Unidade 2:
Zeros de funções

Métodos Numéricos para encontrar raízes (zeros) de funções

- Equações precisam ser resolvidas em todas as áreas da ciência e da engenharia
- Um dos problemas que ocorrem mais frequentemente em trabalhos científicos é calcular as raízes de equações da forma:

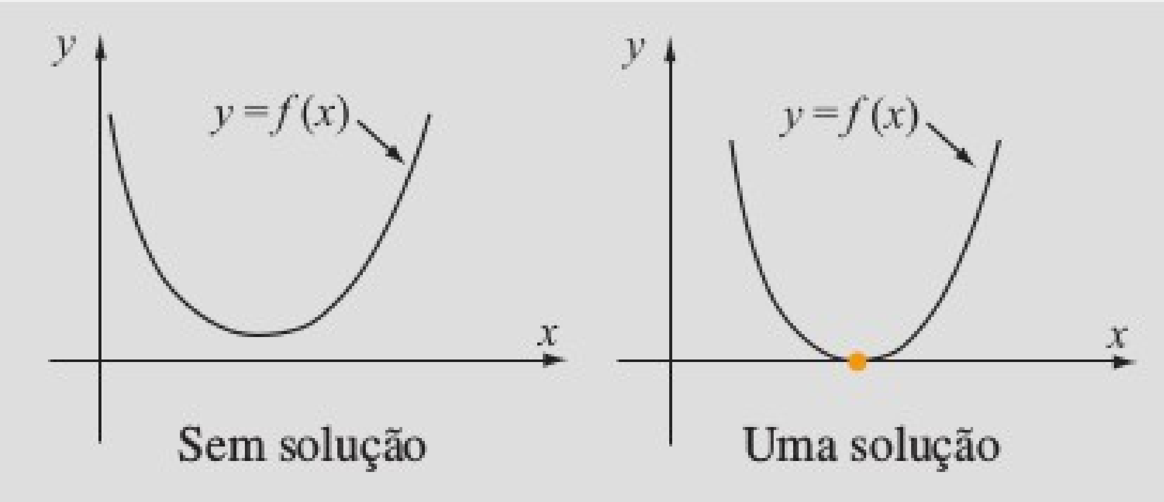
$$\mathbf{f(x) = 0}$$

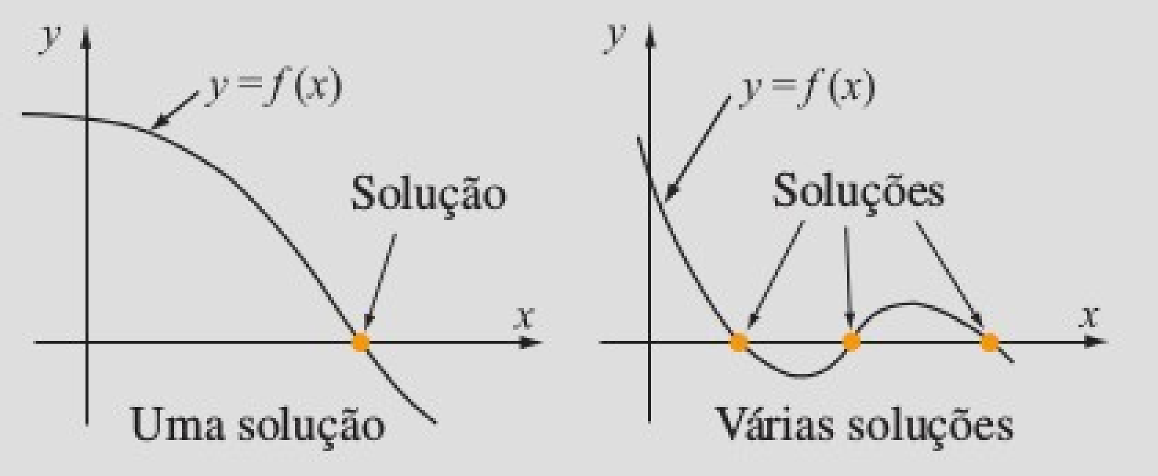
  onde **f(x)** pode ser um polinômio em x ou uma outra função

- A solução dessa equação (também chamada de raiz) é um valor numérico de **x** que satisfaz à equação

Métodos Numéricos para encontrar raízes (zeros) de funções

- Graficamente a solução é o ponto onde a função **f(x)** cruza ou toca o eixo **x**
- Uma equação pode
  - não ter solução
  - ter uma raiz
  - ter várias raízes





