Cálculo Numérico

Universidade Federal do Rio Grande do Norte
-
DIMAP

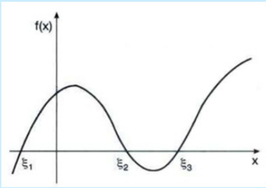
Cálculo Numérico
U2 – Zeros de Funções

Antonio Carlos Gay Thomé

Cálculo Numérico

Introdução

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



Nesta unidade estudaremos esquemas numéricos para resolver equações da forma $f(x) = 0$.

E por quê o uso de métodos numéricos?

Porque na maioria dos casos estas equações não têm uma solução algébrica como existe para as equações de 2º grau.

Método Numérico

O processo numérico para encontrar uma solução (os zeros da função) envolve duas fases:

Fase I - Isolamento das raízes

- ✓ Consiste em achar um intervalo fechado $[a, b]$ que contém a raiz.

Fase II - Refinamento

- ✓ Partindo de uma aproximação inicial refinamos a solução até que certos critérios sejam satisfeitos.

Isolamento das Raízes

O objetivo final é encontrar, **para cada raiz**, um intervalo $[a, b]$, de pequena amplitude ($b - a << 1$), que a contenha.

Duas estratégias são usadas:
- ✓ Análise Gráfica e
- ✓ Tabelamento da função. ↓↙

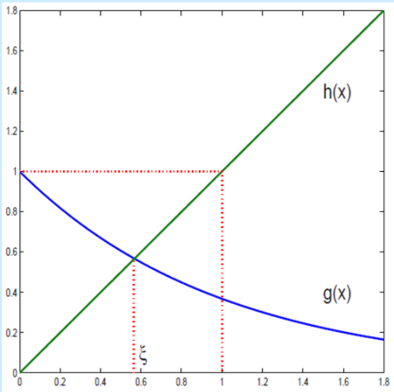
A ***análise gráfica*** é baseada na ideia de que, a partir da equação $f(x) = 0$, pode-se obter uma equação equivalente $g(x) - h(x) = 0$, onde g e h são mais simples e de fácil análise gráfica.

Esboçando o gráfico de g e h podemos determinar os pontos x, onde as curvas se interceptam, estes pontos serão as raízes de $f(x)$, isto é: ($g(\xi) = h(\xi) \rightarrow f(\xi) = 0$).

Cálculo Numérico

Cálculo das Raízes
Análise Gráfica

Exemplo: Seja $f(x) = e^{-x} - x$

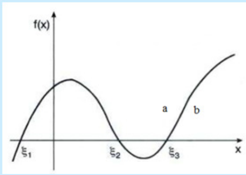


Onde:

$g(x) = e^{-x}$

$h(x) = x$

Quando viável, o gráfico da função pode ser usado para isolar as raízes.



Cálculo Numérico

Isolamento das Raízes
Tabelamento da Função

Teorema:

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

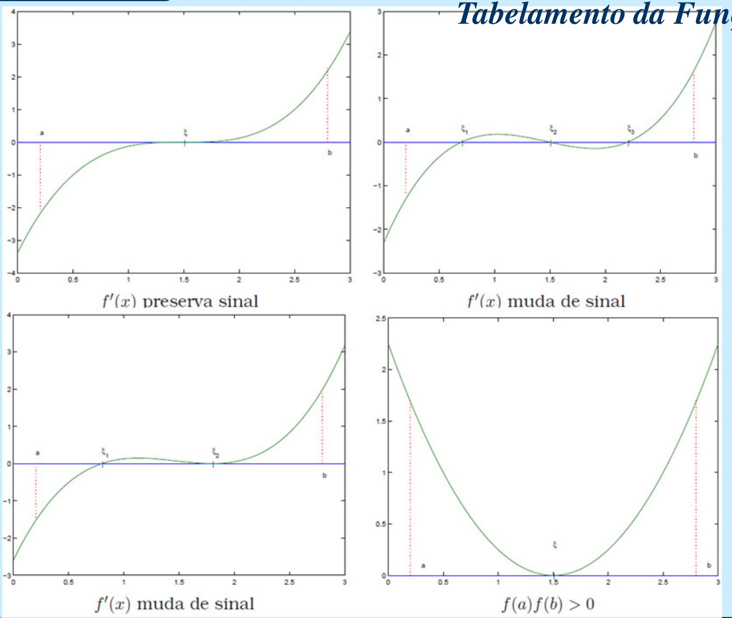
Se $\boldsymbol{f(a).f(b) < 0}$ *então existe <u>pelo menos</u> uma raiz* $\xi \in [a, b]$.

