

Método das Diferenças Finitas

Prof. Luiz T. F. Eleno



LOM3260 — Computação Científica em Python

Departamento de Engenharia de Materiais

Escola de Engenharia de Lorena

Universidade de São Paulo

Plano de aula

1 Contextualização

2 Delimitação da raiz

3 Método da bissecção ou dicotomia

4 Método de Newton

5 Método das secantes

6 `scipy.optimize`

7 Bibliografia

Zeros de funções

- Os **zeros** ou **raízes** de uma função $f(x)$ são os valores de x para os quais

$$f(x) = 0$$

- Conhecemos maneiras de encontrar **analiticamente** os zeros de apenas algumas funções
- Por exemplo, sabemos resolver equações polinomiais de grau um ou dois:

$$f(x) = a_0 + a_1x = 0 \quad \Rightarrow \quad x = -\frac{a_0}{a_1}$$

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad x = \frac{-a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_0a_2}}{2a_2}$$

- ▶ É possível resolver assim também equações polinomiais de graus 3 e 4, mas não mais do que isso
- Sabemos também outros casos, por exemplo

$$f(x) = \sin(\pi x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

- E existem casos bem simples sem solução analítica, por exemplo:

$$f(x) = x - \cos x = 0 \quad \Rightarrow \quad x = ?$$

- Nessas situações, precisamos usar **métodos numéricos**

Plano de aula

1 Contextualização

2 Delimitação da raiz

3 Método da bissecção ou dicotomia

4 Método de Newton

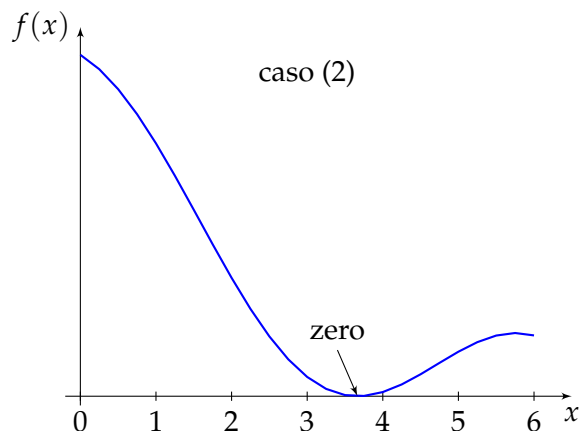
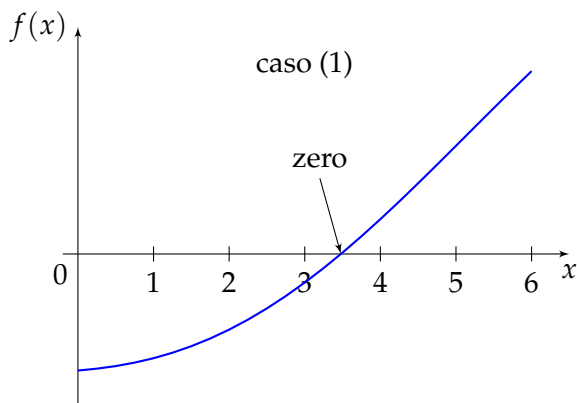
5 Método das secantes

6 `scipy.optimize`

7 Bibliografia

Delimitação da raiz

- Boa parte dos métodos numéricos requer a **delimitação** do zero da função
 - ▶ ou seja, dada uma raiz x , encontrar um intervalo $[a, b]$ tal que $a < x < b$
- Uma maneira é **delimitar graficamente** o zero da função
 - ▶ ou seja, faça o gráfico da função e procure-a visualmente!
 - ▶ Encontre então um intervalo $[a, b]$ contendo a raiz



- Nos dois casos acima, o intervalo $[a, b] = [3, 4]$, por exemplo, delimita uma raiz
- No entanto:
 - ▶ no caso (1): $f(a) \cdot f(b) < 0$; é uma **raiz simples** ou de **multiplicidade ímpar**
 - ▶ no caso (2): $f(a) \cdot f(b) > 0$; é uma **raiz de multiplicidade par**

