Prof. Dr. Sergio Pilling (IPD/ Física e Astronomia)

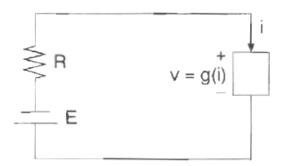


II – Métodos numéricos para encontrar raízes (zeros) de funções reais.

Objetivos: Veremos nessa aula vários métodos numéricos para a resolução de funções reais. Em outras palavras, veremos métodos para encontrar soluções de equações não lineares do tipo f(x)=0.

1. Introdução

Nas mais diversas áreas das ciências exatas ocorrem, frequentemente, situações que envolvem a resolução de uma equação do tipo f(x)=0. Consideremos, por exemplo, o seguinte circuito:



A figura acima representa um dispositivo não linear, isto é, a função g que dá a tensão em função da corrente é não linear. Dados E e R e supondo conhecida a característica do dispositivo v = g(i), se quisermos saber a corrente que vai fluir no circuito temos de resolver a equação E - Ri - g(i) = 0 (pela lei de Kirchoff). Na prática, g(i) tem o aspecto de um polinômio do terceiro grau.

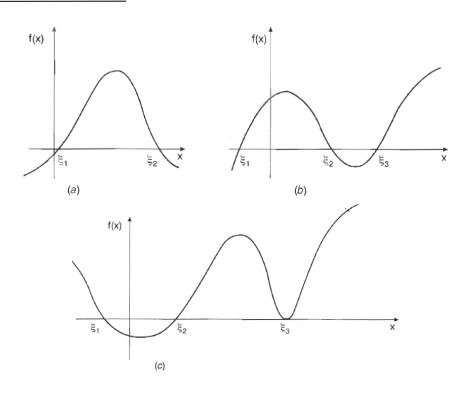
Queremos então resolver a equação f(i) = E - Ri - g(i) = 0.

O objetivo deste capítulo é o estudo de métodos numéricos para resolução de equações não lineares como a acima.

Um número real ξ é um zero da função f(x) ou uma raiz da equação f(x) = 0 se $f(\xi) = 0$.

Em alguns casos, por exemplo, de equações polinomiais, os valores de x que anulam f(x) podem ser reais ou complexos. Neste capítulo, estaremos interessados somente nos zeros reais de f(x).

Graficamente, os zeros reais são representados pelas abcissas dos pontos onde uma curva intercepta o eixo ox.



Como obter raízes reais de uma equação qualquer?

Sabemos que, para algumas equações, como por exemplo às equações polinomiais do segundo grau, existem fórmulas explicitas que dão as raízes em função dos coeficientes (ex. regra de Báskara). No entanto, no caso de polinômios de grau mais elevado e no caso de funções mais complicadas, é praticamente impossível se achar zeros exatamente. Por isso, temos que dos contentar em encontrar apenas aproximações para esses zeros (soluções numéricas); mas isto não é uma limitação muito séria, pois, com os métodos que apresentaremos , conseguimos, a menos de limitações de maquinas, encontrar os zeros de uma função com qualquer precisão prefixada.

A idéia 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.

Por isso, os métodos constam de duas fases:

- FASE I: Localização ou isolamento das raízes, que consiste em obter um intervalo que contém a raiz;
- FASE II: Refinamento, que consiste em, escolhidas aproximações iniciais no intervalo encontrado na Fase I, melhorá-las sucessivamente até se obter uma aproximação para a raiz dentro de uma precisão ε prefixada.

2. FASE I – Isolamento das raízes

Nesta fase é feita uma análise teórica e gráfica da função f(x). É importante ressaltar que o sucesso da fase II depende fortemente da precisão desta análise. Na analise teórica usamos freqüentemente o teorema:

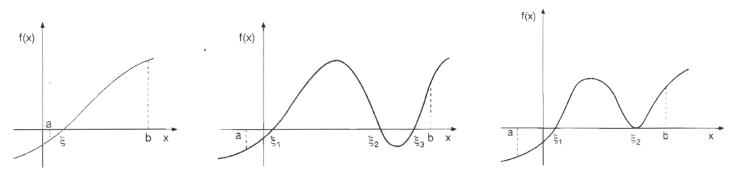
TEOREMA 1

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

Se f(a)f(b) < 0 então existe pelo menos um ponto $x = \xi$ entre a e b que é zero de f(x).

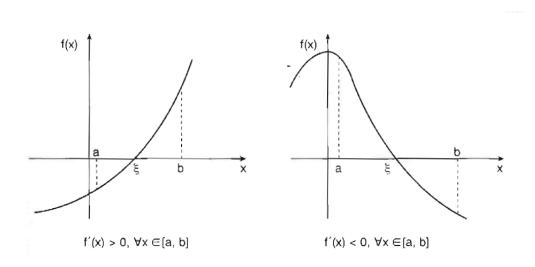
Pois
$$+\times+\rightarrow+$$
, $-\times-\rightarrow+$; $+\times-$ ou $-\times+\rightarrow-$

Graficamente temos:



Obs. Sob as hipóteses do teorema anterior, se f'(x) existir e se f'(x) preservar sinal dentro de (a, b), então este intervalo contém um único zero de f(x).

Graficamente:



Uma forma de se isolar as raízes de f(x) usando resultados anteriores é tabelar f(x) para vários valores de x e analisar as mudanças de sinal de f(x) e o sinal da derivada nos intervalos em que f(x) mudou de sinal.

Exemplo 1

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

Construindo uma tabela de valores para f(x) e considerando apenas os sinais, temos:

Sabendo que f(x) é contínua para qualquer x real e observando as variações de sinal, podemos concluir que cada um dos intervalos $I_1 = [-5, -3]$, $I_2 = [0, 1]$ e $I_3 = [2, 3]$ contém pelo menos um zero de f(x).

Como f(x) é polinômio de grau 3, podemos afirmar que cada intervalo contém um único zero de f(x); assim, localizamos todas as raízes de f(x) = 0.

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

Temos que $D(f) = \mathbb{R}^+ (D(f) = \text{domínio de } f(x))$

Construindo uma tabela de valores com o sinal de f(x) para determinados valores de x temos:

Analisando a tabela, vemos que f(x) admite pelo menos um zero no intervalo (1, 2).

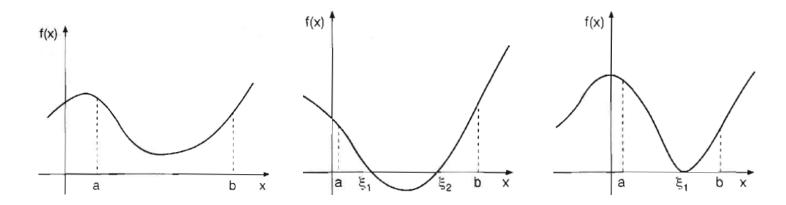
Para se saber se este zero é único neste intervalo, podemos usar a observação anterior, isto é, analisar o sinal de f'(x):

$$f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}} + 5e^{-x} > 0, \quad \forall x > 0.$$

Assim, podemos concluir que f(x) admite um único zero em todo seu domínio de definição e este zero está no intervalo (1, 2).

OBSERVAÇÃO

Se f(a)f(b) > 0 então podemos ter várias situações no intervalo [a, b], conforme mostram os gráficos:



A análise gráfica da função f(x) ou da equação f(x) = 0 é fundamental para se obter boas aproximações para a raiz.

