MS211 - Cálculo Numérico

Zeros Reais de Funções Reais
(Slides Modificados de M. E. Valle

Nas aula de hoje iniciaremos os estudos sobre métodos numéricos para aproximar a solução do seguinte problema:

Zero de uma Função Real

Dada uma função $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, determine, se possível, $\xi \in [a, b]$ tal que

$$f(\xi) = 0.$$

Nesse caso, ξ é chamado **zero** (ou **raiz**) de f. Dizemos também que ξ é uma solução da equação $f(x) = 0$. Denotaremos por $\tilde{\xi}$ a aproximação de ξ fornecida por um método numérico.

Devemos nos atentar para algumas questões:

- Existe $\xi \in [a, b]$ tal que $f(\xi) = 0$?
- No caso afirmativo, ξ é único?
- Se existem mais de uma solução, há um critério para a melhor solução?

Existência de Solução

O seguinte teorema, geralmente visto no curso de Cálculo I, garante a existência de uma raiz de f em $[a, b]$.

Teorema 1 (Teorema do Valor Intermediário)

Seja $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ uma função contínua. Se $f(a)f(b) < 0$, então existe pelo menos um $\xi \in (a, b)$ tal que $f(\xi) = 0$.

O teorema do valor intermediário (TVI), além de garantir a existência da raiz, é a base para o chamado **método da bisseção.**

Método da Bisseção

Suponha que conhecemos um intervalo $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$.

- Calcule o ponto médio do intervalo:

$$x = \frac{a+b}{2}.$$

- Avalie f no ponto médio, ou seja, calcule $f(x)$.
- Substitua a ou b por x de modo a obter um novo intervalo que contém a raiz, ou seja,
    - **Se** $f(x)f(b) < 0$, **então** $a \leftarrow x$, **senão** $b \leftarrow x$.

Repetimos até o(s) critério(s) de parada está/estsão satisfeitos!

Tomamos o último x como estimativa da raiz de f.

Figura do Método da Bisseção

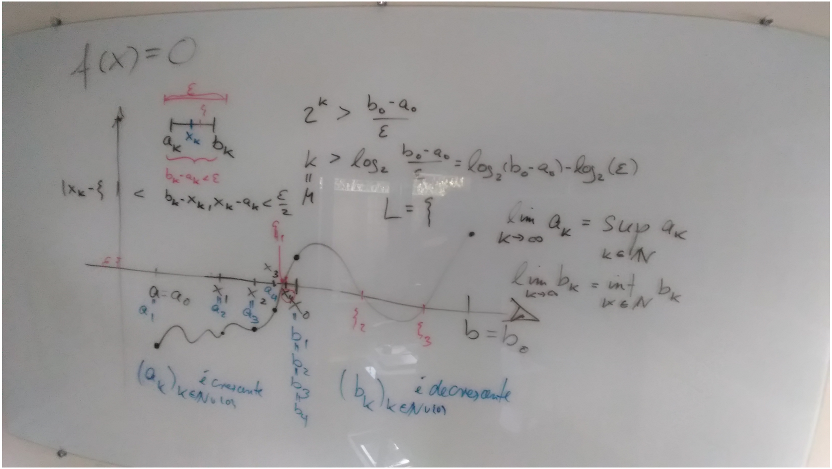


Figura: Figura que acompanha o Bisection Rap. Aqui $\delta = \frac{\varepsilon}{2}$.

Método da Bisseção

```
function [T,x] = bisect(f,a,b,delta,eps)

k = 0;
x = (a+b)/2;
T(k+1,1:6)=[k,a,b,b-a,x,f(x)];
if f(a)*f(b) >= 0
    display('Sem troca de sinal')
else
    while (b-a) >= 2*delta & abs(f(x)) >= eps
        if f(x)*f(b) < 0
            a = x;
        else
            b = x;
        end
        x = (a+b)/2;
        k = k+1;
        T(k+1,1:6)=[k,a,b,b-a,x,f(x)];
    end
end
x = (a+b)/2;
```

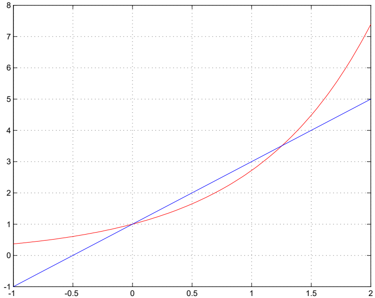
Exemplo 2

Use o método da bisseção para encontrar uma estimativa para a raiz **positiva** da função

$$f(x) = e^x - 2x - 1,$$

com tolerâncias $\varepsilon = \delta = 10^{-3}$.

