

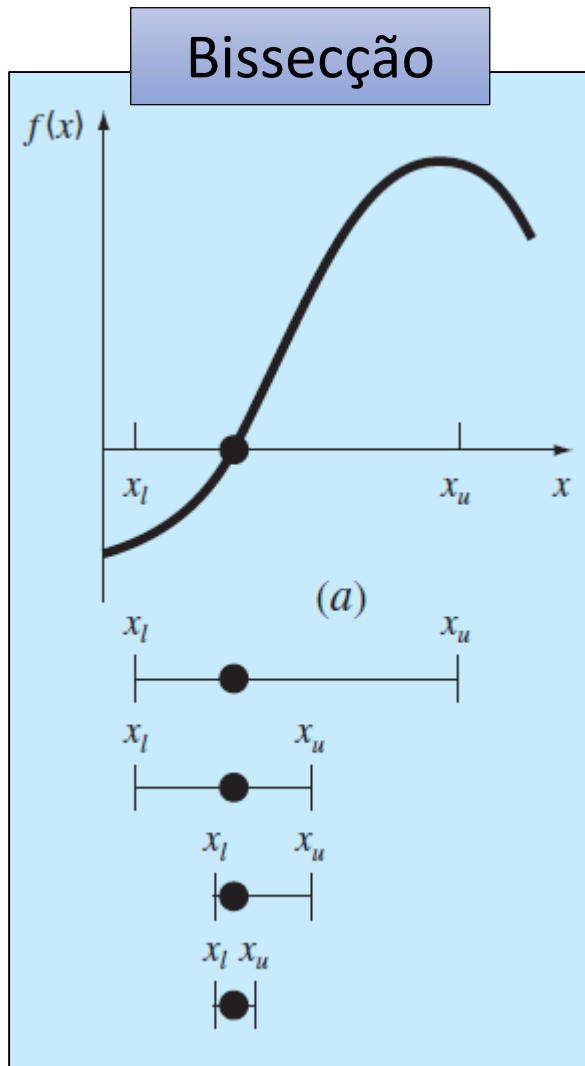
TMEC001 - CÁLCULO NUMÉRICO

CAPÍTULO 02 – SOLUÇÕES NUMÉRICAS DE EQUAÇÕES DE UMA VARIÁVEL

Prof. Felipe R. Loyola
Disciplina: Cálculo Numérico
1º Semestre de 2020

2.2 Métodos Abertos

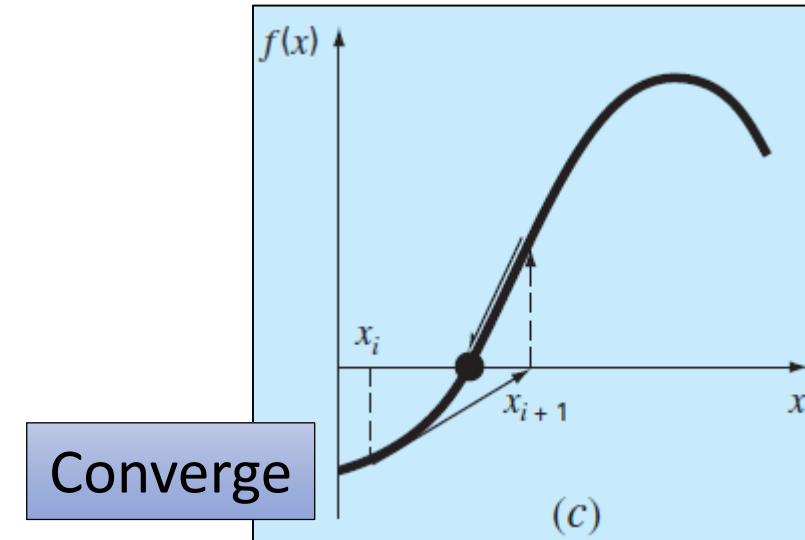
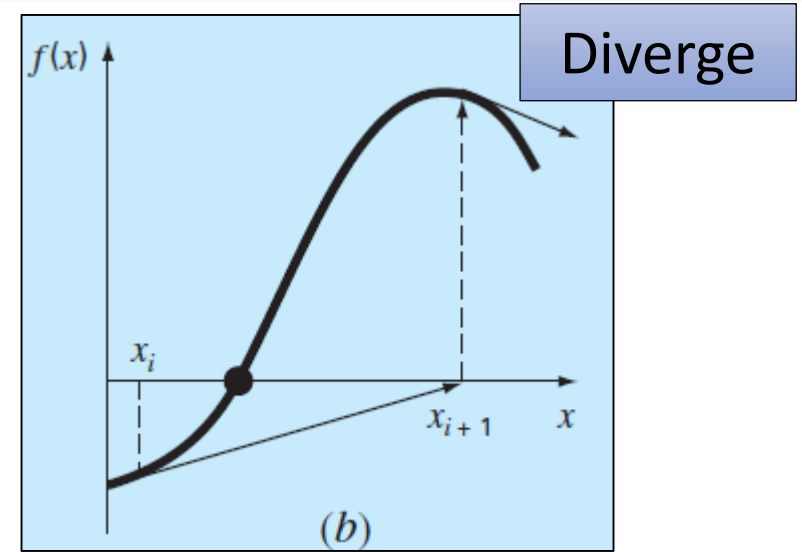
2.2 – Métodos Abertos



