

Métodos Computacionais em Física I (FIW234)

Turmas IFA e IFB

Zeros de Funções

Edivaldo M. Santos e João R. T. de Mello Neto

Aula 7

O problema

- Na aula de hoje estamos interessados no problema de encontrar numericamente as soluções de uma equação do tipo:

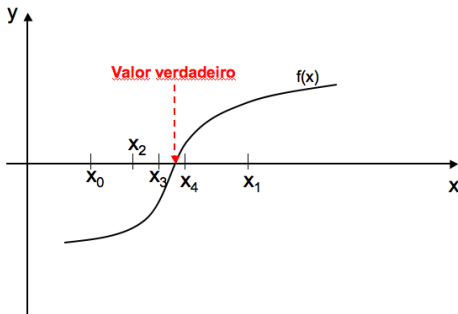
$$f(x) = 0 \quad (1)$$

para uma função $f(x)$ que seja ao menos contínua. Ou seja, encontrar os zeros de f .

- No caso em que função $f(x)$ é um polinômio de grau no máximo 4, as soluções podem ser obtidas por expressões e algoritmos fechados uma vez fornecidos os coeficientes do polinômio.
- Para polinômios de grau 5 ou maior, nenhum procedimento fechado existe.
- E $f(x)$ pode ser ainda uma função muito mais complicada de x , fazendo com que a equação acima não tenha solução analítica como no caso dos polinômios de grau maior que 4.
- De fato, qualquer equação com uma única variável independente x pode ser escrita na forma de 1, movendo-se todos os termos de um dos lados da equação para o outro lado.

Procedimento numérico

- A determinação de raízes de uma função numericamente é feita por iterações sucessivas, iniciando-se com um chute inicial para o valor da raiz e aproximando-se do valor verdadeiro a cada iteração.
- Obviamente, o sucesso e rapidez da convergência dessa procura iterativa depende crucialmente do chute inicial.
- Outra tarefa que deve ser realizada com cuidado antes de aplicar o algoritmo de procura da raiz é a definição do intervalo de busca, que de certa forma está ligado ao da escolha do chute inicial.



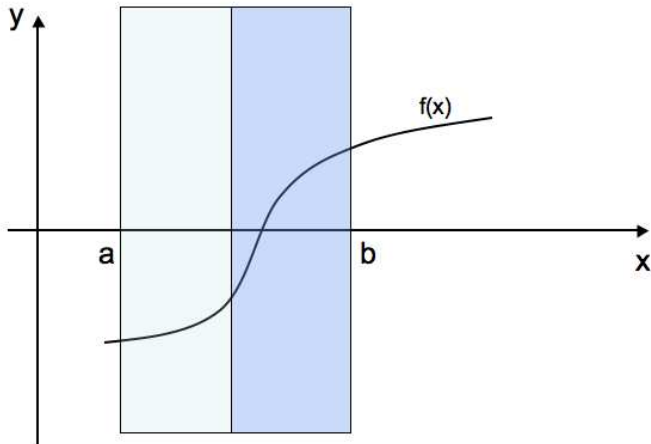
Encurralamento de raízes

- O primeiro passo ao se escrever um programa de busca de raízes é garantir que há de fato uma raiz no intervalo de busca.
- Diz-se que uma raiz de f está encurralada no intervalo (a,b) de $f(a)$ e $f(b)$ têm sinais contrários. Se f é contínua em (a,b) , o **teorema do valor intermediário** garante a existência de pelo menos uma raiz nesse intervalo.
- A função pode ter mais de uma raiz no intervalo de busca, de forma que os procedimentos de busca mais simples vão encontrar apenas uma delas. O problema de raízes múltiplas é bastante sutil e não há qualquer receita geral que sirva para se determinar o número total de raízes num dado intervalo.
- Quando possível, graficar a função da qual se quer encontrar a raiz é um primeiro passo para se decidir o intervalo de busca e/ou o chute inicial para a raiz.

