1$, transformando para diferentes $x = g(x)$

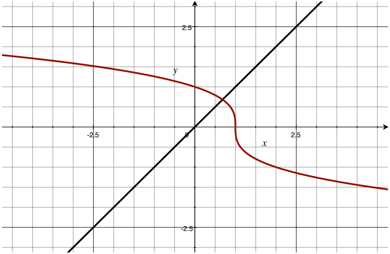
1. $x = 1 - x^3$
   - Não converge



Iteração de Ponto Fixo

Exemplo: $x^3 + x = 1$, transformando para diferentes $x = g(x)$

1. $x = 1 - x^3$
   - Não converge
2. $x = \sqrt[3]{1 - x}$
   - Converge lentamente



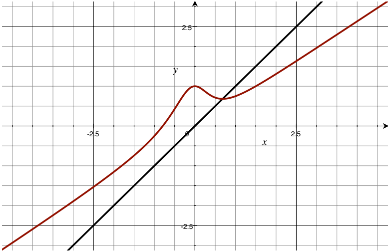
Iteração de Ponto Fixo

Exemplo: $x^3 + x = 1$, transformando para diferentes $x = g(x)$

1. $x = 1 - x^3$
   - Não converge
2. $x = \sqrt[3]{1 - x}$
   - Converge lentamente
3. Somando $2x^3$ nos dois lados:

$$
\begin{aligned}
3x^3 + x &= 2x^3 + 1 \\
(3x^2 + 1)x &= 2x^3 + 1 \\
x &= \frac{2x^3 + 1}{3x^2 + 1}
\end{aligned}
$$

   - Converge rapidamente

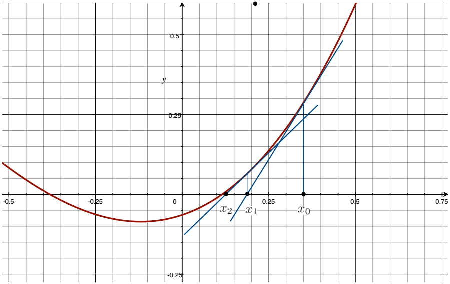


Método de Newton-Raphson

Isaac Newton & Joseph Raphson

Método aberto

- Estimativa inicial x_0
- Assume ser possível avaliação de $f'(x)$



Equação da reta tangente:

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$$

Método de Newton-Raphson

Equação da reta tangente:

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$$

Ponto de interseção da reta com eixo x:

$$\begin{aligned} y = 0 \therefore f'(x_0)(x - x_0) &= -f(x_0) \\ x - x_0 &= -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \\ x &= x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \end{aligned}$$

Método de Newton-Raphson:

$$\begin{aligned} x_0 &= \text{estimativa inicial} \\ x_{i+1} &= x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i = 1, 2, 3, ... \end{aligned}$$

Análise de Convergência

Convergência linear:

$$\frac{e_{i+1}}{e_i} = k, \text{ onde: } k < 1$$

- Método da bisseção

$$k = \frac{1}{2}$$

- Método por iteração de ponto fixo

$$k = |g'(r)|$$

- Newton-Raphson: convergência quadrática

$$M = \lim_{i \to \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} < \infty$$

Método de Newton-Raphson

Análise do erro

- O método de NR pode ser deduzido considerando 2 termos da série de Taylor

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$

  - Na interseção com o eixo x, $f(x_{i+1}) = 0$. Então:

$$0 = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$
$$\therefore x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Método de Newton-Raphson

Análise do erro

- Se a série inteira fosse usada, x_{i+1} seria r:

$$0 = f(x_i) + f'(x_i)(r - x_i) + \frac{f''(c)}{2}(r - x_i)^2, \quad c \in [x_i, r]$$

- Logo: $$-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = r - x_i + \frac{(r - x_i)^2}{2}\frac{f''(c)}{f'(x_i)}$$

$$x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} - r = \frac{(r - x_i)^2}{2}\frac{f''(c)}{f'(x_i)}$$

- Tomando um passo de NR com $e_i = x_i - r$:

$$x_{i+1} - r = e_i^2 \frac{f''(c)}{2f'(x_i)}$$

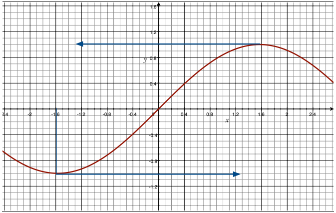
$$e_{i+1} = e_i^2 \left| \frac{f''(c)}{2f'(x_i)} \right|$$

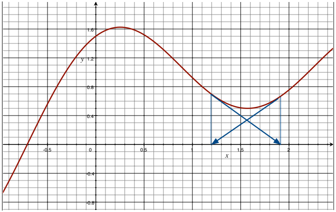
- Logo, NR pode ter convergência quadrática

$$\lim_{i \to \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = \frac{f''(c)}{2f'(x_i)}$$

Método de Newton-Raphson

Exemplos de não convergência





Método de Newton-Raphson

Exemplos de convergência linear

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

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i^2}{2x_i}$$

$$x_{i+1} = \frac{x_i}{2}$$

Logo:

$$e_{i+1} = \frac{e_i}{2}$$

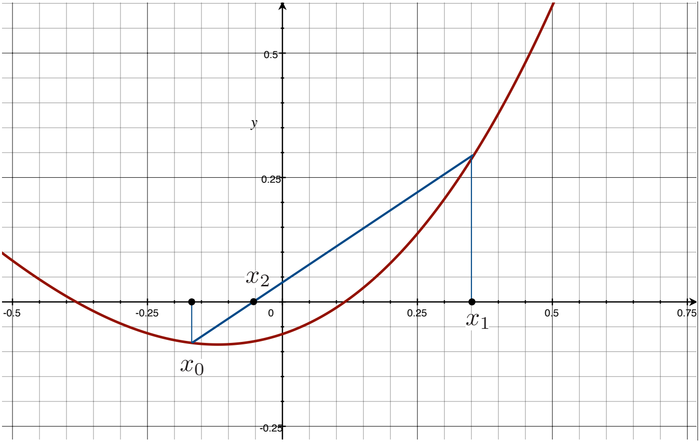
Importante

- Uma implementação de NR deve sempre limitar o número de iterações, pois pode não convergir