Para tanto, é suficiente utilizar um dos seguintes processos:

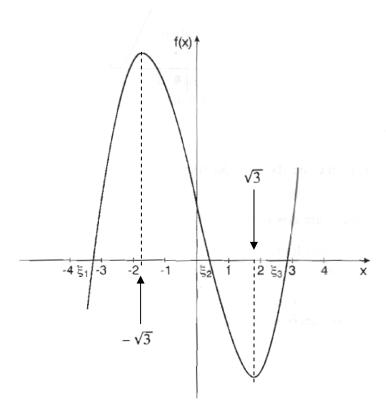
- esboçar o gráfico da função f(x) e localizar as abcissas dos pontos onde a curva intercepta o eixo ox;
- ii) a partir da equação f(x) = 0, obter a equação equivalente g(x) = h(x), esboçar os gráficos das funções g(x) e h(x) no mesmo eixo cartesiano e localizar os pontos x onde as duas curvas se interceptam, pois neste caso f(ξ) = 0 ⇔ g(ξ) = h(ξ);
- iii) usar os programas que traçam gráficos de funções, disponíveis em algumas calculadoras ou softwares matemáticos.

O esboço do gráfico de uma função requer um estudo detalhado do comportamento desta função, que envolve basicamente os itens: domínio da função; pontos de descontinuidade; intervalos de crescimento e decrescimento; pontos de máximo e mínimo; concavidade; pontos de inflexão e assíntotas da função.

Exemplo 2

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

Usando o processo (i), temos:



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

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

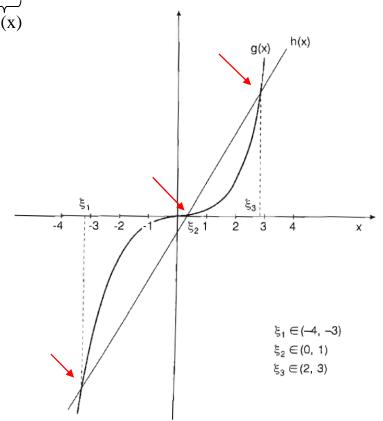
$$f'(x) = 0 \Leftrightarrow x = \pm \sqrt{3}$$

X	f(x)
-4	-25
-3	3
$-\sqrt{3}$	13.3923
-1	11
0	3
1	-5
$\sqrt{3}$	-7.3923
2	_7
3	3
	•

$$\xi_1 \in (-4, -3)$$

 $\xi_2 \in (0, 1)$
 $\xi_3 \in (2, 3)$

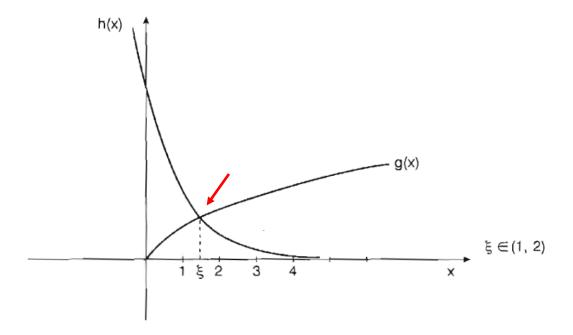
E, usando o processo (ii): da equação $x^3 - 9x + 3 = 0$, podemos obter a equação equivalente $x^3 = 9x - 3$. Neste caso, temos $g(x) = x^3$ e h(x) = 9x - 3. Assim, g(x) = h(x)



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

Neste caso, é mais conveniente usar o processo (ii):

$$\sqrt{x} - 5e^{-x} = 0 \Leftrightarrow \sqrt{x} = 5e^{-x} \Rightarrow g(x) = \sqrt{x} e h(x) = 5e^{-x}$$



3. FASE II – Refinamento da raiz

Veremos agora vários métodos numéricos de refinamento de raiz.

- i) Método da Bissecção
- ii) Método da Posição Falsa
- iii) Método do Ponto Fixo
- iv) Método de Newton-Rapson
- v) Método da Secante

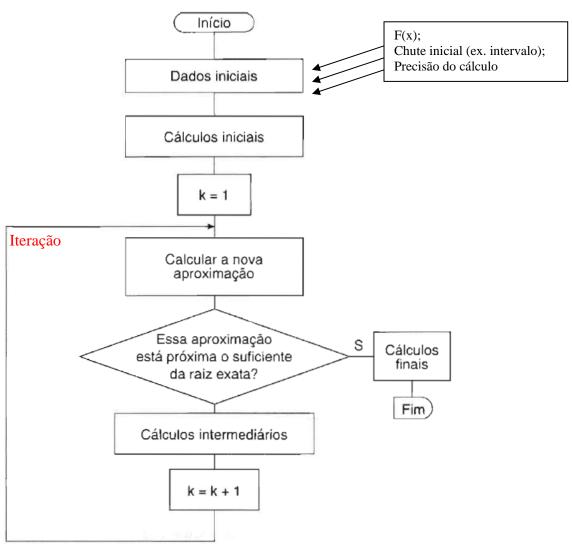
A forma como se efetua o refinamento é que diferencia os métodos. Todos eles pertencem à classe dos métodos iterativos.

Um método interativo consiste em uma seqüência de instruções que são executadas passo a passo, algumas das quais são repetidas em ciclos.

A execução de um ciclo recebe o nome de *iteração*. Cada iteração utiliza resultados das iterações anteriores e efetua determinados testes que permitem verificar se foi atingido um resultado próximo o suficiente do resultado esperado.

Observamos que os métodos iterativos para obter zeros de funções fornecem apenas uma aproximação para a solução exata.

Os métodos iterativos para refinamento da aproximação inicial para a raiz exata podem ser colocados num diagrama de fluxo:



3.1. Critérios de parada dos métodos

Pelo diagrama de fluxo verifica-se que todos os métodos iterativos para obter zeros de função efetuam um teste do tipo:

x, está suficientemente próximo da raiz exata?

Que tipo de teste efetuar para se verificar se x_k está suficientemente próximo da raiz exata? Para isto é preciso entender o significado de raiz aproximada.

Existem duas interpretações para raiz aproximada que nem sempre levam ao mesmo resultado:

 \overline{x} é raiz aproximada com precisão ϵ se:

i)
$$|\overline{x} - \xi| < \varepsilon$$
 ou

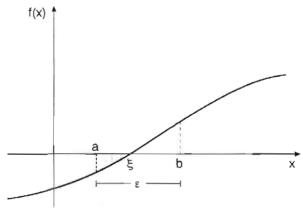
ii) $|f(\overline{x})| < \varepsilon$.

Em geral a precisão ϵ é um número muito pequeno, como por exemplo $\epsilon \sim 0,000001 = 10^{-6}$

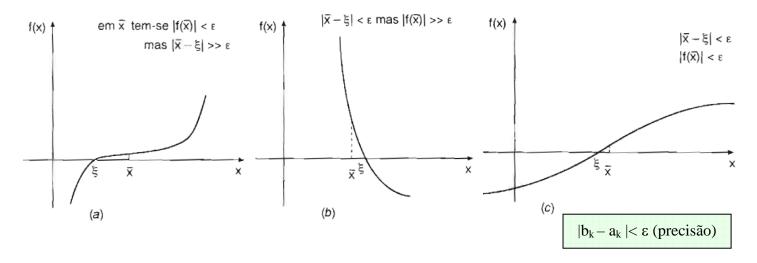
Como efetuar o teste (i) se não conhecemos ξ?

Uma forma é reduzir o intervalo que contém a raiz a cada iteração. Ao se conseguir um intervalo [a, b] tal que:

$$\xi \in [a, b]$$
 então $\forall x \in [a, b], |x - \xi| < \epsilon$. Portanto, $\forall x \in [a, b]$ pode ser tomado como \bar{x}



Nem sempre é possível ter as exigências (i) e (ii) satisfeitas simultaneamente. Os gráficos a seguir ilustram algumas possibilidades:



Os métodos numéricos são desenvolvidos de forma a satisfazer pelo menos um dos critérios.