(*) O Teorema garante a existência de pelo menos uma raiz, mas pode ser que o intervalo contenha mais de uma raiz

Complemento:

Se a derivada $f'(x)$ <u>existir</u> e <u>preservar o sinal</u> em todo o intervalo [a, b], **então** este intervalo contém um <u>único zero</u> de $f(x)$.

Isolamento das Raízes
Tabelamento da Função



Isolamento das Raízes
Tabelamento da Função

Exemplo:

Da análise gráfica vimos que a função $f(x) = e^{-x} - x$ *tem uma raiz entre* [0, 1]. *Tabelando a função para valores a partir de zero e espaçados de 0.25 temos*

x	0	0.25	0.5	0.75	1
$f(x)$	1	0.528	0.106	-0.277	-0.632

Sendo que $f(0.5).f(0.75) < 0$ ➔ *a raiz pertence ao intervalo* [0.5, 0.75].

$f'(x) = -e^{-x} - 1 < 0 \ \forall x \in \boldsymbol{R}$, *isto é* f' *preserva o sinal em* $[a, b]$ *e com isto podemos concluir que esta raiz é única.*

Cálculo Numérico

Refinamento

Refinamento é o esquema numérico que partindo de uma aproximação inicial x_0, gera uma sequência $\{x_k\}$ que converge para a raiz procurada, isto é $x_k \rightarrow \xi$ quando $k \rightarrow \infty$

A aproximação inicial x_0 parte do intervalo encontrado na Fase I, ***Isolamento das Raízes***, e os termos da sequência são calculados até que a aproximação tenha atingido uma *precisão desejada* (critério de parada).

Métodos:

- ✓ Método da Bissecção
- ✓ Método Iterativo Linear (M.I.L.)
- ✓ Método de Newton-Raphson (M.N.R)

9 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Refinamento – Método da Bissecção

Seja $f(x)$ uma função contínua no intervalo $[a, b]$ tal que $f(a).f(b) < 0$ e seja $\varepsilon > 0$ um número dado (precisão).

A ideia é reduzir a amplitude do intervalo até atingir a precisão requerida: $b - a < \varepsilon$, usando sucessivas reduções do intervalo.

Passo 0: faça k = 0 e $[a_k, b_k] = [a, b]$

Passo 1: calcule

$$x_k = \frac{a_k + b_k}{2} \Rightarrow \begin{cases} se\ f(a_k).f(x_k) > 0 \Rightarrow a_{k+1} = x_k, b_{k+1} = b_k \therefore \xi \in [x_k, b_k] \\ se\ f(a_k).f(x_k) < 0 \Rightarrow a_{k+1} = a_k, b_{k+1} = x_k \therefore \xi \in [a_k, x_k] \end{cases}$$

Passo 2: faça k = k + 1;

se $b_k - a_k < \varepsilon$ ➔ *encerra*

senão ➔ *retorna ao Passo 1*

10 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Refinamento – Método da Bissecção

Estimativa do Número de Iterações

Pelo critério de parada podemos observar que o número de iterações depende do intervalo inicial $[a_0, b_0]$ e da precisão requerida ε. Dada uma precisão ε temos,

$$b_k - a_k < \varepsilon \Rightarrow \frac{b_0 - a_0}{2^k} < \varepsilon \Rightarrow 2^k > \frac{b_0 - a_0}{\varepsilon}$$

Os valores são sempre positivos, logo podemos aplicar a função logaritmo, obtendo:

$$\boxed{k > \frac{\log(b_0 - a_0) - \log(\varepsilon)}{\log(2)}}$$

Cálculo Numérico

Refinamento – Método da Bissecção

No Exemplo:

$f(x) = e^{-x} - x$

No intervalo $[0.5, 0.75]$, *usando a precisão* $\varepsilon = 10^{-8}$

$$k > \frac{\log(0.75 - 0.5) - \log(10^{-8})}{\log(2)} = 24.575$$

Será necessário, no mínimo, 25 iterações para que o método da Bissecção possa atingir a precisão desejada.

Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

(método do ponto fixo)

A estratégia deste método é escrever a função f de tal forma que $f(x) = x - \phi(x)$.

função de iteração

Se $f(\xi) = 0$, então $\xi - \phi(\xi) = 0 \rightarrow x = \phi(x)$

Logo, encontrar as raízes de $f(x)$ é equivalente a achar os pontos fixos da função $\phi(x)$, através de um processo iterativo partindo de um dado x_0 escolhido dentro do intervalo [a, b].

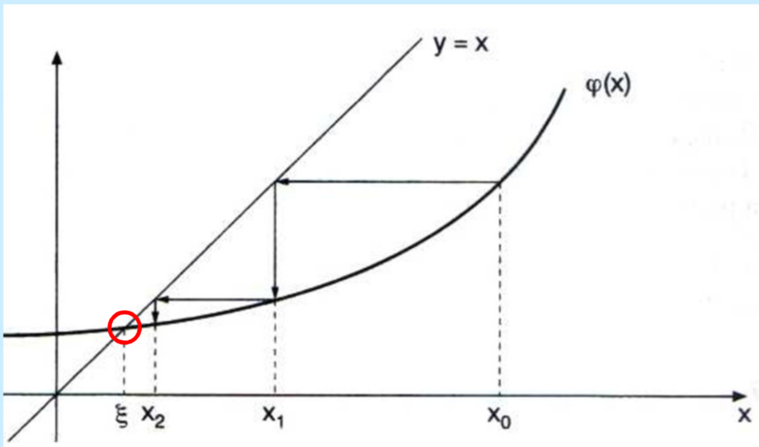
$$\boxed{x_{n+1} = \phi(x_n),\ n = 1, 2, \ldots}$$

Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

(método do ponto fixo)

Graficamente – a convergência é para o ponto onde $\phi(\xi) = \xi$



Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

Condição de Convergência

teorema - *Seja ξ uma raiz da função **f** isolada no intervalo* $[a, b]$.
*Seja ϕ uma função de iteração da função **f** que satisfaz:*

1) ϕ e ϕ' são contínuas em $[a, b]$,
2) $|\phi'(x)| \leq M < 1 \quad \forall x \in [a, b]$,
3) $x_0 \in [a, b]$.

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

15 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

Exemplo:

Seja a função $f(x) = e^{-x} - x$, onde existe uma raiz $\xi \in [0.5, 0.75]$.

Considerando $\phi(x) = e^{-x}$
as condições de convergência são:

1) *As funções $\phi(x) = e^{-x}$ e $\phi'(x) = -e^{-x}$ são contínuas em* $[0.5, 0.75]$.
2) *A função ϕ' satisfaz -* $\max_{x\in[0.5,0.75]} |\Phi'(x)| = 0.6065... < 1$
3) *Tomando $x_0 \in [0.5, 0.75]$ teremos garantia de convergência, por exemplo podemos tomar x_0 como o ponto médio do intervalo*

$$x_0 = \frac{0.5 + 0.75}{2} = 0.625$$

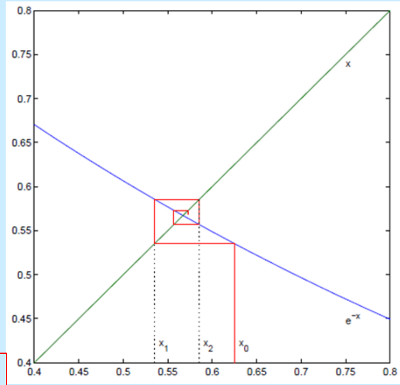
16 *Curso de Cálculo Numérico - 2015*

Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

Assim temos:

$$\begin{aligned} x_1 &= \phi(x_0) = \phi(0.625) = 0.53526... \\ x_2 &= \phi(x_1) = \phi(0.53526) = 0.58551... \\ x_3 &= \phi(x_2) = \phi(0.58551) = 0.55681... \\ x_4 &= \phi(x_3) = \phi(0.55681) = 0.57302... \\ x_5 &= \phi(x_4) = \phi(0.57302) = 0.56381... \\ x_6 &= \phi(x_5) = \phi(0.56381) = 0.56903... \\ \vdots &\ \ \vdots \qquad \vdots \end{aligned}$$