Métodos Numéricos para encontrar raízes (zeros) de funções

- Quando a equação é simples, o valor de **x** pode ser determinado analiticamente
- Esse é o caso quando se escreve **x** explicitamente após a aplicação de operações matemáticas, ou quando uma fórmula conhecida (como a fórmula usada na resolução de equações quadráticas) pode ser usada para determinar o valor exato de x
- Os valores que anulam **f(x)** podem ser reais ou complexas
- Estaremos interessados somente nos raízes reais de **f(x)**

Métodos Numéricos para encontrar raízes (zeros) de funções

- Em muitas situações é impossível determinar analiticamente a raiz de uma equação
- Através de **técnicas numéricas**, é possível obter uma solução aproximada, em alguns casos tão próxima da solução exata, quanto se deseje

Abordagens usadas na solução numérica de equações

- O processo de solução numérica de uma equação é diferente do procedimento usado na obtenção de uma solução analítica.
- Uma solução analítica é obtida com a dedução de uma expressão que leva a um valor numérico exato.
- Uma solução numérica é obtida em um processo que começa com a determinação de uma solução aproximada e é seguido de um procedimento numérico no qual se determina uma solução mais precisa.

Abordagens usadas na solução numérica de equações

- A ideia central destes métodos numéricos é partir de uma aproximação inicial para a raiz (um intervalo onde imaginamos a raiz estar contida) e em seguida refinar essa aproximação através de um processo iterativo.

Abordagens usadas na solução numérica de equações

- Por isso, os métodos são realizados em duas etapas:

  1. Localização ou isolamento das raízes, que consiste em obter um intervalo que contém a raiz

  2. Refinamento, que consiste em melhorar as aproximações iniciais (obtidas no passo 1) sucessivamente até obter uma aproximação para a raiz dentro de uma precisão desejada.

Abordagens usadas na solução numérica de equações

- A solução numérica inicial de uma equação na forma

$$f(x) = 0$$

pode ser estimada com o traçado de um gráfico **f(x)** versus **x** e com a verificação do ponto onde o gráfico cruza o eixo **x**

- **Teorema:**

Seja **f(x)** uma função contínua num intervalo **[a,b].**

Se **f(a)*f(b) < 0** então existe pelo menos um ponto **x = ξ (csi)** entre **a** e **b** que é zero de **f(x)**

Pois **+*+** → **+**, **-*-** → **+**, **-*+** → **-**

- Se **f'(x)** existir e preservar sinal em **(a, b)**, então este intervalo contém um único zero de **f(x)**

Abordagens usadas na solução numérica de equações

- Também é possível escrever e executar um programa de computador que procure um domínio que contenha uma solução
- Tal programa busca uma solução com a avaliação de **f(x)** em diferentes valores de **x**
- Ele começa em um valor de **x** e então muda esse valor em pequenos incrementos
- Uma mudança no sinal de **f(x)** indica a existência de uma raiz dentro do último incremento.

Abordagens usadas na solução numérica de equações

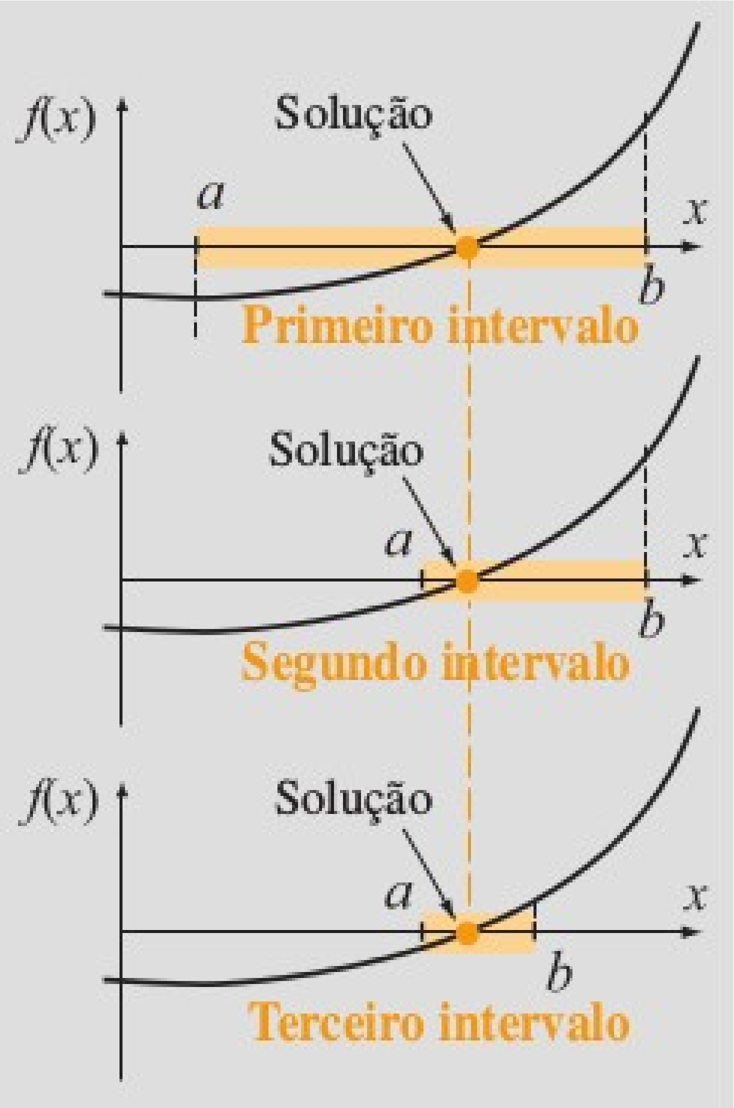
- Em muitos casos, quando a equação que se resolve está relacionada a alguma aplicação na ciência ou na engenharia, a faixa de valores de **x** que inclui a solução pode ser estimada e usada no traçado do gráfico inicial de **f(x)**, ou na busca numérica de um domínio pequeno que contenha uma solução.
- Quando uma equação tem mais de uma raiz, a solução numérica indica uma raiz de cada vez.

