Introdução à Computação em Física

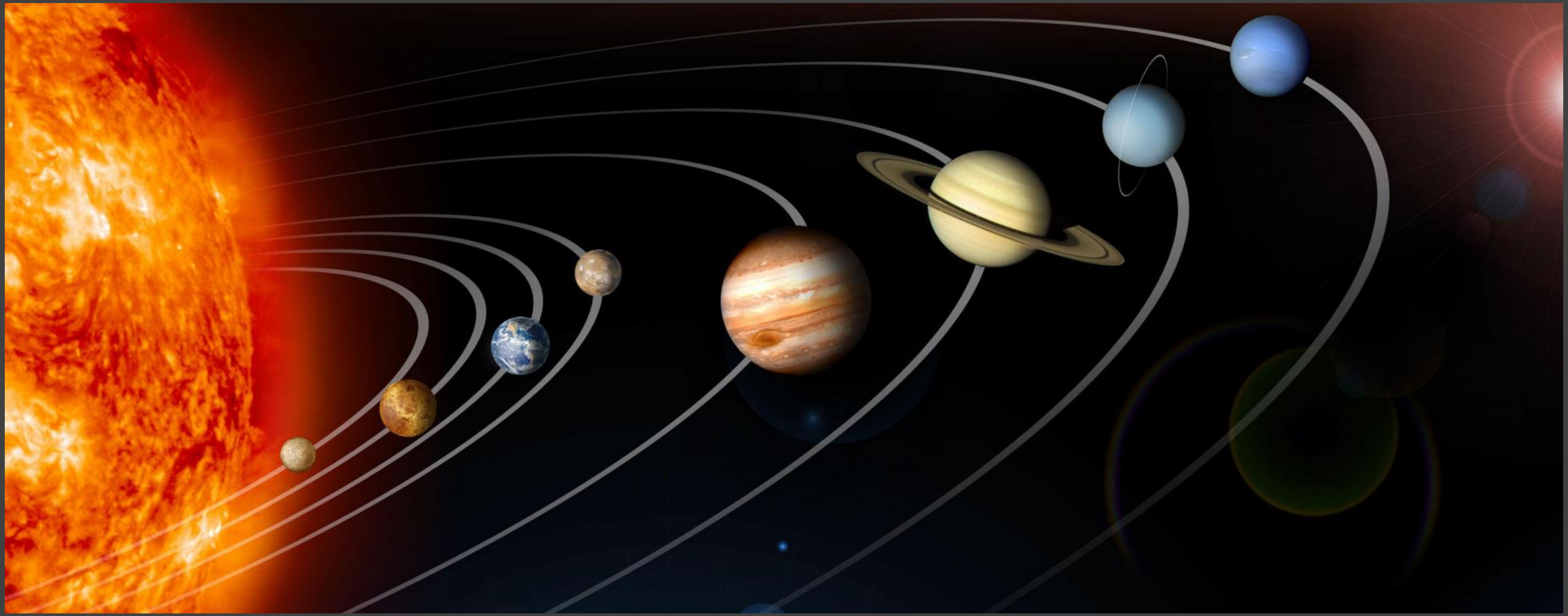
ZEROS DE FUNÇÕES

PROF. WALBER

Refs.:
Cálculo numérico, aspectos teóricos e computacionais (2nd edição), M. A. G. Ruggiero, V. L. da Rocha Lopes
Computational Physics, R. Landau, M. J. Paez, C. C. Bordelanu

Motivação (exemplo):

Objeto se deslocando em uma órbita (elíptica) com uma da excentricidade



Motivação (Exemplo):

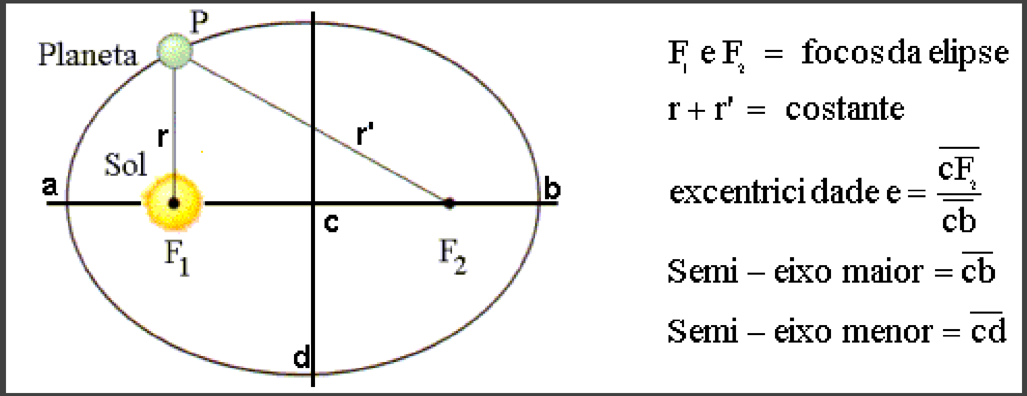
Posição de um objeto que se desloca em uma órbita com excentricidade ε

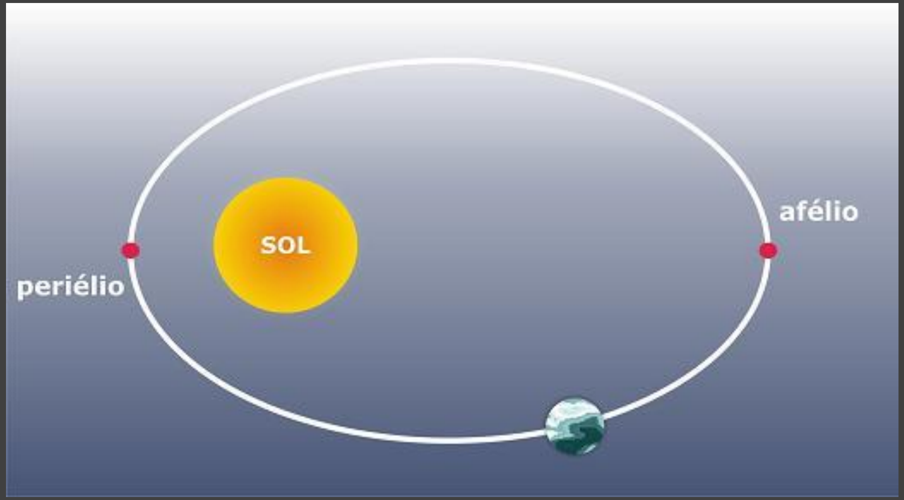
$$r = \frac{a(1-\epsilon^2)}{1+\epsilon cos\nu}$$

$$tan\left(\frac{\nu}{2}\right) = \sqrt{\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}}tan\left(\frac{E}{2}\right)$$

E é um ângulo auxiliar chamado de anomalia excêntrica;

ν é chamado de anomalia verdadeira;
a é o semieixo maior





Motivação (Exemplo):

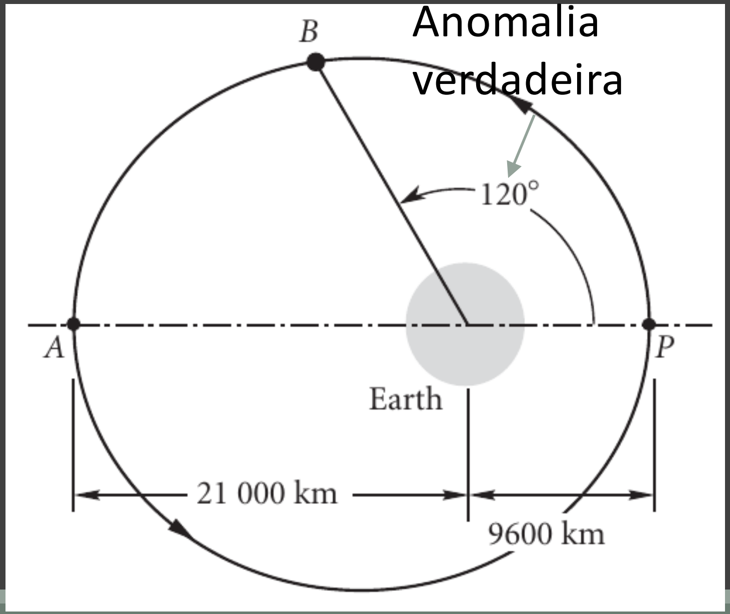
Posição de um objeto que se desloca em uma órbita com excentricidade ε

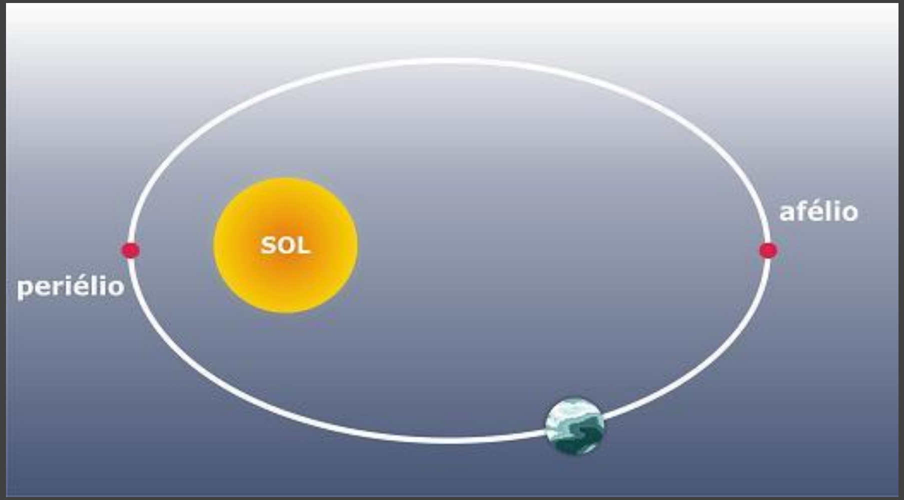
$$r = \frac{a(1-\epsilon^2)}{1+\epsilon cos\nu}$$

$$tan\left(\frac{\nu}{2}\right) = \sqrt{\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}}tan\left(\frac{E}{2}\right)$$