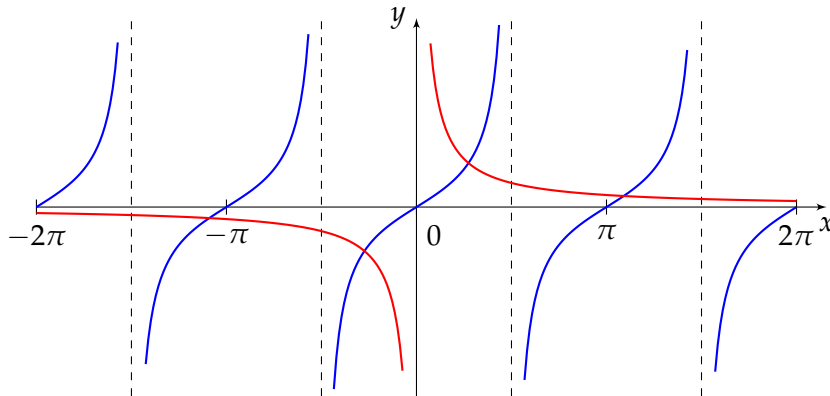
Delimitação da raiz

- Às vezes, é mais fácil encontrar os zeros de uma função $f(x)$ separando-a em duas partes e encontrando as intersecções entre os gráficos dessas partes
- Por exemplo, para achar os zeros de

$$f(x) = x \operatorname{tg} x - 1,$$

podemos encontrar as intersecções entre os gráficos de

$$g(x) = \operatorname{tg} x \quad \text{e} \quad h(x) = \frac{1}{x}$$



- **Obs.:** Você vai precisar resolver uma equação parecida com essa em Mecânica Quântica!!!

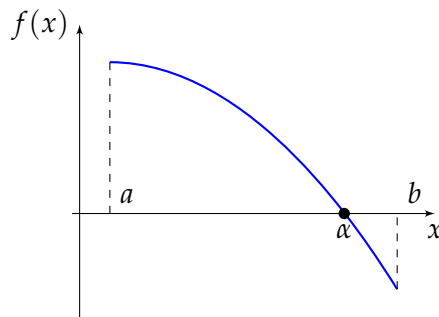
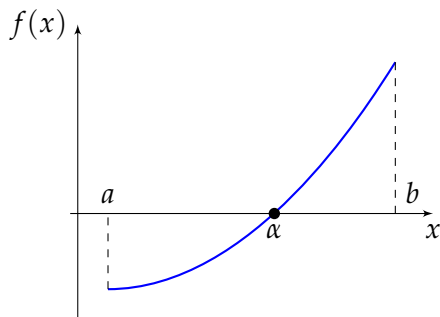
Plano de aula

- 1 Contextualização
- 2 Delimitação da raiz
- 3 Método da bissecção ou dicotomia
- 4 Método de Newton
- 5 Método das secantes
- 6 `scipy.optimize`
- 7 Bibliografia

Raiz simples

ou de multiplicidade ímpar

- Uma propriedade de uma raiz simples (ou de multiplicidade ímpar) α , tal que $f(\alpha) = 0$, delimitada no intervalo $[a, b]$, é observada nas figuras abaixo:



- **Propriedade:** desde que $f(x)$ seja contínua no intervalo $[a, b]$, vale sempre a relação

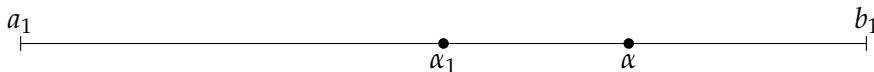
$$f(a) \cdot f(b) < 0$$

- Para isso, é preciso que α seja o único zero de $f(x)$ no intervalo $[a, b]$
- Essa propriedade não vale se a raiz tem multiplicidade par!
- Podemos usar essa propriedade como base de um método numérico
- **Prelúdio:** teoria dos jogos ([fez parte da Lista 1](#))

