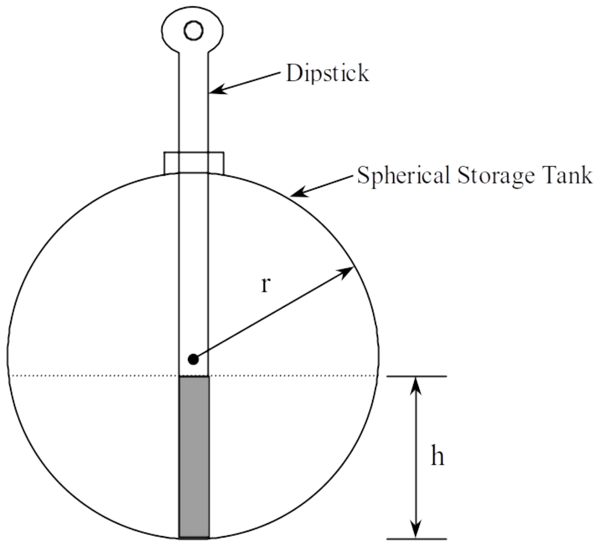
Zeros de Funções Não Lineares

Problema do Tanque de Óleo

Dado um tanque esférico de raio **r=3m**, como determinar a quantidade de óleo no seu interior?

Uma solução é submergir uma haste de comprimento maior do que o diâmetro e, a partir da altura **h** umedecida de óleo na haste, determinar o volume **V** de óleo restante.



A partir da fórmula do volume da esfera, podemos obter o volume de óleo **V** restante no tanque a partir da altura **h**: $V=\frac{\pi h^2(3r-h)}{3}$

Entretanto, para facilitar a medição, gostaríamos de desenvolver uma haste numerada, de forma que a quantidade disponível no tanque pudesse ser diretamente visualizada. Como projetar esta haste?

Solução

O problema que queremos resolver é agora o inverso do anteriormente proposto. Para projetar a haste, temos que marcar a altura correspondente a cada volume desejado. Para tanto, precisamos resolver a equação

$$V=\frac{\pi h^2(3r-h)}{3}$$

para a altura dado um volume e raio. Por exemplo, qual a altura quando tivermos **4m³** de óleo?

$$4=\frac{\pi h^2(3\times 3-h)}{3}$$

$$h^3-9h^2+\frac{12}{\pi}=0$$

$$f(h)=h^3-9h^2+3.8197=0$$

Assim, esta equação não linear precisa ser resolvida. Para marcar outros volumes na escala , teremos que substituir o valor do volume e resolver para h . Isto deve ser feito para cada volume desejado da escala (digamos, a cada 0,25m³).

Raiz

Como encontrar a raiz $\sqrt[n]{k}$?

$$x=\sqrt[n]{k} \quad \Rightarrow \quad x^n=k \quad \Rightarrow \quad x^n-k=0$$

Fórmula de Bhaskara

As raízes de uma equação do segundo grau da forma $ax^2+bx+c=0$ são dadas por:

$$x\pm=\frac{-b\pm\sqrt{b^2-4ac}}{2a} \quad .$$

Quando $a=5\times10^{-4}$, $b=100$, e $c=5\times10^{-3}$ a primeira raiz calculada usando precisão simples (float) é $x_1=0$.

Isto não pode estar correto pois $x_1=0$ é solução da equação se, e somente se, $c=0$.

Como $float(b^2-4ac)=float(b^2)$ para os dados acima, sofremos **cancelamento subtrativo/catastrófico**.

Uma solução para o problema é a reformulação para x_1 (para b > 0):

$$x_1=\frac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a}=\frac{1}{2a}\frac{(-b+\sqrt{b^2-4ac})}{}\frac{(-b-\sqrt{b^2-4ac})}{(-b-\sqrt{b^2-4ac})}=\frac{2c}{(-b-\sqrt{b^2-4ac})}$$

Assim evitamos a subtração de dois números praticamente iguais, e a fórmula resulta em $x_1=-0.5\times10^{-4}$.

Uma fórmula estável para ambas raízes é:

$$x_1=\frac{-b-sign(b)\sqrt{b^2-4ac}}{2a} \quad , \quad x_2=\frac{c}{ax_1} \quad .$$

Definições

Dada uma função $f(x)$ definida e contínua no intervalo I , chamamos de zero (ou raiz) todo $\alpha\in I / f(\alpha)=0$.

Como não podemos calcular os valores exatos das raízes para a maioria das equações, a solução é aplicar um ***método numérico iterativo*** para obter uma aproximação suficientemente adequada do valor desejado.

- **Ideia central:** A partir de uma aproximação inicial para a raiz (chute?), refinar essa aproximação através de um método iterativo.
- **Métodos de Quebra:** Particionam um intervalo que contém a raiz em um intervalo menor que contenha a raiz.
- **Métodos de Ponto Fixo:** Inicia-se por uma aproximação inicial x_0 e aplicando uma *função de iteração* $\phi(x)$ obtém-se um novo valor $x_{i+1}=\phi(x_i)$.