Observamos que, dependendo da ordem de grandeza dos números envolvidos, é aconselhável usar teste do erro relativo, como por exemplo, considerar \tilde{x} como aproximação de ξ se $\frac{|f(\tilde{x})|}{L} < \epsilon$ onde L = |f(x)| para algum x escolhido numa vizinhança de ξ .

Em programas computacionais, além do teste de parada usado para cada método, deve-se ter o cuidado de estipular um <u>número máximo de iterações</u> para se evitar que o programa entre em "looping" devido a erros no próprio programa ou à inadequação do método usado para o problema em questão.

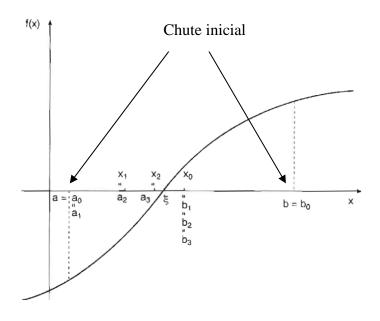
Veremos a seguir as características dos diferentes métodos iterativos para se obter zeros reais de funções.

I) Método da Bisseção

Seja a função f(x) contínua no intervalo [a,b] e tal que f(a)f(b) < 0. Vamos supor, para simplificar, que o intervalo (a,b) contenha apenas uma única raiz da equação f(x)=0.

O objetivo deste método é reduzir a amplitude do intervalo que contém a raiz até atingir a precisão requerida: $|b_k - a_k| < \varepsilon$, usando para isto a sucessiva divisão de [a,b] ao meio.

Graficamente temos:



As iterações são realizadas da seguinte forma:

Obs. Escolhe-se um novo intervalo quando há diferença de sinal entre eles.

Exemplo 3

Já vimos que a função $f(x) = x \log(x) - 1$ tem um zero em (2, 3).

O método da bissecção aplicado a esta função com [2, 3] como intervalo inicial fornece:

$$x_0 = \frac{2+3}{2} = 2.5 \quad \begin{cases} f(2) = -0.3979 < 0 \\ f(3) = 0.4314 > 0 \\ f(2.5) = -5.15 \times 10^{-3} < 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \xi \in (2.5, 3) \\ a_1 = x_0 = 2.5 \\ b_1 = b_0 = 3 \end{cases}$$

$$x_1 = \frac{2.5 + 3}{2} = 2.75 \quad \begin{cases} f(2.5) < 0 \\ f(3) > 0 \\ f(2.75) = 0.2082 > 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \frac{1}{2} \in (2.5, 2.75) \\ a_2 = a_1 = 2.5 \\ b_2 = x_1 = 2.75 \end{cases}$$

.

ALGORITMO 1

Seja f(x) contínua em [a, b] e tal que f(a)f(b) < 0.

- 1) Dados iniciais:
 - a) intervalo inicial [a, b], função
 - b) precisão ε
- 2) Se $(b-a) < \varepsilon$, então escolha para \bar{x} qualquer $x \in [a, b]$. FIM.
- 3) k = 1
- 4) M = f(a)
- 5) $x = \frac{a + b}{2}$
- 6) Se Mf(x) > 0, faça a = x. Vá para o passo 8.
- 7) b = x
- 8) Sc $(b-a) < \varepsilon$, escolha para \overline{x} qualquer $x \in [a, b]$. FIM.
- 9) k = k + 1. Volte para o passo 5.

Terminado o processo, teremos um intervalo [a, b] que contém a raiz (e tal que $(b-a) < \epsilon$) e uma aproximação \overline{x} para a raiz exata.

É bastante intuitivo perceber que se f(x) é contínua no intervalo [a, b] e f(a)f(b) < 0, o método da bissecção vai gerar uma sequência $\{x_k\}$ que converge para a raiz.

I.1. Estimativa do número de iterações do método da bissecção

$$k > \frac{\log(b_0 - a_0) - \log(\epsilon)}{\log(2)} \qquad \qquad \epsilon = (\text{precisão})$$

Portanto se k satisfaz a relação acima, ao final da iteração k teremos o intervalo [a, b] que contém a raiz ξ , tal que $\forall x \in [a, b] \Rightarrow |x - \xi| \leq b - a < \varepsilon$.

Por exemplo, se desejarmos encontrar ξ , o zero da função $f(x) = x \log(x) - 1$ que está no intervalo [2, 3] com precisão $\varepsilon = 10^{-2}$, quantas iterações, no mínimo, devemos efetuar?

$$k > \frac{\log(3-2) - \log(10^{-2})}{\log(2)} = \frac{\log(1) + 2\log(10)}{\log(2)} = \frac{2}{0.3010} \approx 6.64 \Rightarrow k = 7$$

I.2. Observações finais sobre o método da bissecção

conforme demonstramos, satisfeitas as hipóteses de continuidade de f(x) em [a, b] e de troca de sinal em a e b, o método da bissecção gera uma sequência convergente, ou seja, é sempre possível obter um intervalo que contém a raiz da equação em estudo, sendo que o comprimento deste intervalo final satisfaz a precisão requerida;

as iterações não envolvem cálculos laboriosos;

a convergência é muito lenta, pois se o intervalo inicial é tal que b₀ - a₀ >> ε
e se ε for muito pequeno, o número de iterações tende a ser muito grande,
como por exemplo:

$$\begin{vmatrix} b_0 - a_0 = 3 \\ \epsilon = 10^{-7} \end{vmatrix} \Rightarrow k \ge 24.8 \Rightarrow k = 25.$$

 $|b_k - a_k| < \epsilon \text{ (precisão)}$

Exercício 1 – Encontre a raiz da equação $f(x)=x^3-9x+3$ utilizando o método da bissecção e as condições: Chute inicial, I=[0,1], e precisão $\varepsilon=2x10^{-3}$.

Solução:

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

teração	x	f(x)	b – a
1	.5	-1.375	1
2	.25	.765625	.5
3	.375	322265625	.25
4	.3125	.218017578	.125
5	.34375	0531311035	.0625
6	.328125	.0822029114	.03125
7	.3359375	.0144743919	.015625
8	.33984375	0193439126	7.8125×10^{-3}
9	.337890625	$-2.43862718 \times 10^{-3}$	3.90625×10^{-3}
10	.336914063	$6.01691846 \times 10^{-3}$	1.953125×10^{-3}
Ent	$\bar{a}o \bar{x} = 0.336914063$ em		$ b_{10} - a_{10} < \varepsilon$ $ x_{10} < \varepsilon$ Não!

II) Método da Posição Falsa

Seja f(x) contínua no intervalo [a,b] e tal que f(a)f(b) < 0.

Supor que o intervalo (a, b) contenha uma única raiz da equação f(x) = 0.

Podemos esperar conseguir a raiz aproximada \bar{x} usando as informações sot valores de f(x) disponíveis a cada iteração.

No caso do método da bissecção, x é simplesmente a média aritmética entre a e b:

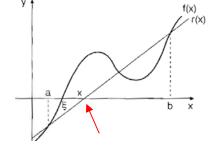
$$x = \frac{a + b}{2}$$

No exercício 1, temos $f(x) = x^3 - 9x + 3$, intervalo inicial [a,b]=[0,1] e vimos que f(1) = -5 < 0 < 3 = f(0). Como |f(0)| está mais próximo de zero que |f(1)|, é provável que a raiz esteja mais próxima de 0 que de 1 (pelo menos isto ocorre quando f(x) é linear em [a, b]).