→

Método da bissecção ou dicotomia

- O método numérico mais simples é o chamado **Método da bissecção** ou **dicotomia**
- Funciona no caso de raízes simples ou de multiplicidade ímpar
- A raiz α tal que $f(\alpha) = 0$ deve ser inicialmente delimitada no intervalo $[a_1, b_1]$
- α deve ser a única raiz no intervalo $[a_1, b_1]$
 - ▶ deve acontecer então que $f(a_1) \cdot f(b_1) < 0$



- A primeira tentativa para a raiz é o ponto médio do intervalo:

$$\alpha_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}$$

- o erro está delimitado por

$$|\alpha - \alpha_1| \leq \frac{b_1 - a_1}{2}$$

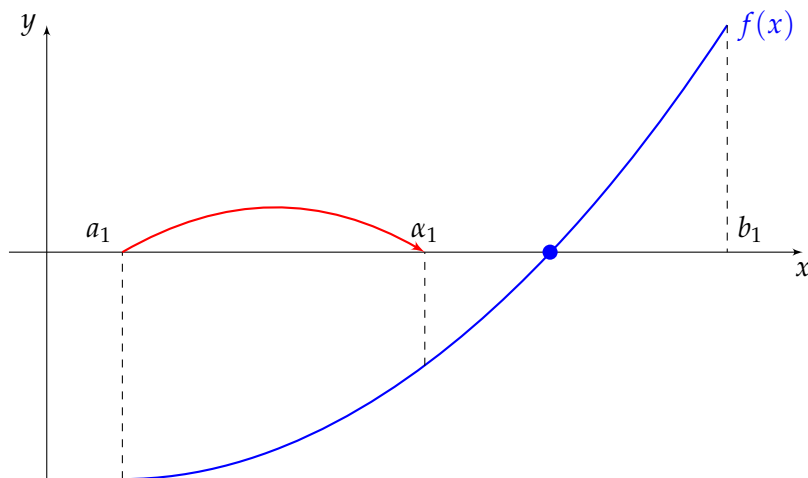
- Veja que, no caso da figura acima, a raiz está agora delimitada no intervalo $[\alpha_1, b_1]$
 - ▶ temos portanto que

$$f(a_1) \cdot f(\alpha_1) > 0 \quad \text{e} \quad f(\alpha_1) \cdot f(b_1) < 0$$

- Vamos agora fazer mais tentativas — ou seja, iterar!

→

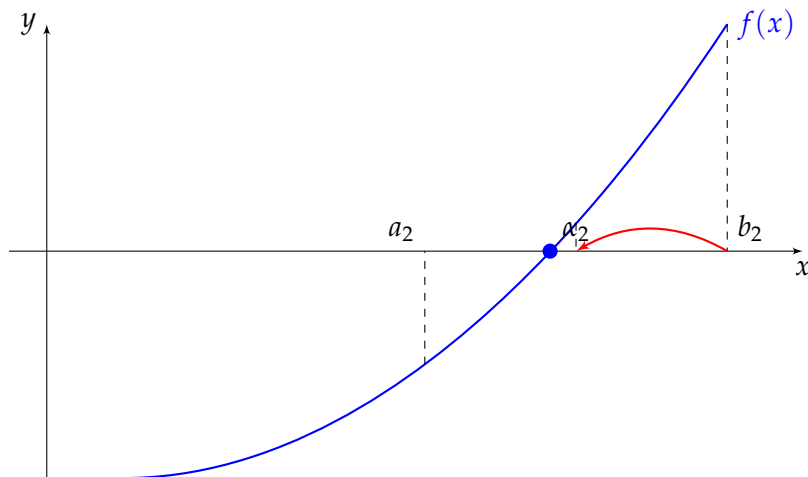
Método da bissecção ou dicotomia



$$\alpha_1 = \frac{a_1 + b_1}{2}, \quad |\alpha - \alpha_1| \leq \frac{b_1 - a_1}{2}$$

$$f(a_1) \cdot f(\alpha_1) > 0 \quad \Rightarrow \quad a_2 = \alpha_1, \quad b_2 = b_1$$