- Nos métodos intervalares, a raiz era localizada dentro de um intervalo prescrito por um limitante inferior e superior. As aplicações repetidas desses métodos sempre resultam em estimativas mais próximas do valor verdadeiro da raiz. Tais métodos são ditos **convergentes** porque se aproximam da raiz verdadeira à medida que os cálculos prosseguem.

2.2 – Métodos Abertos

- Em contraste, os métodos abertos são baseados em fórmulas que exigem apenas um **único valor inicial** de x ou **dois valores iniciais** que não delimitam necessariamente a raiz. Como tal, em algumas vezes **divergem** ou se **afastam** da raiz verdadeira à medida que os cálculos prosseguem. Quando os métodos abertos **convergem**, entretanto, eles em geral o fazem muito **mais rapidamente** que os métodos intervalares.



2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

- Como mencionado anteriormente, os métodos abertos usam uma fórmula para prever a raiz. Tal fórmula pode ser reduzida para a iteração de ponto fixo simples (ou também chamada de iteração de um ponto, substituições sucessivas ou aproximações sucessivas) reescrevendo a equação $f(x) = 0$ de modo que x esteja isolado no lado esquerdo da equação:

$$x = g(x) \tag{01}$$

2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

- Pode-se conseguir essa transformação ou por **manipulação algébrica** ou simplesmente **somando x em ambos os lados da equação original**. A utilidade da equação anterior (01) é que ela fornece uma fórmula para **prever um novo valor** de x e função de um valor x anterior. Portanto, dada uma aproximação inicial para a raiz x_i , a equação anterior pode ser usada para calcular uma **nova estimativa x_{i+1}** , expressa pela fórmula iterativa.

$$x_{i+1} = g(x) \tag{02}$$

2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

- **Exemplo:** Usar o Método da Iteração de Ponto Fixo para localizar a raiz de:

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

Solução: A função pode ser separada diretamente na forma da equação (02)

$$x_{i+1} = e^{-x_i}$$

i	x_i	ε_a (%)	ε_t (%)
0	0		100.0
1	1.000000	100.0	76.3
2	0.367879	171.8	35.1
3	0.692201	46.9	22.1
4	0.500473	38.3	11.8
5	0.606244	17.4	6.89
6	0.545396	11.2	3.83
7	0.579612	5.90	2.20
8	0.560115	3.48	1.24
9	0.571143	1.93	0.705
10	0.564879	1.11	0.399

(02)

2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

Convergência

- Tomando-se a equação iterativa do método

$$x_{i+1} = g(x_i) \quad (03)$$

- e supondo-se que a solução verdadeira seja

$$x_r = g(x_r) \quad (04)$$

- ao se subtrair as equações obtém-se

$$x_r - x_{i+1} = g(x_r) - g(x_i) \quad (05)$$

- O Teorema do Valor Médio para derivadas afirma que , se a função $g(x)$ e a sua primeira derivada forem contínuas sobre um intervalo $a \leq x \leq b$, então existe pelo menos um valor de $x = \xi$ dentro do intervalo tal que:

$$g(\xi) = \frac{g(b) - g(a)}{b - a} \quad (06)$$

2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

- O lado direito dessa equação é a inclinação da reta ligando $g(a)$ e $g(b)$. Logo, o Teorema do Valor Médio afirma que existe um ponto entre a e b que tem uma inclinação denotada por $g'(\xi)$ que é paralela à reta ligando $g(a)$ a $g(b)$. Fazendo-se, então, $a = x_i$ e $b = x_r$, o lado direito da equação anterior (06) pode ser expresso como:

$$g(x_r) - g(x_i) = (x_r - x_i)g'(\xi) \quad (07)$$

- Se o erro verdadeiro para a i -ésima iteração for definido por

$$E_{t,i} = x_r - x_i \quad (08)$$

- Então a equação acima torna-se:

