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

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:

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

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

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

$$f(x) = \operatorname{sen}(\pi x) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad x = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

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

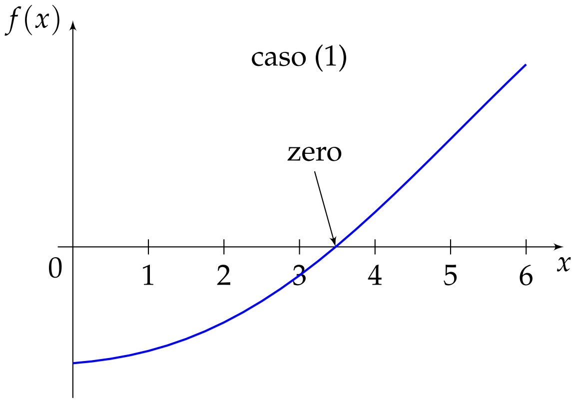
$$f(x) = x - \cos x = 0 \qquad \Rightarrow \qquad x = ?$$

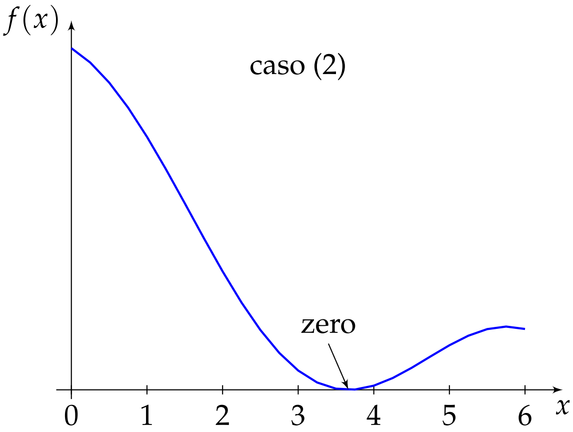
- Nessas situações, precisamos usar **métodos numéricos**

Plano de aula

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

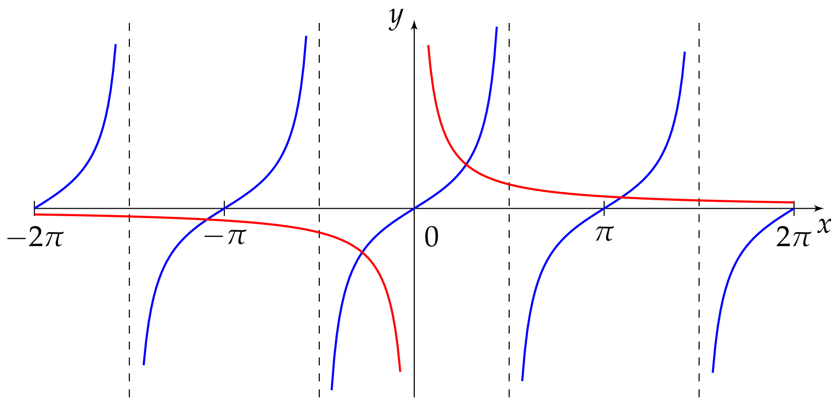
- Às vezes, é mais fácil encontrar os zeros de uma função $f(x)$ separando-a em duas partes e encontrando as intersecções entre os gráficos dessas partes

- Por exemplo, para achar os zeros de

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

podemos encontrar as intersecções entre os gráficos de

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



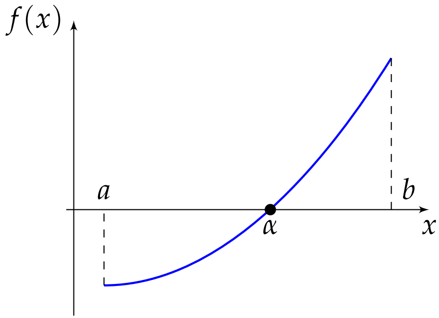
- **Obs.:** Você vai precisar resolver uma equação parecida com essa em Mecânica Quântica!!!

