



Universidade Federal de Goiás
Instituto de Matemática e Estatística
Programa de Mestrado Profissional em
Matemática em Rede Nacional



Noções sobre métodos numéricos determinísticos e probabilísticos

Pâmella Almeida Quintino Jordan

Goiânia

2015

TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR AS TESES E DISSERTAÇÕES ELETRÔNICAS (TEDE) NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei nº 9610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou *download*, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

1. Identificação do material bibliográfico: Trabalho de Conclusão de Curso de Mestrado Profissional em Matemática

2. Identificação da Tese ou Dissertação

Autor (a):	Pâmella Almeida Quintino Jordan			
E-mail:	pamellamaster@yahoo.com.br			
Seu e-mail pode ser disponibilizado na página? <input checked="" type="checkbox"/> Sim <input type="checkbox"/> Não				
Vínculo empregatício do autor	Professor de Educação Básica			
Agência de fomento:	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior	Sigla:	CAPES	
País:	Brasil	UF:	DF	CNPJ: 00889834/0001-08
Título:	Noções sobre Métodos Numéricos Determinísticos e Probabilísticos			
Palavras-chave:	Métodos numéricos, Bissecção, Newton, Secante e Monte Carlo			
Título em outra língua:	Notions about Deterministic and Probabilistic Numerical Methods			
Palavras-chave em outra língua:	Numerical methods, Bisection, Newton, Secant and Monte Carlo			
Área de concentração:	Matemática do Ensino Básico			
Data defesa: (27/07/2015)				
Programa de Pós-Graduação:	Mestrado Profissional em Matemática			
Orientador (a):	Prof. Dr. Fabiano Fortunato Teixeira dos Santos			
E-mail:	fabianofortunatosantos@gmail.com			
Co-orientador (a):*				
E-mail:				

*Necessita do CPF quando não constar no SisPG

3. Informações de acesso ao documento:

Concorda com a liberação total do documento SIM NÃO¹

Havendo concordância com a disponibilização eletrônica, torna-se imprescindível o envio do(s) arquivo(s) em formato digital PDF ou DOC da tese ou dissertação.

O sistema da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações garante aos autores, que os arquivos contendo eletronicamente as teses e ou dissertações, antes de sua disponibilização, receberão procedimentos de segurança, criptografia (para não permitir cópia e extração de conteúdo, permitindo apenas impressão fraca) usando o padrão do Acrobat.

Pâmella Almeida Quintino Jordan
Assinatura do (a) autor (a)

Data: 27/07/2016

¹ Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. A extensão deste prazo suscita justificativa junto à coordenação do curso. Os dados do documento não serão disponibilizados durante o período de embargo.

Pâmella Almeida Quintino Jordan

Noções sobre métodos numéricos determinísticos e probabilísticos

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal de Goiás, como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Matemática.

Área de Concentração: Matemática do Ensino Básico.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano F. T. dos Santos.

Goiânia

2015

Ficha catalográfica elaborada automaticamente
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a), sob orientação do Sibi/UFG.

Jordan, Pâmella Almeida Quintino
Noções sobre Métodos Numéricos Determinísticos e Probabilísticos
[manuscrito] / Pâmella Almeida Quintino Jordan. - 2015.
72 f.

Orientador: Prof. Dr. Fabiano Fortunato Teixeira dos Santos.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de
Matemática e Estatística (IME) , Programa de Pós-Graduação em
Ensino na Educação Básica (Profissional), Goiânia, 2015.

Bibliografia.

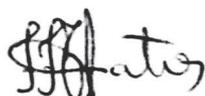
Inclui gráfico, tabelas, lista de figuras.

1. Métodos numéricos. 2. Bissecção. 3. Newton. 4. Secante. 5.
Monte Carlo. I. Santos, Fabiano Fortunato Teixeira dos, orient. II. Título.

Pâmella Almeida Quintino Jordan

Noções sobre Métodos Numéricos Determinísticos e Probabilísticos

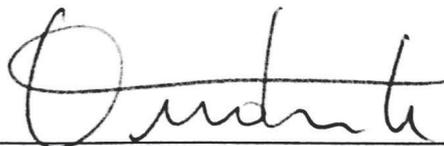
Trabalho de Conclusão de Curso defendido no Programa de Mestrado Profissional em Matemática em Rede Nacional – PROFMAT/UFG, do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal de Goiás, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Matemática, área de concentração Matemática do Ensino Básico, aprovado no dia 27 de julho de 2015, pela Banca Examinadora constituída pelos professores:



Prof. Dr. Fabiano Fortunato Teixeira dos Santos
Instituto de Matemática e Estatística-UFG
Presidente da Banca



Prof. Dr. José Eder Salvador de Vasconcelos
IFG/GOIÂNIA



Leandro da Fonseca Prudente
Instituto de Matemática e Estatística - UFG

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial deste trabalho sem a autorização da universidade, do autor e do orientador.

Pâmella Almeida Quintino Jordan graduou-se em Matemática pela Universidade Federal de Goiás em 2011. Especializou-se em Neuropedagogia aplicada à Educação pela Faculdade Brasileira de Educação e Cultura em 2012. Atualmente atua como Professora Efetiva da Secretaria Municipal de Educação de Goiânia-GO.

Dedico este trabalho à minha mãe Gillys, à meu esposo Yuri e às minhas filhas Brunna e Manuella.

Agradecimentos

A Deus por mais essa realização concedida.

A minha família, pelo apoio de sempre, especialmente minha mãe Gillys que não poupou esforços em me ajudar nessa longa caminhada. A meu esposo Yuri pelo apoio e compreensão.

A meu professor e orientador Fabiano pelo empenho, dedicação e todo o suporte dado.

A meus amigos do Profmat, especialmente Paulenrike, Ricardo e Robson pelo companheirismo e Paulo Henrique pela ajuda, suporte e paciência.

A meus colegas da Escola Municipal Dom Fernando Gomes dos Santos, que compreenderam a minha ausência e sempre me deram palavras de incentivo.

A CAPES pelo suporte financeiro que me auxiliou neste período de 2 anos.

A todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Resumo

No campo da matemática aplicada o estudo de métodos numéricos tem sua relevada importância e apresenta uma vasta variedade. Neste trabalho serão estudados quatro destes métodos: Bisseção, Newton, Secante e Monte Carlo. Os três primeiros são métodos estudados na disciplina de Cálculo Numérico, normalmente ministrado nas graduações das Ciências Exatas; o objetivo deles é o cálculo de raízes de funções reais; eles trabalham através de sequências recorrentes que convergem para as raízes exatas. Uma das aplicações do quarto método é o cálculo da área sob uma curva, utilizando, para isso, números aleatórios. Em cada método estudaremos a motivação seguida de sua comprovada eficácia. Como veremos, são muitas as áreas que necessitam de métodos, como os aqui estudados, para resolução de problemas; as engenharias, a Química, a Física e a Biologia são apenas algumas delas. A fim de demonstrar a importância dos quatro métodos apresentaremos situações em que podem ser aplicados. Demonstrada a necessidade e eficiência de todos os métodos, podemos compreendê-los como uma excelente alternativa para resolução de problemas na área da matemática aplicada, principalmente quando os métodos convencionais de resolução não conseguem desempenhar papel satisfatório. Devemos enfatizar, ainda, a importância do uso de *softwares* e programas computacionais para melhor desempenho dos métodos.

Palavras-chave

Métodos numéricos; Bisseção; Newton; Secante; Monte Carlo.

Abstract

In the field of applied mathematics, the study of numerical methods has its relief importance and it shows a vast variety. In this word will be study four these methods: Bisection, Newton, Secant and Monte Carlo. The first three are methods studied in Numerical Calculus discipline, normally given in graduation from Exact Science; their goal is the calculation of real functions roots; they work through recurrent sequence converge the exact roots. One of the applications of the fourth method is the calculation of the area under a curve, using, for this, random numbers. In each method we will study the motivation followed of their effectiveness. As we will see, there are many areas that need methods, as studied here, for solving problems; the engineering, Chemistry, Physics and Biology are just some of them. In order to demonstrate the importance of the four methods we will present situations that can be applied. Demonstrated the need and effectiveness of all methods, we can understand them as an excellent alternative to solving problems in mathematics applied area, especially when conventional resolution methods cannot play a satisfactory role. We must emphasize, also, the importance of using software and computer programs to better performance of the methods.