Método da Bisseção ou da Dicotomia

Teorema

Uma equação $f(x)=0$, onde $f(x)$ é uma função real contínua, tem ao menos uma raiz entre $x_\ell < x_u$ se $f(x_\ell)f(x_u)<0$ (Ver Figure 1).

Note que se $f(x_\ell)f(x_u)>0$, pode haver ou não raiz (raízes) entre x_ℓ e x_u (Figuras 2 and 3). Se $f(x_\ell)f(x_u)<0$, então pode haver mais de uma raiz entre x_ℓ e x_u (Figura 4).

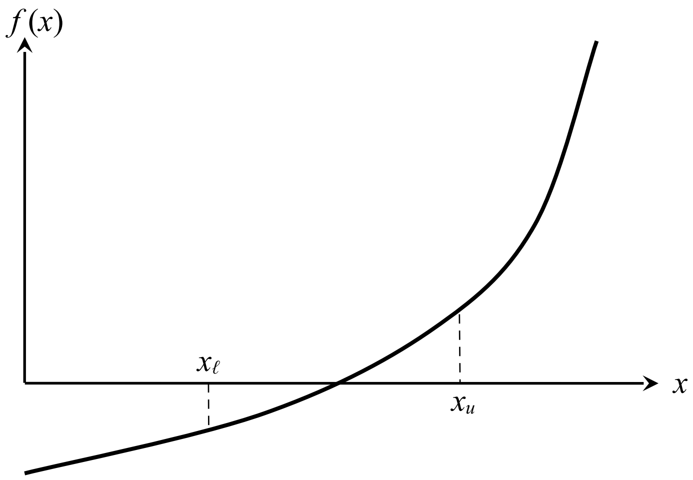


Figura 1 Existe ao menos uma raiz entre os dois pontos se a função é real, contínua e muda de sinal.

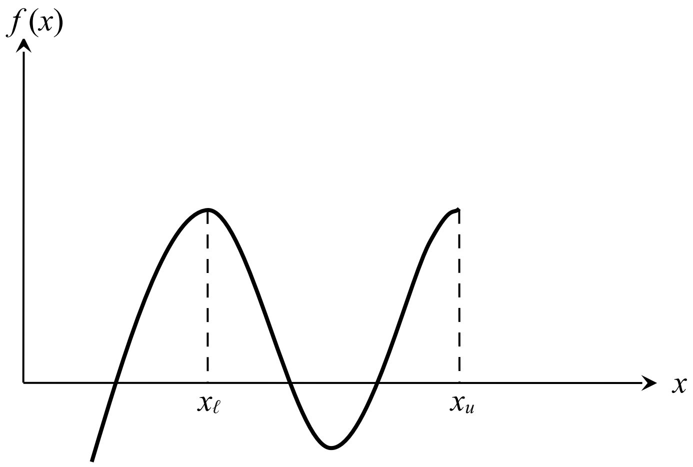


Figura 2 Raízes da equação $f(x)=0$ podem existir entre os dois pontos mesmo que a função $f(x)$ não muda de sinal entre os dois pontos.

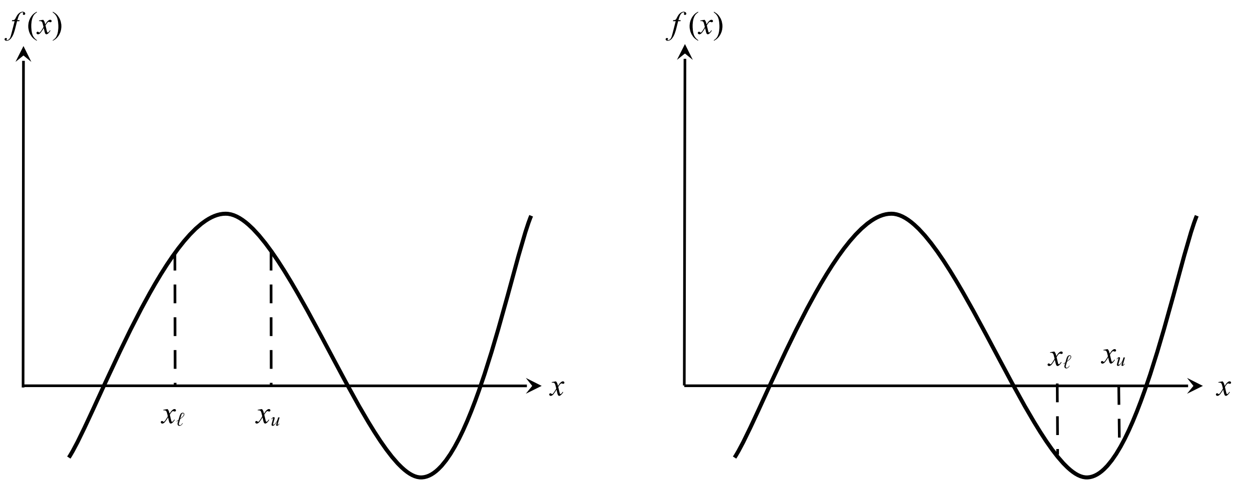


Figura 3 Se a função $f(x)$ não muda de sinal entre os dois pontos, pode não haver raiz para a equação $f(x)=0$ entre estes pontos.