Assim, em vez de tomar a média aritmética entre a e b, o método da posiçad falsa toma a média aritmética ponderada entre a e b com pesos | f(b) | e | f(a) |, respectivamente:

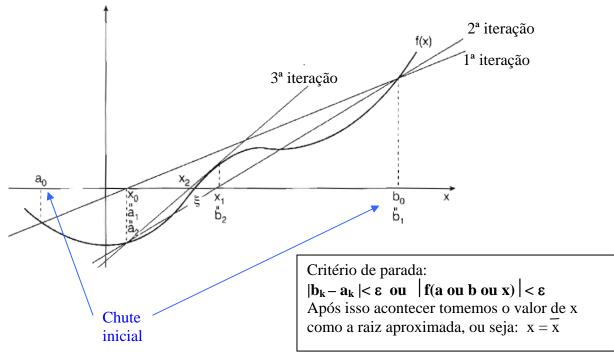
$$x = \frac{a |f(b)| + b |f(a)|}{|f(b)| + |f(a)|} = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$

visto que f(a) e f(b) têm sinais opostos.



Graficamente, este ponto x é a intersecção entre o eixo \overrightarrow{ox} e a reta r(x) que passa por (a, f(a)) e (b, f(b)):

E as iterações são feitas assim:



Exemplo 4

Como seria as primeiras 2 iterações do Método da Posição Falsa aplicado à função $f(x) = x \log(x) - 1$ sabendo que esta tem pelo menos uma raiz no intervalo $[a_0, b_0] = [2,3]$.

$$f(a_0) = -0.3979 < 0$$

$$f(b_0) = 0.4314 > 0$$
Ok! Existe pelo menos 1 raiz dentro desse intervalo!

$$\Rightarrow x_0 = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)} = \frac{2 \times 0.4314 - 3 \times (-0.3979)}{0.4314 - (-0.3979)} = \frac{2.0565}{0.8293} = 2.4798$$

 $f(x_0) = -0.0219 < 0$. Como $f(a_0)$ e $f(x_0)$ têm o mesmo sinal,

$$\begin{cases} a_1 = x_0 = 2.4798 & f(a_1) < 0 \\ b_1 = 3 & f(b_1) > 0 \end{cases} Ok!$$

$$\Rightarrow x_1 = \frac{2.4798 \times 0.4314 - 3 \times (-0.0219)}{0.4314 - (-0.0219)} = 2.5049 \quad e \quad f(x_1) = -0.0011.$$

Analogamente, temos parada. $\begin{cases} a_2 = x_1 = 2.5049 \\ b_2 = b_1 = 3 \end{cases}$ e o processo continua até se atingir um dos critérios de

ALGORITMO 2

Seja f(x) continua em [a, b] e tal que f(a)f(b) < 0.

- 1) Dados iniciais
 - a) intervalo inicial [a, b], função

b) precisões ε_1 e ε_2 Podemos ter ainda: $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$

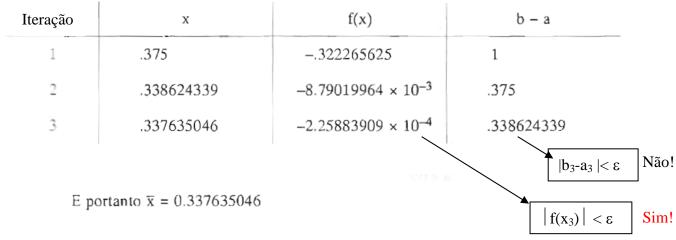
2) Se $(b-a) < \varepsilon_1$, então escolha para \overline{x} qualquer $x \in [a, b]$. FIM

se
$$|f(a)| < \epsilon_2$$
 escolha a ou b como \overline{x} . FIM. ou se $|f(b)| < \epsilon_2$

- 3) k = 1
- 4) M = f(a)
- 5) $x = \frac{af(b) bf(a)}{f(b) f(a)}$
- 6) Se $|f(x)| < \varepsilon_2$, escolha $\overline{x} = x$. FIM.
- 7) Se Mf(x) > 0, faça a = x. Vá para o passo 9.
- 8) b = x
- 9) Se b a < ϵ_1 , então escolha para \bar{x} qualquer $x \in (a, b)$. FIM.
- 10) k = k + 1. Volte ao passo 5.

Exercício 2 – Encontre a raiz da equação $f(x) = x^3 - 9x + 3$ utilizando o método da posição falsa usando como condições iniciais o intervalo I = [0,1] e $\varepsilon = 2 \times 10^{-3}$

Solução:



Comparando esse método com o anterior para a função $f(x) = x^3 - 9x + 3$ utilizando com condições iniciais o intervalo I = [0,1] e $\varepsilon = 2 \times 10^{-3}$ observamos que o método da bissecção necessitou de 10 iterações para obter a resposta e o método da posição falsa necessitou de apenas 3.

Obs. Se f(x) é contínua no intervalo [a,b] com f(a)f(b) < 0 então o método da posição falsa gera uma sequência convergente assim como no método que vimos anteriormente.

III) Método do Ponto Fixo (MPF)

A importância deste método está mais nos conceitos que são introduzidos em seu estudo que em sua eficácia computacional.

Seja f(x) uma função contínua em [a,b], intervalo que contém uma raiz da equação f(x)=0.

O MPF consiste em transformar esta equação em uma equação equivalente $x = \phi(x)$ e a partir de uma aproximação inicial x_0 (chute inicial) gerar a seqüência $\{x_k\}$ de aproximações para ξ (raiz) pela relação $x_{k+1} = \phi(x_k)$ pois a função $\phi(x)$ é tal que $f(\xi)=0$ se e somente se $\phi(\xi)=\xi$. Dessa forma transformamos o problema de encontrar um zero de f(x) no problema de encontrar um ponto fixo de $\phi(x)$.

Uma função $\phi(x)$ que satisfaz a condição acima é chamada de função de iteração para a equação f(x)=0.

Exemplo 5

Para a equação $f(x) = x^2 + x - 6 = 0$ temos várias funções de iteração, entre as quais:

a)
$$\varphi_1(x) = 6 - x^2$$
;

b)
$$\varphi_2(x) = \pm \sqrt{6 - x}$$
;

c)
$$\varphi_3(x) = \frac{6}{x} - 1;$$

$$d) \quad \varphi_4(x) = \frac{6}{x+1}$$

A forma geral das funções de iteração $\varphi(x)$ é $\varphi(x) = x + A(x)f(x)$, com a condição que em ξ , ponto fixo de $\varphi(x)$, se tenha $A(\xi) \neq 0$.

Mostremos que $f(\xi) = 0 \Leftrightarrow \varphi(\xi) = \xi$.