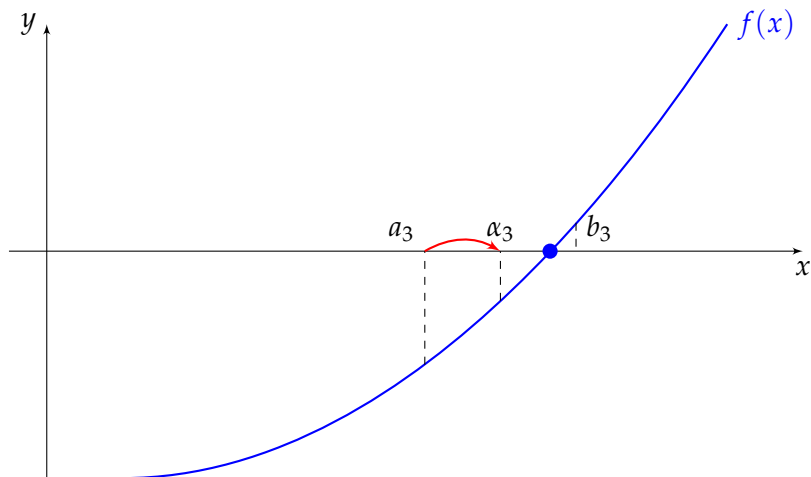
Método da bissecção ou dicotomia



$$\alpha_2 = \frac{a_2 + b_2}{2}, \quad |\alpha - \alpha_2| \leq \frac{b_2 - a_2}{2} = \frac{b_1 - a_1}{2^2}$$

$$f(a_2) \cdot f(\alpha_2) < 0 \quad \Rightarrow \quad a_3 = a_2, \quad b_3 = \alpha_2$$

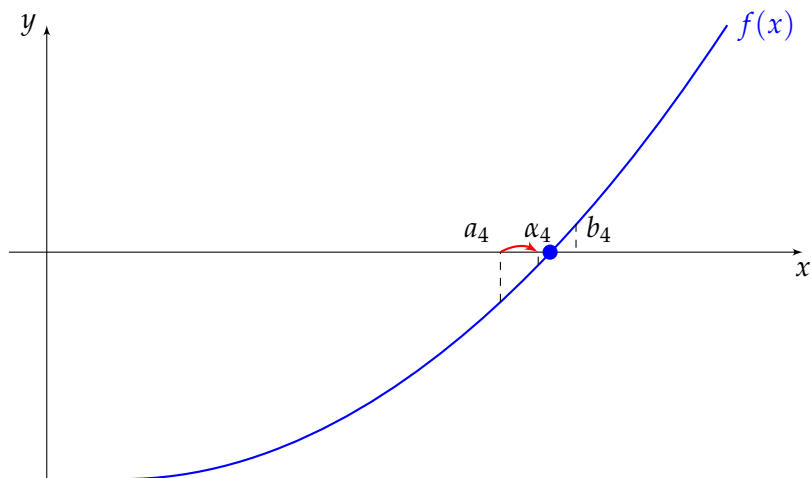
Método da bissecção ou dicotomia



$$\alpha_3 = \frac{a_3 + b_3}{2}, \quad |\alpha - \alpha_3| \leq \frac{b_3 - a_3}{2} = \frac{b_1 - a_1}{2^3}$$

$$f(a_3) \cdot f(\alpha_3) > 0 \quad \Rightarrow \quad a_4 = \alpha_3, \quad b_4 = b_3$$