A aproximação para a raiz seria $x_6 = 0.56903$

Critério de Parada ➔

$|x_{n+1} - x_n| \le \varepsilon$ (Erro Absoluto)

$\dfrac{|x_{n+1} - x_n|}{|x_{n+1}|} \le \varepsilon$ (Erro Relativo)

Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

(*) Observação

Para uma mesma função f(x) pode-se ter mais de uma função de iteração e pode ser que nem todas convirjam.

Exemplo: Seja $f(x) = x^2 + x - 6$

Quatro diferentes funções de iteração $\phi(x)$ podem ser consideradas

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

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

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

d) $\varphi_4(x) = \dfrac{6}{x + 1}$.

Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

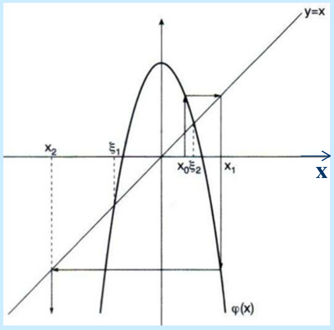
Exemplo - Convergência: Seja $f(x) = x^2 + x - 6$

$\xi_1 = -3$ e $\xi_2 = 2$

Considerando $\phi(x) = \phi_1(x) = 6 - x^2$ e $x_0 = 1.5$

$x_1 = \varphi(x_0) = 6 - 1.5^2 = 3.75$
$x_2 = \varphi(x_1) = 6 - (3.75)^2 = -8.0625$
$x_3 = \varphi(x_2) = 6 - (-8.0625)^2 = -59.003906$
$x_4 = \varphi(x_3) = -(-59.003906)^2 + 6 = -3475.4609$
.
.
.

a sequência diverge ....



Cálculo Numérico

Refinamento – Método Iterativo Linear

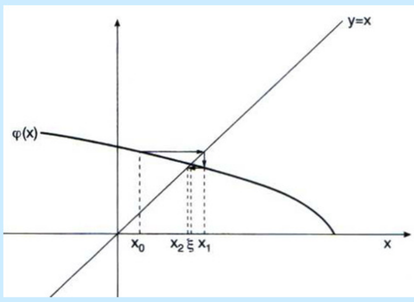
Exemplo - Convergência: Seja $f(x) = x^2 + x - 6$

$\xi_1 = -3$ e $\xi_2 = 2$

Considerando $\Phi(x) = \Phi_2(x) = \sqrt{6 - x}$ e $x_0 = 1.5$

$x_1 = \varphi(x_0) = \sqrt{6 - 1.5} = 2.12132$
$x_2 = \varphi(x_1) = 1.96944$
$x_3 = \varphi(x_2) = 2.00763$
$x_4 = \varphi(x_3) = 1.99809$
$x_5 = \varphi(x_4) = 2.00048$
.
.
.

a sequência converge



Cálculo Numérico

Refinamento – Método de Newton-Raphson

No método iterativo linear, temos que quanto menor for $|\phi'(x)|$ mais rápida será a convergência.

O método de Newton-Raphson é determinado de tal forma que a função de iteração é definida tal que $\phi'(\xi) = 0$, onde ξ é uma raiz de f.

Com isto temos a garantia de que existe um intervalo $[\bar{a}, \bar{b}]$ que contém a raiz, que $|\phi'(x)| << 1$ e, consequentemente, a convergência será bem mais rápida.