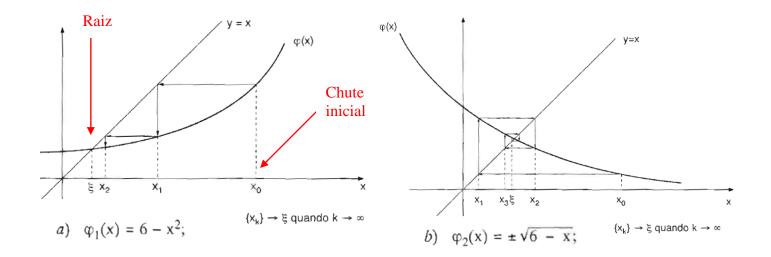
(⇒) seja
$$\xi$$
 tal que $f(\xi) = 0$.

$$\varphi(\xi) = \xi + A(\xi)f(\xi) \Rightarrow \varphi(\xi) = \xi \text{ (porque } f(\xi) = 0).$$

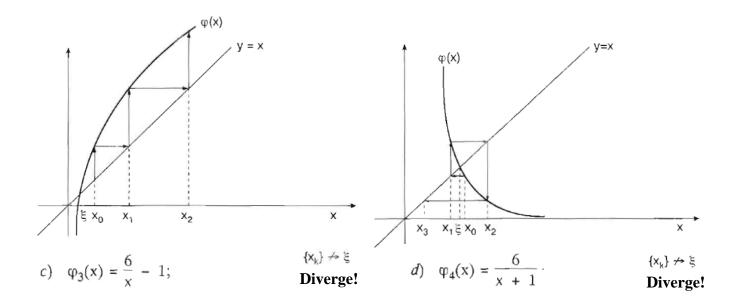
$$(\Leftarrow) \text{ se } \varphi(\xi) = \xi \Rightarrow \xi + A(\xi)f(\xi) = \xi \Rightarrow A(\xi)f(\xi) = 0 \Rightarrow f(\xi) = 0 \text{ (porque } A(\xi) \neq 0).$$

Com isto vemos que, dada uma equação f(x) = 0, existem infinitas funções de iteração $\phi(x)$ para a equação f(x) = 0.

Graficamente, uma raiz da equação x=φ(x) é a abscissa do ponto de intersecção da reta y=x e da curva $y=\varphi(x)$.



Contudo, para certas escolhas de $\varphi(x)$, o processo pode gerar uma seqüência que diverge de ξ .



III.1 Condições para convergência:

Seja ξ uma raiz da equação f(x) = 0, isolada num intervalo I centrado em ξ .

Seja $\varphi(x)$ uma função de iteração para a equação f(x) = 0.

Se

iii)

$$i) \quad \varphi(x) \in \varphi'(x) \text{ são contínuas em I,}$$

$$ii) \quad |\varphi'(x)| \leq M < 1, \forall x \in I \text{ e}$$

$$iii) \quad x_0 \in I,$$

Baixa inclinação!

então a sequência $\{x_k\}$ gerada pelo processo iterativo $x_{k+1} = \phi(x_k)$ converge para ξ .

Exemplo 6

Embora não seja preciso usar método numérico para se encontrar as duas raízes reais $\xi_1 = -3$ e $\xi_2 = 2$ da equação $x^2 + x - 6 = 0$, vamos trabalhar com duas das funções de iteração dadas no Exemplo 7 para demonstrar numérica e graficamente a convergência ou Chute inicial não do processo iterativo.

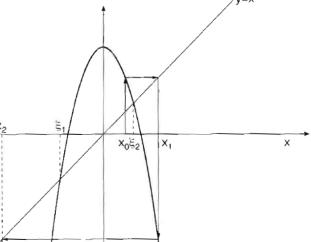
Consideremos primeiramente a raiz $\xi_2 = 2 e \varphi_1(x) = 6 - x^2$. Tomando $x_0 = 1.5$ temos $\varphi(x) = \varphi_1(x) e$

$$x_1 = \varphi(x_0) = 6 - 1.5^2 = 3.75$$

$$x_2 = \varphi(x_1) = 6 - (3.75)^2 = -8.0625$$

$$x_3 = \varphi(x_2) = 6 - (-8.0625)^2 = -59.003906$$

$$x_4 = \varphi(x_3) = -(-59.003906)^2 + 6 = -3475.4609$$



 $\varphi(x)$

e podemos ver que $\{x_k\}$ não está convergindo para $\xi_2 = 2$

Seja agora $\xi_2 = 2$, $\varphi_2(x) = \sqrt{6-x}$ e novamente $x_0 = 1.5$. Temos, assim, $\varphi(x) = \varphi_2(x) e$

$$x_1 = \varphi(x_0) = \sqrt{6-1.5} = 2.12$$

$$x_2 = \varphi(x_1) = 1.96944$$

$$x_3 = \varphi(x_2) = 2.00763$$

$$x_4 = \varphi(x_3) = 1.99809$$

$$x_5 = \varphi(x_4) = 2.00048$$

$$\varphi(x)$$
e podemos ver que $\{x_k\}$ está convergindo para $\xi_2 = 2$.

II – Encontrando Raízes de funções – Cálculo Numérico – Prof. Dr. Sergio Pilling

ALGORITMO 3

Considere a equação f(x) = 0 e a equação equivalente $x = \phi(x)$.

Supor que as hipóteses do Teorema 2 estão satisfeitas.

- 1) Dados iniciais:
 - a) x_0 : aproximação inicial; função e $\varphi(x)$
 - b) $\epsilon_1 \in \epsilon_2$: precisões. \longrightarrow Podemos ter ainda: $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$
- 2) Se $|f(x_0)| < \varepsilon_1$, faça $\overline{x} = x_0$. FIM.
- 3) k = 1
- 4) $x_1 = \varphi(x_0)$
- 5) Se $|f(x_1)| < \epsilon_1$ ou se $|x_1 x_0| < \epsilon_2$ então faça $\overline{x} = x_1$. FIM.
- 6) $x_0 = x_1$
- 7) k = k + 1Volte ao passo 4.

Exemplo 7 – Verificando a convergência antes de fazer as contas.

Analisaremos aqui a função $\varphi_3(x) = \frac{6}{x} - 1$ e a convergência da seqüência $\{x_k\}$ para $\xi_1 = -3$; usando $x_0 = -2.5$:

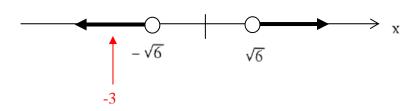


$$\varphi'(x) = \frac{-6}{x^2} < 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}, \quad x \neq 0$$



$$|\varphi'(x)| = |\frac{-6}{x^2}| = \frac{6}{x^2} \quad \forall \ x \in \mathbb{R}, \quad x \neq 0$$

$$\left|\,\phi'(x)\,\right|\,<\,1\,\Leftrightarrow\,\frac{-6}{x^2}\,<\,1\,\Leftrightarrow\,x^2\,>\,6\,\Leftrightarrow\,x\,<\,-\,\sqrt{6}\,\text{ ou }x\,>\,\sqrt{6}$$



Assim, como o objetivo é obter a raiz negativa, temos que

$$I_1$$
 tal que $| \phi'(x) | < 1, \forall x \in I_1$, será: $I_1 = (-\infty; \sqrt{6})$.

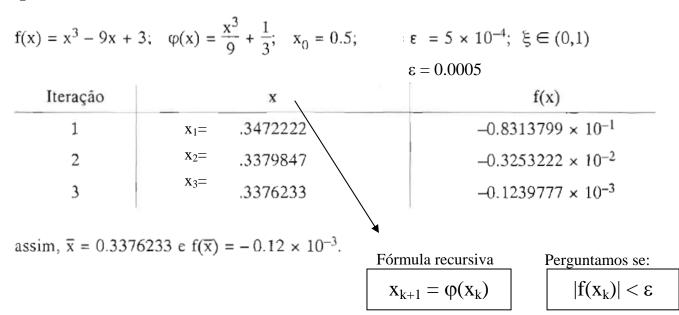
$$(\sqrt{6} \approx 2.4494897)$$

Podemos, pois, trabalhar no intervalo I = [-3.5, -2.5] que o processo convergirá, visto que $I \subseteq I_1$ está centrado na raiz $\xi_1 = -3$.