Keywords

Numerical methods, Bisection, Newton, Secant, Monte Carlo.

Lista de Figuras

1	Gráfico de $f(x) = \ln x$	17
2	Interseção de $g(x) = x^3$ e $h(x) = 9x - 3$	18
3	Gráfico de $f(x) = x^3 - 9x + 3$	19
4	Gráfico $g(x) = (x + 1)^2$ e $h(x) = e^{2-x^2}$	19
5	Gráfico de $f(x) = x^3 - 3x^2 + 3x - 0,95$	21
6	Gráfico de $f(x) = \frac{1}{x - 0,3} - 1,9$	22
7	Gráfico de $f(x) = \frac{\text{sen}(x + 2,3)}{4} - 0,1$	22
8	Interpretação geométrica do Método da Bissecção	24
9	Interpretação geométrica da função iteração (1º caso)	30
10	Interpretação geométrica da função iteração (2º caso)	31
11	Interpretação geométrica do Método de Newton	34
12	Intersecção de $g(x) = e^x$ e $h(x) = 4 \cos x$	35
13	Interpretação geométrica do Método da Secante	40
14	Interseção de $g(x) = x^3$ e $h(x) = \frac{1}{2}$	40
15	Interseção de $g(x) = 3e^x$ e $h(x) = 5 \cos(x)$	44
16	Gráfico de $f(x) = x^4 - 8$	46
17	Interseção de $g(x) = 0,2 \text{sen}(x)$ e $h(x) = x - 0,5$	50
18	Esboço do problema das vigas	51
19	Gráfico de $f(l)$	52
20	Gráfico de $f(x) = x^2 + (2,0 \cdot 10^{-4})x - 2,0 \cdot 10^{-6}$	53
21	Interseção de $f_I(x)$ e $f_{II}(x)$	55
22	Gráfico de $f(x) = 5 - 20(e^{-0,2x} - e^{-0,75x})$	57
23	Gráfico de $f(x) = 25x^2 + \ln(x) - 1,5 \cdot 10^{-4}$	58
24	Ilustração do Método de Monte Carlo para cálculo de áreas	60
25	Circunferência unitária inscrita em um quadrado	68

Sumário

1	Introdução	13
2	Raiz ou Zero de uma Função Real	15
2.1	Isolamento de Raízes	15
2.2	Refinamento	20
3	Método da Bissecção	24
3.1	Convergência	26
3.2	Estimativa do Número de Iterações	27
4	Método de Newton	29
4.1	Motivação	29
4.2	O Método de Newton	33
4.3	Convergência	36
5	Método da Secante	39
6	Comparação entre os Métodos	42
7	Aplicações	49
8	Método de Monte Carlo	60
9	Conclusão	70

1 Introdução

O estudo de funções está presente em diversas áreas, principalmente das Ciências Exatas. Por mais que muitos pensem que ele se concentre apenas na Matemática, as Engenharias, a Química, a Biologia e diversas outras áreas se deparam frequentemente com situações em que é preciso o conhecimento do comportamento dessas funções; tais como sua continuidade, suas derivadas, seu gráfico etc. Neste trabalho, vamos analisar alguns desses pontos, mas enfatizando o estudo dos zeros das funções reais e o cálculo da área sob curvas.

Para alcançarmos esse objetivo, quatro métodos serão tratados: Bisseção, Newton, Secante e Monte Carlo; os três primeiros são métodos iterativos que estimam a raiz de funções reais. São métodos que não fornecem a raiz exata de determinada função, mas sim uma aproximação da mesma, de acordo com uma precisão pré estabelecida. Já o último método é um método probabilístico que, entre outras coisas, estima uma aproximação para a área abaixo do gráfico de funções em um determinado intervalo, ou seja, fornece uma aproximação para a integral definida de funções reais.

Os métodos que utilizaremos para encontrar zeros de funções reais são métodos práticos e que através de sequências recorrentes convergem para a raiz da função. Os métodos, porém, exigem que sejam satisfeitos alguns critérios para que a convergência ocorra, por isso a escolha do melhor método vai sempre depender da função que se quer estudar.

Por outro lado, o método que utilizaremos para calcular a área abaixo da curva do gráfico de funções é um método estocástico, que se utiliza de números aleatórios. A resolução de integrais muitas vezes é um tanto quanto complicada e às vezes impossível de ser feita pelos métodos convencionais; veremos então que a utilização do método de Monte Carlo facilita esses cálculos. Assim como os demais métodos, o de Monte Carlo, por utilizar números aleatórios, apresenta uma estimativa do valor que se procura e não um valor exato, mas como vamos ver adiante ele é bastante eficiente.

Antes de começarmos a apresentar os métodos é importante salientar que a utilização de computadores é de grande valia para a melhor eficiência dos métodos, primeiro pela quantidade de cálculos a serem feitos, segundo pela rapidez e menor probabilidade de haver erros. Os programas utilizados são bastante simples e podem ser facilmente manuseados por qualquer pessoa que tenha acesso a tecnologia. O que será observado é que mesmo com pouca experiência no uso de softwares é possível que tenhamos excelentes resultados e produtividade.

Este trabalho foi dividido em sete capítulos; os seis primeiros tratam dos métodos que calculam zeros de funções reais, enquanto o último trata do método que utilizaremos para calcular integrais definidas e outras aplicações. Para iniciarmos os estudos, o capítulo um trata dos conceitos iniciais e necessários para o estudo dos capítulos posteriores; além de introduzir de forma geral como se trabalha com os métodos da Bisseção, de Newton e da Secante, que serão estudados nos capítulos dois, três e quatro, respectivamente. A seguir, o quinto capítulo vai tratar de comparar os três métodos, apresentando exemplos que serão resolvidos por esses três. Logo após, o capítulo seis trabalha com as aplicações desses métodos, ou seja, é constituído por situações que estudantes e profissionais de diversas áreas se deparam continuamente, e que, necessitam do conhecimento de métodos iterativos para a resolução de problemas. Finalmente, o capítulo sete trata do Método de Monte Carlo, um método estocástico que é uma excelente forma de calcular a área sob uma curva.

Os capítulos de um a cinco foram baseados em cinco grandes bibliografias sobre Cálculo Numérico: [2], [3], [5], [9] e [10] e que foram as leituras essenciais para a elaboração destes capítulos. Os cinco textos abordam tanto aspectos teóricos quanto práticos dos métodos iterativos, apresentando conceitos e resultados imprescindíveis para o estudo dos métodos. Para a elaboração do capítulo seis, além das fontes citadas, ainda foram utilizados os trabalhos de [6], [7] e [12]. Para encerrarmos o trabalho, o último capítulo foi baseado nas seguintes fontes: [1], [4], [8] e [11].

O objetivo deste trabalho não é mostrar formas e fórmulas prontas para resolução de problemas, mas sim apresentar alternativas altamente eficazes, que são de grande valia para encontrar raízes de funções reais e cálculo de integrais definidas, como veremos nos capítulos a seguir.

2 Raiz ou Zero de uma Função Real

Comumente em problemas das Ciências Exatas, como a Física e a Engenharia, são encontradas situações que necessitam da resolução de equações do tipo $f(x) = 0$. Essa solução procurada é chamada de raiz ou zero da função $f(x)$, que pode ser real ou complexa.

Em funções polinomiais de 1^o e 2^o graus e até alguns casos de 3^o e 4^o graus, os zeros da função podem ser facilmente encontrados; o mesmo acontece em algumas funções mais simples, que possuem métodos de resolução facilmente compreendidos até por alunos do ensino básico, como é o caso de $f(x) = \cos(x)$. A dificuldade se concentra, dessa forma, em funções polinomiais com grau superior a três e a maioria das outras funções, as mais complexas, onde podemos citar $f(x) = e^{x^2} - \sin(x)$. Nesse último caso não existe um método para achar a solução exata, mas métodos que trazem uma aproximação desses valores; em alguns casos essa aproximação pode ser tão próxima da solução exata quanto se deseja.