E é um ângulo auxiliar chamado de anomalia excêntrica;

ν é chamado de anomalia verdadeira;
a é o semieixo maior





Motivação (Exemplo):

Para o cálculo de E temos que resolver a equação

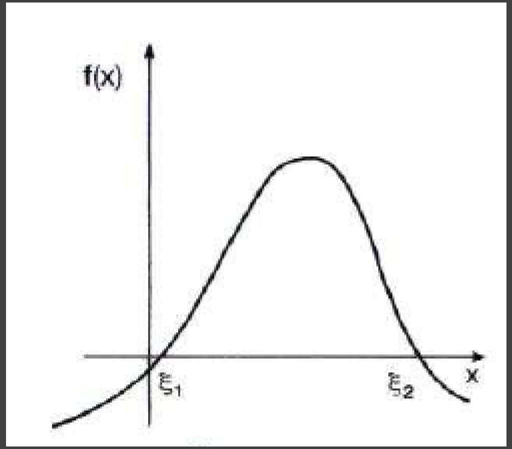
$$E - \epsilon sen(E) = M$$

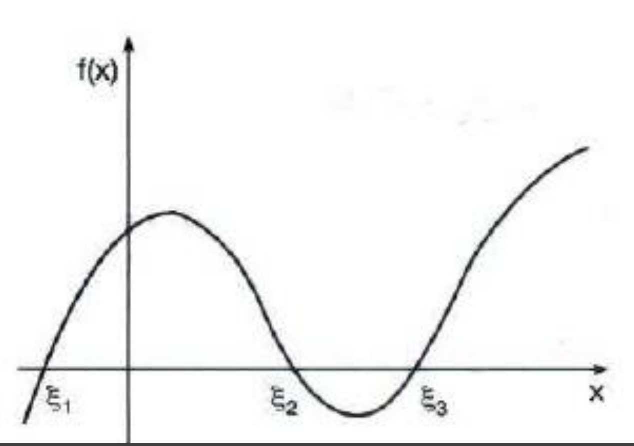
M é chamada de anomalia média (unidade radianos) e é dada em termos do período da órbita T, t é medido a partir do periélio

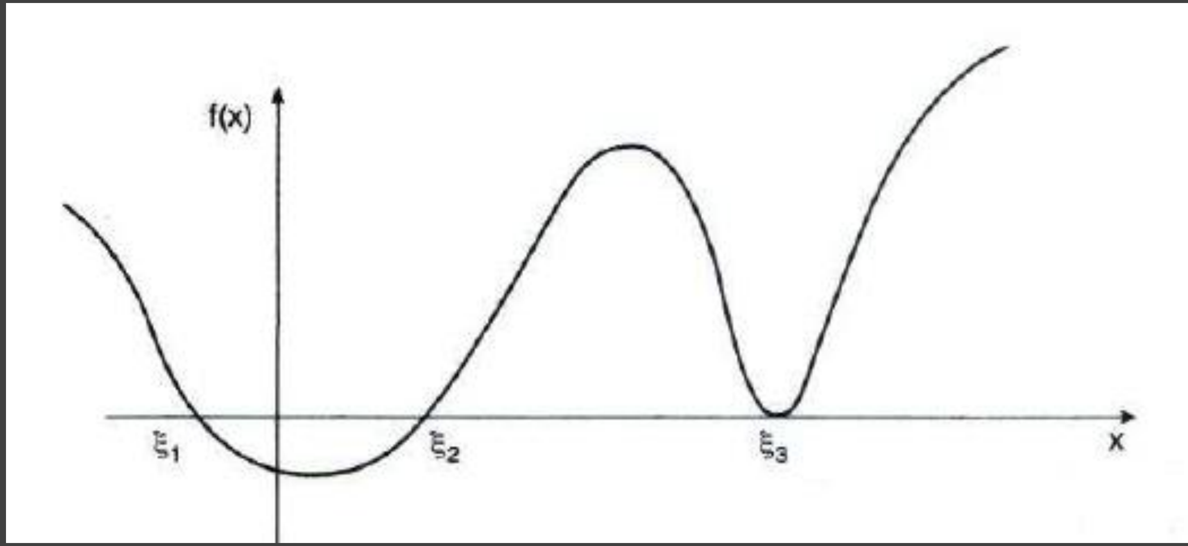
$$M = \frac{2\pi t}{T}$$

$$\Downarrow$$

$$tan\left(\frac{\nu}{2}\right) = \sqrt{\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}}tan\left(\frac{E}{2}\right) \Rightarrow r = \frac{a(1-\epsilon^2)}{1+\epsilon cos\nu}$$







Zeros de funções reais:

- Nesta aula iremos ver alguns esquemas numéricos para se resolver equações da forma $f(x) = 0$. Vale ressaltar que em muitos problemas de Física há a necessidade de se buscar soluções de equações, ou seja, as chamadas raízes de uma dada função.

- Em raros casos é possível obter as raízes de $f(x)=0$ de forma exata, como por exemplo no caso de um polinômio de segundo grau.

Fases dos métodos para se encontrar as raízes:

- Os esquemas que iremos utilizar consistem em duas fases para se encontrar as raízes de uma função f(x). Nesse sentido, iremos partir de uma aproximação inicial para a raiz e em seguida refinar a aproximação através de um **<u>processo iterativo</u>.**

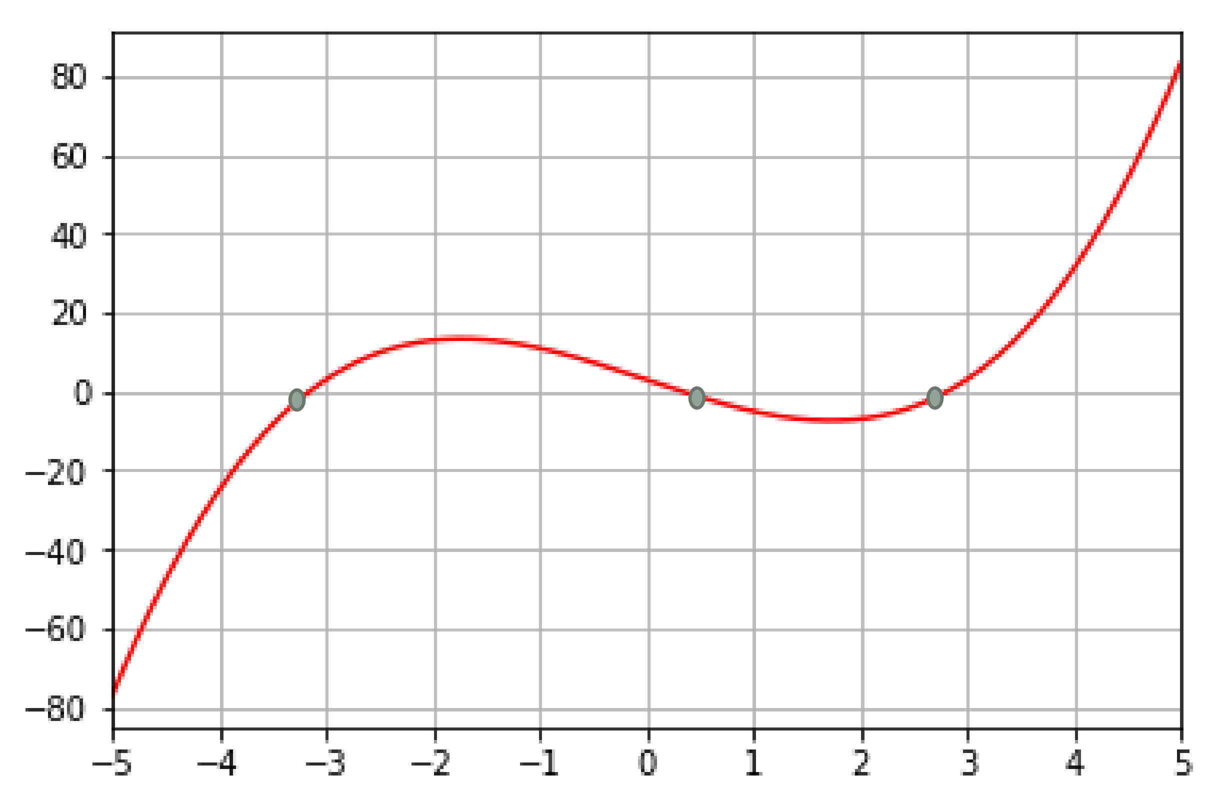
- **Fase I:** Localização (isolar) das raízes. Obtém-se um intervalo [a,b] que contém uma única raiz;

- **Fase II:** Refinamento, onde dadas aproximações iniciais para o intervalo [a,b], melhorá-las sucessivamente até se obter uma aproximação para a raiz dentro de uma dada precisão ε.