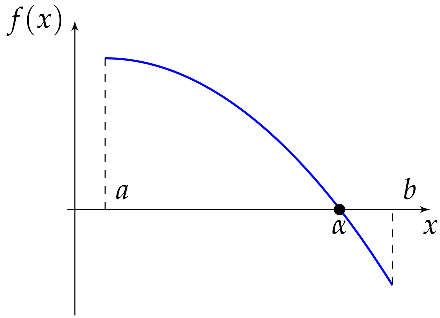
Plano de aula

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:





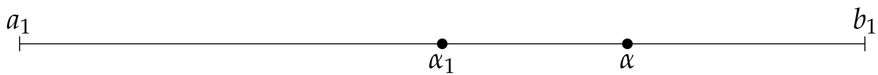
- **Propriedade:** desde que $f(x)$ seja contínua no intervalo $[a, b]$, vale sempre a relação

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

- 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

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

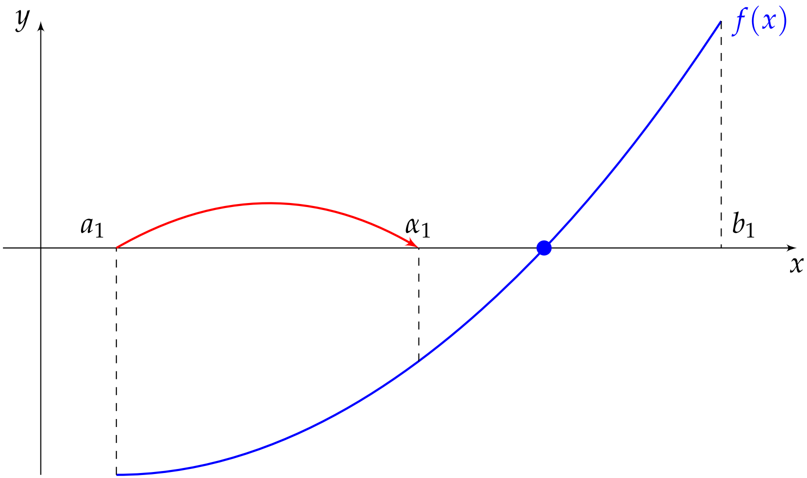
- Veja que, no caso da figura acima, a raiz está agora delimitada no intervalo $[\alpha_1, b_1]$
  - temos portanto que