Resposta:
Note que $f(x) = 0$ é equivalente a $h(x) = g(x)$, sendo $h(x) = e^x$ e $g(x) = 2x + 1$. Sempre podemos escrever $f(x) = 0$ em termos de $g(x) = h(x)$ e vice versa!!!



Vamos aplicar o método da bisseção usando $a = 1$ e $b = 2$.

Tabela do Método da Bisseção

```
>> f = inline('exp(x)-2*x-1')
f = f(x) = exp(x)-2*x-1
>> eps = 10^(-3)
eps =  0.0010000
>> delta = eps
delta =  0.0010000
>> a = 1
a =  1
>> b = 2
b =  2
>> [T,x] = bisect(f,a,b,delta,eps)



   k     a          b          b-a         x          f(x)
----------------------------------------------------------------
   0   1.00000   2.00000   1.00000   1.50000    0.48169
   1   1.00000   1.50000   0.50000   1.25000   -0.00966
   2   1.25000   1.50000   0.25000   1.37500    0.20508
   3   1.25000   1.37500   0.12500   1.31250    0.09045
   4   1.25000   1.31250   0.06250   1.28125    0.03864
   5   1.25000   1.28125   0.03125   1.26562    0.01406
   6   1.25000   1.26562   0.01562   1.25781    0.00209
   7   1.25000   1.25781   0.00781   1.25391   -0.00381
   8   1.25391   1.25781   0.00391   1.25586   -0.00086

Para k = 8, temos que |f(x)| < eps. Portanto, o critério de parada
"vertical" está satisfeito. Note que b-a >= 2*delta, mas aqui paramos
assim que |f(x)| < eps OU b-a >= 2*delta.


x =  1.2559
```

Taxa de Convergência

A taxa de convergência de um método numérico refere-se ao quão rápido ele fornece uma estimativa para a raiz de uma função $f : [a, b] \to \mathbb{R}$.

No caso do método da bisseção, a cada iteração dividimos o intervalo inicial pela metade.

Após k iterações, teremos um intervalo de tamanho $\frac{b-a}{2^k}$, que converge para zero quando $k \to \infty$.

Teremos $b - a \leqslant 2\delta$ quando

$$k \geqslant \log_2 \left(\frac{|b - a|}{\delta} \right) - 1.$$

Nesse caso, a aproximação atual $\tilde{\xi}$ satisfaz $|\tilde{\xi} - \xi| \leqslant \delta$.

Exemplo 3

Use o método da bisseção para encontrar uma estimativa para a raiz **positiva** da função

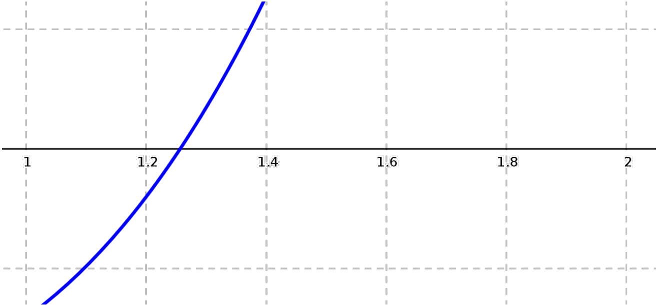
$$f(x) = e^x - 2x - 1,$$

com tolerância $\delta = 10^{-1}$.

Resposta:
Primeiramente, observe que

$$f(1) = e - 3 = -0.28172 \quad \text{e} \quad f(2) = e^2 - 5 = 2.3891.$$

Pelo teorema do valor intermediário, existe uma raiz entre 1 e 2.
Vamos aplicar o método da bisseção considerando $a = 1$ e $b = 2$.



Inicializamos $f_a = f(a) = -0.28172$ e $f_b = f(b) = 2.3891$.