Fase I: Isolamento das raízes

Nesta fase é feita uma análise teórica e gráfica da função f(x).
Graficamente, plota-se a função f(x) e localiza-se visualmente os intervalos [a,b] que contém as raízes:

$f(x) = x^3 - 9x + 3$



Raízes:

r1 ∈ (-4,-3)

r2 ∈ (0,1)

r3 ∈ (2,3)

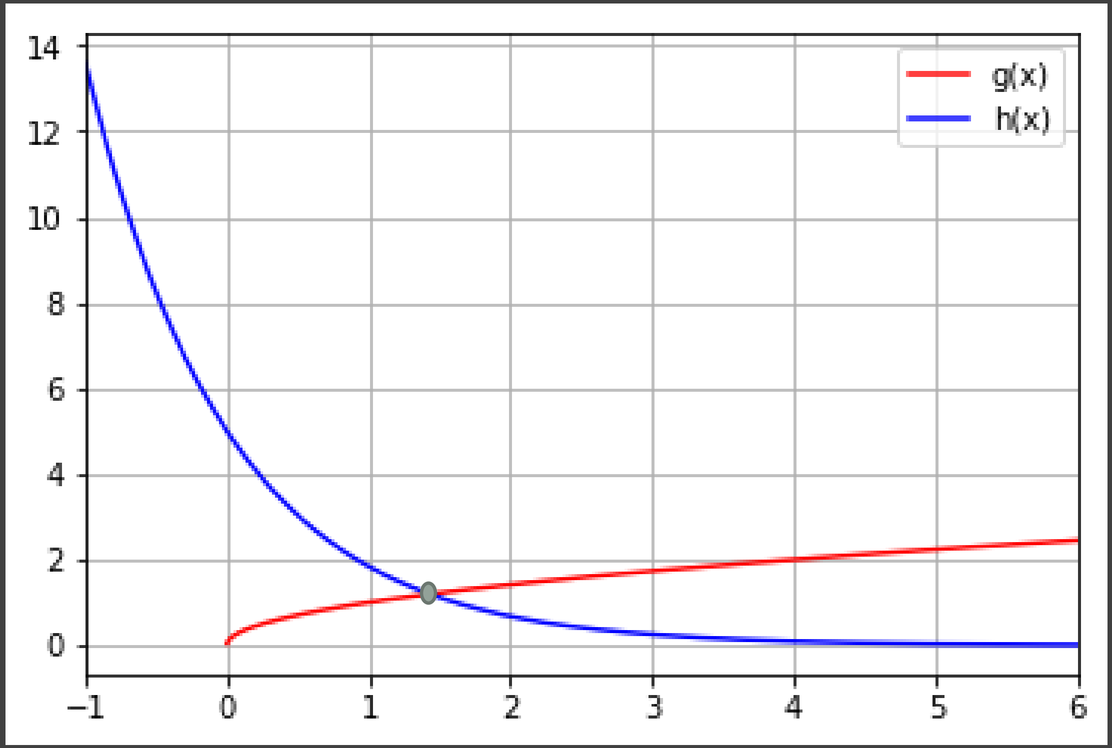
Fase I: Isolamento das raízes

Graficamente, plota-se a outras funções que ajudam a compor a função f(x).

$$f(x) = \sqrt{x} - 5e^{-x}$$

$$g(x) = \sqrt{x}$$

$$h(x) = 5e^{-x}$$



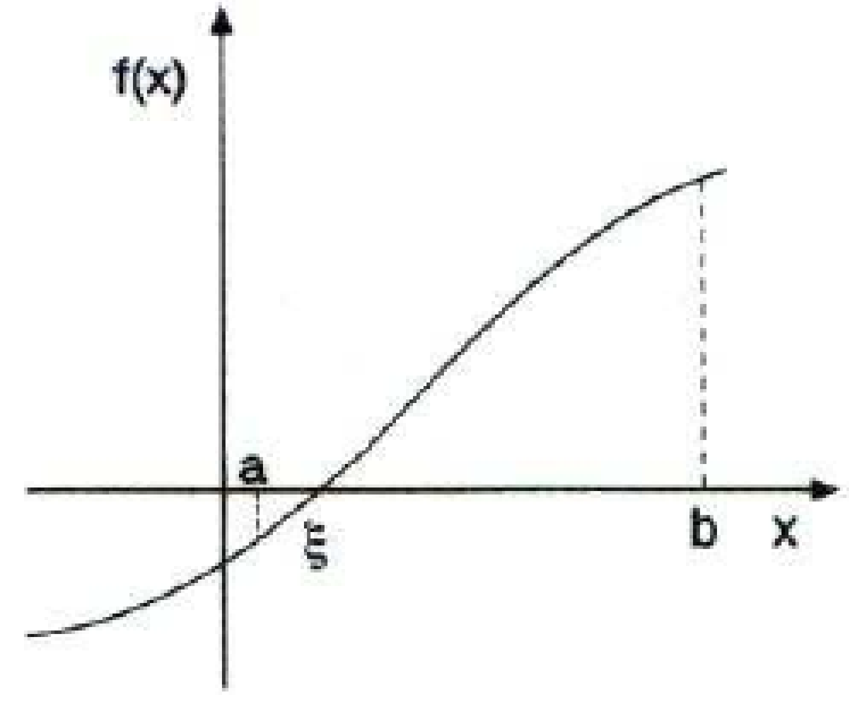
Raíz:

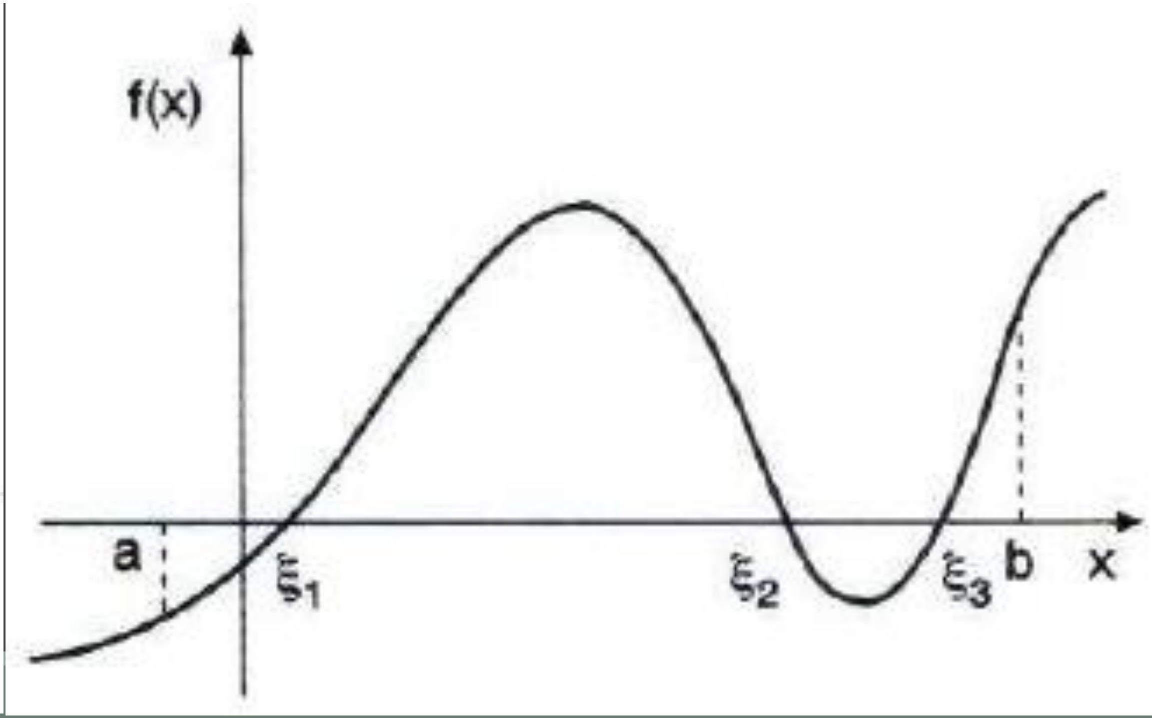
r1 ∈ (1,2)

Fase I : Isolamento de raízes

A análise teórica é feita com base no **teorema de Bolzano**:

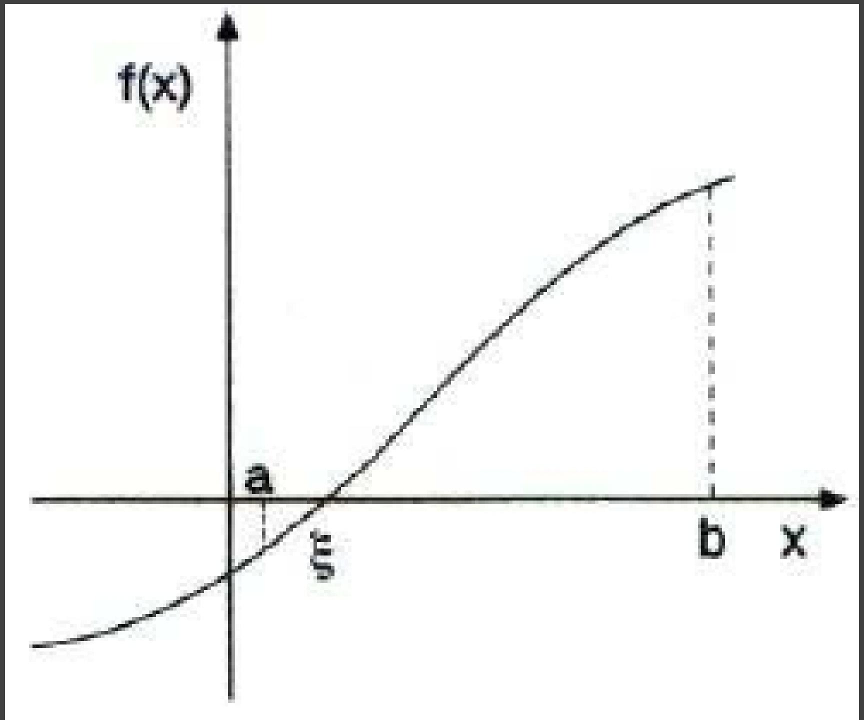
Seja $f(x)$ uma função contínua em um intervalo [a,b]. Se $f(a)f(b) < 0$ então existe pelo menos um ponto $x = r$ entre a e b que é zero de $f(x)$.