$$E_{t,i+1} = g'(\xi)E_{t,i} \quad (09)$$

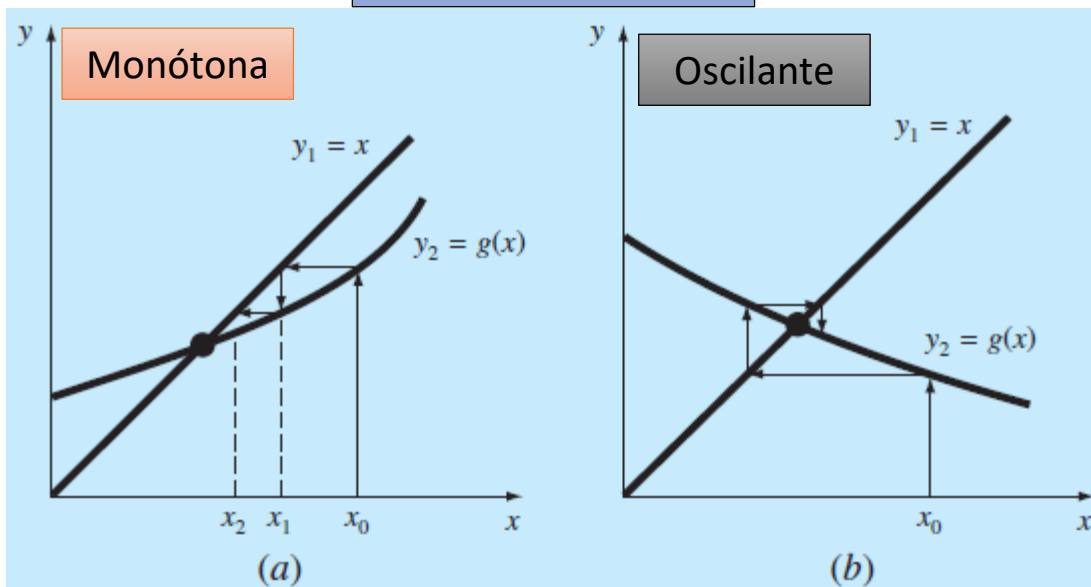
2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

- Conseqüentemente, se $|g'(\xi)| < 1$, os erros **diminuem a cada iteração**. Para $|g'(\xi)| > 1$, o erro **cresce**. Observa-se também que, se a **derivada for positiva**, os **erros** serão **positivos** e, portanto, a solução será **monótona**; se a derivada for **negativa** os erros **oscilarão**.
- Um desdobramento da análise é que ela também demonstra que, quando o **método converge**, o erro é aproximadamente **proporcional** e **inferior** ao erro no **passo anterior**. Por essa razão, a iteração do ponto fixo é dita linearmente convergente.

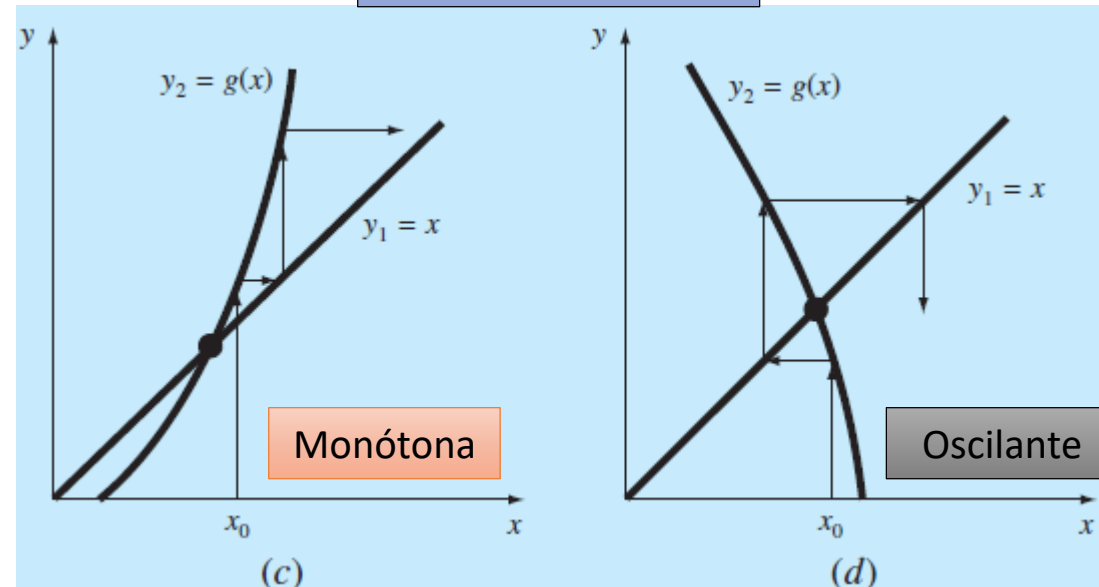
2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

- A **descrição gráfica** da convergência e da divergência do método do ponto fixo é feita com o auxílio do método gráfico das **duas curvas**. Neste caso, se $f_1(x) = f_2(x)$, pode-se separar a equação em duas componentes: $y_1 = f_1(x)$ e $y_2 = f_2(x)$. Neste caso, os valores de x correspondentes às intersecções dessas funções representam as raízes da função original.