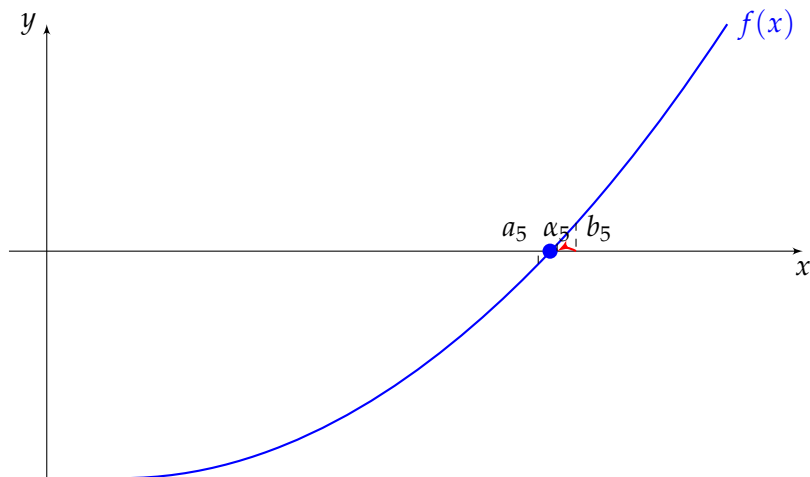
Método da bissecção ou dicotomia



$$\alpha_4 = \frac{a_4 + b_4}{2}, \quad |\alpha - \alpha_4| \leq \frac{b_4 - a_4}{2} = \frac{b_1 - a_1}{2^4}$$

$$f(a_4) \cdot f(\alpha_4) > 0 \quad \Rightarrow \quad a_5 = \alpha_4, \quad b_5 = b_4$$

Método da bissecção ou dicotomia



$$\alpha_5 = \frac{a_5 + b_5}{2}, \quad |\alpha - \alpha_5| \leq \frac{b_5 - a_5}{2} = \frac{b_1 - a_1}{2^5}$$

$$f(a_5) \cdot f(\alpha_5) < 0 \quad \Rightarrow \quad a_6 = a_5, \quad b_6 = \alpha_5$$

Algoritmo

- Inicialmente, defina o intervalo $[a, b]$ contendo a raiz α tal que $f(\alpha) = 0$
 - ▶ certifique-se de que $f(a) \cdot f(b) < 0$ e que só há uma raiz nesse intervalo
- estabeleça uma precisão ϵ (por exemplo, $\epsilon = 10^{-4}$, ou seja, três casas decimais)

Algoritmo para o método da bissecção

1. Calcule

$$\alpha_1 = \frac{a + b}{2} \quad \text{e} \quad \delta = \frac{b - a}{2}$$

2. Se $\delta \leq \epsilon$, pare. Se não, continue:

3. Se $f(a) \cdot f(\alpha_1) > 0$, faça $a = \alpha_1$; senão, faça $b = \alpha_1$. Volte para o passo 1.

- Ao final da execução do algoritmo, α_1 será a melhor aproximação para a raiz dentro da precisão pré-estabelecida $|\alpha - \alpha_1| \leq \epsilon$
- Por garantia, você pode implementar uma verificação da condição $f(a) \cdot f(b) < 0$ antes de começar a rodar o algoritmo

Uma implementação do algoritmo da bissecção

Método da bissecção para encontrar a raiz de $f(x) = x - \cos x$

```
import numpy as np
```

```
def f(x): # função da qual se quer achar a raiz  
    return x - np.cos(x)
```

```
def bissec(func, a, b, prec=1e-13): # função com o algoritmo da bissecção  
    erro = b - a  
    while erro > prec:  
        c = .5 * (a + b)  
        if func(a) * func(c) > 0:  
            a = c  
        else:  
            b = c  
        erro /= 2  
    return c
```

```
sol = bissec(f, 0, 1) # delimitando a raiz inicialmente em [0, 1]  
print(sol)
```


Número de iterações

- Das equações dos slides anteriores, sabemos que, em cada iteração do método da bissecção, a raiz está delimitada num intervalo $[a_n, b_n]$ tal que

$$|\alpha - \alpha_n| \leq \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{b - a}{2^n}$$

- Se precisamos de uma precisão ϵ , é só impor

$$\frac{b - a}{2^n} \leq \epsilon$$

ou, isolando n :

$$n \geq \log_2 \left(\frac{b - a}{\epsilon} \right)$$

que também pode ser escrita como

$$n \geq \log_2 10 \log_{10} \left(\frac{b - a}{\epsilon} \right) \approx 3.322 \log_{10} \left(\frac{b - a}{\epsilon} \right)$$

- Por exemplo, se $b - a = 1$ e $\epsilon = 10^{-4} \Rightarrow n \geq 13.287$
 - ▶ ou seja, $n = 14$ garante a precisão desejada.