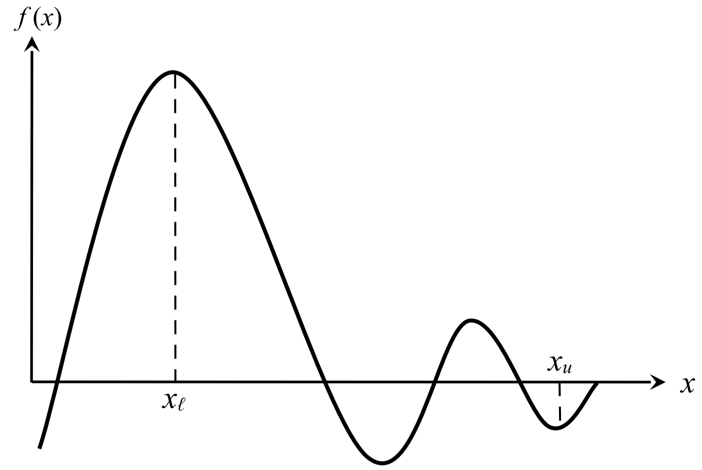


Figura 4 Se a função $f(x)$ muda de sinal entre dois pontos, mais de uma raiz da equação $f(x)=0$ pode existir entre os dois pontos.

Algoritmo para o método da Bisseção

Os passos para encontrar a raiz da equação $f(x)=0$ pelo método da bisseção são:

1. Escolher x_ℓ e x_u como aproximações da raiz tal que $f(x_\ell)f(x_u)<0$, ou seja, de forma que $f(x)$ troque de sinal entre x_ℓ e x_u.
2. Estimar a raiz x_m, da equação $f(x)=0$ como o ponto médio entre x_ℓ e x_u:
$$x_m = \frac{x_\ell + x_u}{2}$$
3. Verificar:
   a) Se $f(x_\ell)f(x_m)<0$, a raiz está entre x_ℓ e x_m; então $x_\ell = x_\ell$ e $x_u = x_m$.
   b) Se $f(x_\ell)f(x_m)>0$, a raiz está entre x_m e x_u; então $x_\ell = x_m$ e $x_u = x_u$.
   c) Se $f(x_\ell)f(x_m)=0$; então a raiz é x_m. FIM.
4. Encontrar uma nova estimativa para a raiz
$$x_m = \frac{x_\ell + x_u}{2}$$
   Encontre o erro aproximado relativo

$$|\in_a| = |\frac{x_m^{new} - x_m^{old}}{x_m^{new}}| \times 100$$

onde

x_m^{new} = raiz estimada da iteração atual

x_m^{old} = raiz estimada da iteração anterior

5. Comparar o erro aproximado relativo $|\in_a|$ com a tolerância a erro pré-definida $\in_s$. Se $|\in_a| > \in_s$, então vá para o Passo 3, senão, PARE.

Problema do Tanque de Óleo

Equação: $f(h) = h^3 - 9h^2 + 3.8197 = 0$, $0 \le h \le 2r$ e $r = 3$

Solução: assumindo $h_\ell = 0,\ h_u = 6$

Tabela 1 Raiz de $f(h) = 0$ pelo método da bisseção.

Iteração	h_ℓ	h_u	h_m	$\|\in_a\|\%$	$f(h_m)$
1	0.00	6	3	----------	−50.180
2	0.00	3	1.5	100	−13.055
3	0.00	1.5	0.75	100	−0.82093
4	0.00	0.75	0.375	100	2.6068
5	0.375	0.75	0.5625	33.333	1.1500
6	0.5625	0.75	0.65625	14.286	0.22635
7	0.65625	0.75	0.70313	6.6667	−0.28215
8	0.65625	0.70313	0.67969	3.4483	−0.024077
9	0.65625	0.67969	0.66797	1.7544	0.10210
10	0.66797	0.67969	0.67383	0.86957	0.039249

Critérios de Parada

1. Diferença entre raiz estimada atual e raiz estimada na iteração anterior:

$$|\in_a| = |x_m^{new} - x_m^{old}| \quad \text{ou} \quad |\in_a| = |\frac{x_m^{new} - x_m^{old}}{x_m^{new}}| \times 100$$

2. Diferença entre o valor da função na raiz estimada atual e na iteração anterior:

$$|\in_a| = |f(x_m^{new}) - f(x_m^{old})| \quad \text{ou} \quad |\in_a| = |\frac{f(x_m^{new}) - f(x_m^{old})}{f(x_m^{new})}| \times 100$$

3. Valor da função na raiz estimada: $\in_a = |f(x_m)|$

Vantagens do método da Bisseção

a) O método sempre converge uma vez que reduz sucessivamente o intervalo contendo uma raiz.
b) A cada iteração o intervalo é reduzido pela metade, de forma a garantir o erro encontrado na solução da equação.