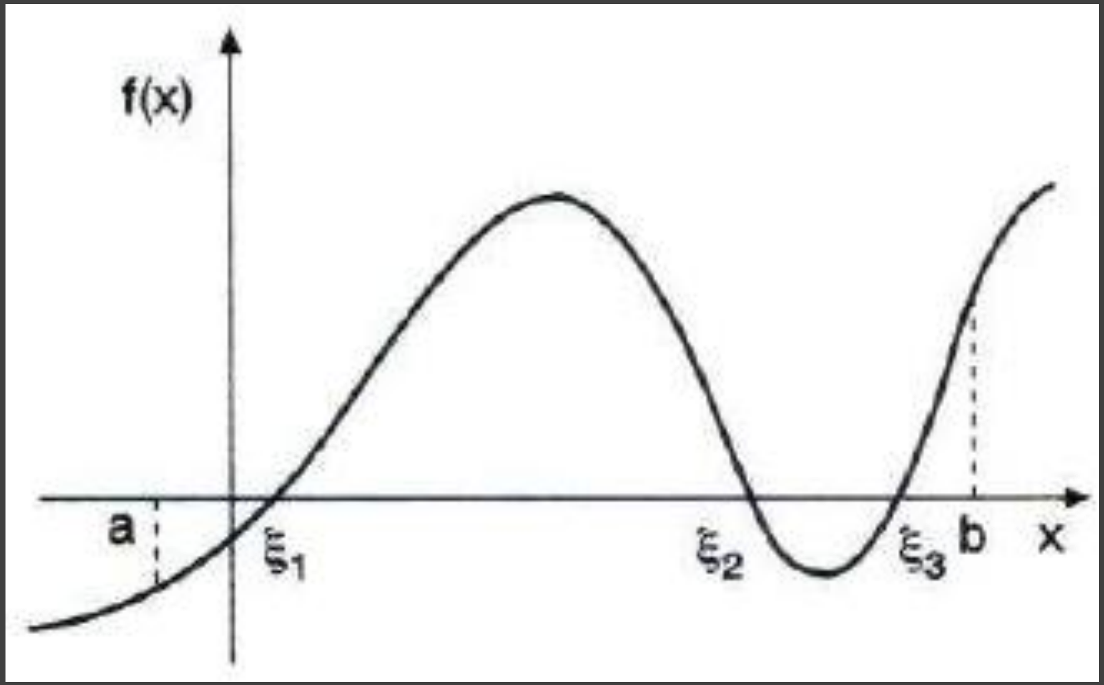




Fase I : Isolamento de raízes

Baseado no teorema anterior, se f'(x) existir e preservar o sinal em (a,b), então este intervalo contém uma única raiz de f(x).



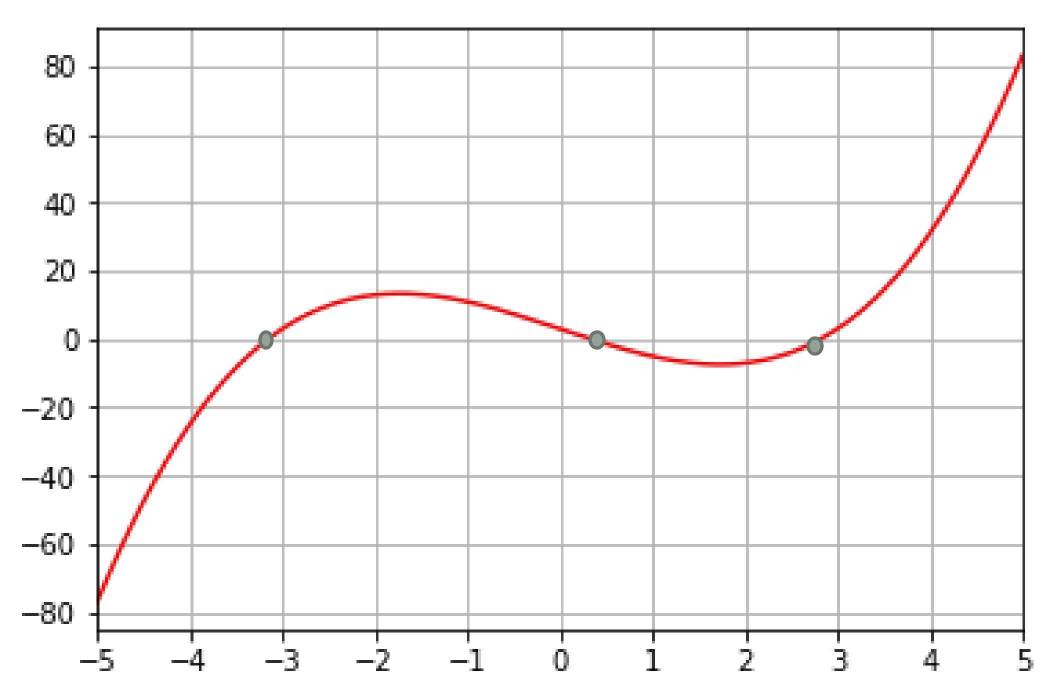


Fase I : Isolamento de raízes

Tabelamento:

$f(x) = x^3 - 9x + 3$

x	-10	-5	-3	-1	0	1	2	3	4
f(x)	-	-	+	+	+	-	-	+	+



Raízes:

r1 ∈ (-4,-3)

r2 ∈ (0,1)

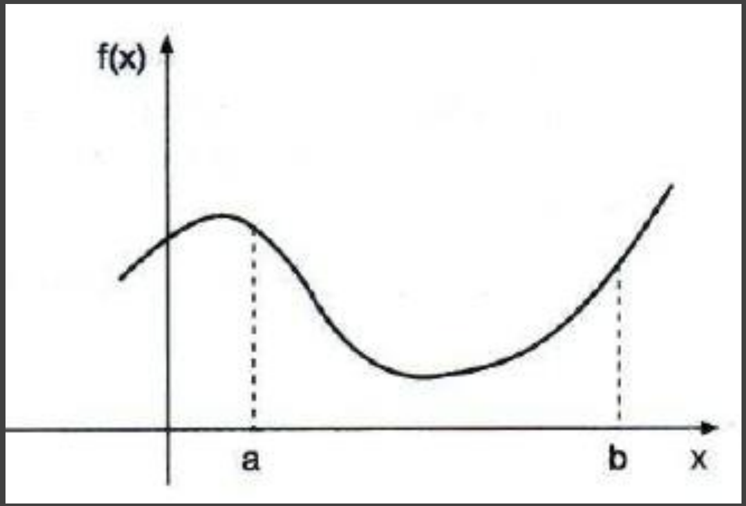
r3 ∈ (2,3)

$f'(x) = 3x^2-9$

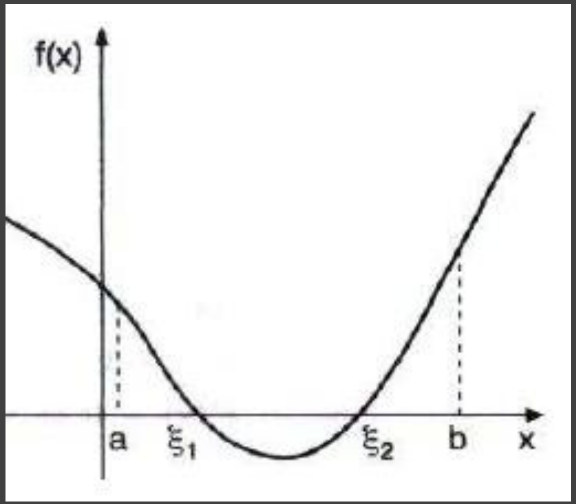
Conserva o sinal em cada intervalo , logo há uma única raiz em cada um deles.

Fase I : Isolamento de raízes

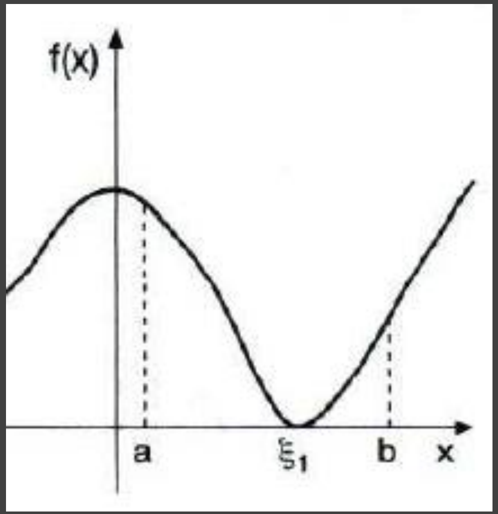
Caso f(a)f(b) > 0 , pode-se ter diferentes situações:



Sem raízes em (a,b)