Vantagens e desvantagens

Vantagens e desvantagens do método da bissecção:

- **Vantagens:**
 - ▶ sempre conhecemos a precisão e sabemos exatamente o número de iterações para atingir a convergência desejada
 - ▶ uma vez conhecido um intervalo delimitando a raiz, é um método de convergência garantida
- **Desvantagem:**
 - ▶ é um método lento, exigindo muitas iterações (em comparação com os métodos a seguir)

Plano de aula

1 Contextualização

2 Delimitação da raiz

3 Método da bissecção ou dicotomia

4 **Método de Newton**

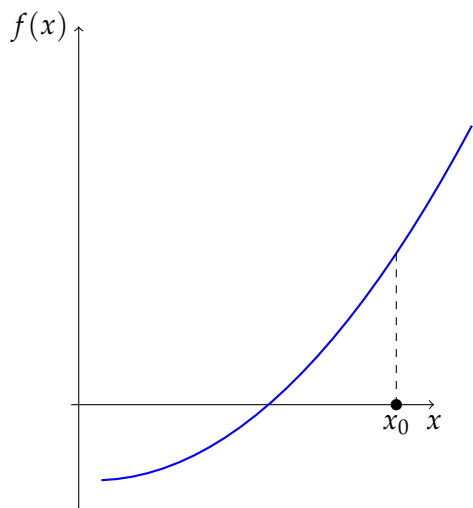
5 Método das secantes

6 `scipy.optimize`

7 Bibliografia

Método de Newton

- **Método de Newton**, ou de **Newton-Raphson**:



- A nova aproximação x_n é dada pelo zero da reta tangente a $f(x)$ em $x = x_{n-1}$
- a equação da reta tangente é

$$y = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x - x_{n-1})$$

cujos zeros x_n é encontrado fazendo $y = 0$:

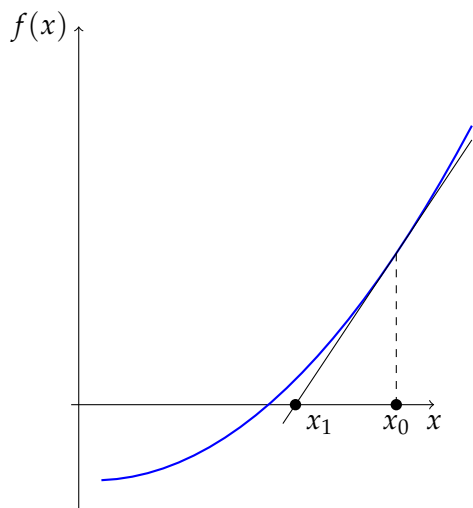
$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}}$$

- Como ilustra a figura, o método de Newton é extremamente rápido
- Não é necessário delimitar a raiz, basta um “chute” inicial
- ▶
- Mas a convergência não é garantida!
 - ▶ dependendo da função e do chute inicial, o método de Newton pode se afastar da raiz (e possivelmente tender a $\pm\infty$), ou oscilar em torno de algum valor
- Além disso, requer o cálculo da primeira derivada da função, que pode ser custoso ou inacessível computacionalmente

Método de Newton

- **Método de Newton**, ou de **Newton-Raphson**:



- A nova aproximação x_n é dada pelo zero da reta tangente a $f(x)$ em $x = x_{n-1}$
- a equação da reta tangente é

$$y = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x - x_{n-1})$$

cujos zeros x_n é encontrado fazendo $y = 0$:

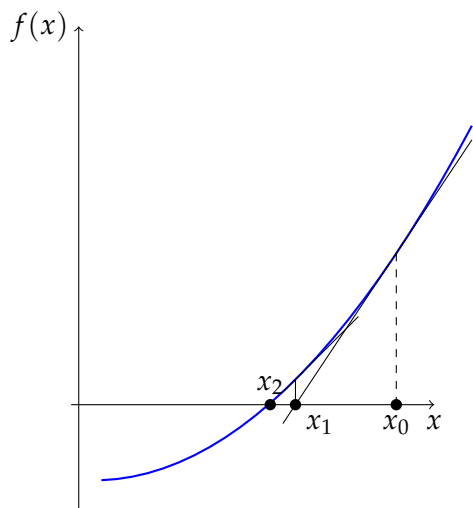
$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}}$$