Para um melhor entendimento dos métodos que serão trabalhados, devemos subdividi-los em duas etapas, a primeira etapa consiste no isolamento de raízes, ou seja, na determinação de um menor intervalo real possível, onde podemos localizar uma raiz da função estudada, e a segunda etapa consiste no refinamento, ou seja, é a etapa que, através do intervalo determinado na etapa 1, se constrói uma sequência de valores que tende a convergir para a raiz da função.

Para um melhor entendimento dos métodos que serão trabalhados, devemos subdividi-los em duas etapas, que serão estudadas logo mais: Etapa 1: Isolamento de raízes; Etapa 2: Refinamento.

Nas próximas seções serão apresentadas e detalhadas cada uma dessas etapas, como veremos adiante.

2.1 Isolamento de Raízes

O objetivo principal da Etapa 1 é localizar com a melhor precisão possível as raízes de determinada função, ou seja, o menor intervalo possível em que podemos encontrar seus zeros. Durante essa etapa usamos com frequência os seguintes resultados:

Teorema 1. (*Bolzano*): *Seja $f(x)$ uma função contínua definida no intervalo $[a, b]$. Se $f(a) \cdot f(b) < 0$, então existe pelo menos um $c \in [a, b]$ tal que $f(c) = 0$.*

Este teorema é um caso particular do Teorema do Valor Intermediário. O qual enunciaremos a seguir.

Teorema 2. (*Valor Intermediário*): *Seja $f(x)$ uma função contínua no intervalo $[a, b]$. Se existe $d \in \mathbb{R}$, tal que $f(a) < d < f(b)$, então existe $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = d$.*

Para obter o Teorema de Bolzano basta tomarmos $d = 0$. Vale observar que usando as mesmas hipóteses do Teorema 1, se $f'(x)$ existir e preservar o sinal no intervalo (a, b) então $c \in [a, b]$ é único.

Dada uma função real $f(x)$, uma maneira de localizarmos um intervalo que contenha uma raiz de $f(x)$ é atribuir valores à função e analisar o comportamento da função em relação ao sinal, como veremos no exemplo a seguir:

Exemplo 1. *Seja $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \sqrt{x} - 5e^{-x}$. Vamos determinar suas raízes.*

Começamos construindo uma tabela atribuindo valores a x e observando o sinal de $f(x)$.

x	0	1	2	3	...
$f(x)$	-	-	+	+	...

Como observamos na tabela acima $f(1) \cdot f(2) < 0$, o que pelo Teorema 1 nos leva a concluir que o intervalo $(1, 2)$ contém uma raiz de $f(x)$. Para sabermos se essa raiz é única precisamos analisar o sinal de

$$f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{x}} + 5e^{-x} > 0, \forall x > 0$$

Ou seja, $f'(x)$ possui sinal constante em todo o seu domínio, e consequentemente no intervalo $(1, 2)$. Que por sua vez possui uma única raiz.

Uma maneira mais clara de visualizar as raízes de uma função é analisando o seu gráfico, uma vez que os zeros de uma função são representados pelas abscissas dos pontos que interceptam o eixo OX . O estudo do gráfico de uma função é de fundamental importância para se obter melhores aproximações para as raízes das funções desejadas. O sucesso da Etapa 2 depende da precisão da Etapa 1.

Existem vários os processos para a obtenção do esboço do gráfico de uma função, mas é necessário, acima de tudo o estudo detalhado acerca do comportamento

dessa função, o que engloba: o seu domínio, seus pontos de continuidade, seus intervalos de crescimento e decréscimo, seus pontos de máximo e mínimo, sua concavidade, seus pontos de inflexão e suas assíntotas.

Existem várias formas de se traçar o gráfico de uma função. Alguns deles são:

1. Nas funções cujo gráfico já é conhecido, basta esboçá-lo e localizar os pontos em que a curva intercepta o eixo OX;
2. Em algumas funções pode-se obter uma equação equivalente, de forma que $f(x) = 0 \Leftrightarrow g(x) = h(x)$. Esboça-se o gráfico das funções $g(x)$ e $h(x)$, em um mesmo plano cartesiano, e localiza-se os pontos de interseção dos dois gráficos, são eles as raízes de $f(x)$;
3. Utiliza-se o recurso de softwares matemáticos, como GeoGebra, Graph para o esboço do gráfico e localização das raízes da função.

É importante ressaltar que em alguns casos não é possível localizar as raízes exatas da função, mas sim uma aproximação das mesmas, ou seja, um intervalo em que elas se encontram. Quanto melhor a aproximação encontrada melhor a precisão da raiz, que será calculada através dos métodos iterativos que serão apresentados na Etapa 2. Analisaremos a seguir o gráfico de algumas funções:

Exemplo 2. *Seja $f : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = \ln x$, vamos determinar suas raízes:*

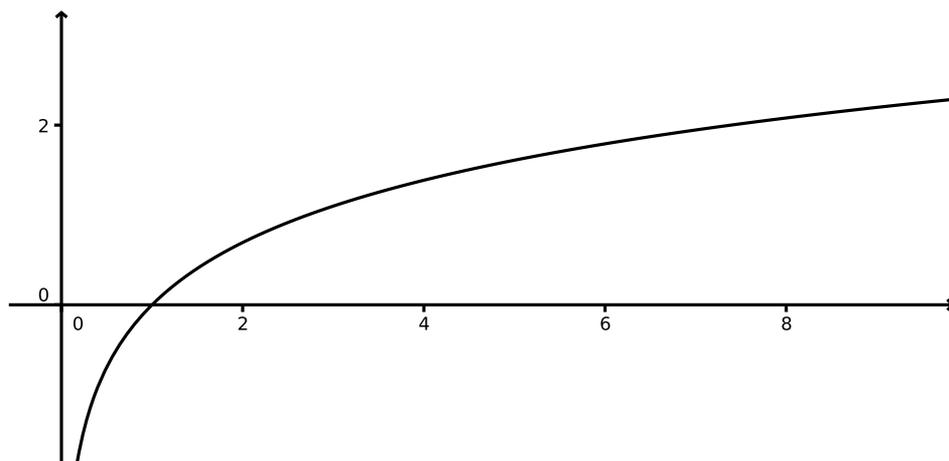


Figura 1: Gráfico de $f(x) = \ln x$

O gráfico de $f(x)$ intercepta o eixo OX em um único ponto, possuindo, assim, uma única raiz. Como $f(x) = 0$ quando $x = 1$, então a raiz de $f(x)$ é $x = 1$.

Exemplo 3. Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = x^3 - 9x + 3$, vamos determinar suas raízes.

Nesta caso, o processo mais fácil para localizar a raiz de $f(x)$ é utilizando o processo 2; temos então:

$$f(x) = x^3 - 9x + 3 = 0 \Leftrightarrow x^3 = 9x - 3$$

Temos assim, $g(x) = x^3$ e $h(x) = 9x - 3$. Desenhemos o gráfico dessas duas funções e localizamos os pontos onde as duas se interceptam:

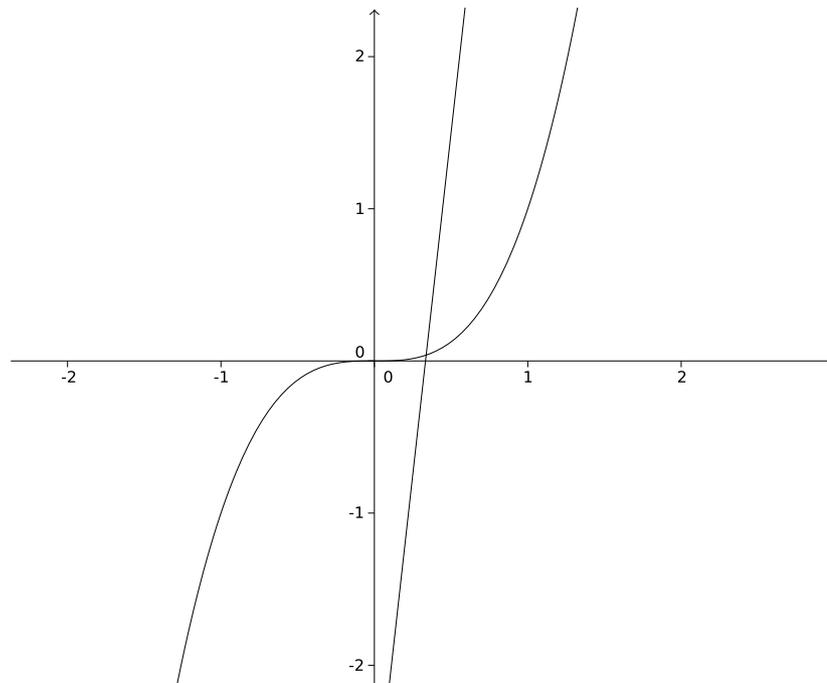


Figura 2: Interseção de $g(x) = x^3$ e $h(x) = 9x - 3$

A figura acima nos mostra que $f(x)$ possui três raízes distintas, localizadas nos intervalos $(-2, -4)$, $(0, 2)$ e $(2, 4)$. Podemos melhorar o resultado encontrado, vamos esboçar abaixo o gráfico de $f(x)$ e analisar o intervalo que contém suas raízes:

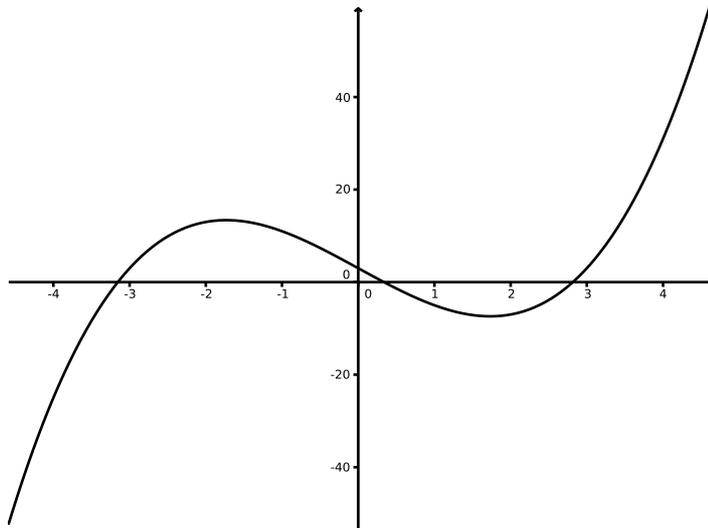


Figura 3: Gráfico de $f(x) = x^3 - 9x + 3$

Analisando o gráfico acima, podemos constatar que $f(x)$ possui três raízes, uma localizada no intervalo $(-4, -3)$, outra em $(0, 1)$ e outra em $(2, 3)$.

Exemplo 4. Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $f(x) = (x + 1)^2 - e^{2-x^2}$. Vamos determinar suas raízes.

Chamando $(x + 1)^2$ de $g(x)$ e e^{2-x^2} de $h(x)$ temos $f(x) = 0 \Leftrightarrow g(x) = h(x)$

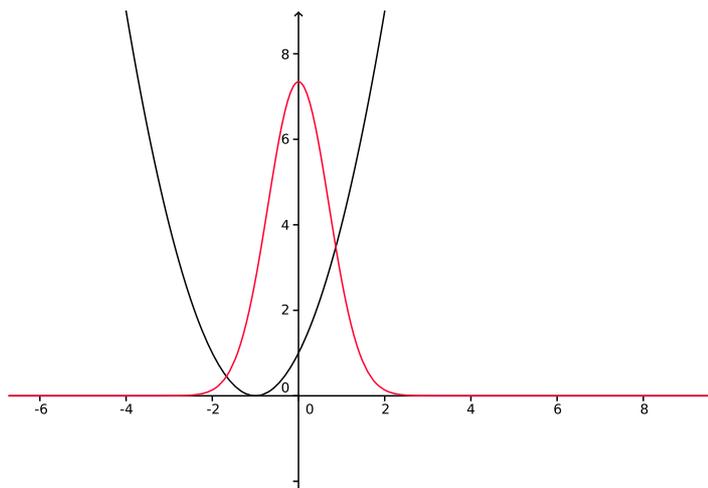


Figura 4: Gráfico $g(x) = (x + 1)^2$ e $h(x) = e^{2-x^2}$

As curvas das duas funções se interceptam em dois pontos, logo $f(x)$ possui duas raízes. Uma raiz localizada no intervalo $(-2, -1)$ e outra no intervalo $(0, 1)$. Conforme podemos observar na Figura 4.

Encontrando o melhor intervalo possível que possua algum zero de $f(x)$ partimos para a Etapa 2: refinamento das raízes, onde serão apresentados métodos iterativos para melhor aproximação das raízes exatas de cada função. Aqui apresentaremos três métodos: Bisseção, Newton e Secante.

Nos exemplos dados vimos alguns modos de determinar um intervalo que contenha a raiz de uma função, seja ela por atribuição de valores à função e a aplicação do Teorema 1, ou por esboço de gráficos das funções ou dos gráficos da interseção de funções decompostas. Encerrada a etapa 1, devemos passar à etapa 2, a de refinamento de raízes, que estudaremos na seção a seguir.

2.2 Refinamento

Como já dito anteriormente, o Etapa 2 depende da precisão do intervalo encontrado na Etapa 1. Dessa forma, dado $f(x)$ uma função qualquer, se na Etapa 1 encontramos o intervalo $[a, b]$ que possui uma raiz de $f(x)$, na Etapa 2 a aproximação da raiz exata será calculada através de métodos iterativos.

Esses métodos constroem x_n , que se aproxima da raiz exata o quanto se queira. Método iterativo é um procedimento que calcula uma sequência de aproximações. Quanto maior o número de iterações, melhor a aproximação da raiz. O procedimento é composto por várias instruções, e algumas delas são repetidas em ciclos; cada iteração corresponde a execução de um ciclo de instruções. Dessa forma, primeiramente fazemos os cálculos iniciais com os dados que possuímos, ou seja, o intervalo encontrado na Etapa 1, analisamos, então, o resultado encontrado; a raiz aproximada calculada é precisa o suficiente ou é necessário uma melhor aproximação? Se a raiz calculada já satisfaz a precisão requerida, então encerramos os cálculos ali; caso contrário, os cálculos continuam sendo feitos, mas não com os dados iniciais e sim com os resultados que vão sendo obtidos. Mas a pergunta é: até quando é necessário repetir o método, ou seja, o que significa encontrar uma raiz suficientemente precisa? Primeiro, para se obter uma raiz aproximada devemos estabelecer um critério de aproximação, ou seja, queremos aproximar quanto da raiz exata?

Vamos considerar \bar{x} como a raiz exata de uma função real $f(x)$, x_k a raiz aproximada encontrada através dos métodos iterativos e ε , tal que $\varepsilon > 0$, sendo a

precisão procurada, ou seja, o quanto se quer aproximar x_k de \bar{x} . Os métodos iterativos trabalham buscando alcançar um critério de parada, ou seja, trabalham até que uma das experiências abaixo sejam satisfeitas:

$$|x_k - \bar{x}| < \varepsilon$$

ou

$$|f(x_k)| < \varepsilon.$$

Nem sempre os métodos conseguem satisfazer as duas experiências simultaneamente, isso vai depender da função que se estuda, como veremos nos exemplos a seguir.