Desvantagens do método da Bisseção

a) A convergência é lenta pois baseia-se em dividir o intervalo ao meio.
b) Se um dos valores iniciais estiver próximo da raiz, o número de iterações para atingir a raiz será maior (considerando o critério de parada $|f(x)|$.
c) Se a função $f(x)$ é tal que apenas toca o eixo (Figura 5) como p. ex.:

$$f(x)=x^2=0$$

o método será incapaz de encontrar um limite inferior x_ℓ , e superior x_u , tal que $f(x_\ell)f(x_u)<0$

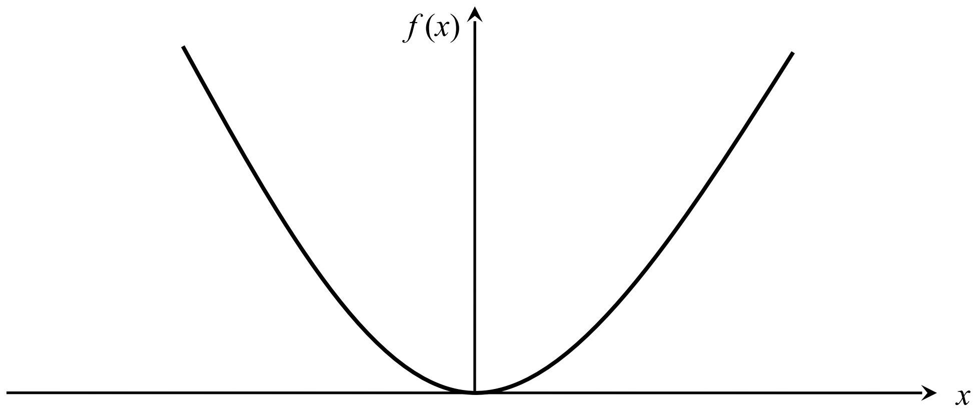


Figura 5 A equação $f(x)=x^2=0$ possui uma única raiz em $x=0$ que não pode ser incluída em um intervalo válido.

d) Para funções $f(x)$ em que há uma singularidade e ocorre uma inversão de sinal na singularidade, o método pode convergir para a singularidade, e não para a raiz (Figura 6). Um exemplo é

$$f(x)=\frac{1}{x}$$

onde $x_\ell=-2$, $x_u=3$ são valores iniciais válidos que satisfazem

$$f(x_\ell)f(x_u)<0$$

Entretanto, a função não é contínua e o teorema de que existe uma raiz não é aplicável.

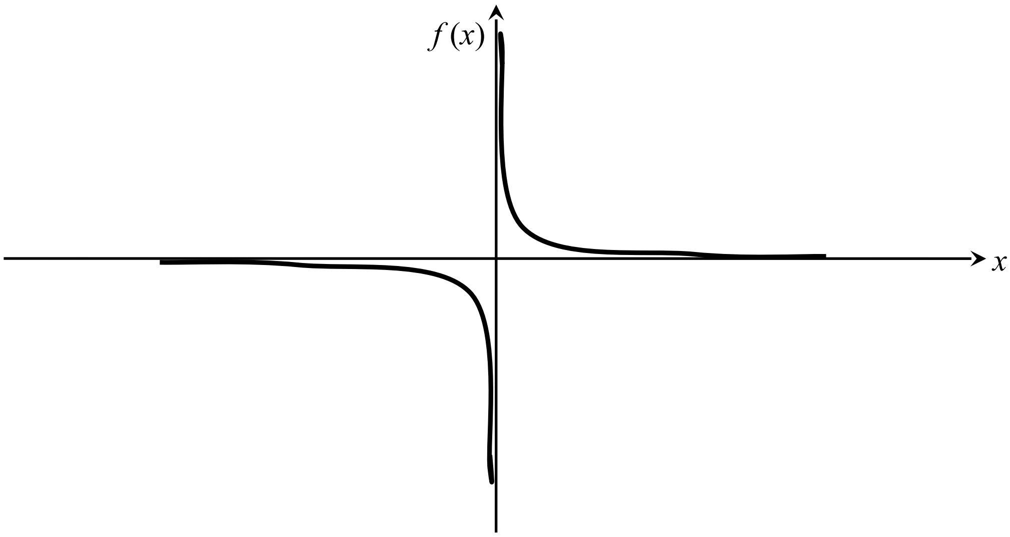


Figura 6 A equação $f(x)=\frac{1}{x}=0$ não possui raiz mas muda de sinal.

Métodos de Ponto Fixo

- São métodos abertos, i.e., não é necessário conhecer um intervalo que contém a raiz. Basta uma aproximação inicial;
- A convergência destes métodos não é garantida..

Ideia Básica

1. Dada uma função f da qual se procura uma raiz x, "fabrica-se" uma função auxiliar ou função de iteração ϕ *;*
2. A partir de um valor inicial x_0, constrói-se uma sequência de valores de acordo com a seguinte relação: $x_{k+1}=\phi(x_k)$;
3. Se a escolha de ϕ e x_0 for feita corretamente, espera-se que a sequência gerada convirja para a raiz de f ;
4. Com algum critério de parada, em função da precisão desejada, toma-se um dos valores x_k como aproximação da raiz.