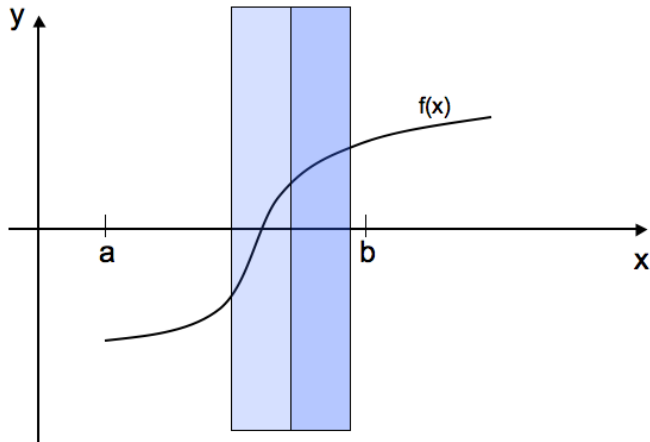
O método da bisseção

- O método mais simples para se encontrar uma raiz encurralada num intervalo (a,b) é o da bisseção.
- Nesse método, divide-se o intervalo atual de busca em duas metades e toma-se como novo intervalo aquele que contém uma raiz encurralada, ou seja, aquele em que a função tem sinais opostos nos seus extremos.

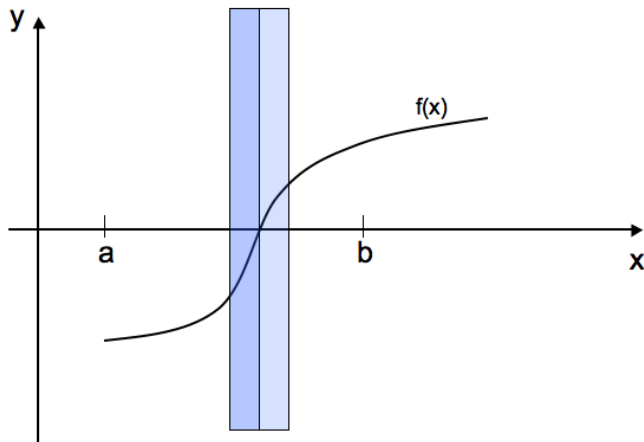
Método da bisseção



Método da bisseção



Método da biseção



Bisseção: precisão e velocidade de convergência

- Há 2 tipos de precisão com a qual podemos trabalhar. A precisão absoluta

$$\epsilon_{abs} = |\text{valor verdadeiro} - \text{valor aproximado}| \quad (2)$$

e precisão relativa

$$\epsilon_{rel} = \left| \frac{\text{valor verdadeiro} - \text{valor aproximado}}{\text{valor verdadeiro}} \right| \quad (3)$$

Bisseção: precisão e velocidade de convergência

- Há 2 tipos de precisão com a qual podemos trabalhar. A precisão absoluta

$$\epsilon_{abs} = |\text{valor verdadeiro} - \text{valor aproximado}| \quad (2)$$

e precisão relativa

$$\epsilon_{rel} = \left| \frac{\text{valor verdadeiro} - \text{valor aproximado}}{\text{valor verdadeiro}} \right| \quad (3)$$

- A precisão relativa é a mais apropriada na maioria das aplicações de interesse. No entanto, não conhecemos o valor verdadeiro da raiz, só temos acesso á melhor aproximação ao seu valor. Dessa forma, nossa estimativa de precisão relativa será:

$$\epsilon_{rel}^{\sim} = \left| \frac{\text{melhor valor} - \text{valor anterior}}{\text{melhor valor}} \right| \quad (4)$$

Bisseção: precisão e velocidade de convergência

- Há 2 tipos de precisão com a qual podemos trabalhar. A precisão absoluta

$$\epsilon_{abs} = |\text{valor verdadeiro} - \text{valor aproximado}| \quad (2)$$

e precisão relativa

$$\epsilon_{rel} = \left| \frac{\text{valor verdadeiro} - \text{valor aproximado}}{\text{valor verdadeiro}} \right| \quad (3)$$

- A precisão relativa é a mais apropriada na maioria das aplicações de interesse. No entanto, não conhecemos o valor verdadeiro da raiz, só temos acesso á melhor aproximação ao seu valor. Dessa forma, nossa estimativa de precisão relativa será:

$$\tilde{\epsilon}_{rel} = \left| \frac{\text{melhor valor} - \text{valor anterior}}{\text{melhor valor}} \right| \quad (4)$$

- No método da bisseção, a precisão varia linearmente a cada iteração, de fato ela é reduzida por um fator 2 a cada iteração.
- É fácil mostrar que para uma dada precisão ϵ e uma largura Δ para o intervalo inicial de busca, o número de iterações necessárias varia de acordo

$$n = \log_2 \left(\frac{\Delta}{\epsilon} \right) \quad (5)$$

Bisseção: vantagens e desvantagens

- Vantagem:

- 1 Determinação de uma raiz encurralada garantida!
- 2 algoritmo simples

- Desvantagem:

- 1 A convergência linear é considerada lenta.