Método da Secante

Usa a reta secante para aproximar $f'(x)$

- Preserva características do Método de Newton-Raphson
- Usa 2 estimativas iniciais



Método da Secante

Avalia $f'(x)$ por diferenças finitas

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

Substituindo na fórmula de NR:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$
$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$$

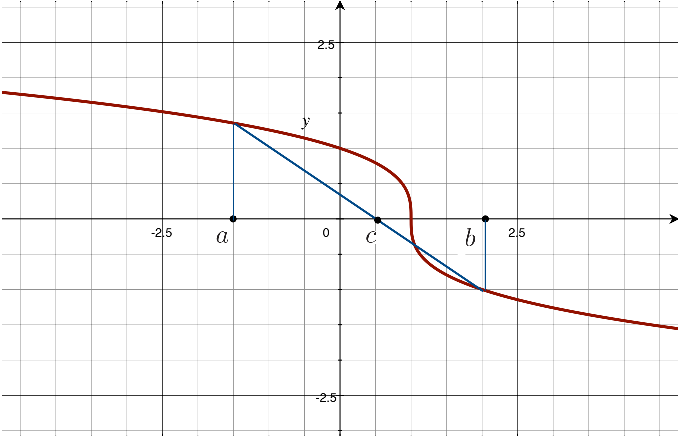
Importante

- Método **aberto**, pode não convergir

Método da Falsa Posição

Combina Método da **Bisseção** com Método da **Secante**

- Método intervalar: $f(a)f(b) < 0$
- Tende a convergir mais rápido que Bisseção



Método da Falsa Posição

Bisseção:
$$c = \frac{a+b}{2}$$

Falsa Posição:

- Por semelhança de triângulo

$$\frac{c-a}{b-a} = \frac{f(a)}{f(a)-f(b)}$$
$$c = a + \frac{f(a)(b-a)}{f(a)-f(b)}$$
$$c = \frac{a\,f(a) - a\,f(b) + b\,f(a) - a\,f(a)}{f(a)-f(b)}$$

- Logo:

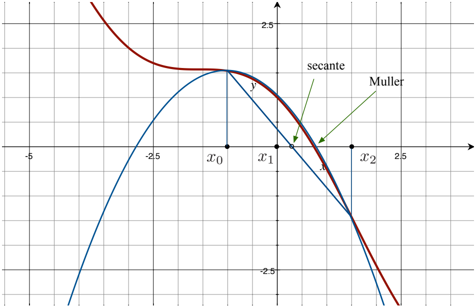
$$c = \frac{b\,f(a) - a\,f(b)}{f(a)-f(b)},$$ equivalente a secante

- **Implementação igual a Bisseção**

Método de Muller

Método aberto (generaliza do método da secante com parábolas)

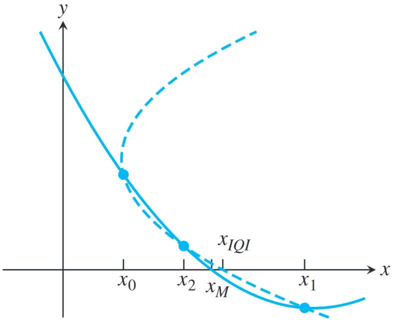
- Parte de 3 estimativas iniciais: x_0, x_1, x_2
- Determina parábola interpolante: $p(x)$
- Raízes da parábola interceptam o eixo x
- Adota como x_3 a raiz mais próxima de x_2
- Cicla as estimativas, descartando a mais antiga (x_0)



Método da Interpolação Quadrática Inversa

Método aberto

- Parte de 3 estimativas iniciais: x_0, x_1, x_2
- Determina parábola interpolante inversa: $p(y)$
- Adota interseção de **y** com eixo x: $p(0) = c$
- Cicla as estimativas, descartando a mais antiga (x_0)



Método de Brent

Método intervalar com convergência rápida

- Função `fzero` do MatLab usa uma versão desse método

Dados $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$

1. Calcular nova estimativa x considerando os métodos...
   - Bisseção com $[a, b] \rightarrow c = \frac{a+b}{2}$
     - Garante convergência linear
   - IQI com $[a,\ b,\ c] \rightarrow c_{IQI}$
     - Substitui c por c_{IQI} se erro regressivo diminui: $f(c_{IQI}) < f(c)$
     - Logo, intervalo de busca diminui para a próxima iteração
   - Se IQI falhar, avalia Método da Secante com $[a, b] \rightarrow c_s$
     - Substituindo c caso o erro diminua
2. Atualizar novo intervalo $[a, b]$
   - $f(a)f(c) < 0,\ b = c$
   - Senão, $a = c$
   - c deve estar dentro do intervalo $[a, b]$

Exercício Proposto

Considere a equação $x^3 - 2x - 2 = 0$.
Aplique duas iterações dos métodos:

- Bisseção com $[a, b] = [1, 2]$
- Newton-Raphson com $x_0 = 2$
- Secante com $x_0 = 1$ e $x_1 = 2$
- Falsa Posição com $[a, b] = [1, 2]$