Obtenção da Função de Iteração

- Podemos obter $\phi(x)$ isolando x em $f(x)=0$. Exemplo $f(x)=x^2+x-6$
  - $\phi(x)=\sqrt{6-x}$, $\phi(x)=\frac{6}{x}-1$
- Ou através da forma geral: $\phi(x)=x+A(x)f(x)$, onde $A(x)$ é uma função

qualquer, contínua no intervalo em torno da raiz, e não possui a mesma raiz que $f(x)$.

- $A(x)=-1 \rightarrow \phi(x)=6-x^2$
  $A(x)=\frac{-1}{x} \rightarrow \phi(x)=\frac{6}{x}-1$ (demonstrar!!)

- Calcular a raiz de $f(x)=x^2+x-6$ utilizando $\phi(x)=\sqrt{6-x}$ e $x_0=1.5$

$$x_1=\phi(x_0)=2.12132$$
$$x_2=\phi(x_1)=1.96944$$
$$x_3=\phi(x_2)=2.00763$$
$$x_4=\phi(x_3)=1.99809$$
(Converge)

- Calcular a raiz de $f(x)=x^2+x-6$ utilizando $\phi(x)=6-x^2$ e $x_0=1.5$

$$x_1=\phi(x_0)=3.75$$
$$x_2=\phi(x_1)=-8.0625$$
$$x_3=\phi(x_2)=-59.0039$$
$$x_4=\phi(x_3)=-3475.46$$
(Diverge)

Critérios de Parada

1. Diferença entre raiz estimada atual e raiz estimada na iteração anterior:

$$|\in_a| = |x_m^{new} - x_m^{old}| \quad \text{ou} \quad |\in_a| = |\frac{x_m^{new} - x_m^{old}}{x_m^{new}}| \times 100$$

2. Diferença entre o valor da função na raiz estimada atual e na iteração anterior:

$$|\in_a| = |f(x_m^{new}) - f(x_m^{old})| \quad \text{ou} \quad |\in_a| = |\frac{f(x_m^{new}) - f(x_m^{old})}{f(x_m^{new})}| \times 100$$

3. Valor da função na raiz estimada: $\in_a = |f(x_m)|$

Método de Newton-Raphson

- É um método iterativo no qual a função de iteração é dada por: $\phi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$

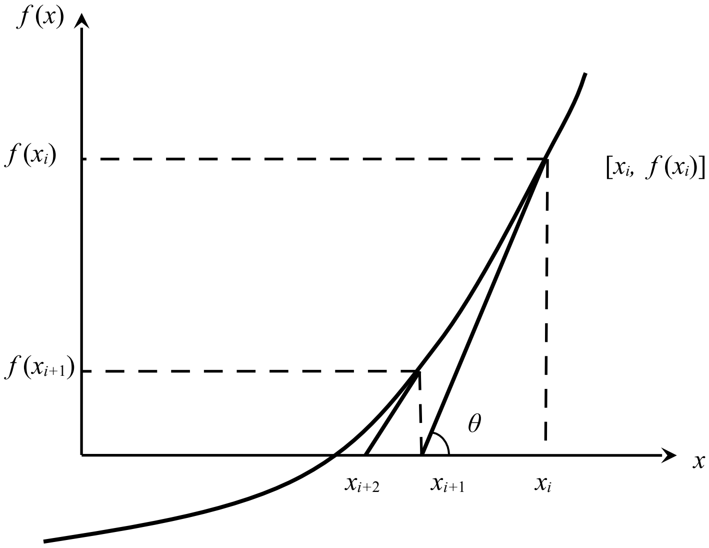


Figura 8 Ilustração do método de Newton-Raphson.

Algoritmo para o Método de Newton-Raphson

1. Calcule a derivada $f'(x)$;
2. Use um valor x_i como estimativa inicial da raiz para calcular um novo valor:
   $x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$
3. Encontre o Erro Relativo Aproximado: $|\in_a|=|\frac{x_{i+1}-x_i}{x_{i+1}}|\times 100$
4. Compare o erro com a tolerância $\in_s$ especificada. Também verifique o número de iterações a fim de detectar divergências e notificar o usuário.