Exemplo 5. $f(x) = x^3 - 3x^2 + 3x - 0,95$

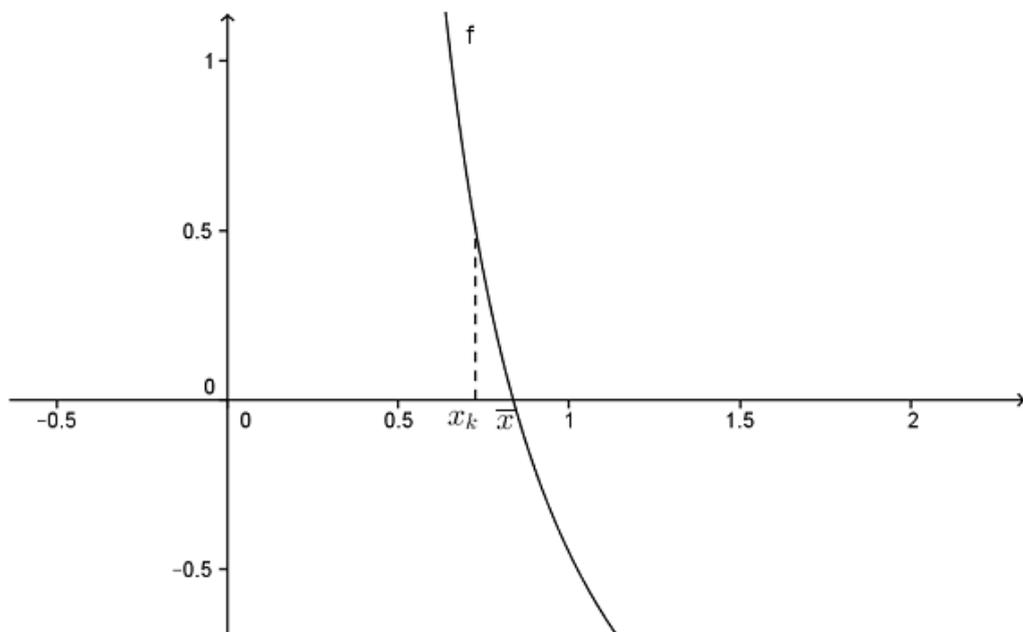


Figura 5: Gráfico de $f(x) = x^3 - 3x^2 + 3x - 0,95$

Na figura acima temos um caso em que $|x_k - \bar{x}| < \varepsilon$, mas $|f(x_k)| > \varepsilon$.

Exemplo 6. $f(x) = \frac{1}{x - 0,3} - 1,9$

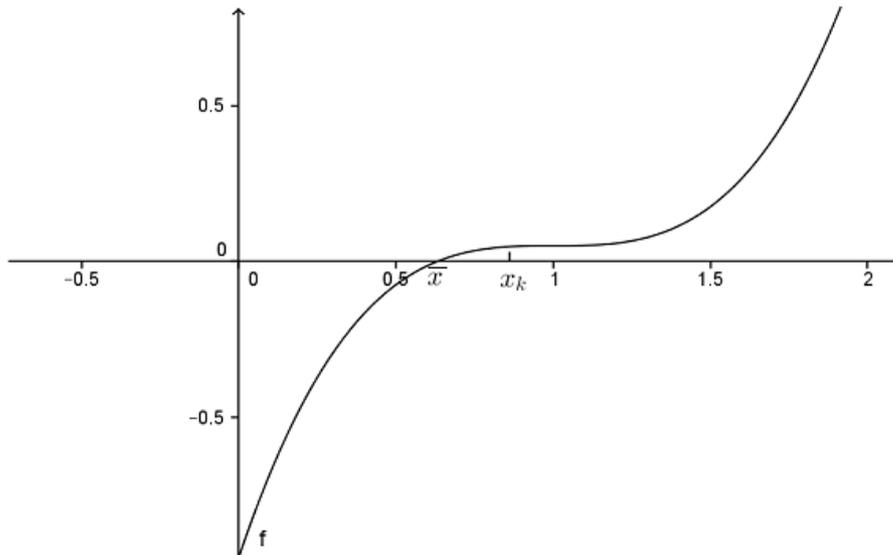


Figura 6: Gráfico de $f(x) = \frac{1}{x - 0,3} - 1,9$

Na figura acima temos um caso em que $|f(x_k)| < \varepsilon$, mas $|x_k - \bar{x}| > \varepsilon$.

Exemplo 7. $f(x) = \frac{\text{sen}(x + 2,3)}{4} - 0,1$

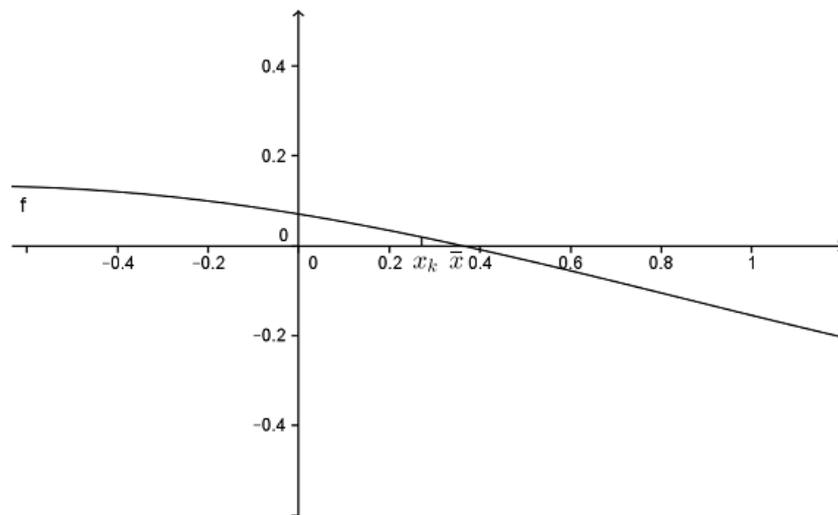


Figura 7: Gráfico de $f(x) = \frac{\text{sen}(x + 2,3)}{4} - 0,1$

Na Figura 7 temos um caso em que $f(x)$ satisfaz os dois resultados do critério de parada.

Analisando os três últimos exemplos dados é fácil perceber que por mais que aproximemos da raiz exata, nem sempre podemos satisfazer os dois resultados do critério de parada, mas desde que pelo um dos critérios sejam satisfeitos, é possível encontrar uma aproximação satisfatória do zero de qualquer função, isso por que o que determina que o critério de parada seja satisfeito é o comportamento da função.

Como a intenção dos métodos iterativos é calcular uma aproximação da raiz exata, utilizar o primeiro resultado $|x_k - \bar{x}| < \varepsilon$ não é uma boa alternativa, uma vez que não se conhece a raiz exata da função. Podemos utilizar então o segundo resultado ($|f(x_k)| < \varepsilon$) ou usar o teste do erro relativo:

$$\varepsilon_{relativo} = \left| \frac{x_{k+1} - x_k}{x_{k+1}} \right|.$$

Portando, neste trabalho, os métodos serão utilizados para calcularmos uma aproximação da raiz exata, com uma precisão ε pré estabelecida, desde que seja satisfeito um dos critérios abaixo:

$$|f(x_k)| < \varepsilon$$

ou

$$\left| \frac{x_{k+1} - x_k}{x_{k+1}} \right| < \varepsilon$$

Usualmente, a precisão é de magnitude $\varepsilon = 10^{-m}$, onde m é o número de casas decimais corretas que se deseja que a raiz aproximada calculada tenha em relação à raiz exata. Nos próximos capítulos vamos estudar alguns desses métodos iterativos.

3 Método da Bissecção

O método da bissecção consiste basicamente na redução do intervalo que contém a raiz (inicialmente encontrado na Etapa 1), sempre pela metade. Para isso usamos o Teorema de Bolzano. Ou seja, o método da bissecção determina uma série de intervalos $[a_i, b_i]$, a partir de um intervalo previamente encontrado $[a, b]$, que se reduz a cada iteração à metade do anterior. A quantidade de iterações necessárias é àquela em que a amplitude do intervalo calculado é menor que a precisão ε preestabelecida. Graficamente temos:

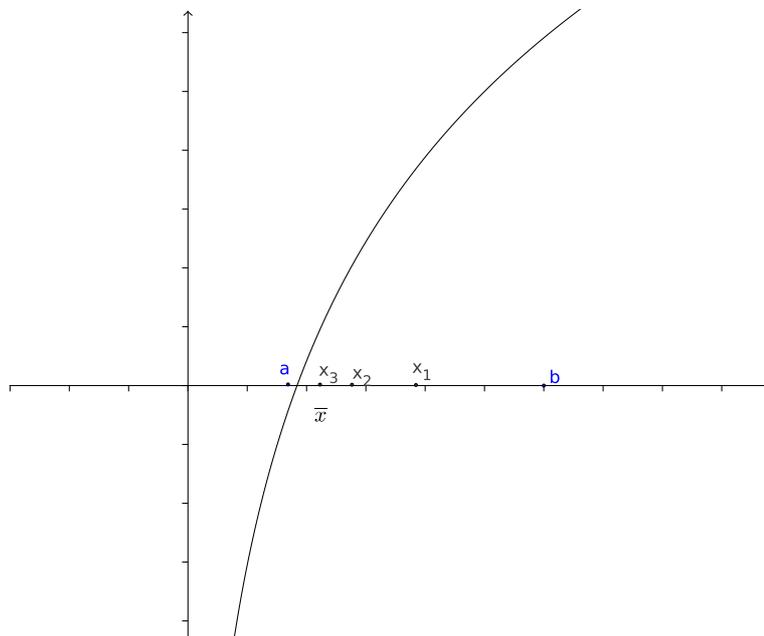


Figura 8: Interpretação geométrica do Método da Bissecção

O gráfico nos permite interpretar que a partir de um intervalo previamente encontrado $[a, b]$ nos é possível reduzi-lo sempre à metade, o que nos permite aproximarmos cada vez mais da interseção da curva com o eixo OX . Essa redução de intervalo vai ser feita até que se encontre um valor que seja tão próximo da raiz exata o quanto se queira.