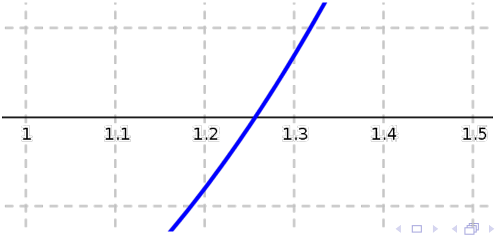
Primeira iteração:

Como $b - a = 1 > 0.2 = 2\delta$, calculamos:

$$m = (a+b)/2 = 3/2 = 1.5.$$
$$f_m = 0.48169.$$

Como $f_a f_m < 0$, definimos

$$b = m \quad \text{e} \quad f_b = f_m$$



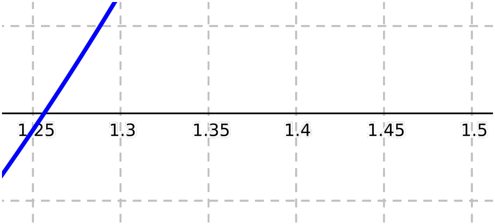
Segunda iteração:

Como $b - a = 0.5 > 0.2 = 2\delta$, calculamos:

$$m = (a + b)/2 = 1.25.$$
$$f_m = -0.0096570.$$

Como $f_a f_m > 0$, definimos

$$a = m \quad \text{e} \quad f_a = f_m$$



Note que $|f_m| = 0.00965$, um valor que poderia ser usado como critério de parada!

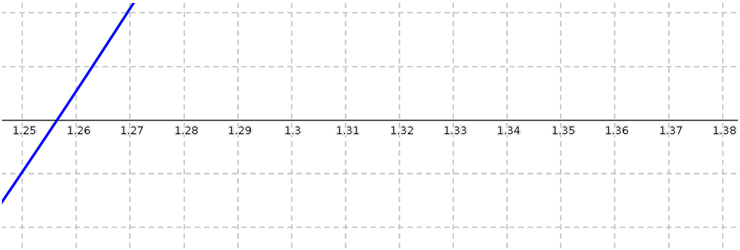
Terceira iteração:

Como $b - a = 0.25 > 0.2 = 2\delta$, calculamos:

$$m = (a+b)/2 = 1.375.$$
$$f_m = 0.20508.$$

Como $f_a f_m < 0$, definimos

$$b = m \quad \text{e} \quad f_b = f_m$$

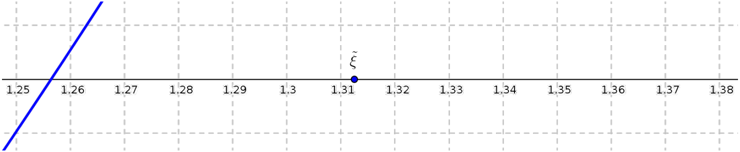


Quarta iteração:

Como $b - a = 0.125 < 0.2 = 2\delta$, terminamos as iterações. Definimos

$$\tilde{\xi} = \frac{b-a}{2} = 1.3125,$$

como sendo a aproximação para a raiz de f.



Note que $|f(\tilde{\xi})| = 0.090451$. Na segunda iteração, porém, encontramos $|f_m| = 0.0965$. Assim, m da segunda iteração (aparentemente) é uma aproximação melhor para a raiz.

Método da Posição Falsa (Regula Falsi)

- Para o método da bisseção, importa apenas o sinal de f nos extremos dos intervalos.
- Um método mais elaborado, deve olhar para os valores de f!

Por exemplo, espera-se que a raiz de f esteja mais próxima de a que de b se $|f(a)| < |f(b)|$.

No método da posição falsa, em vez de escolher o ponto médio do intervalo, adotamos a intersecção do eixo x com a reta que passa pelos pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$, i.e., substituímos o ponto médio do intervalo por

$$m = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}.$$

Método da Posição Falsa

Entrada: Função f; intervalo que contém a raiz $[a, b]$.
Dados: Tolerâncias δ e ϵ.
Inicialize: $f_a = f(a)$, $f_b = f(b)$ *e* $f_m = \epsilon + 1$.
enquanto $|f_m| > \epsilon$ *e* $b - a > 2\delta$ **faça**

Defina: $m = \dfrac{af_b - bf_a}{f_b - f_a}$.
Avalie: $f_m = f(m$.
se $sign(f_a)sign(f_m) < 0$ **então**
Defina $b = m$ e $f_b = f_m$.
senão
Defina $a = m$ e $f_a = f_m$.