Bisseção: implementação

```
/* Adaptado de Numerical Recipes in C */

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include "protos.h"

#define JMAX 40 /* Maximum allowed number of bisections. */

float rtbis(float x1, float x2, float xacc)
/*
   Using bisection, find the root of a function func known to lie between x1 and x2.
   The root, returned as rtbis, will be refined until its accuracy is +/- xacc.
*/
{
    int j;
    float dx,f,fmid,xmid,rtb;
    f=func(x1);
    fmid=func(x2);
    if (f*fmid >= 0.0) printf("Raiz deve estar encurralada para a bissecao em rtbis\n");
    rtb = f < 0.0 ? (dx=x2-x1,x1) : (dx=x1-x2,x2); /* Orient the search so that f>0 lies at x+dx. */
    for (j=1;j<=JMAX;j++) {
        fmid=func(xmid=rtb+(dx *= 0.5)); /* Bisection loop */
        if (fmid <= 0.0) rtb=xmid;
        if (fabs(dx) < xacc || fmid == 0.0) return rtb;
    }
    printf("Numero maximo de bissecoes atingido!\n");
    return 0.0; /* Never get here. */
}
```

O método de Newton-Raphson

- De acordo com o teorema de Taylor, uma função $f(x)$ com derivadas contínuas de ordem arbitrária pode ser representada pela seguinte série de potências:

$$\begin{aligned}f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \cdots \\&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n\end{aligned}$$

para expansão em torno de um ponto x_0 do domínio de f .

O método de Newton-Raphson

- De acordo com o teorema de Taylor, uma função $f(x)$ com derivadas contínuas de ordem arbitrária pode ser representada pela seguinte série de potências:

$$\begin{aligned}f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \cdots \\&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n\end{aligned}$$

para expansão em torno de um ponto x_0 do domínio de f .

- Se aproximarmos a função na vizinhança de um ponto a qualquer do domínio de f pela sua expansão em série de Taylor até ordem 1, isto é:

$$f(x) \approx f(a) + f'(a)(x - a), \quad (6)$$

uma estimativa direta de uma raiz de f pode ser obtida resolvendo-se

$$f(a) + f'(a)(x - a) = 0$$

$$x = a - \frac{f(a)}{f'(a)}. \quad (7)$$

que é a intersecção da reta tangente ao gráfico de $f(x)$ em $x = a$ com o eixo x .

O método de Newton-Raphson

- De acordo com o teorema de Taylor, uma função $f(x)$ com derivadas contínuas de ordem arbitrária pode ser representada pela seguinte série de potências:

$$\begin{aligned}f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \cdots \\&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n\end{aligned}$$

para expansão em torno de um ponto x_0 do domínio de f .

- Se aproximarmos a função na vizinhança de um ponto a qualquer do domínio de f pela sua expansão em série de Taylor até ordem 1, isto é:

$$f(x) \approx f(a) + f'(a)(x - a), \quad (6)$$

uma estimativa direta de uma raiz de f pode ser obtida resolvendo-se

$$f(a) + f'(a)(x - a) = 0$$

$$x = a - \frac{f(a)}{f'(a)}. \quad (7)$$

que é a intersecção da reta tangente ao gráfico de $f(x)$ em $x = a$ com o eixo x .

- Na realidade, o valor de x determinado acima pode ser usado como um novo ponto de expansão de f e o algoritmo pode ser repetido para obter uma nova estimativa da raiz. Num método iterativo:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad (8)$$

Newton-Raphson: velocidade de convergência

- A expansão em série de Taylor em torno da i -ésima aproximação para a raiz de f é:

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x - x_i)^2 + \cdots, \quad (9)$$

de forma que a aproximação seguinte é dada por

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}. \quad (10)$$

- Subtraindo-se do valor verdadeiro da raiz (x) ambos os lados da última equação e lembrando que $\epsilon_{i+1} = x - x_{i+1}$ e $\epsilon_i = x - x_i$, temos

$$\epsilon_{i+1} = \epsilon_i + \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}. \quad (11)$$