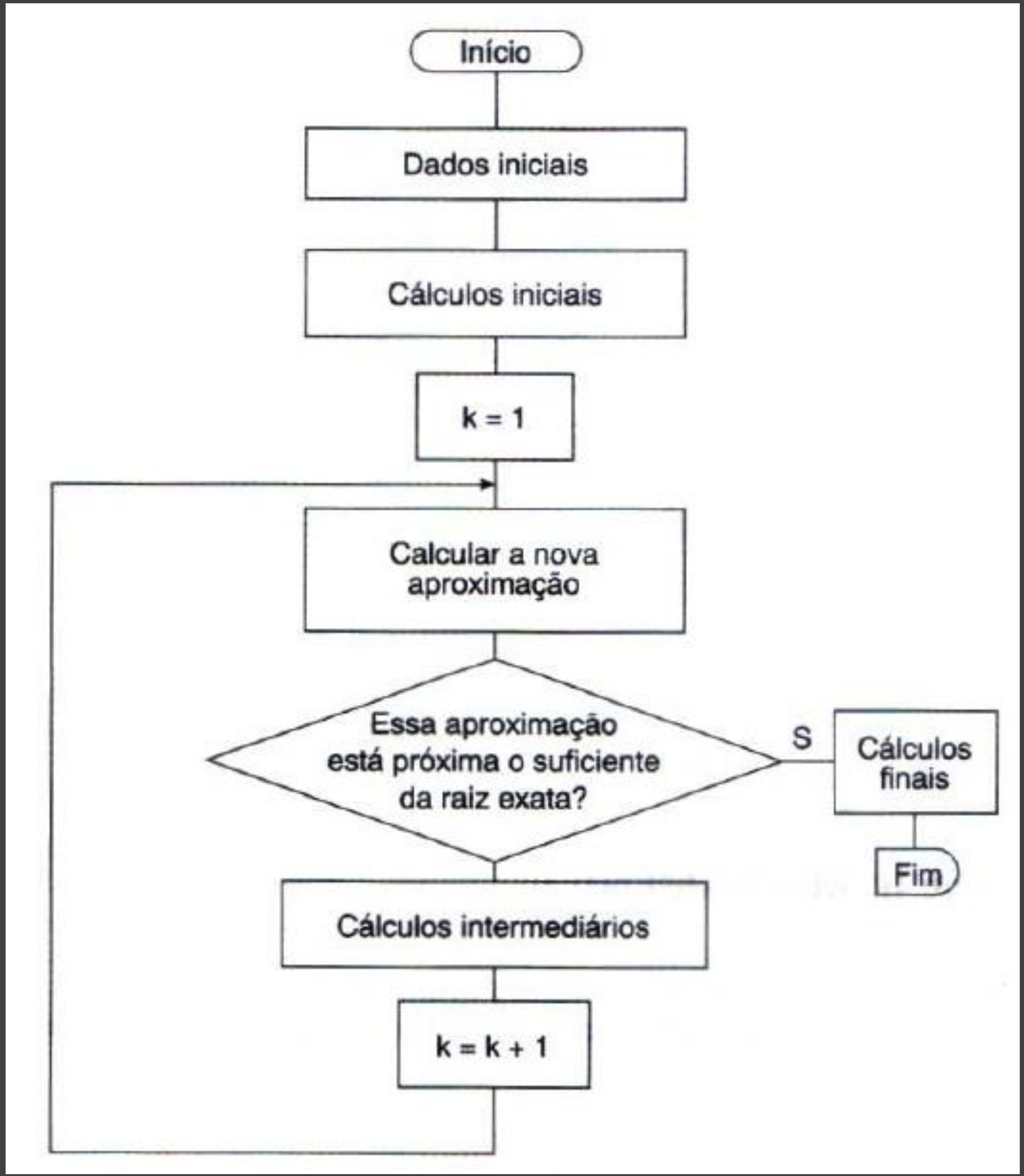


duas raízes em (a,b)



Uma raíz em (a,b)

Análise gráfica é de grande importância.



Fase II : Refinamento

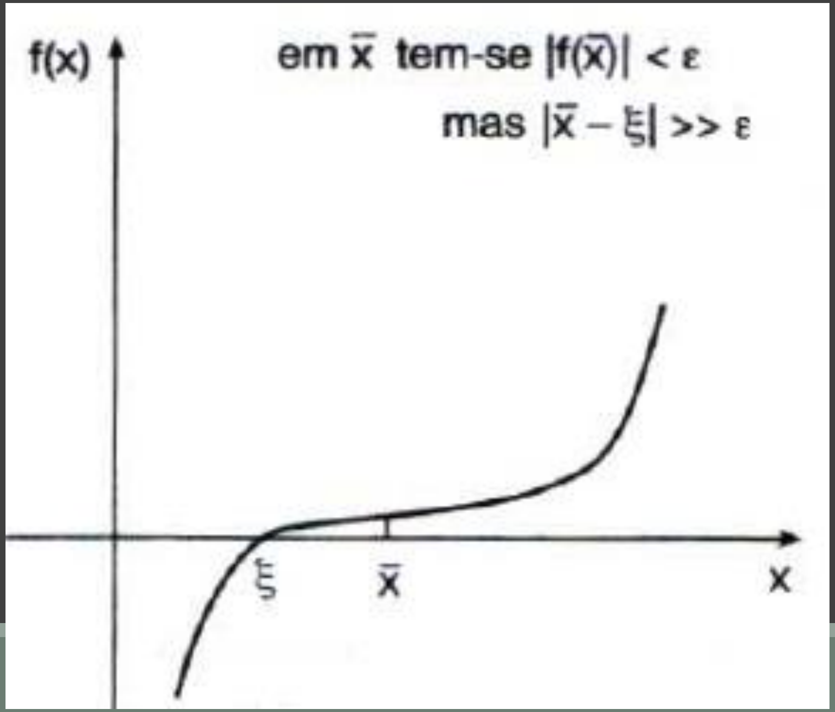
- Fase consiste em aproximar uma raiz r dentro do intervalo (a,b);
- Diversos esquemas para realizar esse procedimento, todos baseados no método iterativo (figura ao lado);
- Método iterativo: sequência de instruções que são executadas passo a passo, algumas que são repetidas em ciclos (iterações);
- Utiliza-se resultados obtidos anteriormente (k, k+1);
- Critério de parada: r obtido é suficientemente próximo da raiz exata ? Precisão da raiz obtida.

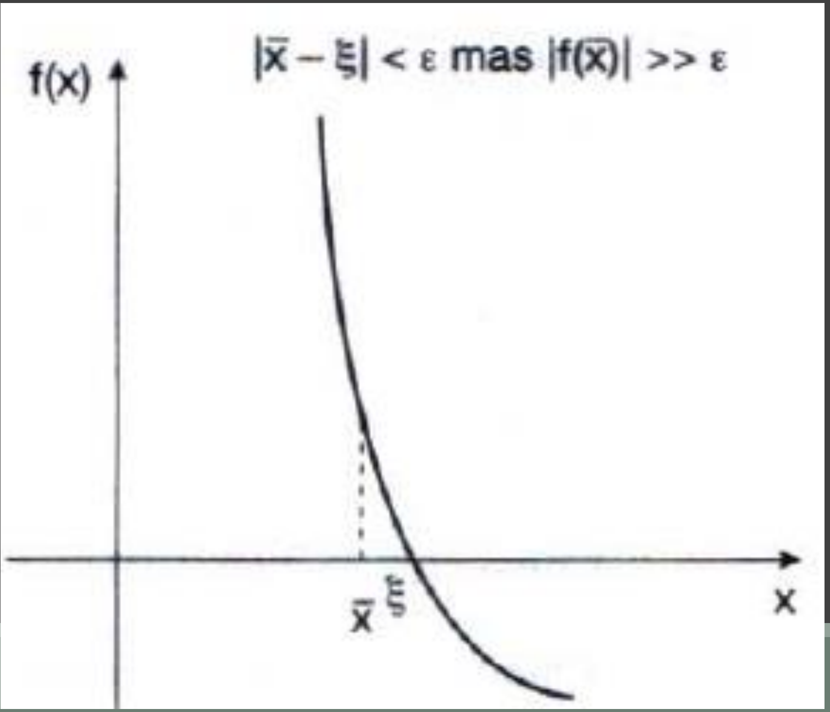
Critério da parada:

O critério da parada pode ser escrito da seguinte maneira:

x_i raiz aproximada e r raiz exata $|x_i - r| < \epsilon$ $|f(x_i)| < \epsilon$

Nem sempre ambas são satisfeitas





Critério da parada:

O critério da parada pode ser escrito da seguinte maneira:

x_i raiz aproximada e r raiz exata

$$|x_i - r| < \epsilon \qquad |f(x_i)| < \epsilon$$

Além disso, não conheçemos a raiz exata. Nesse sentido, é interessante fazer uso do erro absoluto e relativo:

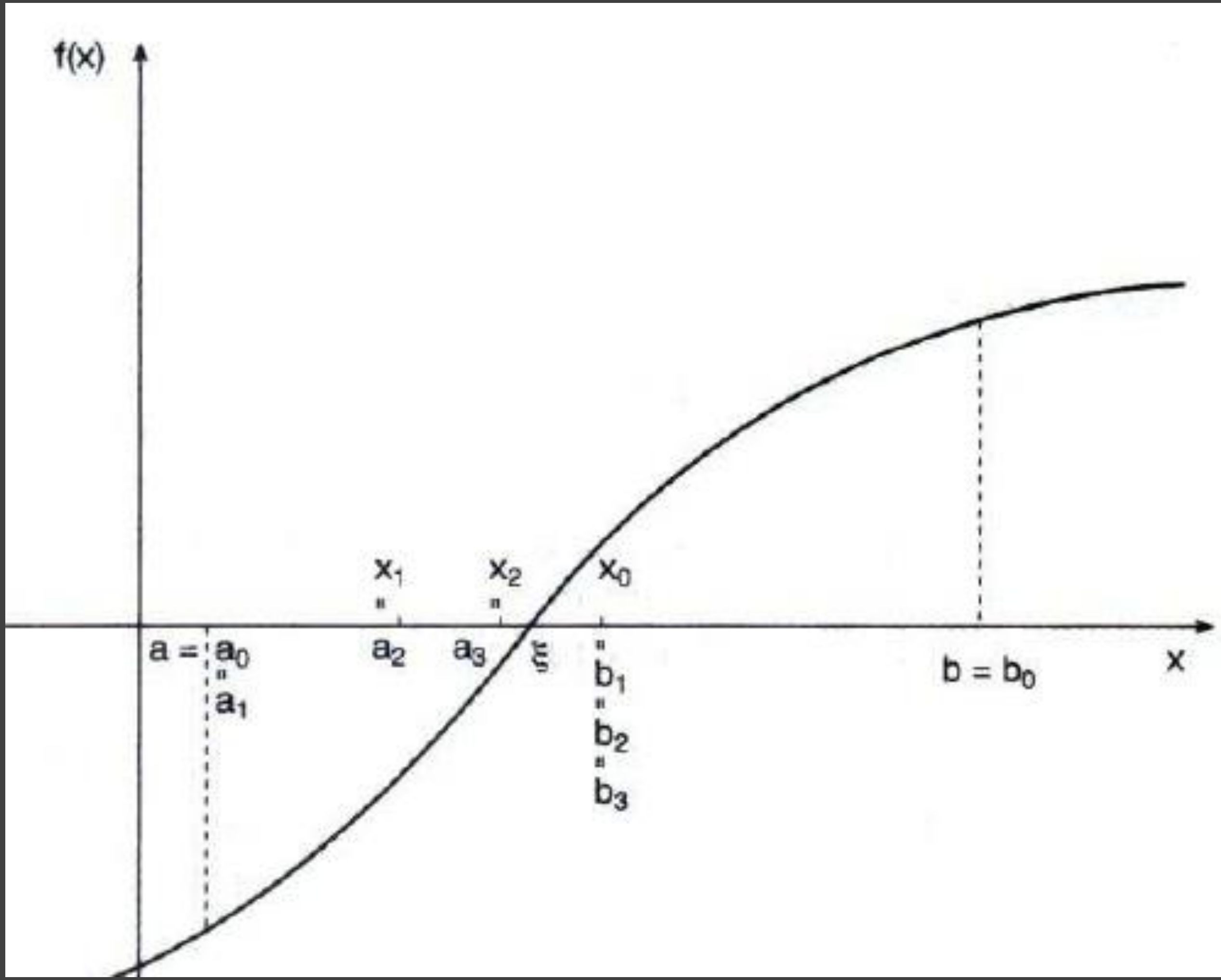
Erro absoluto

$$|x_i - x_{i-1}| < \epsilon$$

Erro relativo

$$\left|\frac{x_i - x_{i-1}}{x_i}\right| < \epsilon$$

Método da Bissecção



Método da bissecção:

Seja uma função f(x) contínua no intervalo [a,b] tal que f(a)f(b) < 0 (contém pelo menos uma raiz);

A ideia é reduzir a amplitude do intervalo [a,b] que contém a raiz até que o comprimento do mesmo seja menor que a precisão desejada, usando para isso sucessivas divisões de [a,b] ao meio;

Método da bissecção:

As iterações são realizadas da seguinte forma, considerando $[a_0,b_0] = [a,b]$:

$$x_0 = \frac{a_0 + b_0}{2} \Rightarrow \begin{cases} f(a_0) < 0 \\ f(b_0) > 0 \\ f(x_0) > 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} r \in (a_0, x_0) \\ a_1 = a_0 \\ b_1 = x_0 \end{cases} \Rightarrow [a_1, b_1]$$

$$x_1 = \frac{a_1 + b_1}{2} \Rightarrow \begin{cases} f(a_1) < 0 \\ f(b_1) > 0 \\ f(x_1) < 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} r \in (x_1, b_1) \\ a_2 = x_1 \\ b_2 = b_1 \end{cases} \Rightarrow [a_2, b_2]$$

$$\Downarrow$$

$$b_k - a_k < \epsilon$$

Pode-se utilizar outros critérios de parada, erro absoluto ou relativo por exemplo.

Método da bissecção:

Convergência para [0,1]:

$f(x) = x^3 - 9x + 3$

x	-10	-5	-3	-1	0	1	2	3	4
f(x)	-	-	+	+	+	-	-	+	+

```
Iteracao  1  x =  0.5 fx =  -1.375  b-a =  0.5
Iteracao  2  x =  0.25 fx =  0.765625  b-a =  0.25
Iteracao  3  x =  0.375 fx =  -0.322265625  b-a =  0.125
Iteracao  4  x =  0.3125 fx =  0.218017578125  b-a =  0.0625
Iteracao  5  x =  0.34375 fx =  -0.0531311035156  b-a =  0.03125
Iteracao  6  x =  0.328125 fx =  0.082202911377  b-a =  0.015625
Iteracao  7  x =  0.3359375 fx =  0.0144743919373  b-a =  0.0078125
Iteracao  8  x =  0.33984375 fx =  -0.0193439126015  b-a =  0.00390625
Iteracao  9  x =  0.337890625 fx =  -0.00243862718344  b-a =  0.001953125
Iteracao  10  x =  0.3369140625 fx =  0.00601691845804  b-a =  0.0009765625
Iteracao  11  x =  0.33740234375 fx =  0.00178890430834  b-a =  0.00048828125
Iteracao  12  x =  0.337646484375 fx =  -0.000324921813444  b-a =  0.000244140625
Iteracao  13  x =  0.337524414062 fx =  0.000731976158932  b-a =  0.0001220703125
Iteracao  14  x =  0.337585449219 fx =  0.000203523399932  b-a =  6.103515625e-05
Iteracao  15  x =  0.337615966797 fx =  -6.07001500441e-05  b-a =  3.0517578125e-05
Iteracao  16  x =  0.337600708008 fx =  7.14113891327e-05  b-a =  1.52587890625e-05
Iteracao  17  x =  0.337608337402 fx =  5.35556059011e-06  b-a =  7.62939453125e-06
f(raiz) =  5.35556059011e-06
```

Método iterativo linear (MIL)
(Método do ponto fixo)

Método iterativo linear (MIL):

Método que introduz novas ideias do ponto de vista conceitual;

Seja f(x) uma função contínua em [a,b] (intervalo que contém uma raiz). O MIL consiste em transformar a equação f(x) = 0, em uma forma

$x = \varphi(x)$ onde $\varphi(x)$ Função de iteração

Para qualquer $\varphi(x)$ a solução da equação $x = \varphi(x)$ é chamada de ponto fixo de $\varphi(x)$

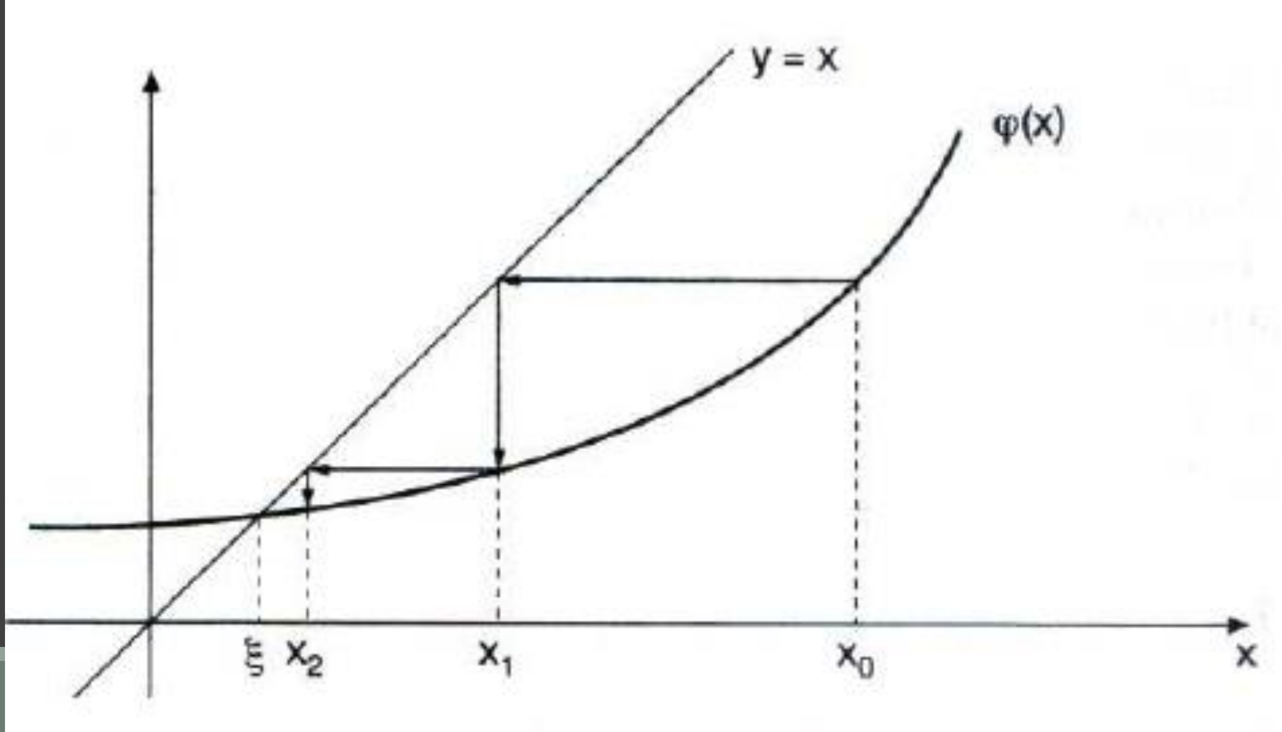
Assim sendo, o problema de determinar um zero de f(x) foi transformado na busca da solução da equação $x = \varphi(x)$ a qual não altera a raiz procurada.

Método iterativo linear (MIL):

A parti de uma aproximação inicial x_0, gera-se uma sequência de números x_i, através do processo iterativo:

$$x_i = \varphi(x_{i-1})$$

Graficamente:



Método iterativo linear (MIL):

Há um número infinito de funções de iteração para uma dada equação f(x)= 0 ;

Possuem uma forma geral do tipo

$$\varphi(x) = x + A(x)f(x)$$ onde A(raiz) ≠ 0 .

Exemplo: $f(x) = x^2 - x - 2$

exemplos de $x = \varphi(x)$

1. $x = x^2 - 2$
2. $x = \sqrt{x+2}$
3. $x = 1 + \dfrac{2}{x}$
4. $x = x - \dfrac{x^2 - 2x - 8}{m}$ $m \neq 0$

Método iterativo linear (MIL):

Nem todas funções de iteração levam a soluções convergentes:

Exemplo: $f(x) = x^2 - x - 2$

$x_0 = 2.5$ (raiz = 2)

$$x_i = \varphi(x_{i-1}) = x_{i-1}^2 - 2$$

$$x_i = \varphi(x_{i-1}) = \sqrt{x_{i-1} + 2}$$

$$\begin{aligned} x_1 &= \varphi(x_0) = (2.5)^2 - 2 = 4.25 \\ x_2 &= \varphi(x_1) = (4.25)^2 - 2 = 16.0625 \\ x_3 &= \varphi(x_2) = (16.0625)^2 - 2 = 256.00391 \end{aligned}$$