Abordagens usadas na solução numérica de equações

- Os métodos numéricos usados para resolver equações podem ser divididos em dois grupos:
  - métodos de confinamento
  - métodos abertos

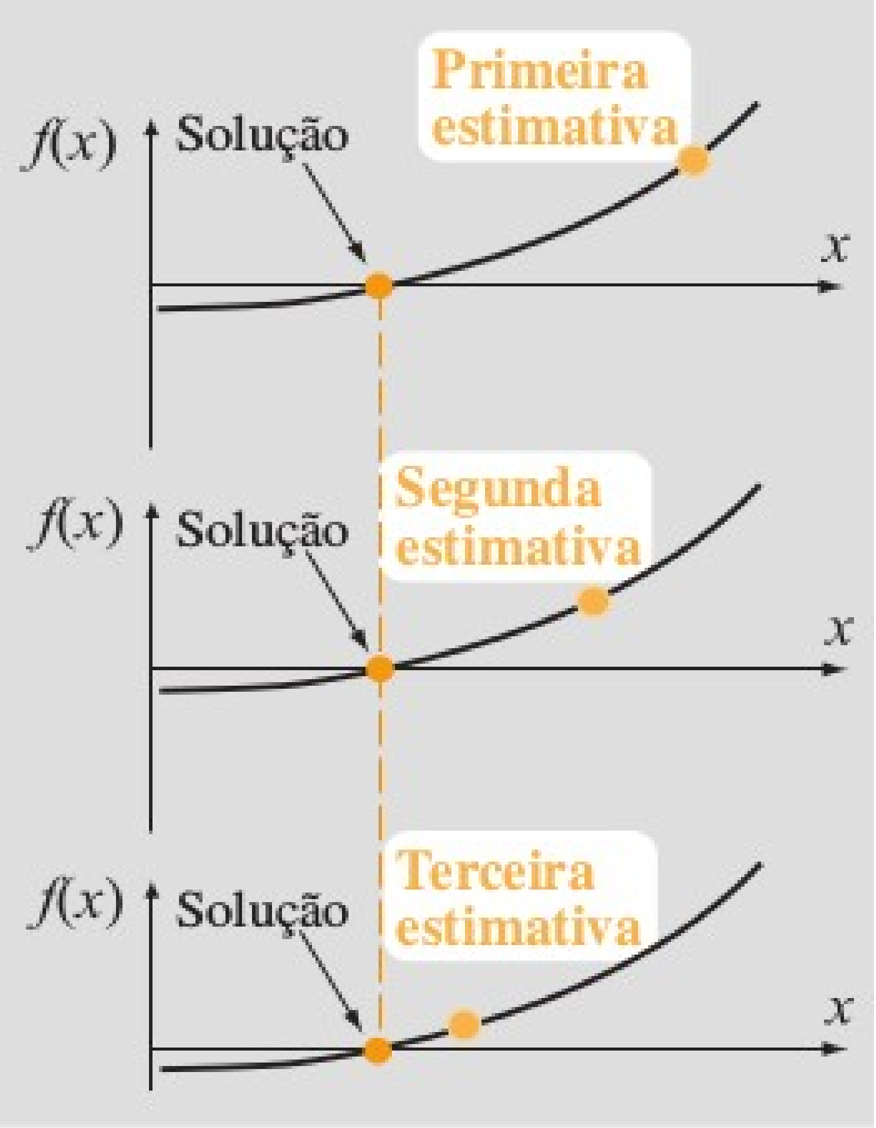
Abordagens usadas na solução numérica de equações

- Nos **métodos de confinamento,** identifica-se um intervalo que inclui a solução.
- Por definição, os pontos finais do intervalo são os limites superior e inferior da solução.
- Então, usando um esquema numérico, o tamanho do intervalo é reduzido sucessivamente até que a distância entre os pontos finais seja menor que a precisão desejada para a solução.