Problema do Tanque de Óleo

Equação: $f(h)=h^3-9h^2+3.8197=0$, $f'(h)=3h^2-18h$

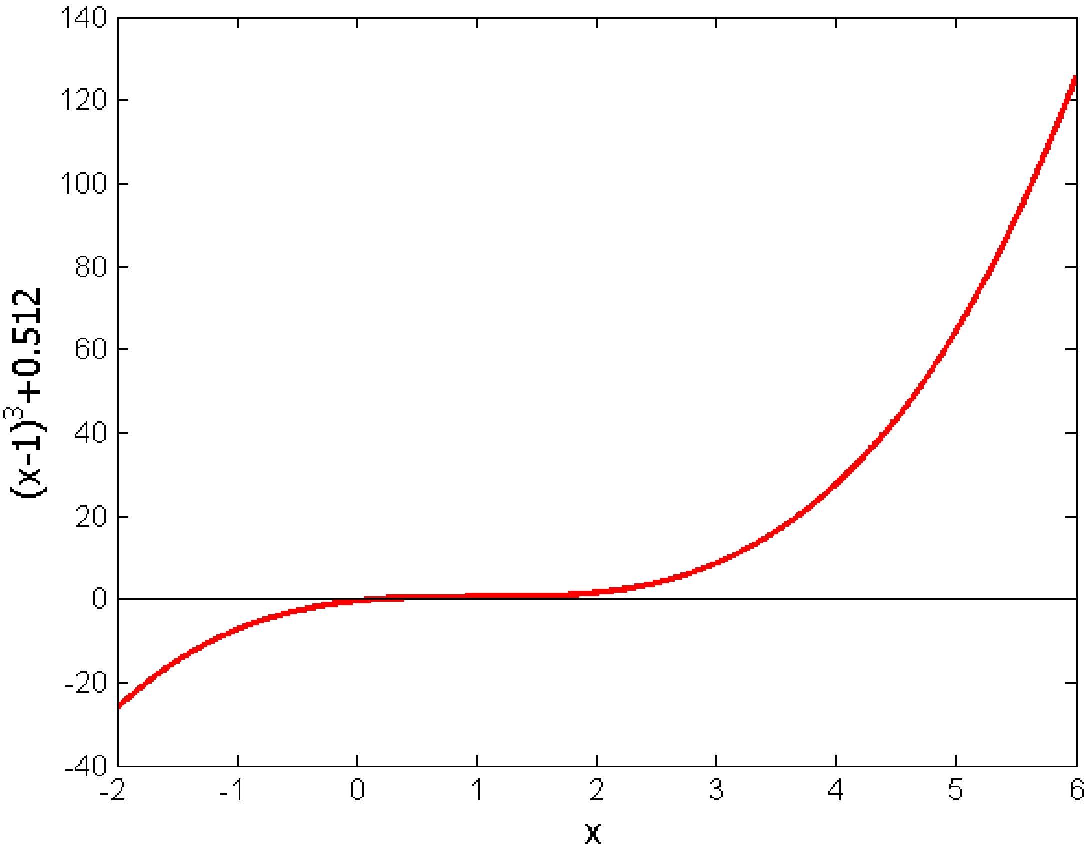
Solução: assumindo $h_0=1$

- $h_1 = h_0 - \frac{f(h_0)}{f'(h_0)} = 1 - \frac{(1)^3 - 9(1^2) + 3.8197}{3(1^2) - 18(1)} = 1 - \frac{-4.1803}{-15} = 0.72131$, $|\in_a| = \left|\frac{h_1 - h_0}{h_1}\right| \times 100 = 38.636\%$
- $h_2 = h_1 - \frac{f(h_1)}{f'(h_1)} = 0.67862$, $|\in_a| = \left|\frac{h_2 - h_1}{h_1}\right| \times 100 = 6.2907\%$
- $h_3 = h_2 - \frac{f(h_2)}{f'(h_2)} = 0.67747$, $|\in_a| = \left|\frac{h_3 - h_2}{h_2}\right| \times 100 = 0.17081\%$

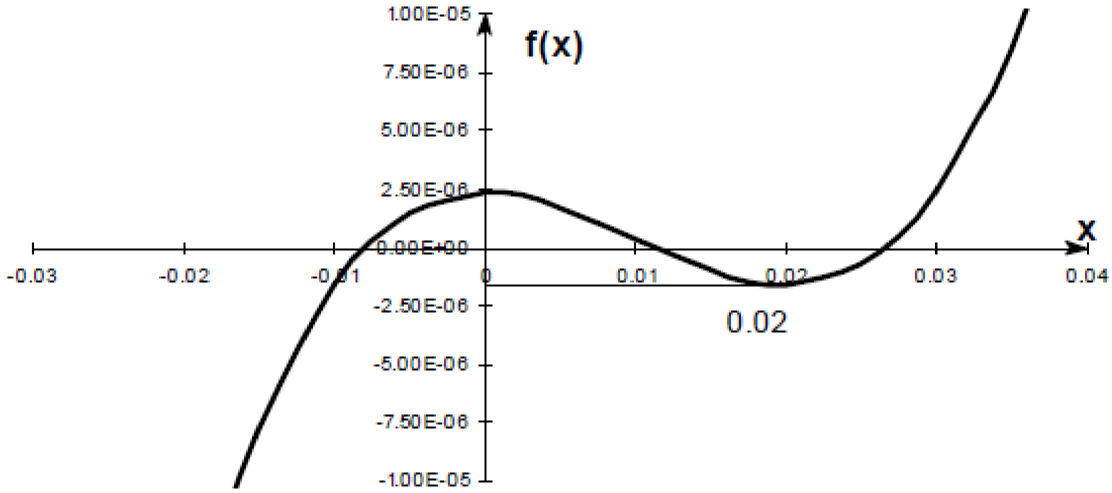
Desvantagens do Método de Newton-Raphson