Saída: Aproximação para a raiz:

$$\tilde{\xi} = \begin{cases} m, & |f_m| \leqslant \epsilon, \\ \frac{af_b - bf_a}{f_b - f_a}, & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Exemplo 4

Use o método da posição falsa para encontrar uma estimativa para a raiz **positiva** da função

$$f(x) = e^x - 2x - 1,$$

com tolerâncias $\delta = 0.1$ e $\epsilon = 0.1$.

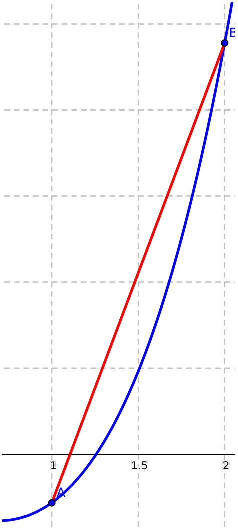
Resposta: Primeiramente, observe que

$$f(1) = e - 3 = -0.28172$$

e

$$f(2) = e^2 - 5 = 2.3891.$$

Pelo teorema do valor intermediário, existe uma raiz entre 1 e 2.
Vamos aplicar o método da posição falsa com $a = 1$ e $b = 2$.



Inicializamos

$$f_a = f(a) = -0.28172$$

e

$$f_b = f(b) = 2.3891.$$

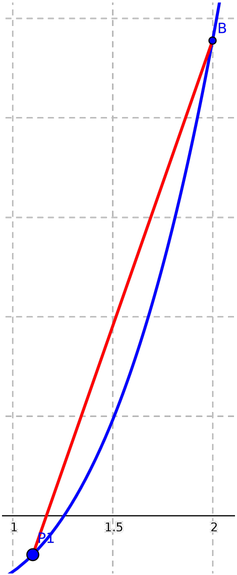
Primeira iteração:
Como $b - a = 1 > 0.2 = 2\delta$, calculamos:

$$m = \frac{a * f_b - b * f_a}{f_b - f_a} = 1.1055.$$

$$f_m = -0.19028.$$

Como $f_a f_m > 0$, definimos

$$a = m \quad \text{e} \quad f_a = f_m$$



Segunda iteração:
Como

$$b - a = 0.89452 > 0.2 = 2\delta,$$

e

$$|f_m| = 0.19028 > 0.1 = \epsilon,$$

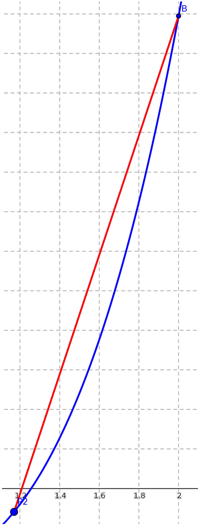
calculamos:

$$m = \frac{a * f_b - b * f_a}{f_b - f_a} = 1.1715.$$

$$f_m = -0.11620.$$

Como $f_a f_m > 0$, definimos

$$a = m \quad \text{e} \quad f_a = f_m$$



Terceira iteração:
Como

$$b - a = 0.82853 > 0.2 = 2\delta,$$

e

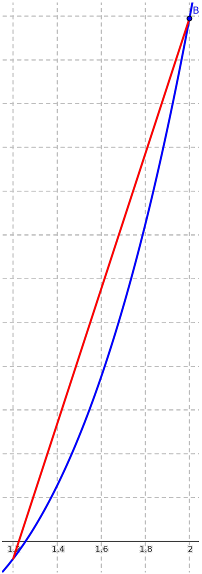
$$|f_m| = 0.11620 > 0.1 = \epsilon,$$

calculamos:

$$m = \frac{a * f_b - b * f_a}{f_b - f_a} = 1.2099.$$
$$f_m = -0.066646.$$

Como $f_a f_m > 0$, definimos

$$a = m \quad \text{e} \quad f_a = f_m$$



Quarta iteração:
Como

$$b - a = 0.79010 > 0.2 = 2\delta,$$

mas

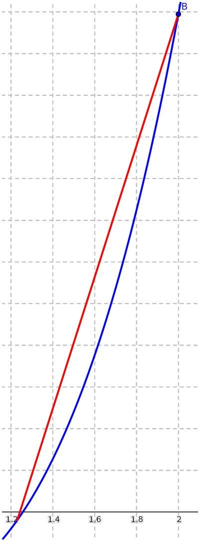
$$|f_m| = 0.066646 < 0.1 = \epsilon,$$

terminamos as interações.
A aproximação para a raiz é

$$\tilde{\xi} = 1.2099,$$

e

$$f(\tilde{\xi}) = -0.066646.$$



Método do Ponto Fixo

O método do ponto fixo é conceitualmente importante, pois serve de base para muitos outros métodos numéricos.