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

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

$\rightarrow$

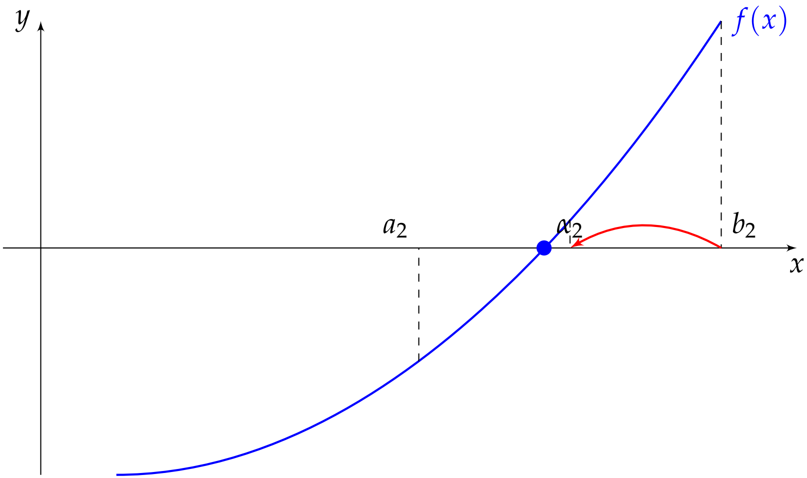
Método da bissecção ou dicotomia



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

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

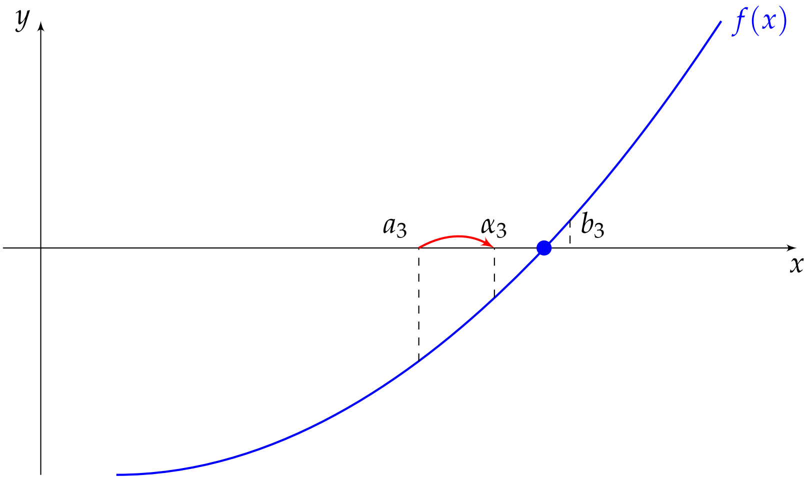
Método da bissecção ou dicotomia



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

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

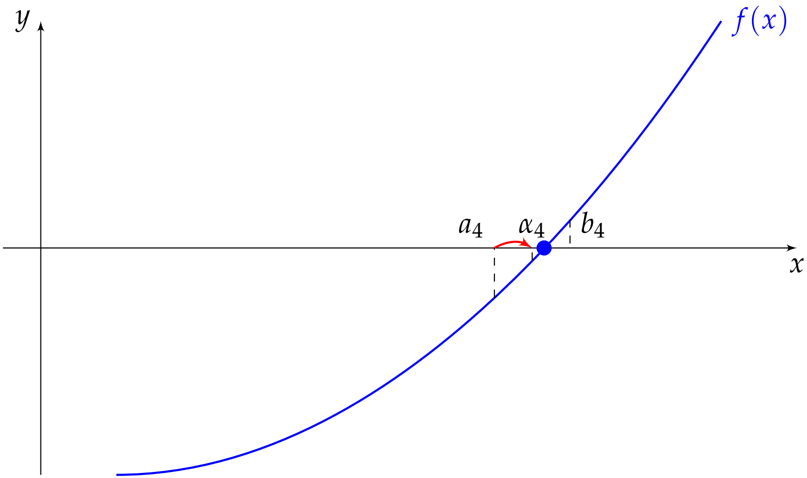
Método da bissecção ou dicotomia



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

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

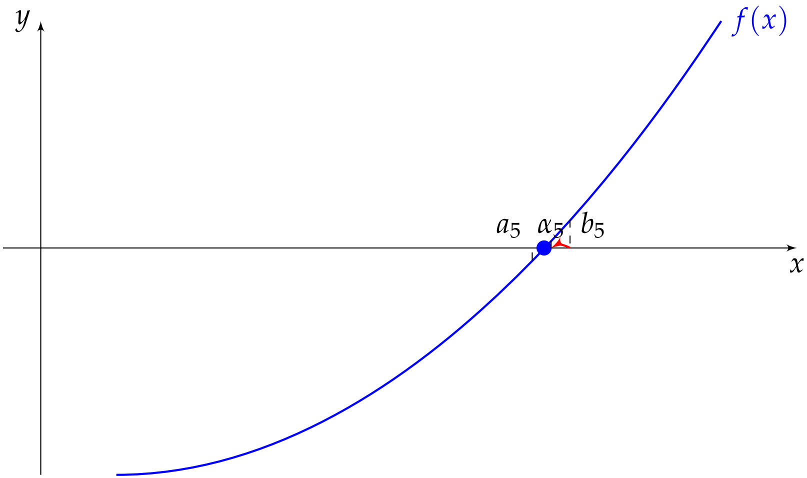
Método da bissecção ou dicotomia



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

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

Método da bissecção ou dicotomia



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

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

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
$$\alpha_1 = \frac{a+b}{2} \qquad \text{e} \qquad \delta = \frac{b-a}{2}$$
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 $f(x) = x - \cos x$

```python
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 bisssecção
    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:

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

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 $\epsilon = 10^{-4} \quad \Rightarrow \quad n \geq 13.287$
  - ou seja, $n = 14$ garante a precisão desejada.