Abordagens usadas na solução numérica de equações

- Nos **métodos abertos**, assume-se uma estimativa inicial para a solução (um ponto).
- O valor dessa tentativa inicial para a solução deve ser próximo à solução real.
- Então, usando um esquema numérico, valores melhores (mais precisos) são calculados para a solução.



Abordagens usadas na solução numérica de equações

- Métodos de confinamento sempre convergem para uma solução.
- Métodos abertos são usualmente mais eficientes, mas às vezes podem não levar à solução.
- Já que métodos numéricos não são exatos, é necessário estimar os erros envolvidos.

Estimação de erros em soluções numéricas

- Como soluções numéricas não são exatas, algum critério deve ser aplicado para determinar se uma solução estimada é suficientemente precisa.
- Várias medidas podem ser usadas para estimar a precisão de uma solução aproximada.
- A escolha de uma dessas medidas depende da aplicação em questão e fica a cargo de quem resolve a equação.
- Seja $\mathbf{x_{TS}}$ a solução verdadeira (exata) tal que $\mathbf{f(x_{TS}) = 0}$, e seja $\mathbf{x_{NS}}$ uma solução numérica aproximada tal que $\mathbf{f(x_{NS}) = \varepsilon}$**,** onde $\boldsymbol{\varepsilon}$ (épsilon) é um número pequeno.
- Quatro medidas podem ser consideradas para se estimar o erro.

Estimação de erros em soluções numéricas

Erro real

- O erro real é a diferença entre a solução exata, $\mathbf{x_{TS}}$, e a solução numérica, $\mathbf{x_{NS}}$:

$$\boldsymbol{ErroReal = x_{TS} - x_{NS}}$$

- Infelizmente, o erro real não pode ser calculado porque geralmente a solução exata não é conhecida.

Estimação de erros em soluções numéricas

Tolerância em f(x)

- Em vez de considerar o erro na solução, é possível considerar o desvio de **f(x_{NS})** em relação a zero

  (o valor de **f(x)** no ponto **x_{TS}** é obviamente zero)

- A tolerância em **f(x)** é definida como o valor absoluto da diferença entre **f(x_{TS})** e **f(x_{NS})**:

  $$ToleranciaEm\_f = |f(x_{TS}) - f(x_{NS})| = |0 - \varepsilon| = |\varepsilon|$$

- A tolerância em **f(x)** é o valor absoluto da função em **x_{NS}**

Estimação de erros em soluções numéricas

Tolerância na solução

- A tolerância é a máxima quantidade na qual a solução exata pode desviar de uma solução numérica aproximada.
- A tolerância é útil na estimativa do erro quando métodos de confinamento são usados na determinação da solução numérica.
- Nesse caso, se é sabido que a solução está contida no domínio **[a, b]**, pode-se assumir que a solução numérica seja o ponto central desse intervalo:

$$x_{ns} = \frac{a+b}{2}$$

mais ou menos uma tolerância que é igual à metade da distância entre **a** e **b**:

$$Tolerância = \left| \frac{b-a}{2} \right|$$

Estimação de erros em soluções numéricas

Erro relativo

- Se $\mathbf{x}_{NS}$ é uma solução numérica estimada, então o erro relativo real é dado por:

$$ErroRelativoReal = \left| \frac{x_{TS} - x_{NS}}{x_{TS}} \right|$$

- Esse erro relativo real não pode ser calculado, já que a solução $\mathbf{x}_{TS}$ não é conhecida.
- No entanto, é possível calcular o erro relativo estimado quando se tem duas estimativas numéricas para a solução.

Estimação de erros em soluções numéricas

Erro relativo

- Esse é o caso quando soluções numéricas são calculadas iterativamente, onde em cada nova iteração se obtém uma solução mais precisa.
- Se é $\mathbf{x}_{ns}^{(n)}$ a solução numérica estimada na última iteração e $\mathbf{x}_{ns}^{(n-1)}$ a solução estimada na penúltima iteração, então o erro relativo estimado pode ser definido por:

$$ErroRelativoEstimado=\left|\frac{x_{NS}^{(n)}-x_{NS}^{(n-1)}}{x_{NS}^{(n-1)}}\right|$$