Convergentes



Divergentes



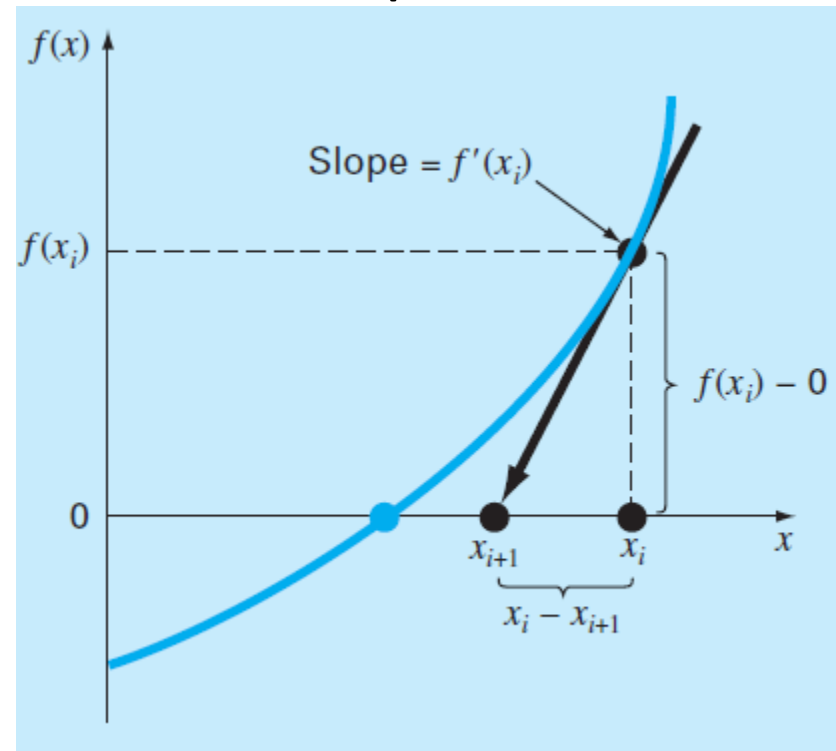
2.2.1 – Iteração de ponto fixo simples

Algoritmo do Método de Iteração de Ponto Fixo

```
FUNCTION Fixpt(x0, es, imax, iter, ea)
  xr = x0
  iter = 0
  DO
    xrold = xr
    xr = g(xrold)
    iter = iter + 1
    IF xr ≠ 0 THEN
      ea =  $\left| \frac{xr - xrold}{xr} \right| \cdot 100$ 
    END IF
    IF ea < es OR iter ≥ imax EXIT
  END DO
  Fixpt = xr
END Fixpt
```

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

- Talvez seja a fórmula **mais** amplamente **utilizada** para **localizar** um **zero de função** seja a equação de Newton-Raphson. Se a aproximação inicial da raiz for x_i , pode-se estender uma reta tangente a partir do ponto $[x_i, f(x_i)]$. O ponto onde essa **tangente cruza o eixo x** usualmente representa uma **estimativa melhorada** da raiz



2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

- O método de Newton-Raphson pode ser deduzido com base em sua interpretação geométrica (ou alternativamente, empregando-se a série de Taylor). Graficamente, a primeira derivada em x é equivalente a:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - 0}{x_i - x_{i+1}} \quad (10)$$

que pode ser reorganizada para fornecer

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (11)$$

A equação acima é chamada de fórmula de Newton-Raphson.

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

- Alternativamente, empregando-se a série de Taylor, tem-se:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(\xi)}{2!} (x_{i+1} - x_i)^2 \quad (12)$$

onde ξ está em algum ponto do intervalo de x_i a x_{i+1} . Uma versão aproximada é obtida truncando-se a série após o termo da primeira derivada:

$$f(x_{i+1}) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) \quad (13)$$

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

A equação (13) pode ser reescrita como

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (14)$$

que é idêntica à fórmula de Newton-Raphson (11). Além da dedução, a **série de Taylor** também pode ser usada para realizar uma **estimativa do erro da fórmula**, o que se consegue percebendo que, se a série de Taylor completa fosse empregada, seria obtido um resultado exato.