Vantagens e desvantagens

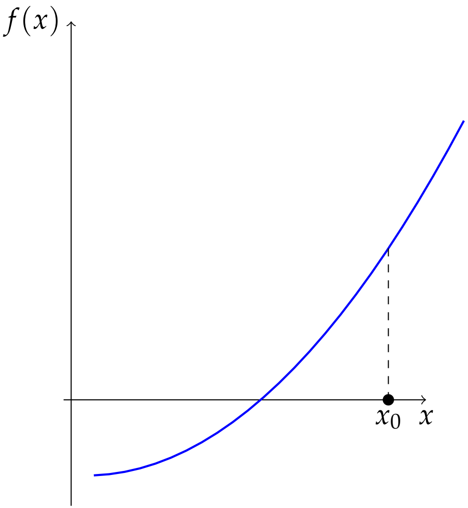
Vantagens e desvantagens do método da bissecção:

- **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

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 $y = 0$:

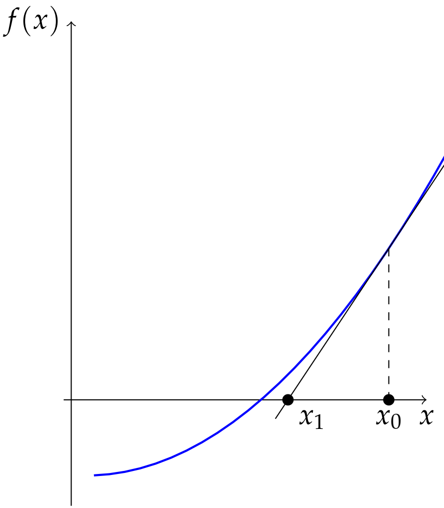
$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})\,(x_n - x_{n-1}) = 0$$

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

- 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 $y = 0$:

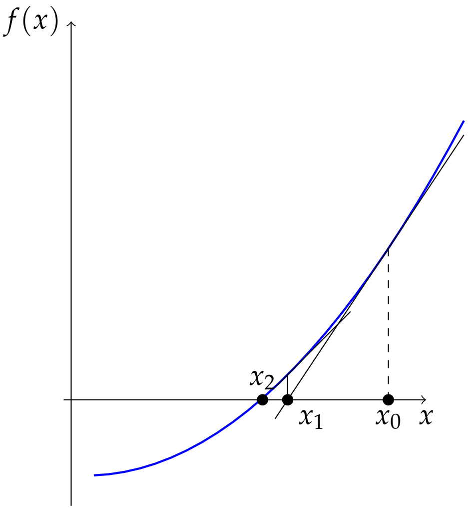
$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})\,(x_n - x_{n-1}) = 0$$

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

- 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 $y = 0$:

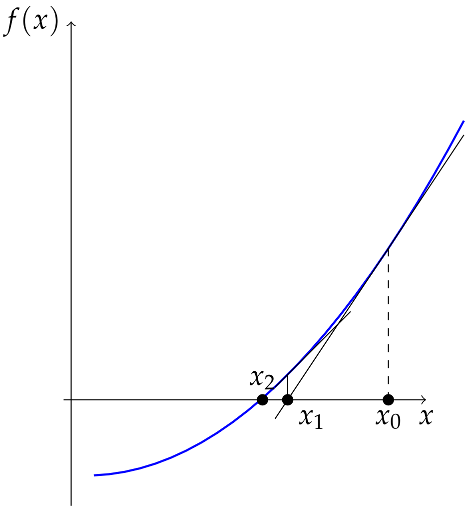
$$f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})\,(x_n - x_{n-1}) = 0$$

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

- 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 $y = 0$:

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

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

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

```python
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)
```

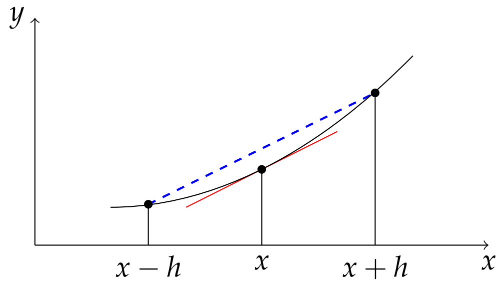
Plano de aula

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

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

```python
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

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 (http://www.ime.usp.br/~map2121).
- 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.