Tomando
$$x_0 = -2.5$$
, temos: $x_1 = -3.4$ $x_1 = \phi(x_0) = 6/x_0 - 1$ $x_2 = -2.764706$ $x_2 = \phi(x_1) = 6/x_1 - 1$ $x_3 = -3.170213$ $x_4 = -2.892617$

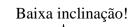
Como a raiz $\xi_1 = -3$ é conhecida, é possível escolher um intervalo I centrado em ξ_1 , tal que em I as condições do teorema são satisfeitas. Contudo, ao se aplicar o MPF na resolução de uma equação f(x) = 0, escolhe-se I "aproximadamente" centrado em ξ . Quanto mais preciso for o processo de isolamento de ξ , maior exatidão será obtida na escolha de I.

Exemplo 8



IV) Método de Newton-Raphson

No estudo do método do ponto fixo, vimos que:



i) uma das condições de convergência é que | φ'(x) | ≤ M < 1, ∀ x ∈ I, onde
 I é um intervalo centrado na raiz;

→ ii) a convergência do método será mais rápida quanto menor for | φ'(ξ) |.

O que o método de Newton faz, na tentativa de garantir e acelerar a convergência do MPF, é escolher para função de iteração a função $\varphi(x)$ tal que $\varphi'(\xi) = 0$.

O Método de Newton é obtido geometricamente da seguinte forma:

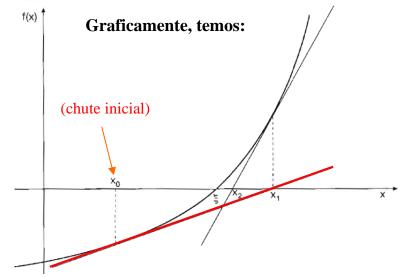
dado o ponto $(x_k, f(x_k))$ traçamos a reta $L_k(x)$ tangente à curva neste ponto:

$$L_k(x) = f(x_k) + f'(x_k) (x - x_k).$$

 $L_k(x)$ é um modelo linear que aproxima a função f(x) numa vizinhança de x_k .

Encontrando o zero deste modelo, obtemos:

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



Exemplo 9

(chute inicial)

Consideremos $f(x) = x^2 + x - 6$, $\xi_2 = 2 e^{-\frac{1}{x_0}} = 1.5$

Nessa técnica devemos calcular a derivada da função f´(x)

Fórmula recursiva
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_k - \frac{x_k^2 + x_k - 6}{2x_k + 1}$$

Temos, pois,

$$x_0 = 1.5$$

$$x_1 = 2.0625$$

$$x_2 = 2.00076$$

$$x_3 = 2.00000$$
.

ESTUDO DA CONVERGÊNCIA DO MÉTODO DE NEWTON

TEOREMA 3

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

Então, existe um intervalo $\overline{I} \subset I$, contendo a raiz ξ , tal que se $x_0 \in \overline{I}$, a sequência $\{x_k\}$ gerada pela fórmula recursiva $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ convergirá para a raiz.

Exemplo 10

Comprovaremos neste exemplo que uma escolha cuidadosa da aproximação inicial é, en geral, essencial para o bom desempenho do método de Newton.

Consideremos a função $f(x) = x^3 - 9x + 3$ que possui três zeros: $\xi_1 \in I_1 = (-4, -3]$ $\xi_2 \in I_2 = (0, 1)$ e $\xi_3 \in I_3 = (2, 3)$ e seja $x_0 = 1.5$. A seqüência gerada pelo método é

	Chute i	inicial
Iteração	Х	f(x)
1	-1.6666667	0.1337037×10^{2}
2	18.3888889	0.6055725×10^4
3	12.3660104	0.1782694×10^4 Diverge um
4	8.4023067	0.5205716×10^3 pouco!
5	5.83533816	0.1491821×10^3
6	4.23387355	0.4079022×10^2
7	3.32291096	0.9784511×10
8	2.91733893	0.1573032×10
9	2.82219167	0.7837065×10^{-1}
10	2.81692988	0.2342695×10^{-3}

Podemos observar que de início há uma divergência da região onde estão as raizes mas, a partir de x_7 , os valores aproximam-se cada vez mais de ξ_3 . A causa da divergência inicial é que x_0 está próximo de $\sqrt{3}$ que é um zero de f'(x) e esta aproximação inicial gera $x_1 = -1.66667 \approx -\sqrt{3}$ que é o outro zero de f'(x) pois

$$f'(x) = 3x^2 - 9 \Rightarrow f'(x) = 0 \Leftrightarrow x = \pm \sqrt{3}$$
.

ALGORITMO 4

Seja a equação f(x)=0

Supor que estão satisfeitas as hipóteses do Teorema 3.

- 1) Dados iniciais:
 - a) x_0 : aproximação inicial; f(x); f'(x).
 - b) ε_1 e ε_2 : precisões

Podemos ter ainda: $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$

- \longrightarrow 2) Se | f(x₀) | < ε_1 , faça $\overline{x} = x_0$. FIM.
 - 3) k = 1

4)
$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Chute inicial

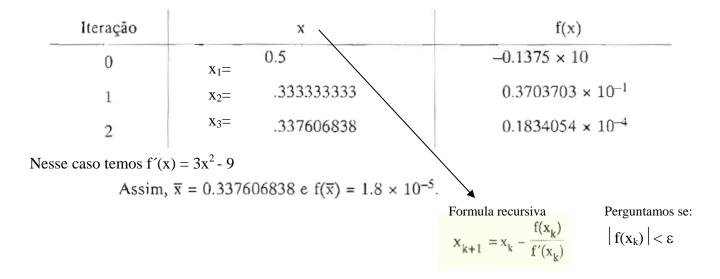
- 6) $x_0 = x_1$
- 7) k = k + 1Volte ao passo 4.

Exemplo 11

plo 11 $f(x) = x^3 - 9x + 3; x_0 = 0.5;$

$$\varepsilon = 1 \times 10^{-4}; \quad \xi \in (0,1).$$

Os resultados obtidos ao aplicar o método de Newton são:



V) Método da Secante

Chutes

iniciais

Uma grande desvantagem do método de Newton é a necessidade de se obter-f'(x) e calcular seu valor numérico a cada iteração.

Requer um processador rápido para não tomar muito tempo de máquina!

Uma forma de se contornar este problema é substituir a derivada $f'(x_k)$ pelo quociente das diferenças:

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

onde x_k e x_{k-1} são duas aproximações para a raiz.

Neste caso, a função de iteração fica

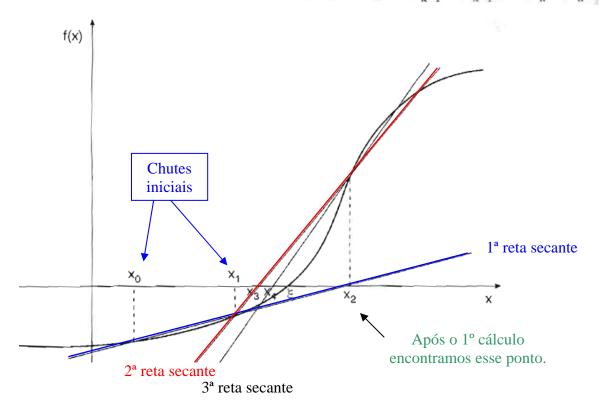
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})} (x_k - x_{k-1})$$

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

Observamos que são necessárias duas aproximações para se iniciar o método.

INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA

A partir de duas aproximações x_{k-1} e x_k , o ponto x_{k+1} é obtido como sendo a abcissa do ponto de intersecção do eixo \overrightarrow{ox} e da reta secante que passa por $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$ e $(x_k, f(x_k))$:



Chutes iniciais

Consideremos $f(x) = x^2 + x - 6$; $\xi_2 = 2$; $x_0 = 1.5$ e $x_1 = 1.7$. Então,

$$x_2 = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{1.5(-1.41) - 1.7(-2.25)}{-1.41 + 2.25} = 2.03571$$

$$x_3 = \frac{x_1 f(x_2) - x_2 f(x_1)}{f(x_2) - f(x_1)} = \frac{1.7(0.17983) - (2.03571)(-1.41)}{0.17983 + 1.41} = 1.99774$$

$$x_4 = \frac{x_2 f(x_3) - x_3 f(x_2)}{f(x_3) - f(x_2)} = \frac{(2.03571)(-0.01131) - (1.99774)(0.17983)}{-0.01131 - 0.17983} = 1.99999$$

.... e o processo continua até que se obtenha a precisão desejada ε aplicando-se o critério de parada $|f(x_k)| < \varepsilon$ ou, ainda em alguns, casos pode se ter ainda o critério de parada $|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon$.

ALGORITMO 5

Seja a equação f(x) = 0.

- 1) Dados iniciais:
 - a) x₀ e x₁: aproximações iniciais; função
 - b) $\epsilon_1 \in \epsilon_2$: precisões. \longrightarrow Podemos ter ainda: $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon$

$$\longrightarrow$$
 2) Se $|f(x_0)| < \varepsilon_1$, faça $\overline{x} = x_0$. FIM.

$$\longrightarrow 3) \quad \text{Se } |f(x_1)| < \varepsilon_1$$

$$\longrightarrow \quad \text{ou se } |x_1 - x_0| < \varepsilon_2$$

$$\int fa \zeta a \ \overline{x} = x_1. \text{ FIM.}$$

4)
$$k = 1$$

5)
$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f(x_1) - f(x_0)} (x_1 - x_0)$$

7)
$$x_0 = x_1$$

 $x_1 = x_2$

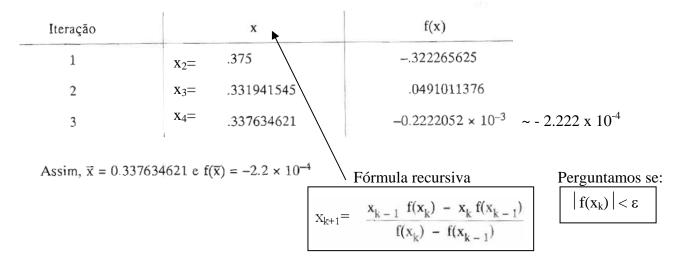
8)
$$k = k + 1$$

Volte ao passo 5.

Exercício 3

Considere a função contínua $F(x) = x^3 - 9x + 3$. Aplique o método da secante para encontrar uma raiz com precisão melhor do que 5 x 10⁻⁴ (ϵ =0.0005) usando os pontos x₀=0 e x₁=1 como chute inicial.

Os resultados obtidos ao aplicarmos o método da secante são:



Comentários Finais

Visto que o método da secante é uma aproximação para o método de Newton, as condições para a convergência do método são praticamente as mesmas; acrescente-se ainda que o método pode divergir se $f(x_k) \approx f(x_{k-1})$.

4 Revisão

- Teorema 1:

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

Se f(a)f(b) < 0 então existe pelo menos um ponto $x = \xi$ entre a e b que é zero de f(x).

Complemento do teorema 1: Se f'(x) existir e preservar sinal em (a, b), então este intervalo contém um único zero de f(x).

- Critérios de parada dos métodos iterativos:

Nos mét. com intervalo inicial I=[a,b] (Bissecção e posição falsa) \rightarrow | b-a | $< \epsilon$ ou | f(a ou b ou x) | $< \epsilon$

Nos métodos com chute inicial (MPF, Newton ou Secante) $\rightarrow |f(x_i)| < \epsilon$ Em geral ϵ (precisão estipulada) é um número muito pequeno, por exemplo, $\epsilon \sim 0.000001 = 10^{-6}$

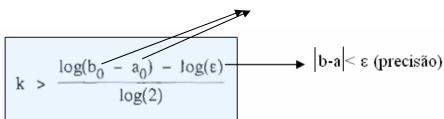
I) Método da Bissecção

$$\begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \downarrow & \bullet \\ a_i & x_i & b_i \end{bmatrix}$$

Obs. Escolhe-se um novo intervalo quando há diferença de sinal entre eles.

$$x_k = \frac{a_k + b_k}{2}$$

Numero de iterações no método da bissecção: Intervalo inicial

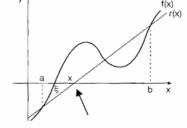


II) Método da Posição Falsa

Assim, em vez de tomar a média aritmética entre a e b, o método da posição falsa toma a média aritmética ponderada entre a e b com pesos | f(b) | e | f(a) |, respectivamente:

$$x = \frac{a | f(b) | + b | f(a) |}{| f(b) | + | f(a) |} = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$

visto que f(a) e f(b) têm sinais opostos.



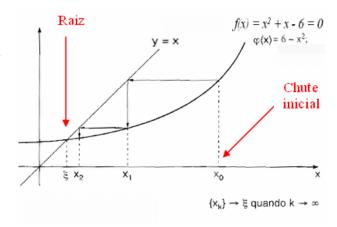
Graficamente, este ponto x é a intersecção entre o eixo \overrightarrow{ox} e a reta r(x) que passa por (a, f(a)) e (b, f(b)):

III) Método da Ponto Fixo (MPF)

Transformar f(x)=0 numa equação equivalente $x=\phi(x)$ e a partir de um chute inicial x_0 gerar uma seqüência $\{x_k\}$ de aproximações através da relação

$$\mathbf{x}_{k+1} = \phi(\mathbf{x}_k)$$

Graficamente, uma raiz da equação $x=\phi(x)$ é a abscissa do ponto de intercessão da reta y=x e da curva $y=\phi(x)$



OBS: Esse método nem sempre converge!

As condições para convergência são:

- i) $\varphi(x) = \varphi'(x)$ são contínuas em I, onde I é um intervalo centrado em ξ (raiz)
- *ii*) $| \phi'(x) | ≤ M < 1, \forall x ∈ I e$ Função com baixa inclinação próxima da raiz.
- iii) $x_0 \in I$,

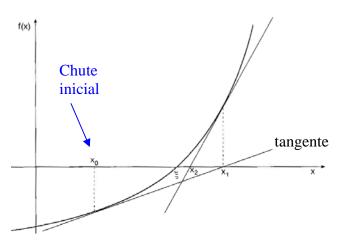
a convergência será mais rápida quanto menor for $|\phi'(\xi)|$

IV) Método de Newton ou Newton-Raphson

Esse método é bem parecido com o MPF, contudo para acelerar a convergência escolhe-se uma $\varphi(\xi)$ tal que $\varphi'(\xi)=0$. Nesse método utilizamos a expressão abaixo no o processo iterativo:

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

onde $x_{k=0}$ é um chute inicial para a raiz

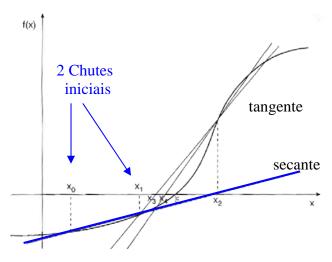


IV) Método da Secante

Uma das desvantagens no método de Newton é a necessidade de se obter f'(x) e calcular seu valor numérico a cada iteração, nesse método a derivada da função é aproximada pela expressão abaixo:

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

onde $x_{k=0}$ é $x_{k=1}$ são chutes iniciais para a raiz. Nesse método utilizamos a expressão abaixo no o processo iterativo:



$$\mathbf{x}_{k+1} = \frac{\mathbf{x}_{k-1} \ f(\mathbf{x}_k) - \mathbf{x}_k \ f(\mathbf{x}_{k-1})}{f(\mathbf{x}_k) - f(\mathbf{x}_{k-1})}$$

OBS: Se tivermos $f(x_k) \sim f(x_{k+1})$ o método pode divergir! Denominador tende a zero!