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

- Nessa situação, $x_{i+1} = x_r$, na qual x_r é o valor verdadeiro da raiz. Substituindo esse valor junto com $f(x_r) = 0$ na equação (12) obtém-se:

$$0 = f(x_i) + f'(x_i)(x_r - x_i) + \frac{f''(\xi)}{2!} (x_r - x_i)^2 \quad (15)$$

- A equação (13) pode ser substituída da equação (15) fornecendo:

$$0 = f'(x_i)(x_r - x_{i+1}) + \frac{f''(\xi)}{2!} (x_r - x_i)^2 \quad (16)$$

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

Erros no Método de Newton-Raphson

- Percebendo-se que o erro é igual à discrepância entre x_{i+1} e o valor verdadeiro de x_r , como em

$$E_{t,i+1} = x_r - x_{i+1} \quad (17)$$

tem-se que a equação (16) pode ser expressa por:

$$0 = f'(x_i)E_{t,i+1} + \frac{f''(\xi)}{2!} (E_{t,i})^2 \quad (18)$$

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

- Supondo-se a convergência, ambos os valores de x_i e ξ deveriam eventualmente ser aproximados pela raiz x_r e a equação (18) pode ser reorganizada para fornecer

$$E_{t,i+1} = \frac{-f''(x_r)}{2f'(x_r)} (E_{t,i})^2 \quad (19)$$

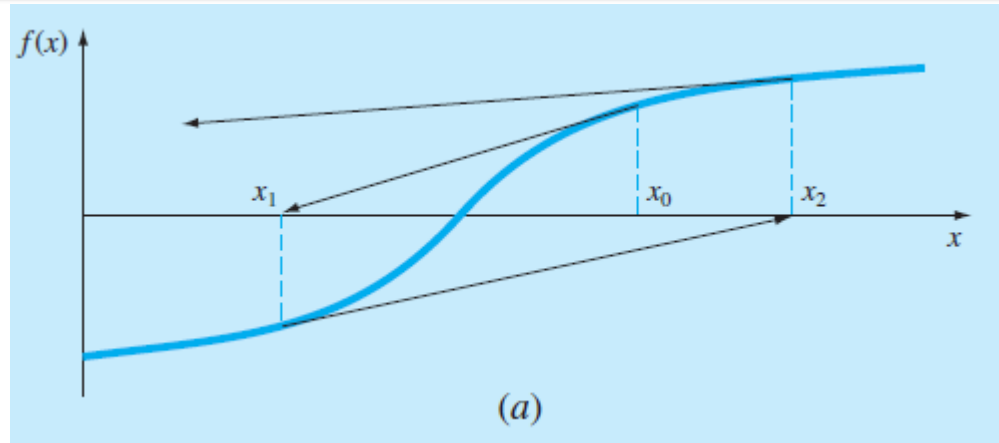
- De acordo com a equação acima, o erro é aproximadamente proporcional ao quadrado do erro anterior. Isso significa que o número de casas decimais corretas aproximadamente dobra a cada iteração tem comportamento é chamado de **convergência quadrática**.