O gráfico nos permite interpretar que a partir de um intervalo previamente encontrado $[a, b]$ nos é possível reduzi-lo sempre à metade, o que nos permite aproximarmos cada vez mais da interseção da curva com o eixo OX . Essa redução de intervalo vai ser feita até que se encontre um valor que seja tão próximo da raiz exata o quanto se queira.

O algoritmo do método consiste em determinar um intervalo $[a, b]$ tal que $f(a) \cdot f(b) < 0$ (Etapa 1) e também a precisão ε que se deseja. Se $(a - b) < \varepsilon$, então o intervalo $[a, b]$ já é preciso. Se o intervalo ainda não é pequeno o suficiente, calculamos o ponto médio de $[a, b]$, e analisamos o que acontece.

- i) Se $f(x) = 0$, então x é a raiz exata de $f(x)$;
- ii) Se $f(x) \cdot f(a) < 0$ então determinamos o novo intervalo $[a, x]$;
- iii) Se $f(x) \cdot f(a) > 0$ então determinamos o novo intervalo $[x, b]$;

Nos casos (ii) e (iii), se o novo intervalo determinado possui amplitude menor que a precisão ε preestabelecida, então o intervalo já é o procurado, caso contrário repetimos todo o algoritmo, até que se encontre um intervalo com amplitude menor que ε . O próximo exemplo traz uma aplicação do Método da Bissecção.

Exemplo 8. Seja $f : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}$, definida por $f(x) = \sqrt{x} - 5e^{-x}$. Já determinamos que no intervalo $(1, 2)$, $f(x)$ possui uma raiz. Vamos estabelecer uma precisão de $\varepsilon = 10^{-3}$ e organizar os cálculos em uma tabela:

k	a	Sinal de $f(a)$	b	Sinal de $f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	1	-	2	+	1,5	0,10909	-
2	1	-	1,5	+	1,25	-0,31449	0,2
3	1,25	-	1,5	+	1,375	-0,09159	0,09091
4	1,375	-	1,5	+	1,4375	0,01135	0,04348
5	1,375	-	1,4375	+	1,40625	-0,03945	0,02222
6	1,40625	-	1,4375	+	1,42188	-0,01388	0,01099
7	1,42187	-	1,4375	+	1,42969	-0,00122	0,00546
8	1,42968	-	1,4375	+	1,43359	0,00508	0,002725
9	1,42968	-	1,4335	+	1,43164	0,00193	0,001364
10	1,42968	-	1,4316	+	1,43066	0,00035	0,000683

No caso de $f(x)$ foram necessárias 10 iterações no Método da Bissecção para conseguirmos encontrar uma raiz $x = 1,430664063$, que seja aproximada da raiz exata de acordo com a precisão ε estabelecida.

3.1 Convergência

É fácil perceber que dada uma função $f(x)$ contínua em $[a, b]$ satisfazendo $f(a) \cdot f(b) < 0$ e aplicando o Método da Bissecção, obtemos uma sequência de pontos médios de intervalos que convergem para a raiz. Porém, precisamos nos aprofundar nessa análise, afinal, por quê as sequências x_k obtidas convergem para a raiz exata? Podemos chamalos intervalos encontrados a cada iteração, de (a_k, b_k) , onde k é o número de iterações, e os respectivos pontos médios de x_k . O método da bissecção nos fornece três sequências:

- i) $\{a_k; k \in \mathbb{N}\}$: é uma sequência não decrescente e limitada superiormente por b ; ou seja, existe $l' \in \mathbb{R}$ tal que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} a_k = l'.$$

- ii) $\{b_k; k \in \mathbb{N}\}$: é uma sequência não crescente e limitada inferiormente por a ; ou seja, existe $l'' \in \mathbb{R}$ tal que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} b_k = l''.$$

- iii) $\{x_k; k \in \mathbb{N}\}$: é uma sequência construída por: $x_k = \frac{a_k + b_k}{2}$, onde $a_k < x_k < b_k$, $\forall k$.

Como a amplitude de cada novo intervalo determinado é a metade do intervalo anterior, temos:

$$\begin{aligned} b_k - a_k &= \frac{b_{k-1} - a_{k-1}}{2} \\ &= \frac{b_{k-2} - a_{k-2}}{2^2} \\ &\vdots \\ &= \frac{b - a}{2^k} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\lim_{k \rightarrow \infty} (b_k - a_k) &= \lim_{k \rightarrow \infty} \left(\frac{b - a}{2^k} \right) \\
&= (b - a) \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{2^k} \\
&= (b - a) \cdot 0 \\
&= 0
\end{aligned}$$

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (b_k - a_k) = 0 \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} b_k = \lim_{k \rightarrow \infty} a_k$$

Logo, $l' = l''$. Seja $l = l' = l''$, temos do item (iii) que $a_k < x_k < b_k$, assim:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} b_k < \lim_{k \rightarrow \infty} x_k < \lim_{k \rightarrow \infty} a_k \Rightarrow l < \lim_{k \rightarrow \infty} x_k < l \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = l.$$

Precisamos provar agora que l é a raiz de $f(x)$, ou seja, $f(l) = 0$. A cada iteração realizada temos que $f(a_k) \cdot f(b_k) < 0$. Dessa forma,

$$\begin{aligned}
0 &\geq \lim_{k \rightarrow \infty} f(a_k) f(b_k) \\
&= \lim_{k \rightarrow \infty} f(a_k) \cdot \lim_{k \rightarrow \infty} f(b_k) \\
&= f\left(\lim_{k \rightarrow \infty} a_k\right) \cdot f\left(\lim_{k \rightarrow \infty} b_k\right) \\
&= f(l) \cdot f(l) \\
&= [f(l)]^2
\end{aligned}$$

Temos então: $0 \geq [f(l)]^2 \geq 0 \Rightarrow f(l) = 0$. Podemos concluir então que dada $f(x)$ contínua em um intervalo determinado $[a, b]$ que contenha uma raiz, então o Método da Bissecção nos fornece uma sequência convergente de $\{x_k\}$, que converge para a raiz exata de $f(x)$.

3.2 Estimativa do Número de Iterações

É possível calcularmos a quantidade de iterações necessárias para, a partir de determinado intervalo, encontramos uma raiz aproximada com uma precisão preestabelecida. No item anterior vimos que

$$b_k - a_k = \frac{b - a}{2^k}.$$

Como precisamos que a raiz aproximada $x_k = b_k - a_k$, encontrada na k -ésima iteração, tenha uma precisão ε , obtemos:

$$\begin{aligned}
 b_k - a_k &= \frac{b - a}{2^k} < \varepsilon \\
 \Rightarrow 2^k &> \frac{b - a}{\varepsilon} \\
 \Rightarrow \log 2^k &> \log \frac{b - a}{\varepsilon} \\
 \Rightarrow k \log 2 &> \log \frac{b - a}{\varepsilon} \\
 \Rightarrow k &> \frac{\log(b - a) - \log \varepsilon}{\log 2}.
 \end{aligned}$$

No caso do Exemplo 8, já poderíamos prever o número de iterações que seriam necessárias para se calcular a raiz aproximada de $f(x) = \sqrt{x} - 5e^{-x}$ no intervalo $(1, 2)$, com precisão $\varepsilon = 10^{-3}$, pois

$$k > \frac{\log(2 - 1) - \log 10^{-3}}{\log 2} \Rightarrow k > \frac{\log 1 + 3 \log 10}{\log 2} \Rightarrow k > 9,966.$$

Logo, vemos que foram necessárias 10 iterações para obtermos x_k com a precisão que se queira.