Estimação de erros em soluções numéricas

Erro relativo

Quando as soluções numéricas estimadas se aproximam da solução exata prevê-se que a diferença

$$\mathbf{x_{ns}^{(n)} - x_{ns}^{(n-1)}}$$

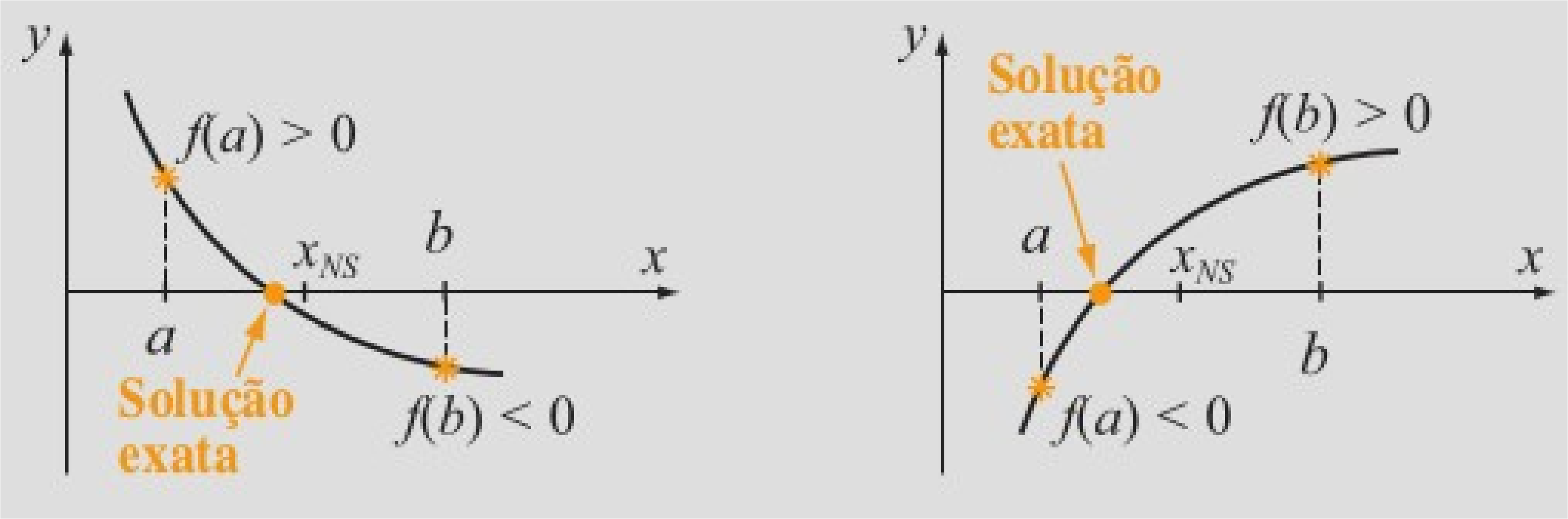
seja pequena em comparação com o valor de $\mathbf{x_{ns}^{(n)}}$ e o erro relativo estimado se torna aproximadamente igual ao valor de erro real relativo.

MÉTODO DA BISSEÇÃO

- O método da bisseção é um método de confinamento usado para se obter a solução de uma equação na forma **f(x) = 0** quando se sabe que dentro de um dado intervalo **[a, b]:**
  - **f(x)** é contínua
  - a equação possui uma solução
- Quando esse é o caso, **f(x)** tem sinais opostos nos pontos finais do intervalo.