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson

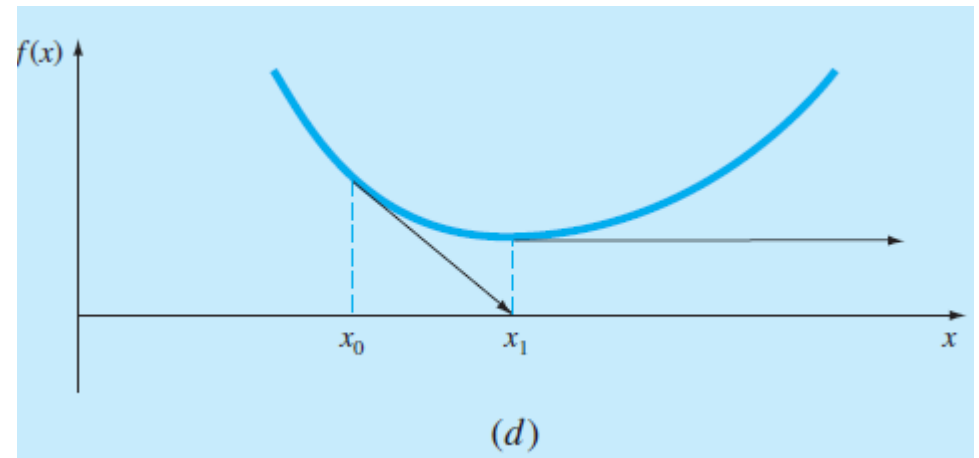
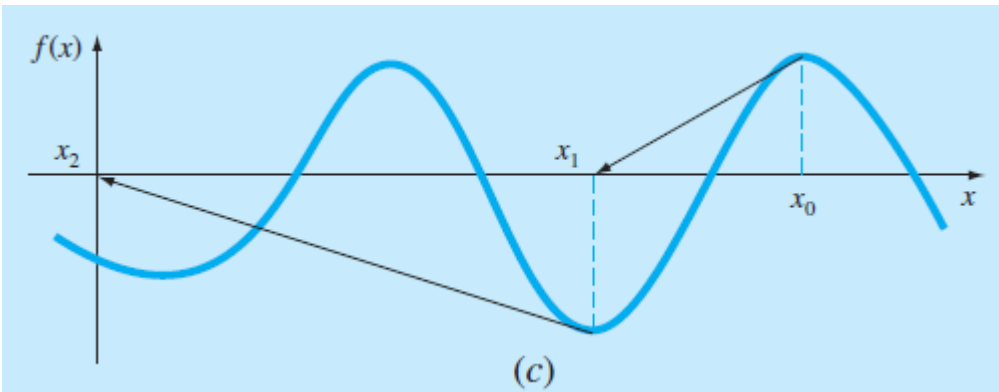
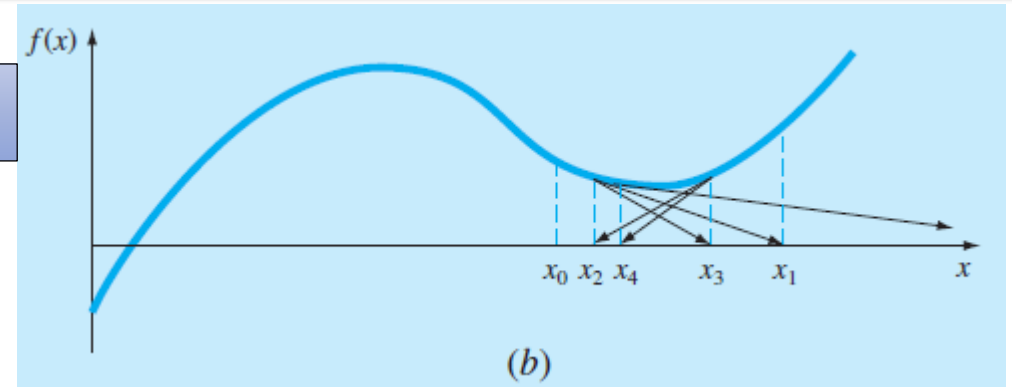
Armadilhas do método de Newton-Raphson

- Embora o método de Newton-Raphson seja em geral muito eficiente, há situações nas quais ele apresenta um **desempenho insatisfatório**. O ponto em comum de todas as situações, contudo, é o fato de a **derivada** da função $f(x)$ ser **nula** ou apresentar um **valor próximo a zero**. Citam-se como exemplos dessas situações:
 - i. Raízes múltiplas
 - ii. Proximidades de pontos de inflexão
 - iii. Proximidades de máximos ou mínimos (globais ou locais)

2.2.2 – O Método do Newton-Raphson



Exemplos



- Não existe critério geral de convergência para o método de Newton-Raphson. Sua convergência depende da natureza da função e da precisão da aproximação inicial. Deve-se, assim, garantir que a aproximação inicial esteja “suficientemente” próxima da raiz, embora para algumas funções nenhuma aproximação funcionará.

2.2.3 – O Método da Secante

- Um **problema** em potencial na implementação do método de Newton-Raphson é o **cálculo da derivada**. Embora isso não seja inconveniente para muitas funções, como polinômios, para outras o cálculo das derivadas pode ser extremamente inconveniente ou difícil. Nesses casos, a **derivada** pode ser **aproximada** por uma **diferença dividida regressiva**, como em:

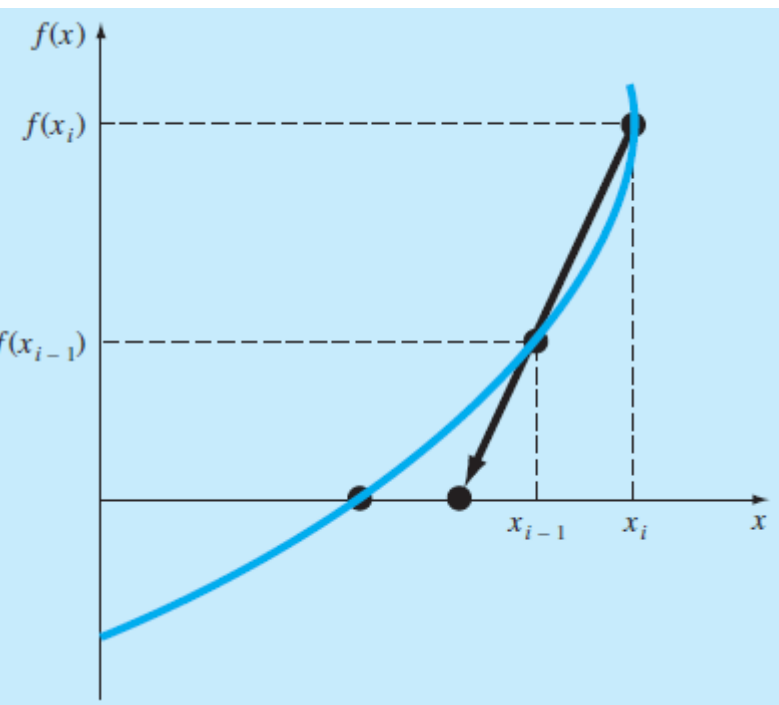
$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i} \quad (20)$$

2.2.3 – O Método da Secante

- Essa aproximação pode ser substituída na equação (11) para fornecer a seguinte equação iterativa

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)} \quad (21)$$

A equação acima é a fórmula do **Método da Secante**. Deve-se notar que a abordagem exige **duas estimativas iniciais** de x . Porém, como não é exigido que $f(x)$ mude de sinal entre as estimativas, ele não é classificado como um método intervalar.