21 Curso de Cálculo Numérico - 2015

Cálculo Numérico

Refinamento – Método de Newton-Raphson

Para determinar a forma de ϕ consideremos uma função $A(x)$ que seja contínua diferençável e que $A(x) \neq 0$, $\forall x$. Assim temos

$$f(x) = 0 \Rightarrow A(x).f(x) = 0 \Rightarrow x = x + A(x).f(x) = \phi(x)$$

Calculando a derivada de ϕ na raiz ξ temos que

$$\phi'(\xi) = 1 + A'(\xi)f(\xi) + A(\xi)f'(\xi) = 0.$$

Como $f(\xi) = 0$ e considerando que $f'(\xi) \neq 0$, segue que

$$A(\xi) = -\frac{1}{f'(\xi)}.$$

Assim tomamos a função $A(x) = -1/f'(x)$, e portanto teremos

$$\boxed{\phi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}}$$

22 Curso de Cálculo Numérico - 2015

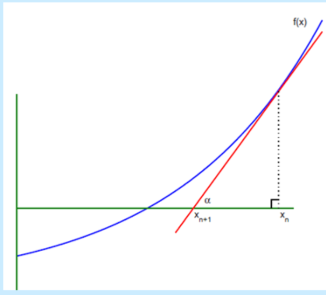
Cálculo Numérico

Refinamento – Método de Newton-Raphson

Com esta função de iteração monta-se o processo iterativo conhecido como método de ***Newton-Raphson***, onde dado x_0

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Graficamente este método tem a interpretação mostrada na Figura ao lado. Onde x_{n+1} é o ponto onde a derivada da função em x_n corta o eixo dos x.



Cálculo Numérico

Refinamento – Método de Newton-Raphson

Exemplo:

Seja $f(x) = e^{-x} - x$ que possui uma raiz no intervalo $[0.5, 0.75]$, usando $x_0 = 0.625$ e $\varepsilon = 0.006$.

$f'(x) = -e^{-x} - 1$ e $x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)} = x_n + \dfrac{e^{-x} - x}{e^{-x} + 1}$

$$x_1 = x_0 + \frac{e^{-x_0} - x_0}{e^{-x_0} + 1} = 0.56654 \quad |x_1 - x_0| = 0.0584 > \varepsilon$$

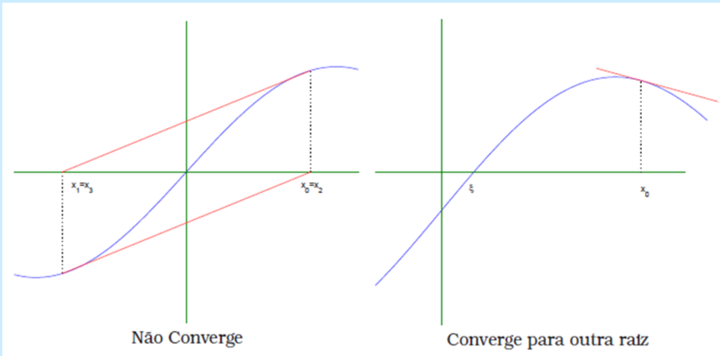
$$x_2 = x_1 + \frac{e^{-x_1} - x_1}{e^{-x_1} + 1} = 0.56714 \quad |x_2 - x_1| = 0.0006 < \varepsilon$$

Este método encontrou a solução em duas iterações, enquanto que o M.I.L. precisou de 6 iterações para obter a aproximação com a mesma precisão.

Cálculo Numérico

Refinamento – Método de Newton-Raphson

O método de ***Newton-Hapson*** nem sempre converge:



Cálculo Numérico

Ordem de Convergência

O Método de ***Newton-Raphson*** pode ser interpretado como um caso particular do ***Método Iterativo Linear***, onde a convergência ocorre mais rapidamente.

A "medida" que permite comparar a convergência entre os métodos é a ***ordem de convergência***, definida por:

Seja $\{x_n\}$ uma sequência que converge para um número ξ e seja $e_k = x_k - \xi$ o erro na iteração k. Se

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} = C,$$

com $p \geq 1$ e $C > 0$, então a sequência converge com ordem ***p*** *e com constante assintótica* ***C***.

Ordem de Convergência

Assim quanto maior for o valor de p, menor será o erro $|e_{k+1}|$.

Se $p = 1$ ➔ o método tem convergência linear.
Se $p = 2$ ➔ a convergência é quadrática.

M.I.L. tem ordem de convergência $p = 1$ e $C = |\phi'(\xi)|$

Newton-Raphson tem ordem de convergência $p = 2$ e $C = \frac{1}{2}|\phi''(\xi)|$