Neste capítulo estudamos o Método da Bissecção, como pudemos perceber é um método bastante simples e que exige poucos requisitos para que, se aplicado corretamente, converge para a solução de funções reais. Basicamente se utiliza do Teorema de Bolzano, que vimos no Capítulo 1. Mas apesar de ser um método simples, sua ordem de convergência é um tanto quanto lento, ou seja, são necessárias um número relativamente grande de iterações para que encontremos a raiz aproximada de uma função com uma determinada precisão. No capítulo seguinte vamos estudar um novo método iterativo, o Método de Newton, que apesar de ser um tanto mais complexo que o da bissecção, é um método bem mais rápido, o que reduz o número de iterações necessárias.

4 Método de Newton

O método de Newton é dos métodos mais conhecidos e utilizados para se calcular a aproximação da raiz de uma função. Mas antes de iniciarmos os estudos sobre o Método de Newton vamos estudar quais as motivações para o desenvolvimento do método.

4.1 Motivação

Uma função $f(x)$ contínua no intervalo $[a, b]$, que também contém uma raiz de $f(x)$. Podemos expressar x como $x = \varphi(x)$ de forma que $f(\varphi(x)) = 0$. Qualquer solução de $\varphi(x)$ é chamada de ponto fixo de $\varphi(x)$. O problema agora deixa de ser encontrar a raiz x_k aproximada e passa a ser encontrar o ponto fixo de $\varphi(x)$, ou seja, a partir de um ponto inicial x_0 será gerada uma sequência de aproximações da raiz exata pela relação $x_{k+1} = \varphi(x_k)$. Chamamos a função $\varphi(x)$ de função de iteração sempre que ela satisfazer as condições aqui explicitadas. A recorrência da função de iteração se comporta da seguinte forma:

$$\begin{aligned}x_0 &\rightarrow \text{solução inicial} \\x_1 &= \varphi(x_0) \\x_2 &= \varphi(x_1) \\&\vdots \\x_{k+1} &= \varphi(x_k); \end{aligned}$$

isso se justifica pois,

$$f(\bar{x}) = 0 \Leftrightarrow \varphi(\bar{x}) = \bar{x}.$$

De fato, a forma geral de $\varphi(x)$ é dada por:

$$\varphi(x) = x + A(x)f(x),$$

para qualquer $A(x)$, de tal forma que $A(\bar{x}) \neq 0$. De $f(\bar{x}) = 0$ temos: $\varphi(\bar{x}) = \bar{x} + A(\bar{x}) \cdot 0 \Rightarrow \varphi(\bar{x}) = \bar{x}$. De $\varphi(\bar{x}) = \bar{x}$ temos: $\bar{x} + A(\bar{x})f(\bar{x}) = \bar{x} \Rightarrow f(\bar{x}) = 0$, pois $A(\bar{x}) \neq 0$.

Por exemplo as funções de iteração da função $f(x) = x^2 + x - 6 = 0$, são $\varphi_1(\bar{x}) = 6 - x^2$, $\varphi_2(\bar{x}) = \pm\sqrt{6 - x}$, $\varphi_3(\bar{x}) = \frac{6}{x} - 1$ e $\varphi_4(\bar{x}) = \frac{6}{x + 1}$.

Graficamente, encontrar uma raiz da função $\bar{x} = \varphi(\bar{x})$, significa encontrar a abscissa do ponto de intersecção entre a reta $y = x$ e a da curva $y = \varphi(x)$. Por isso é necessário escolher bem a função de iteração, uma vez que não é sempre que a sequência gerada converge para a raiz, o que podemos observar nos exemplos abaixo.

Exemplo 9. *Abaixo vamos ver uma função de iteração $\varphi(x)$, de modo que a sequência $\{x_k\}$ não converge para a raiz de $f(x)$.*

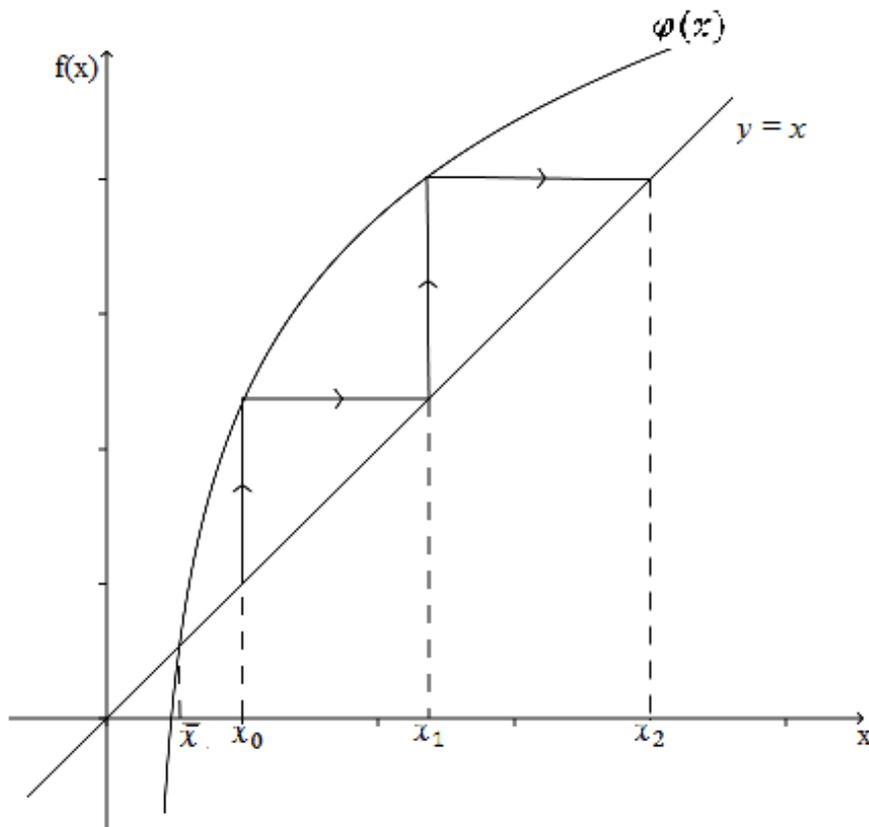


Figura 9: Interpretação geométrica da função iteração (1º caso)

Exemplo 10. *Vamos ver na Figura 10 uma função de iteração $\varphi(x)$, de modo que a sequência $\{x_k\}$ converge para a raiz de $f(x)$.*

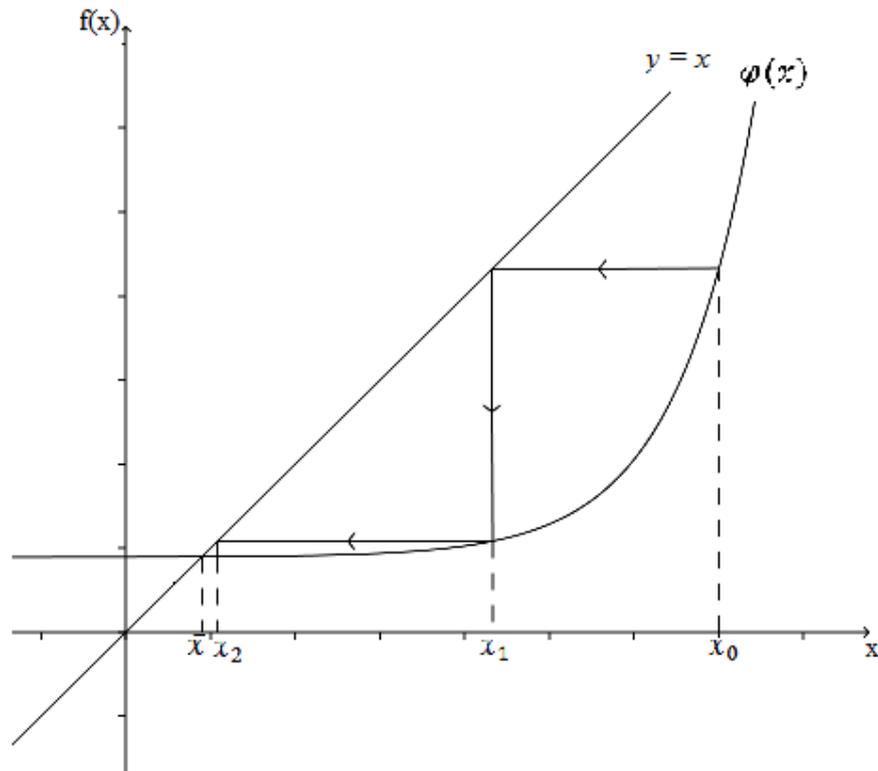


Figura 10: Interpretação geométrica da função iteração (2º caso)

Abaixo vamos estudar um teorema que apresenta condições suficientes para garantir a convergência da sequência $\{x_k\}$ para a raiz \bar{x} .