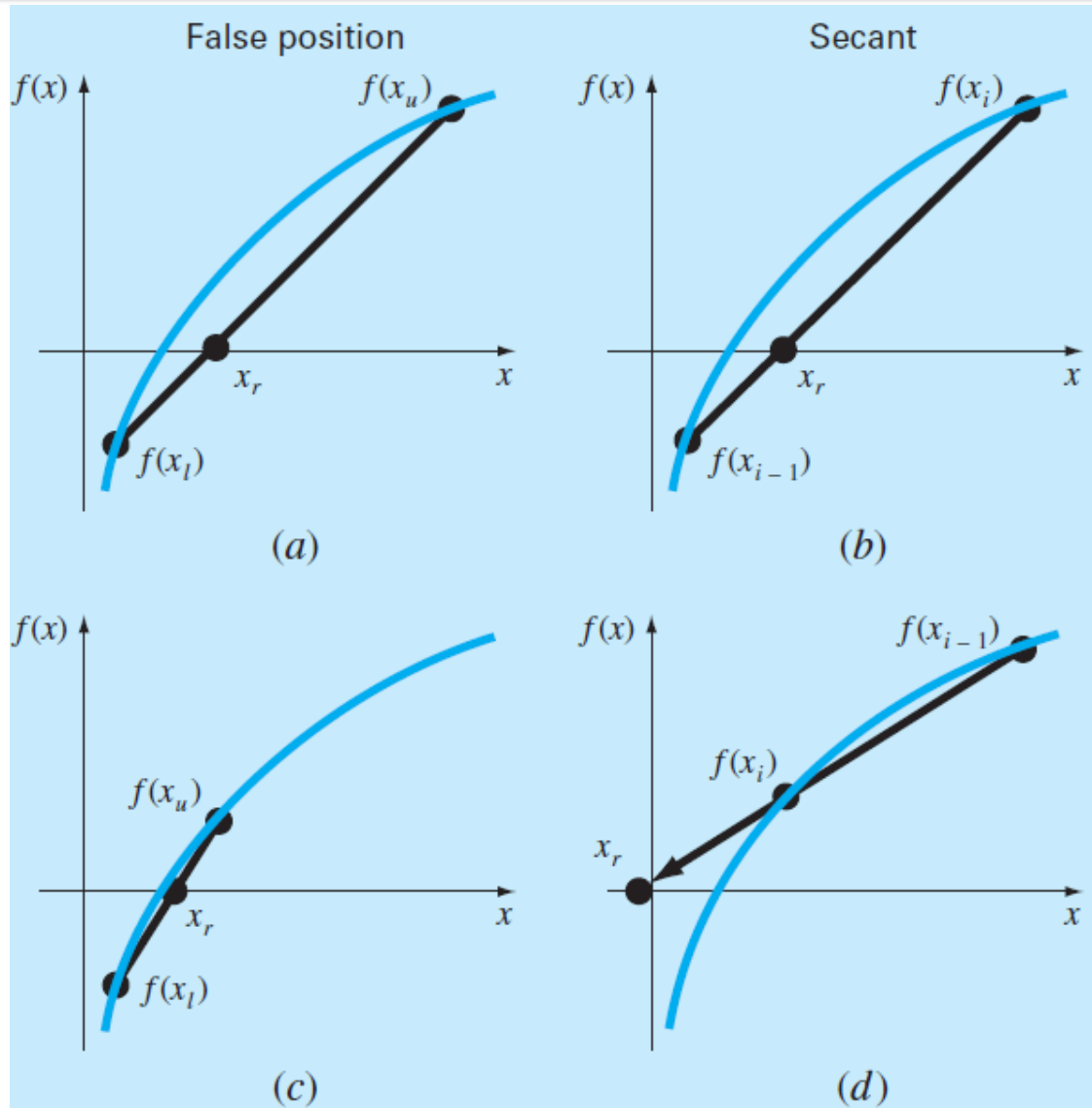


2.2.3 – O Método da Secante

Diferença entre os métodos da secante e falsa posição

- Comparando-se as equações iterativas dos métodos da **falsa posição** e da **secante**, observa-se que as mesmas são **idênticas** em ambos os casos, são utilizadas **duas estimativas iniciais** para calcular uma aproximação da inclinação da função que é utilizada para projetar para o eixo x uma nova estimativa da raiz. Entretanto, uma **diferença crítica** entre os métodos é a **forma** com que um dos **valores iniciais** é **substituído** pela **nova estimativa**. Enquanto no método da falsa posição garante-se que as duas estimativas empregadas sempre delimitam a raiz, no método da secante há a substituição dos valores em sequência escrita, isto é, o novo valor x_{i+1} substitui x_i e o valor de x_i substitui x_{i-1} . Em certos casos, isso pode levar à divergência.

2.2.3 – O Método da Secante



- Embora o **método da secante** possa ser divergente, quando ele converge, usualmente, o faz a uma **taxa mais rápida** do que o método da **falsa posição**. A **inferioridade** do método da **falsa posição** resulta de uma **extremidade** permanecer **fixa** para continuar a limitar a raiz. Essa propriedade, que é vantajosa do ponto de vista de impedir a divergência, é uma **desvantagem** com relação à taxa de **convergência**.

2.2.4 – Raízes Múltiplas

- Uma raiz múltipla corresponde a um ponto onde a função é tangente ao eixo x . Isso causa algumas dificuldades para muitos métodos numéricos:
 - i. O fato de a função **não mudar de sinal** em raízes de **multiplicidade par impede** o uso dos **métodos intervalares** confiáveis, de modo que a análise deve recair nos **métodos abertos**, sujeitos à divergência.
 - ii. Um outro problema possível está relacionado ao fato de que não só $f(x)$, mas também $f'(x)$ vai a **zero na raiz**. Isso introduz problemas tanto no método de Newton-Raphson quanto no da secante, uma vez que ambos contem a derivada (ou sua estimativa) no denominador. Uma forma simples de contornar esse problema baseia-se no fato de que $f(x)$ sempre atingirá zero antes de $f'(x)$. Portanto, se uma verificação do zero for incluída no programa, os cálculos podem ser parados antes de $f'(x)$ atingir zero.

2.2.4 – Raízes Múltiplas

- iii. É possível demonstrar que os métodos de Newton-Raphson e da secante são **linearmente** (ao invés de quadraticamente) **convergentes** para **raízes múltiplas**. Foram propostas formas alternativas (modificadas) para contornar tal problema, como empregar as seguintes formulações:

$$x_{i+1} = x_i - m \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (22)$$

onde m é a multiplicidade da raiz, ou ainda

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)f'(x_i)}{[f'(x_i)]^2 - f(x_i)f''(x_i)} \quad (23)$$

entre outras expressões

2.2 – Exemplos

- **Exemplo**: Considere a equação

$$f(c) = \frac{667,38}{c} [1 - e^{-0,146843c}] - 40$$

solucionada anteriormente pelos métodos da bissecção e da falsa posição. Resolva-a também utilizando os métodos do ponto fixo, Newton-Raphson e secante, empregando como critério de parada $\varepsilon_a = 0,5\%$. Como estimativa inicial para os métodos de Newton-Raphson e do ponto fixo empregue $x_0 = 12$, no caso do método da secante, utilize $x_0 = 12$ e $x_1 = 16$.

2.2 – Exemplos

- **Exemplo**: Determine a raiz positiva de:

$$f(x) = x^{10} - 1$$

Empregando os métodos da bissecção, da falsa posição, de Newton-Raphson e da secante. Empregue o intervalo inicial $[0 ; 1,5]$ para os métodos da bissecção e da falsa posição, a estimativa inicial $x_0 = 0,01$ para o método de Newton-Raphson e os valores de $x_0 = 0$ e $x_1 = 1,5$ para o método da secante. Em todos os casos, empregue uma tolerância de 10^{-12} .