a) Necessidade de uma função diferenciável

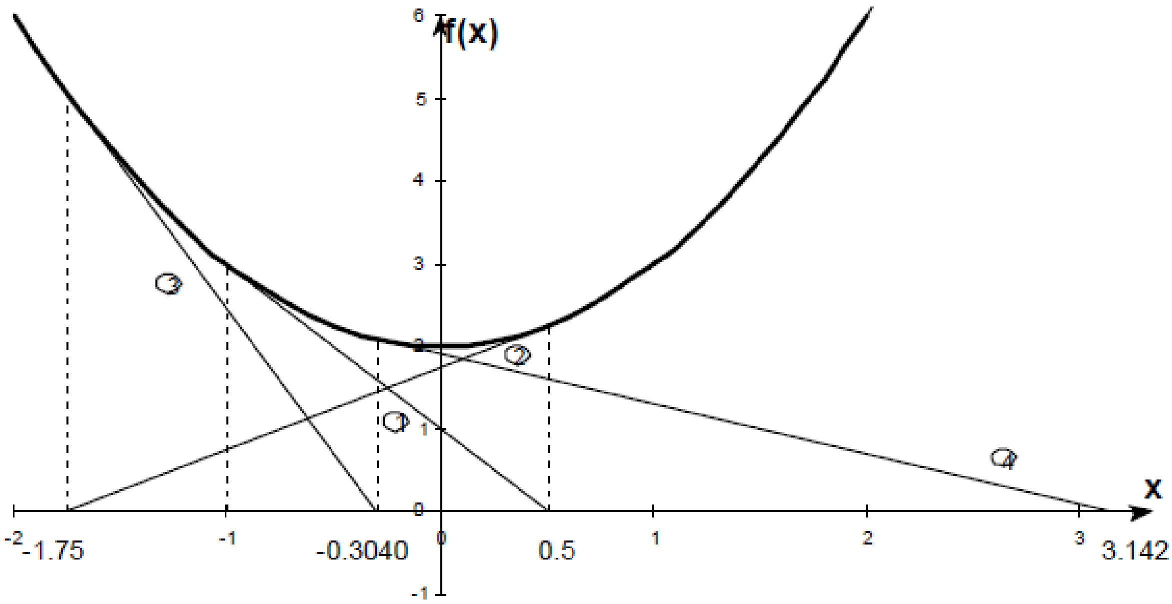
b) Divergência próximo a pontos de inflexão: para valores de x_0 próximos ao ponto de inflexão, a função pode divergir. Eventualmente ela converge novamente.



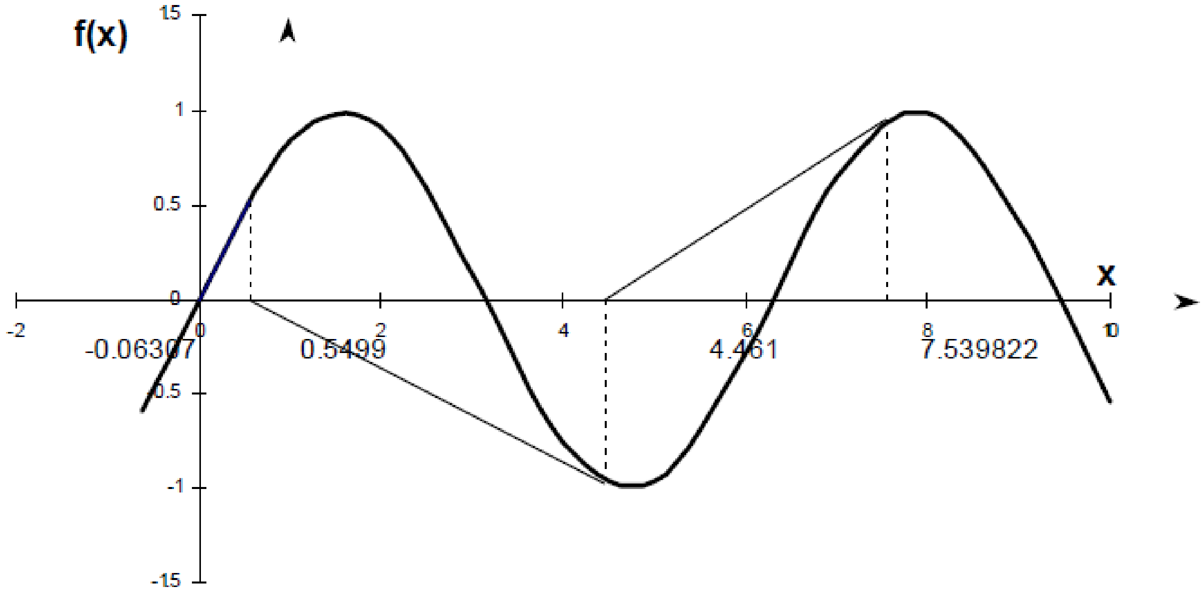
c) Divisão por zero



d) Oscilação próximo a máximos e mínimos



e) Alternância entre raízes



Quando o Método de Newton-Raphson funciona?