5 Comparação entre os métodos

Realizemos agora alguns testes com o objetivo de comparar os vários métodos estudados anteriormente.

Esta comparação deve levar em conta vários critérios entre os quais: garantias de convergência, rapidez de convergência, esforço computacional.

Observamos que o único dado que os exemplos fornecem para se medir a rapidez de convergência é o número de iterações efetuadas, o que não nos permite tirar conclusões sobre o tempo de execução do programa, pois o tempo gasto na execução de uma iteração varia de método para método.

Conforme constatamos no estudo teórico, os métodos da bissecção e da posição falsa têm convergência garantida desde que a função seja contínua num intervalo [a, b] tal que f(a)f(b) < 0. Já o MPF e os métodos de Newton e secante têm condições mais restritivas de convergência. Porém, uma vez que as condições de convergência sejam satisfeitas, os dois últimos são mais rápidos que os três primeiros.

O esforço computacional é medido através do número de operações efetuadas a cada iteração, da complexidade destas operações, do número de decisões lógicas, do número de avaliações de função a cada iteração e do número total de iterações.

Tendo isto em mente, percebe-se que é difícil tirar conclusões gerais sobre a eficiência computacional de um método, pois, por exemplo, o método da bissecção é o que efetua cálculos mais simples por iteração enquanto que o de Newton requer cálculos mais elaborados, porque requer o cálculo da função e de sua derivada a cada iteração. No entanto, o número de iterações efetuadas pela bissecção pode ser muito maior que o número de iterações efetuadas por Newton.

Considerando que o método ideal seria aquele em que a convergência estivesse assegurada, a ordem de convergência fosse alta e os cálculos por iteração fossem simples, o método de Newton é o mais indicado sempre que for fácil verificar as condições de convergência e que o cálculo de f'(x) não seja muito elaborado. Nos casos em que é trabalhoso obter e/ou avaliar f'(x), é aconselhável usar o método da secante, uma vez que este é o método que converge mais rapidamente entre as outras opções.

Outro detalhe importante na escolha é o critério de parada, pois, por exemplo, se o objetivo for reduzir o intervalo que contém a raiz, não se deve usar métodos como o da posição falsa que, apesar de trabalhar com intervalo, pode não atingir a precisão requerida, nem secante, MPF ou Newton que trabalham exclusivamente com aproximações x_k para a raiz exata.

Após estas considerações, podemos concluir que a escolha do método está diretamente relacionada com a equação que se quer resolver, no que diz respeito ao comportamento da função na região da raiz exata, às dificuldades com o cálculo de f'(x), ao critério de parada etc.

Exemplo 13

$$f(x) = e^{-x^2} - \cos(x);$$
 $\xi \in (1, 2);$ $\epsilon = 10^{-4}$

	Bissecção	Posição Falsa	MPF $\varphi(x) = \cos(x) - e^{-x^2} + x$	Newton	Secante
Dados Iniciais	[1, 2]	[1, 2]	x ₀ = 1.5	x ₀ = 1.5	$x_0 = 1; x_1 = 2$
x	1.44741821	1.44735707	1.44752471	1.44741635	1.44741345
f(x)	2.1921×10^{-5}	-3.6387×10^{-5}	7.0258×10^{-5}	1.3205 × 10 ⁻⁶	-5.2395 × 10 ⁻⁷
Епо em x	6.1035 × 10 ⁻⁵	.552885221	1.9319 × 10 ⁻⁴	1.7072×10^{-3}	1.8553 × 10 ⁻⁴
Número de Iterações	14	6	6	2	5

$$ER_{\overline{x}} \approx \frac{\left| f(x_{k-1}) - f(\overline{x} = x_k) \right|}{\left| f(\overline{x} = x_k) \right|}$$

Exemplo 14

$$f(x) = x^3 - x - 1; \quad \xi \in (1, 2); \quad \epsilon = 10^{-6}$$

$$\epsilon = 10^{-6}$$

Com esses valores os métodos divergem um pouco. (denominador $\rightarrow 0$)

	Bissecção	Posição Falsa	MPF $\varphi(x) = (x+1)^{1/3}$	Newton	Secante
Dados Iniciais	[1, 2]	[1, 2]	$x_0 = 1$	$x_0 = 0$	$x_0 = 0; x_1 = 0.5$
$\overline{\mathbf{x}}$	0.1324718×10^{1}	0.1324718 × 10 ¹	0.1324717×10^{1}	0.1324718×10^{1}	0.1324718 × 10 ¹
f(x)	-0.1847744 × 10 ⁻⁵	-0.7897615 × 10 ⁻⁶	-0.52154406 × 10 ⁻⁶	0.1821000 × 10 ⁻⁶	-0.8940697 × 10 ⁻⁷
Erro em x	0.9536743 × 10 ⁻⁶	0.6752825	0.3599538 × 10 ⁻⁶	0.6299186 × 10 ⁻⁶	0.8998843 × 10 ⁻⁵
Número de Iterações	20	17	9	21	27

Exemplo 15

$$f(x) = 4sen(x) - e^x;$$
 $\xi \in (0, 1);$ $\epsilon = 10^{-5}$

$$\varepsilon = 10^{-5}$$

	Bissecção	Posição Falsa	MPF $\varphi(x) = x - 2 \operatorname{sen}(x) + 0.5e^{x}$	Newton	Secante
Dados Iniciais	[0, 1]	[0, 1]	$x_0 = 0.5$	$x_0 = 0.5$	$x_0 = 0; x_1 = 1$
$\overline{\mathbf{x}}$	0.370555878	0.370558828	.370556114	.370558084	.370558098
$f(\overline{x})$	-1.3755 × 10 ⁻⁵	1.6695 × 10 ⁻⁶	-4.5191×10^{-6}	-2.7632 × 10 ⁻⁸	5.8100 × 10 ⁻⁹
Erro em x	7.6294 × 10 ⁻⁶	.370562817	1.1528 × 10 ⁻⁴	+1.3863 × 10 ⁻⁴	5.7404×10^{-6}
Número de Iterações	17	8	5	3	7

6 Exercícios Propostos

6.1. Localize graficamente as raízes das equações a seguir:

a)
$$4\cos(x) - e^{2x} = 0$$

$$b) \quad \frac{x}{2} - tg(x) = 0$$

$$c) \quad 1 - x \ln(x) = 0$$

$$d) \quad 2^{x} - 3x = 0$$

$$e$$
) $x^3 + x - 1000 = 0$

6.2 Calcule as 4 primeiras iterações utilizando o método de Newton-Rapson e o método da secante para encontrar a raiz da equação: $x^3 - 2x^2 - 3x + 10 = 0$ com $x_0 = 1.9$.

Obs. Faça uma escolha arbitraria do valor de x₁ para utilizar no método da secante.

6.3 Seja $f(x) = e^x - 4x^2 e \xi$ sua raiz no intervalo (0, 1). Tomando $x_0 = 0.5$, encontre ξ com $\varepsilon = 10^{-4}$, usando:

a) o MPF com
$$\varphi(x) = \frac{1}{2} e^{x/2}$$
;

b) o método de Newton.
 Compare a rapidez de convergência.