Suponha que desejamos resolver a equação $f(x) = 0$, em que f é uma função contínua em $[a, b]$.

Primeiramente, reescrevemos o problema na forma

$$x = \varphi(x), \tag{1}$$

em que φ é tal que $f(\xi) = 0$ se e somente se $\xi = \varphi(\xi)$.

Uma solução ξ de (1) é chamada **ponto fixo** de φ.

Aproximações Sucessivas

Posteriormente, dado uma aproximação inicial x_0 de ξ, o método do ponto fixo define as aproximações sucessivas

$$x_{k+1} = \varphi(x_k), \quad \forall k = 0, 1, \ldots$$

Espera-se que $x_k \to \xi$ quando $k \to \infty$.

Método do Ponto Fixo

Entrada: Função φ; aproximação inicial x_0.
Dados: Número máximo de interações k_{max}; tolerância δ.
Inicialize: $k = 0$ e $Er = \delta + 1$.
enquanto $k \leqslant k_{max}$ e $Er > \delta$ **faça**
  Atualize: $k = k + 1$.
  Avalie: $x = \varphi(x_0)$.
  Calcule: $Er = |x - x_0|$.
  Atualize: $x_0 = x$.
Saída: Aproximação para a raiz $\tilde{\xi} = x$.

Exemplo 5

Considere a função $f(x) = e^x - 2x - 1$, que possui uma raiz $\xi \in [1, 2]$. Usando como aproximação inicial os valores $x_0 = 1$, determine as aproximações sucessivas considerando

(a) $\varphi_1(x) = (e^x - 1)/2$.

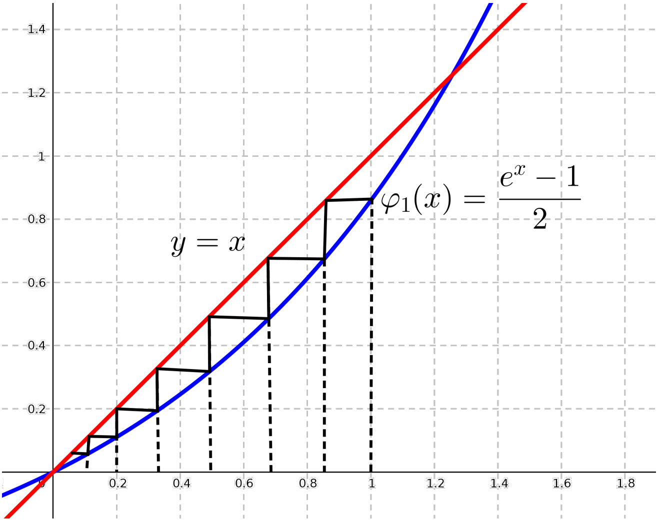
(b) $\varphi_2(x) = \ln(2x + 1)$.

Esboce as funções φ_1 e φ_2 e os resultados obtidos.

Resposta:
Considerando a função $\varphi_1(x) = (e^x - 1)/2$ e $x^{(0} = 1$ obtemos a sequência:

$$
\begin{aligned}
x_0 &= 1, & x_1 &= 0.85914, \\
x_2 &= 0.68057, & x_3 &= 0.48750, \\
x_4 &= 0.31412, & x_5 &= 0.18453, \\
x_6 &= 0.10132, & x_7 &= 0.053318, \\
x_8 &= 0.027382, & x_9 &= 0.013880, \\
x_{10} &= 0.0069885, & x_{11} &= 0.0035065, \\
x_{12} &= 0.0017563, & x_{13} &= 8.7894 \times 10^{-4}
\end{aligned}
$$

que converge para zero, uma raiz de f que não está no intervalo $[1, 2]$. Geometricamente, temos:



$\varphi_1(x) = \dfrac{e^x - 1}{2}$
$y = x$
1.4
1.2
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6
1.8

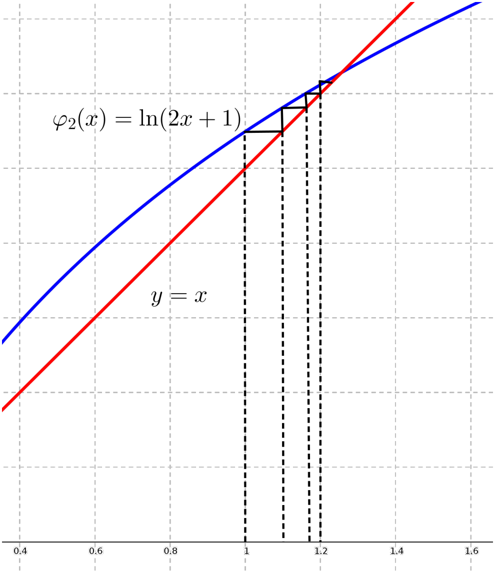
Considerando a função $\varphi_2(x) = \ln(2x+1)$ e $x_0 = 1$ obtemos a sequência:

$$
\begin{array}{ll}
x_0 = 1, & x_1 = 1.0986, \\
x_2 = 1.1623, & x_3 = 1.2013, \\
x_4 = 1.2246, & x_5 = 1.2381, \\
x_6 = 1.2460, & x_7 = 1.2504, \\
x_8 = 1.2530, & x_9 = 1.2545, \\
x_{10} = 1.2553, & x_{11} = 1.2558, \\
x_{12} = 1.2561, & x_{13} = 1.2562 \\
x_{14} = 1.2563, & x_{15} = 1.2564 \\
x_{16} = 1.2564. &
\end{array}
$$

que converge para a raiz de f no intervalo $[1, 2]$. Com efeito,

$$f(1.2564) = -5.7124 \times 10^{-5}.$$

Geometricamente, temos:



$\varphi_2(x) = \ln(2x + 1)$
$y = x$
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4
1.6

Convergência do Método do Ponto Fixo

O seguinte teorema fornece uma condição suficiente para a convergência do método do ponto fixo.

Teorema 6 (Teorema do Ponto Fixo)

Seja φ uma função contínua com derivada φ' contínua em um intervalo I centrado no ponto fixo ξ de φ. Se $\exists M < 1$ tal que

$$|\varphi'(x)| \leqslant M < 1, \quad \forall x \in I,$$

então, para qualquer aproximação inicial $x_0 \in I$, a sequência $\{x_k\}$ produzida pelo método do ponto fixo converge para ξ.

Demonstração do Teorema do Ponto Fixo

Pelo teorema do valor médio, visto em Cálculo I, temos:

$$\varphi(x_{k-1}) - \varphi(\xi) = \varphi'(\eta)(x_{k-1} - \xi),$$

para algum η entre x_{k-1} e ξ. Assim,

$$|x_k - \xi| = |\varphi(x_{k-1}) - \varphi(\xi)| = |\varphi'(\eta)||x_{k-1} - \xi| \leqslant M|x_{k-1} - \xi|.$$

Dessa forma, concluímos que

$$|x_k - \xi| \leqslant M^k|x_0 - \xi|, \quad \forall k = 0, 1, 2, \ldots.$$

Lembrando que $M < 1$, concluímos que $x_k \in I$ para todo k e

$$\lim_{k\to\infty} |x_k - \xi| \leqslant \lim_{k\to\infty} M^k|x_0 - \xi| = 0.$$

Considerações Finais

Na aula de hoje iniciamos o estudo dos métodos numéricos para aproximar a raiz real ξ de uma função real f, isto é,

$$f(\xi) = 0.$$

Baseado no teorema do valor intermediário, apresentamos os métodos da bisseção e da posição falsa.

Depois, apresentamos o método do ponto fixo no qual formulamos o problema de forma equivalente como

$$\xi = \varphi(\xi),$$

Definimos a sequência $x_{k+1} = \varphi(x_k)$, que converge para o ponto fixo se $|\varphi'(x)| \leqslant M < 1$.

Muito grato pela atenção!