Não converge

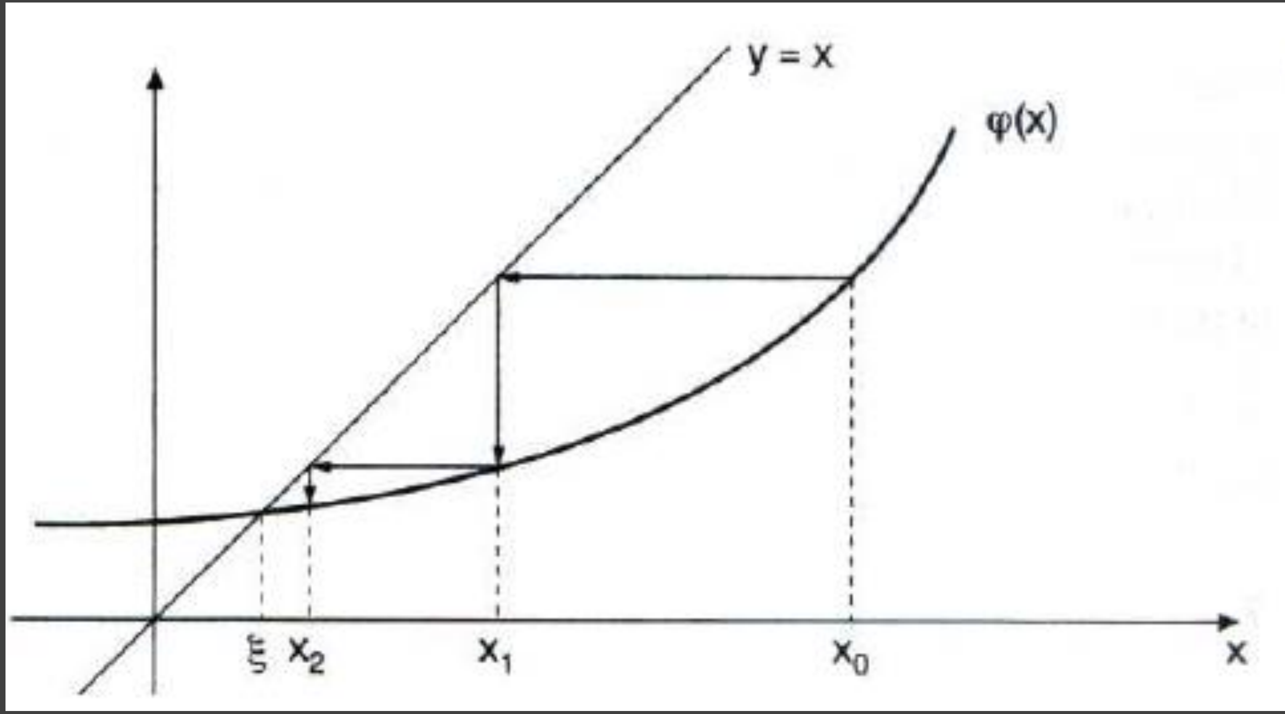
$$\begin{aligned} x_1 &= \varphi(x_0) = \sqrt{4.5} = 2.1213203 \\ x_2 &= \varphi(x_1) = \sqrt{4.1213203} = 2.0301035 \\ x_3 &= \varphi(x_2) = \sqrt{4.0301035} = 2.0075118 \end{aligned}$$

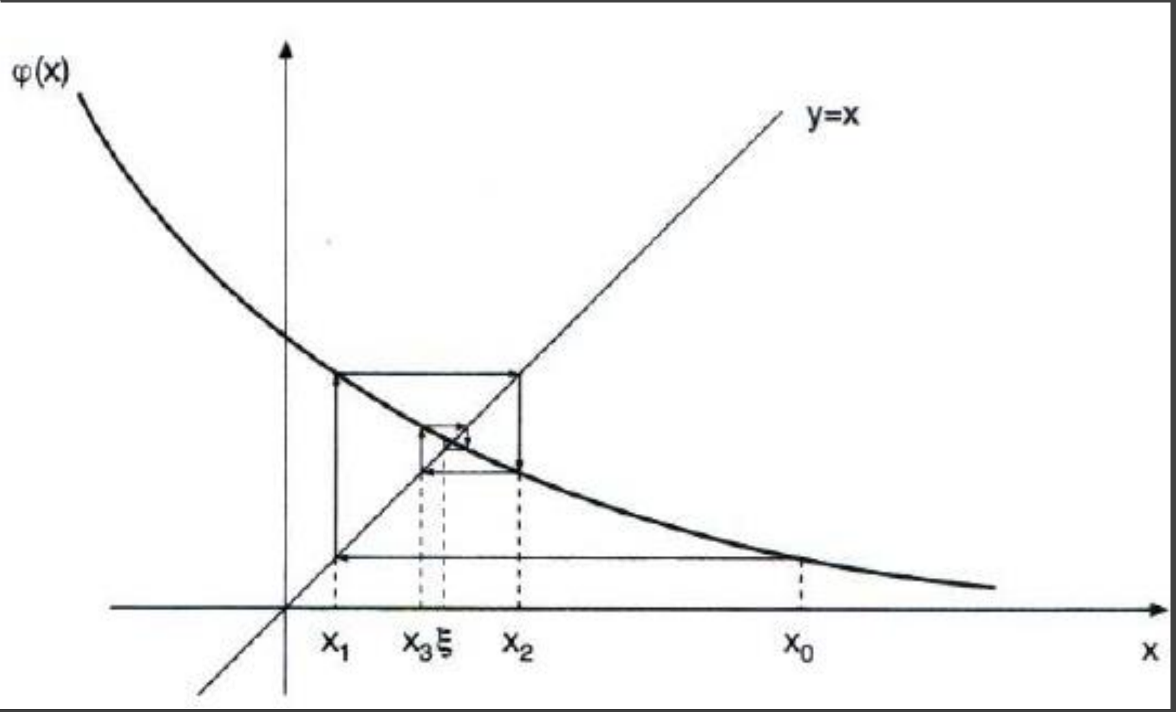
Converge

Método iterativo linear (MIL):

Graficamente:

Convergentes

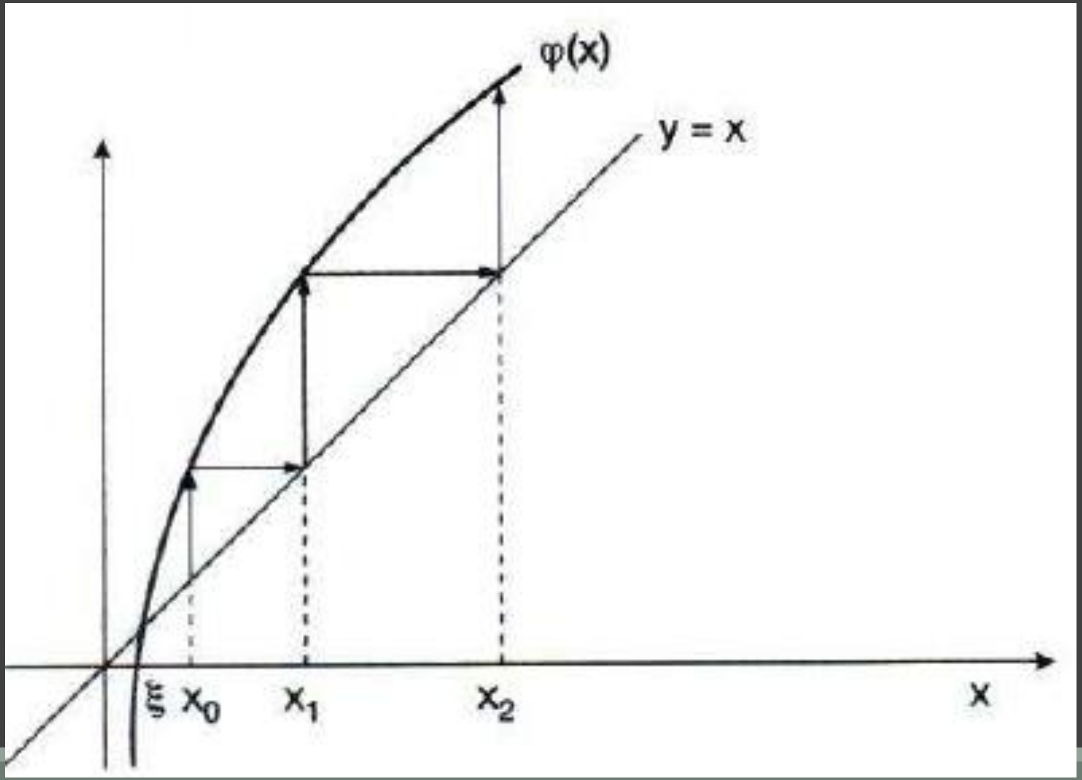


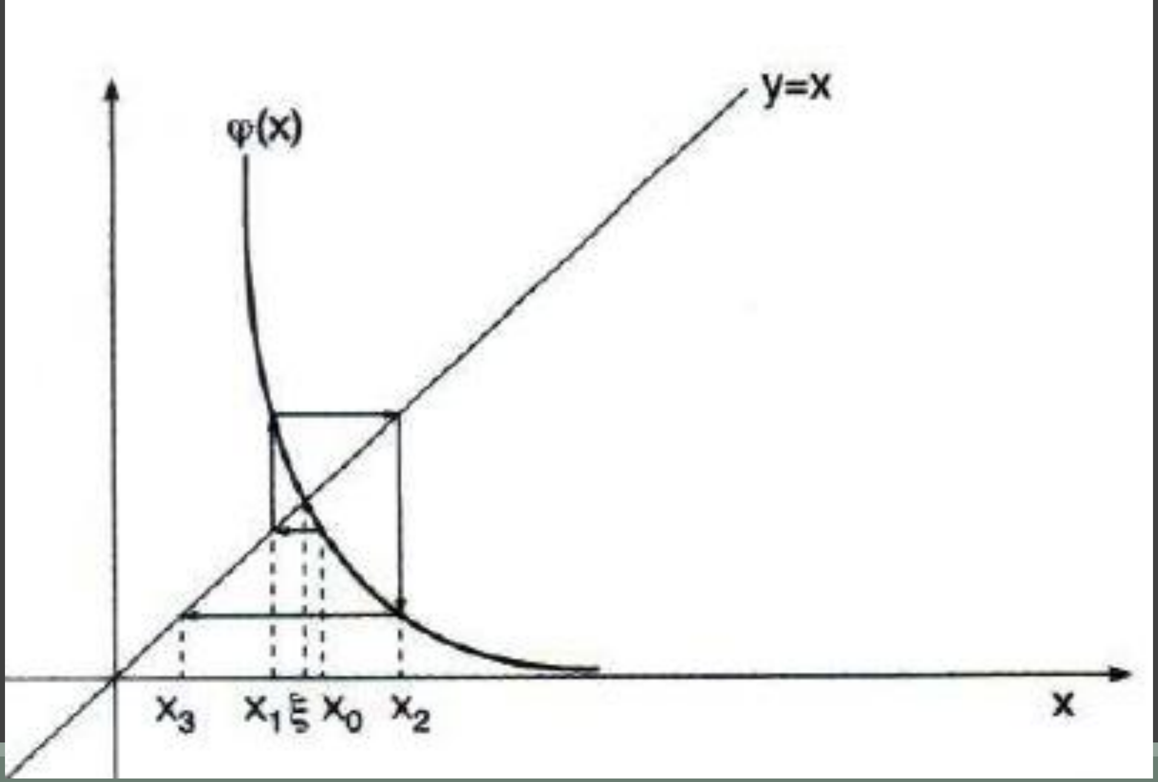


Método iterativo linear (MIL):

Graficamente:

Não converge





Método iterativo linear (MIL):

Para que o MIL obtenha a raiz é necessário que a sequência obtida seja convergente.