- Como ilustra a figura, o método de Newton é extremamente rápido
- Não é necessário delimitar a raiz, basta um “chute” inicial
▶
- Mas a convergência não é garantida!
▶ dependendo da função e do chute inicial, o método de Newton pode se afastar da raiz (e possivelmente tender a $\pm\infty$), ou oscilar em torno de algum valor
- Além disso, requer o cálculo da primeira derivada da função, que pode ser custoso ou inacessível computacionalmente

Método de Newton

- **Método de Newton**, ou de **Newton-Raphson**:



- A nova aproximação x_n é dada pelo zero da reta tangente a $f(x)$ em $x = x_{n-1}$
- a equação da reta tangente é

$$y = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x - x_{n-1})$$

cujo zero x_n é encontrado fazendo $y = 0$:

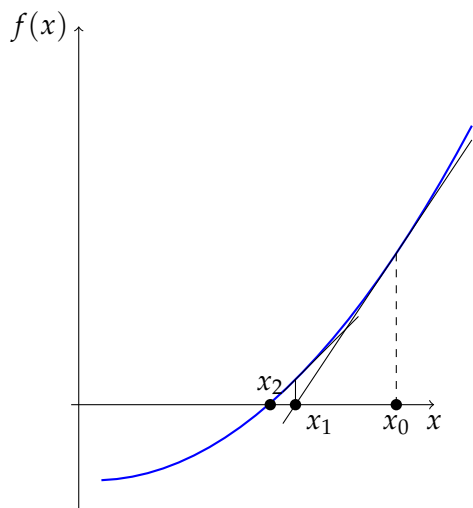
$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}}$$

- Como ilustra a figura, o método de Newton é extremamente rápido
- Não é necessário delimitar a raiz, basta um “chute” inicial
▶
- Mas a convergência não é garantida!
▶ dependendo da função e do chute inicial, o método de Newton pode se afastar da raiz (e possivelmente tender a $\pm\infty$), ou oscilar em torno de algum valor
- Além disso, requer o cálculo da primeira derivada da função, que pode ser custoso ou inacessível computacionalmente

Método de Newton

- **Método de Newton**, ou de **Newton-Raphson**:



- A nova aproximação x_n é dada pelo zero da reta tangente a $f(x)$ em $x = x_{n-1}$
- a equação da reta tangente é

$$y = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x - x_{n-1})$$

cujos zeros x_n é encontrado fazendo $y = 0$:

$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x_n - x_{n-1}) = 0$$

$$\Rightarrow \boxed{x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}}$$

- Como ilustra a figura, o método de Newton é extremamente rápido
- Não é necessário delimitar a raiz, basta um “chute” inicial
 - ▶ **CHUTE: Cálculo Hipotético Universal Teórico Explicativo**
- Mas a convergência não é garantida!
 - ▶ dependendo da função e do chute inicial, o método de Newton pode se afastar da raiz (e possivelmente tender a $\pm\infty$), ou oscilar em torno de algum valor
- Além disso, requer o cálculo da primeira derivada da função, que pode ser custoso ou inacessível computacionalmente

Algoritmo

- Inicialmente, encontre um valor inicial x_0 próximo à raiz α tal que $f(\alpha) = 0$
- estabeleça uma **tolerância** η

Algoritmo para o método de Newton

1. Calcule

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

2. Se $|f(x_1)| \leq \eta$, pare. Se não, faça $x_0 = x_1$ e volte para o passo 1.

- Ao final da execução do algoritmo, x_1 será a melhor aproximação para a raiz dentro da tolerância pré-estabelecida $|f(x_1)| \leq \eta$
- Mas não há nenhuma garantia de que o método vá convergir para a solução correta!
- Além disso, é melhor estabelecer um critério de parada num número máximo de iterações, para evitar um loop infinito