- "Quase sempre" podemos garantir que, se x_0 for escolhida suficientemente próxima da raiz, então a sequência $x_{0,} x_{1,} x_{2,} \ldots$ convergirá para a raiz;
- "Quase sempre" porque depende de:
  - f ser uma função diferenciável, com derivada contínua;
  - Do comportamento de f na proximidade da raiz;

Método para calcular o valor numérico de um Polinômio

Encontrar os zeros de polinômios é uma aplicação bastante comum dos métodos iterativos. Neste caso, o valor numérico do polinômio deve ser calculado a cada iteração, de forma que vale a pena otimizar o processo.

Vamos utilizar como exemplo um polinômio de grau 4:

$$p_4(x)=a_4 x^4+a_3 x^3+a_2 x^2+a_1 x^1+a_0 \qquad (1)$$

Este polinômio pode ser reescrito na forma:

$$p_4(x)=(((a_4 x+a_3)x+a_2)x+a_1)x+a_0 \qquad (2)$$

conhecida como a "forma dos parênteses encaixados".

Podemos ver que o número de cálculos a serem efetuados pelo processo (2) é bem menor que pelo processo (1). Pelo processo (1) temos **n** adições e **n + (n-1) + ... + 1 = (1+n)n/2** multiplicações. No caso (2) temos **n** adições e **n** multiplicações.

Portanto, para $p_n(x)$ de grau **n** qualquer, calculamos os coeficientes $b_j, j=n, n-1,\ldots, 1,0$ sucessivamente, sendo:

$$b_n = a_n$$

$$b_j = a_j + b_{j+1} x \qquad j = n-1, n-2, \ldots, 2, 1, 0$$

$$p_n(x) = b_0$$

Para o cálculo da derivada $p_4'(x)$ usando os mesmos coeficientes b_j :

$$p_4'(x) = 4a_4 x^3 + 3a_3 x^2 + 2a_2 x + a_1$$

$$\Rightarrow p_4'(x) = b_4 x^3 + b_3 x^2 + b_2 x + b_1$$

Aplicando o mesmo esquema anterior teremos:

$$c_n = b_n$$

$$c_j = b_j + c_{j+1} x \qquad j = n-1, n-2, \ldots, 2, 1$$

$$p_n'(x) = c_1$$

Exercício

Implementar uma função para calcular o valor do polinômio num ponto e para calcular o valor da derivada do polinômio no ponto.

```c
// p: coeficientes de um polinomio
// n: grau do polinomio p
// x: valor inicial
// px: valor do polinomio no ponto x
// dpx: valor da primeira derivada do polinomio no ponto x
void calculaPolinomioEDerivada( double *p, int n,
                                double x, double *px, double *dpx )
{
   double b=p[n], c=b;
   for (int i=n-1; i; --i) {
     b = p[i] + b * x;
     c = b + c * x;
   }
   b = p[0] + b * x;
   *px = b;
   *dpx = c;
}
```

Método da Secante

- Procura contornar o principal problema do método de Newton-Raphson: a necessidade da função derivada.
  - **Solução:** Substituir a derivada (inclinação da reta tangente) pela inclinação da reta secante que passa por dois pontos, ou seja, $f'(x)$ é aproximada por:
    $f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$
  - Os pontos não precisam formar um intervalo que contenha a raiz, ou seja, o método da secante também é um método de intervalo aberto.
- A função de iteração é dada por: $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_i - x_{i-1})}{f(x_i) - f(x_{i-1})}$

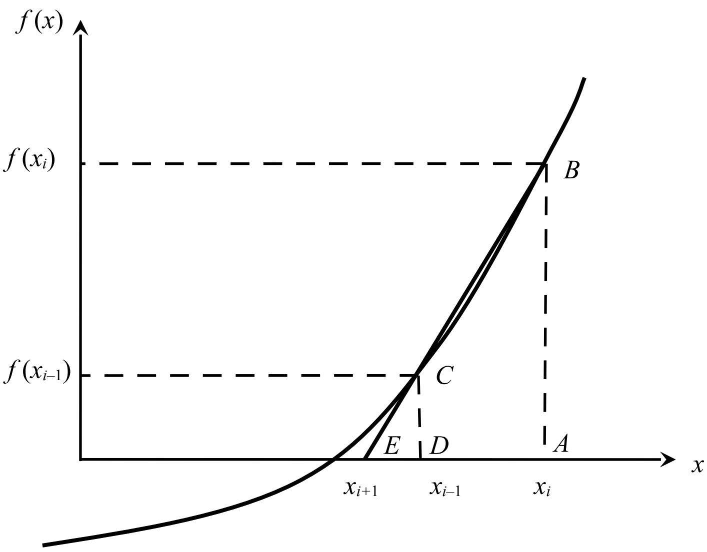


Figure 10 Representação Geométrica do Método da Secante.

Desvantagens do Método da Secante

O método da secante é muito parecido com o método de Newton, e portanto sujeito aos mesmos problemas. A principal diferença é que ele não depende da derivada da função.