MÉTODO DA BISSEÇÃO

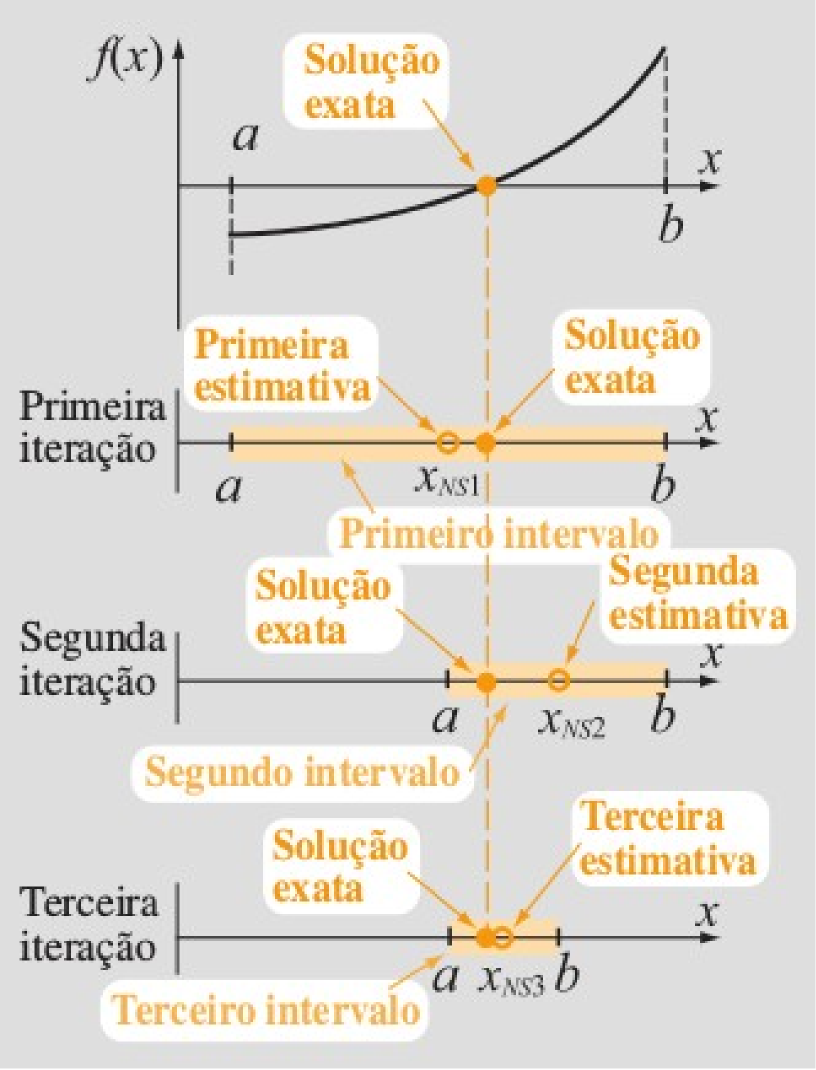
- Se f(x) é contínua e tem uma solução entre os pontos **x = a** e **x = b**, então ou **f(a) > 0** e **f(b) < 0** ou **f(a) < 0** e **f(b) > 0**
- Em outras palavras, se há uma solução entre **x = a** e **x = b**, então **f(a) f(b) < 0**
- Solução de **f(x) = 0** entre **x = a** e **x = b**



MÉTODO DA BISSEÇÃO

- O processo de solução começa com a determinação dos pontos **a** e **b** que definem um intervalo onde existe uma solução.
- Tal intervalo é encontrado ou com o traçado de um gráfico de **f(x)** ou com o exame da função buscando uma mudança de sinal.
- O ponto central do intervalo, $\mathbf{x}_{\mathbf{NS1}}$, é então tomado como sendo a **primeira estimativa da solução numérica**.
- A solução exata está contida ou na seção entre **a** e $\mathbf{x}_{\mathbf{NS1}}$ ou na seção entre os pontos $\mathbf{x}_{\mathbf{NS1}}$ e **b**
- Se a solução numérica não for suficientemente precisa, define-se um novo intervalo que contenha a solução exata, e seu ponto central é escolhido como a nova (segunda) estimativa da solução numérica.
- O processo continua até que a solução numérica seja suficientemente precisa de acordo com o critério selecionado.

MÉTODO DA BISSEÇÃO



Algoritmo para o método da bisseção

1. Escolha o primeiro intervalo encontrando os pontos **a** e **b** entre os quais existe uma solução. Isso significa que **f(a)** e **f(b)** têm sinais diferentes, de forma que **f(a)f(b) < 0**

Os pontos podem ser determinados a partir de um gráfico de **f(x)** *versus* **x**.

2. Calcule a primeira estimativa da solução numérica $\mathbf{x_{NS1}}$ usando:

$$x_{NS1} = \frac{(a+b)}{2}$$

Algoritmo para o método da bisseção

3. Determine se a solução exata está entre **a** e $\mathbf{x_{NS1}}$, ou entre $\mathbf{x_{NS1}}$ e **b**

Isso é feito com a verificação do sinal do produto $\mathbf{f(a) \cdot f(x_{NS1})}$:

- Se $\mathbf{f(a) \cdot f(x_{NS1}) < 0}$, a solução exata está entre **a** e $\mathbf{x_{NS1}}$
- Se $\mathbf{f(a) \cdot f(x_{NS1}) > 0}$, a solução exata está entre $\mathbf{x_{NS1}}$ e **b**

Algoritmo para o método da bisseção

4. Selecione o subintervalo que contém a solução exata (**a** até $\mathbf{x_{NS1}}$, ou $\mathbf{x_{NS1}}$ até **b**) como o novo intervalo **[a, b]** e volte para o **passo 2**.

Os passos **2** a **4** são repetidos até que a tolerância especificada seja satisfeita ou um determinado limite de erro seja atingido.

Quando o processo da bisseção deve ser interrompido?

- Idealmente, o processo da bisseção deve ser interrompido com a obtenção da solução exata.
- Isso significa que o valor de $\mathbf{x_{NS}}$ deve ser tal que $\mathbf{f(x_{NS}) = 0}$
- Na realidade, entretanto, a solução exata em geral não pode ser obtida computacionalmente.
- A escolha do critério de interrupção pode depender do problema a ser resolvido.