Uma implementação do método de Newton-Raphson

Método de Newton para encontrar a raiz de $f(x) = x - \cos x$

```
import numpy as np
```

```
def f(x): # função da qual se quer achar a raiz  
    return x - np.cos(x)
```

```
def df(x): # a derivada da função acima  
    return 1 + np.sin(x)
```

```
def newton(func, deriv, x0, tol=1e-13): # função com o algoritmo de Newton-Raphson  
    f = func(x0)  
    while abs(f) > tol:  
        df = deriv(x0)  
        x0 -= f / df  
        f = func(x0)  
    return x0
```

```
sol = newton(f, df, 1) # "chute" inicial: x0 = 1  
print(sol)
```

Plano de aula

1 Contextualização

2 Delimitação da raiz

3 Método da bissecção ou dicotomia

4 Método de Newton

5 Método das secantes

6 `scipy.optimize`

7 Bibliografia

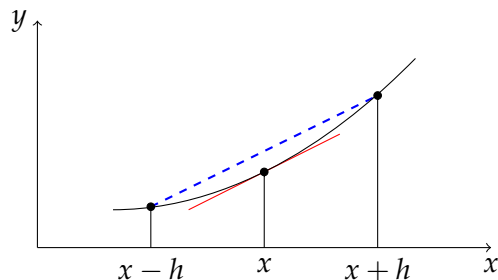
Método das secantes

- Uma estratégia para evitar o cálculo da derivada é fazer uma aproximação:

$$y'(x) \approx \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}$$

para algum valor de h pequeno o suficiente

- geralmente, é suficiente adotar h um pouco maior que a tolerância desejada para a solução ** por exemplo, se a tolerância é $|f(x_1)| < \eta$, adotar $h \approx 10\eta$ funciona (usualmente)
- Ou seja, estamos efetivamente usando uma **derivação numérica**



- Essa estratégia é conhecida como **Método das Secantes**

Plano de aula

- 1 Contextualização
- 2 Delimitação da raiz
- 3 Método da bissecção ou dicotomia
- 4 Método de Newton
- 5 Método das secantes
- 6 `scipy.optimize`
- 7 Bibliografia

Rotinas em `scipy`

- A biblioteca `scipy.optimize` contém diversas rotinas para encontrar o zero de funções
 - ▶ inclusive funções de mais de uma variável e sistemas de equações não-lineares
- Documentação completa em <https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/optimize.html>
- O código abaixo calcula o zero da função $f(x) = x - \cos x$ começando em $x_0 = 1$, usando a função `newton` da biblioteca `scipy.optimize`:

Usando `scipy.optimize.newton`

```
import numpy as np
import scipy.optimize as sp

def f(x):
    return x - np.cos(x)

sol = sp.newton(f, 1.)

print(sol)
```

Plano de aula

- 1 Contextualização
- 2 Delimitação da raiz
- 3 Método da bissecção ou dicotomia
- 4 Método de Newton
- 5 Método das secantes
- 6 `scipy.optimize`
- 7 Bibliografia

Bibliografia

- R. Burden e J. Faires, **Análise Numérica**, Cengage Learning, São Paulo, 2008.
- Chapra e Canale, **Métodos Numéricos para Engenharia**, 12th ed., McGrawHill 2009.
- Humes / Melo / Yoshida / Martins, **Noções de Cálculo Numérico**, McGraw-Hill do Brasil, 1984 (<https://python.computeel.org/assets/aulas/pdf/Noco-es-de-Calculo-Numerico-1984.pdf>).
- A. Gilat e V. Subramaniam, **Métodos Numéricos para Engenheiros e Cientistas**, Bookman, Porto Alegre, 2008.
- I. Q. Barros, **Introdução ao Cálculo Numérico**, Edgar Blücher, São Paulo, 1972.
- Neide B. Franco, **Cálculo Numérico**, Pearson, São Paulo, 2007.