- Nas proximidades de um zero de f , o lado esquerdo 9 pode ser desprezado, de modo que mantendo apenas termos de ordem 2, podemos escrever

$$f(x_i) = -\epsilon_i f'(x_i) - \frac{\epsilon_i^2}{2} f''(x_i), \quad (12)$$

de modo que substituindo essa expressão na anterior chegamos a

$$\epsilon_{i+1} = -\frac{\epsilon_i^2}{2} \frac{f''(x_i)}{f'(x_i)} \quad (\text{convergência quadrática!}) \quad (13)$$

Newton-Raphson: vantagens e desvantagens

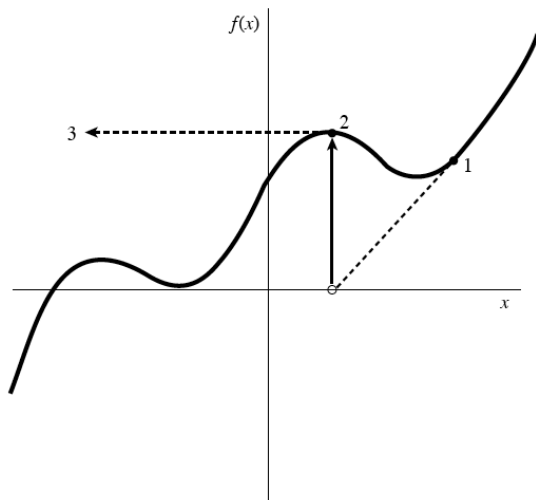
- Vantagem:

- 1 Convergência rápida: quadrática em ϵ
- 2 Salvo em alguns casos patológicos, determinação de uma raiz encurralada garantida!

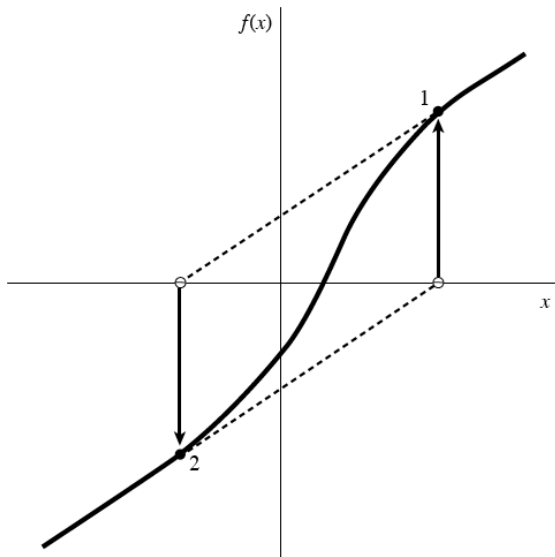
- Desvantagem:

- 1 É preciso calcular não só a função, mas também sua derivada a cada iteração.

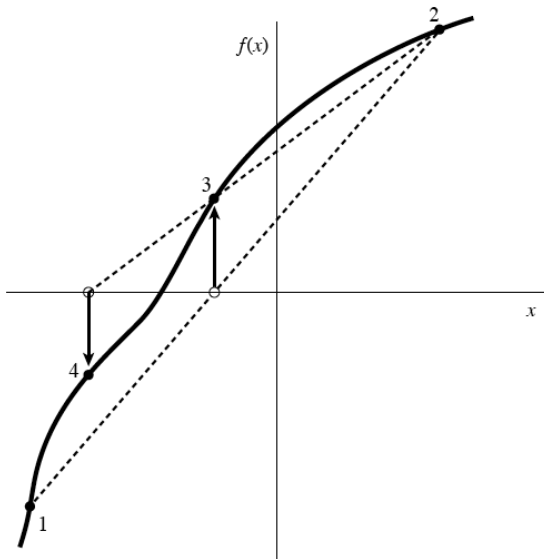
Newton-Raphson: patologias



Newton-Raphson: patologias



O método da secante



PARA FAZER EM SALA DE AULA

- escreva um código para encontrar o zero não-nulo da função $x^2 - 4 \sin(x)$.
- grafique a função no Gnuplot para decidir qual será seu intervalo de busca.
- compare o número de iterações até encontrar a raiz nos dois métodos: Bissecção e Newton-Raphson.
- confira seus resultados visulmente com o gráfico do Gnuplot.