Quando o processo da bisseção deve ser interrompido?

- Na prática, portanto, o processo deve ser interrompido quando o erro estimado for menor que algum valor predeterminado.
- Nos nossos exemplos como **critério de parada para método de bisseção** vamos usar o valor da tolerância:

$$Tolerância = \left| \frac{b-a}{2} \right|$$

Notas adicionais a respeito do método da bisseção

- O método sempre converge para uma resposta, desde que uma raiz esteja contida no intervalo inicial **[a, b]**
- O método pode falhar quando a função é tangente ao eixo **x**, não o cruzando em **f(x) = 0**
- A convergência do método é lenta em comparação com outros métodos

Notas adicionais a respeito do método da bisseção

$$k > \frac{\log(b_0 - a_0) - \log(\varepsilon)}{\log(2)}$$

- Se **k** satisfaz essa relação, ao final da iteração **k** teremos o intervalo **[a, b]** que contém a raiz com a precisão **ε** desejada.
- Por exemplo, se desejamos encontrar o zero da função que está no intervalo **[2, 3]** com a precisão $\mathbf{10^{-2}}$ o número mínimo de iterações é definido da seguinte forma:

$$k > \frac{\log(3-2) - \log(10^{-2})}{\log(2)} = \frac{\log(1) + 2 * \log(10)}{\log(2)} = \frac{2}{0{,}3010} \simeq 6{,}64 \Rightarrow k = 7$$

MÉTODO DA BISSEÇÃO

- **Exemplo 1:**

  Calcular a raiz positiva da equação

  $f(x) = x^2 - 3$, com **$\varepsilon <= 0{,}01$**

- **Exemplo 2:**

  Calcular a raiz da equação

  $f(x) = x^3 - 10$, com **$\varepsilon <= 0{,}05$**

MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO

- O **método da falsa posição** (também chamado de método ***regula falsi*** ou de interpolação linear) é um método de confinamento usado para se obter a solução de uma equação na forma **f(x) = 0** quando se sabe que, dentro de um dado intervalo **[a, b]**, **f(x)** é contínua e a equação possui uma solução.

MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO

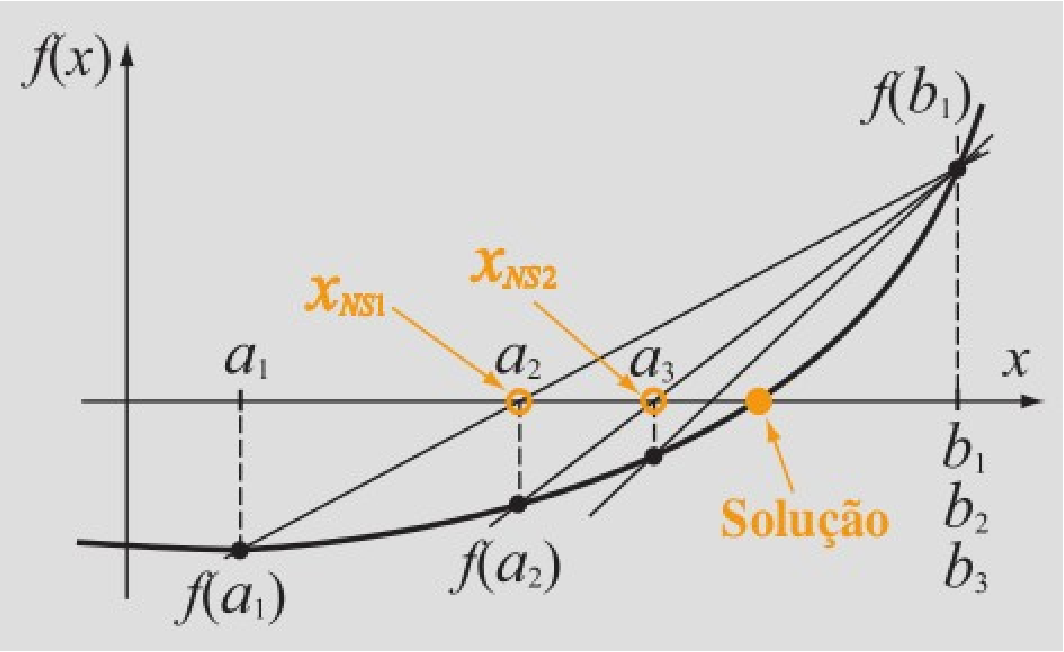
- A solução tem início com a obtenção de um intervalo **[a_1, b_1]** que confine a solução.
- Os valores da função nos pontos finais são **$f(a_1)$** e **$f(b_1)$**
- Os pontos finais são então conectados por uma linha reta, e a primeira estimativa da solução numérica, **x_{NS1}** , é o ponto onde a linha reta cruza o eixo **x**.
- Isso contrasta com o método da bisseção, onde o ponto central do intervalo foi escolhido como solução.

MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO

- Para a segunda iteração, define-se um novo intervalo **$[a_2, b_2]$**.
- Esse novo intervalo corresponde à subseção do primeiro intervalo que contém a solução.
- Ele é
  - **$[a_1, x_{NS1}]$**, **a_1** atribuído a **a_2** e **x_{NS1}** a **b_2** ou
  - **$[x_{NS1}, b_1]$**, **x_{NS1}** atribuído a **a_2** e **b_1** a **b_2**
- Os pontos finais do segundo intervalo são em seguida conectados por uma linha reta, e o ponto onde essa nova reta cruza o eixo x se torna a segunda solução estimada, **x_{NS2}**

MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO

- Para a terceira iteração, um novo subintervalo **[a_3 , b_3]** é selecionado, e as iterações continuam da mesma forma até que a solução numérica seja considerada suficientemente precisa.



MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO

- Para um dado intervalo **[a, b]**, a equação da linha reta que conecta os pontos **(b, f(b))** e **(a, f(a))** é dada por:

$$y=\frac{f(b)-f(a)}{b-a}*(x-b)+f(b)$$

- O ponto $\mathbf{x_{NS}}$ onde a reta cruza o eixo **x** é determinado pela substituição de **y = 0** na equação e a solução dessa equação para **x**:

$$x_{NS}=\frac{af(b)-bf(a)}{f(b)-f(a)}$$

Algoritmo para o método da falsa posição

1. Escolha o primeiro intervalo encontrando os pontos **a** e **b** entre os quais existe uma solução

Isso significa que **f(a)** e **f(b)** têm sinais diferentes, de forma que **f(a)*f(b) < 0**

Os pontos podem ser determinados a partir de um gráfico de **f(x)** *versus* **x**

2. Calcule a primeira estimativa da solução numérica $\mathbf{x}_{\mathbf{NS1}}$ usando

$$x_{NS} = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$

Algoritmo para o método da falsa posição

3. Determine se a solução exata está entre **a** e $\mathbf{x_{NS1}}$, ou entre $\mathbf{x_{NS1}}$ e **b**.

Isso é feito com a verificação do sinal do produto **f(a)** * $\mathbf{f(x_{NS1})}$:

- Se $\mathbf{f(a) * f(x_{NS1}) < 0}$, a solução exata está entre **a** e $\mathbf{x_{NS1}}$
- Se $\mathbf{f(a) * f(x_{NS1}) > 0}$, a solução exata está entre $\mathbf{x_{NS1}}$ e **b**

4. Selecione o subintervalo que contém a solução (**a** até $\mathbf{x_{NS1}}$, ou $\mathbf{x_{NS1}}$ até **b**) como o novo intervalo **[a, b]** e volte para o passo **2**

Critério de parada:

$\mathbf{|x_n - x_{n-1}| <= erro}$, ou

$\mathbf{| f(x_n) | <= erro}$

Os passos 2 a 4 são repetidos até que uma tolerância especificada ou um determinado limite de erro sejam atingidos.

MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO

- **Quando as iterações devem ser interrompidas?**

As iterações são interrompidas quando o erro estimado for menor que algum valor predeterminado ou um número máximo de passos for executado.

Notas adicionais a respeito do método da falsa posição

- O método sempre converge para uma resposta, desde que uma raiz esteja contida no intervalo inicial **[a, b]**.
- O erro no Método da Falsa Posição diminui mais rapidamente por causa do esquema mais eficiente para localização da raiz.
- Geralmente é superior ao da bisseção, porém há casos em que não é o método mais eficiente.

Notas adicionais a respeito do método da falsa posição

- Frequentemente a função no intervalo **[a, b]** é côncava para cima ou para baixo. Nesse caso, um dos pontos finais do intervalo permanece o mesmo em todas as iterações, enquanto o outro avança em direção à raiz.
- Em outras palavras, a solução numérica avança em direção à raiz apenas de um lado.
- Isso pode levar à convergência insatisfatória, particularmente para funções com curvatura significativa.
- Várias modificações têm sido introduzidas no método para fazer com que o subintervalo nas iterações sucessivas se aproxime da raiz de ambos os lados.

MÉTODO DA FALSA POSIÇÃO

- **Exemplo 3:**

  Calcular a raiz positiva da equação

  $f(x) = x^3 - 9*x + 3$, com **$\varepsilon <= 0{,}001$**

- **Exemplo 4:**

  Calcular a raiz positiva da equação

  $f(x) = x^4 - 26*x^2 + 24*x + 21$, com **$\varepsilon <= 0{,}01$**