A convergência do método é fundamentada pelo seguinte teorema:

Seja r uma raiz da equação $f(x) = 0$, isolada num intervalo I centrado em r. Seja $\varphi(x)$ uma função de iteração para a equação $f(x) = 0$ e $M < 1$ um limitante. Se:

- $\varphi(x)$ e $\varphi'(x)$ são contínuas em I;
- $|\varphi'(x)| \leq M < 1, \forall x \in I$;
- $x_0 \in I$;

então a sequência $\{x_i\}$ gerada converge para a raiz r.

Método iterativo linear (MIL):

Algoritmo:

1. Dados iniciais: x_0 e precisões ε_1 e ε_2
2. Se $|f(x_0)| < \varepsilon_1$, raiz $r = x_0$. Fim
3. Caso contrário iniciar $i = 1$
4. $x_1 = \phi(x_0)$

5. Se $|f(x_1)| < \varepsilon_1$ ou se $|x_1 - x_0| < \varepsilon_2$. Raiz $r = x_1$. Fim

6. $x_0 = x_1$

7. $i = i+1$, volte para 4.

Método de Newton-Raphson (MNR):

No método anterior, vimos que:

1. Uma das condições de convergência é que:

$$|\varphi'(x)| \leq M < 1, \forall x \in I$$

2. Nesse sentido, a convergência do método será mais rápida quanto menor for $|\varphi'(r)|$

Devido a isso, o método de Newton-Raphson procura uma função de iteração $\varphi(x)$ tal que:

$$\varphi'(r) = 0$$

Método de Newton-Raphson

Método de Newton-Raphson (MNR):

Da forma geral da função de iteração:

$$\varphi(x) = x + A(x)f(x)$$

$$\Downarrow$$

$$\varphi'(x) = 1 + A'(x)f(x) + A(x)f'(x)$$

Como f(r) = 0, $\varphi'(r) = 1 + A(r)f'(r) = 0$

Função de iteração MNR

$$A(r) = -\frac{1}{f'(r)} \Rightarrow \varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

Método de Newton-Raphson (MNR):

Convergência baseada no seguinte teorema:

Sejam $f(x)$, $f'(x)$ e $f''(x)$ contínuas num intervalo I que contém a raiz $x = r$ de $f(x) = 0$. Supor que $f'(r) \neq 0$.

Então, existe um intervalo $\bar{I} \subset I$, contendo a raiz r, tal que se $x_0 \in \bar{I}$, a sequência $\{x_k\}$ gerada pela fórmula recursiva

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$

convergirá para a raiz.

Método de Newton-Raphson (MNR):

Exemplo convergência: $f(x) = x^3 - 9x + 3$, $x_0 = 1.5$

```
iteracao =  1 x =  -1.66666666667
iteracao =  2 x =  18.3888888889
iteracao =  3 x =  12.3660104035
iteracao =  4 x =  8.40230671982
iteracao =  5 x =  5.83533816483
iteracao =  6 x =  4.233873551
iteracao =  7 x =  3.32291096056
iteracao =  8 x =  2.91733893111
iteracao =  9 x =  2.82219166541
iteracao =  10 x =  2.81692987584
iteracao =  11 x =  2.81691405287
Final, Raiz =  2.81691405287 fx =  2.1157902097e-09  abs(x-x0) = 1.58229714713e-05
```

Método de Newton-Raphson (MNR):

Exemplo convergência: $f(x) = x^3 - 9x + 3$, $x_0 = 0.5$

MNR

```
iteracao =  1 x =  0.333333333333
iteracao =  2 x =  0.337606837607
iteracao =  3 x =  0.337608955965
Final, Raiz =  0.337608955965 fx =  4.54480897361e-12  abs(x-x0) = 2.11835847519e-06
```

Bissecção

```
Iteracao  13  x =  0.337524414062 fx =  0.000731976158932  b-a =  0.0001220703125
Iteracao  14  x =  0.337585449219 fx =  0.000203523399932  b-a =  6.103515625e-05
Iteracao  15  x =  0.337615966797 fx =  -6.07001500441e-05  b-a =  3.0517578125e-05
Iteracao  16  x =  0.337600708008 fx =  7.14113891327e-05  b-a =  1.52587890625e-05
Iteracao  17  x =  0.337608337402 fx =  5.35556059011e-06  b-a =  7.62939453125e-06
Iteracao  18  x =  0.3376121521 fx =  -2.76723094657e-05  b-a =  3.81469726562e-06
Iteracao  19  x =  0.337610244751 fx =  -1.11583781224e-05  b-a =  1.90734863281e-06
Iteracao  20  x =  0.337609291077 fx =  -2.90140968717e-06  b-a =  9.53674316406e-07
f(raiz) =  -2.90140968717e-06
```

Método das Secantes

Método das Secantes:

Uma das desvantagens do MNR é o cálculo da derivada a cada iteração.

No método das Secantes essa desvantagem é contornada através da substituição da derivada da seguinte maneira:

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$$

Método foward difference (fd) visto anteriormente

Com isso, a função de iteração fica sendo

$$\varphi(x_k) = x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}} = \frac{x_{k-1} f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

Método das Secantes:

Assim sendo,

$$\varphi(x_k) = x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}} = \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

$$x_{k+1} = \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

Nesse caso, temos que considerar nas aproximações iniciais x_0 e x_1

Método das Secantes:

Convergência, exemplo: $f(x) = x^2 + x - 6$, $x0 = 1.5$ e $x1 = 1.7$ (raiz = 2)

```
iteracao =  1 x =  2.03571428571
iteracao =  2 x =  1.99773755656
iteracao =  3 x =  1.99998394709
iteracao =  4 x =  2.00000000727
Final, Raiz =  2.00000000727 fx =  3.633535961e-08
```

$f(x) = x^3 - 9x + 3$, $x0 = 0.5$, $x1 = 0.7$

```
iteracao =  1 x =  0.326169405815
iteracao =  2 x =  0.338300511035
iteracao =  3 x =  0.337609870453
iteracao =  4 x =  0.337608955892
Final, Raiz =  0.337608955892 fx =  6.4101968178e-10
```

Bissecção

```
Iteracao  13  x =  0.337524414062 fx =  0.000731976158932  b-a =  0.0001220703125
Iteracao  14  x =  0.337585449219 fx =  0.000203523399932  b-a =  6.103515625e-05
Iteracao  15  x =  0.337615966797 fx =  -6.07001500441e-05  b-a =  3.0517578125e-05
Iteracao  16  x =  0.337600708008 fx =  7.14113891327e-05  b-a =  1.52587890625e-05
Iteracao  17  x =  0.337608337402 fx =  5.35556059011e-06  b-a =  7.62939453125e-06
Iteracao  18  x =  0.3376121521 fx =  -2.76723094657e-05  b-a =  3.81469726562e-06
Iteracao  19  x =  0.337610244751 fx =  -1.11583781224e-05  b-a =  1.90734863281e-06
Iteracao  20  x =  0.337609291077 fx =  -2.90140968717e-06  b-a =  9.53674316406e-07
f(raiz) =  -2.90140968717e-06
```

Atividades práticas:

1. Determine a raízes das equações (método da Bissecção):

$$x - cosx = 0$$

$$2cos(x) - \frac{e^x}{2} = 0$$

Com precisão 10^{-6}

2. Escreva um programa que encontre a raiz da equação abaixo no intervalo (0,1). Utilizando a função iteração dada com precisão de 10^{-6}

$$f(x) = x^3 - 9x + 3$$

$$\varphi(x) = \frac{x^3}{9} + \frac{1}{3}$$

Atividades práticas:

3. Considerando as funções equações abaixo:

$$xlog(x) - 1 = 0 \qquad x = tanh(1.5x)$$

a. Localize graficamente as raízes (salve os plots em duas figuras de extensão *.png)

b. Determine a raízes das equações (precisão 10^{-7}) pelos métodos da Bissecção, Newton-Raphson e das Secantes. Descreva quantas iterações foram necessárias para cada método.

Atividades práticas:

4. Seja a equação de Kepler, que auxilia na obtenção na posição de um objeto se deslocando sobre uma órbita com excentricidade ε:

$$E - \epsilon sen(E) = M$$

(a) Considerando M = 2.5 e ε = 0.8, encontre E (anomalia excêntrica).

(b) Obtenha r/a e ν para M (0,4π], lembrando que

$$tan\left(\frac{\nu}{2}\right) = \sqrt{\frac{1+\epsilon}{1-\epsilon}}tan\left(\frac{E}{2}\right)$$

$$r = \frac{a(1-\epsilon^2)}{1+\epsilon cos\nu}$$

(c) Faça gráficos para r/a e ν em função de M .