Teorema 3. *Seja $f(x)$ uma função qualquer tal que $f(\bar{x}) = 0$ e seja \bar{x} uma raiz isolada em um intervalo I , de forma que $I = (\bar{x} - h, \bar{x} + h)$, onde $\bar{x} = \varphi(\bar{x})$. Se*

- i) $\varphi(x)$ e $\varphi'(x)$ são contínuas em I ;*
- ii) $|\varphi'(x)| \leq M < 1, \forall x \in I$ e*
- iii) $x_0 \in I$,*

então x_k gerada de $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ converge para \bar{x} .

Demonstração. Primeiro vamos provar que se $x_0 \in I \Rightarrow x_k \in I, \forall k \in \mathbb{N}$. Temos que $f(\bar{x}) = 0 \Leftrightarrow \bar{x} = \varphi(\bar{x})$ e também $x_{k+1} = \varphi(x_k)$; logo,

$$x_{k+1} - \bar{x} = \varphi(x_k) - \varphi(\bar{x}).$$

Como $\varphi(x)$ é contínua e diferenciável no intervalo I , então pelo Teorema do Valor Médio existe c_k entre x_k e \bar{x} , tal que,

$$\varphi'(c_k) = \frac{\varphi(x_k) - \varphi(\bar{x})}{x_k - \bar{x}}. \text{ Assim, } \varphi'(c_k)(x_k - \bar{x}) = \varphi(x_k) - \varphi(\bar{x}) = x_{k+1} - \bar{x}.$$

Logo, $x_{k+1} - \bar{x} = \varphi'(c_k)(x_k - \bar{x})$. Então temos que $\forall k \in \mathbb{N}$,

$$|x_{k+1} - \bar{x}| = |\varphi'(c_k)|(x_k - \bar{x})|. \quad (1)$$

Como por hipótese, $|\varphi'(x)| \leq M < 1, \forall x \in I$, então

$$|x_{k+1}| < |(x_k - \bar{x})|.$$

□

Podemos observar, que a distância entre x_{k+1} e \bar{x} é menor que a distância entre x_k e \bar{x} , e como o intervalo I é centrado em \bar{x} , é fácil concluir que se $x_k \in I$, então $x_{k+1} \in I, \forall k \in \mathbb{N}$. Agora vamos provar que $\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \bar{x}$.

De (1) nós temos que $|x_{k+1} - \bar{x}| = |\varphi'(c_k)|(x_k - \bar{x})|$, ou seja

$$|x_1 - \bar{x}| = |\varphi'(c_0)|(x_0 - \bar{x})| \leq M|(x_0 - \bar{x})|$$

$$|x_2 - \bar{x}| = |\varphi'(c_1)|(x_1 - \bar{x})| \leq M|(x_1 - \bar{x})| \leq M^2|(x_0 - \bar{x})|$$

⋮

$$|x_k - \bar{x}| = |\varphi'(c_{k-1})|(x_{k-1} - \bar{x})| \leq M|(x_{k-1} - \bar{x})| \leq \dots \leq M^k|(x_0 - \bar{x})|.$$

Dessa forma, $0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} |x_k - \bar{x}| \leq \lim_{k \rightarrow \infty} M^k|(x_0 - \bar{x})|$. Como $0 \leq M \leq 1$, então $\lim_{k \rightarrow \infty} M^k|(x_0 - \bar{x})| = 0$; logo,

$$0 \leq \lim_{k \rightarrow \infty} |x_k - \bar{x}| \leq 0 \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} |x_k - \bar{x}| = 0 \Rightarrow \lim_{k \rightarrow \infty} x_k = \bar{x}.$$

Concluimos que a sequência $\{x_k\}$ converge para a raiz de $f(x)$.

Vimos então que o método construído até aqui garante a convergência da sequência $\{x_k\}$ para a raiz. Vamos estudar a seguir a ordem de convergência do método, ou seja, a velocidade com que a sequência converge para a raiz exata.

Definição 1. *Sejam $\{x_k\}$ uma sequência que converge para \bar{x} e $\varepsilon_k = |x_k - \bar{x}|$ o erro na k -ésima iteração. Se existirem números p e C , tais que $p > 1$ e C uma constante positiva, de modo que $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|^p} = C$, então p é a ordem de convergência da sequência $\{x_k\}$ e C é a constante assintótica de erro.*

Pela definição acima, podemos perceber que quando o número de iterações tende ao infinito, o erro da k -ésima iteração tende a zero, isso porque se $k \rightarrow \infty$ então $|\varepsilon_{k+1}| \approx |\varepsilon|^p C$; logo quanto maior o valor de p , $|\varepsilon_k|^p C$ estará mais próximo de zero, independente do valor da constante, o que implica, imediatamente, o aumento da velocidade de convergência de $\{x_k\}$. Portanto, se tivermos dois processos iterativos que geram duas sequências convergentes para a raiz da função, com ordens de convergência p_1 e p_2 tais que $p_1 > p_2 \geq 1$, então a sequência gerada pelo processo iterativo de ordem de convergência p_1 converge mais rapidamente que a sequência gerada pelo processo iterativo de ordem p_2 . Concluimos assim que quanto maior a ordem de convergência de um método, maior a sua velocidade de convergência.

A seguir vamos provar que o método proposto nessa seção possui ordem de convergência linear, ou seja, $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|} = C$, com $0 \leq |C| \leq 1$.

De fato o Teorema 3 nos traz a seguinte relação: $x_{k+1} - \bar{x} = \varphi(x_k) - \varphi(\bar{x}) = \varphi'(c_k)(x_k - \bar{x})$, com c_k entre x_k e \bar{x} . Assim, $\frac{x_{k+1} - \bar{x}}{x_k - \bar{x}} = \varphi'(c_k)$. Logo,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x_{k+1} - \bar{x}}{x_k - \bar{x}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \varphi'(c_k) = \varphi'(\lim_{k \rightarrow \infty} (c_k)) = \varphi'(\bar{x}).$$

Portanto, $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|\varepsilon_{k+1}|}{|\varepsilon_k|} = \varphi'(\bar{x}) = C$ e como $\varphi'(x)$ satisfaz as condições do Teorema 3, então $|C| < 1$. Assim, o método estudado possui convergência linear.

O que podemos perceber é que para k suficientemente grande, o erro em qualquer iteração é proporcional ao erro da iteração anterior e essa proporcionalidade é dada por $\varphi'(\bar{x})$. Dessa forma, quanto menor o módulo de $\varphi'(\bar{x})$ mais rápida será a velocidade de convergência de um método.

Até aqui não entramos no Método de Newton em si, apenas apresentamos uma motivação para ele. O objetivo do Método de Newton é acelerar a velocidade de convergência do método estudado.

4.2 O Método de Newton

Vimos que, se dada uma função $f(x)$, contínua no intervalo $[a, b]$, que contém uma raiz de $f(x)$, e tomarmos uma função de iteração $\varphi(x)$ tal que $f(\varphi(x)) = 0$ e que satisfaça todos os requisitos do Teorema 3, então é possível gerarmos uma sequência $\{x_k\}$ de aproximações da raiz exata de $f(x)$ através da recorrência $x_{k+1} = \varphi(x_k)$ que converge para a raiz exata de $f(x)$. Basicamente o Método de Newton consiste em acelerar essa convergência.

Como vimos, quanto menor $|\varphi'(\bar{x})|$ maior será a velocidade de convergência do método. Então para tornar o Método é mais rápido possível, devemos tomar $\varphi'(\bar{x}) = 0$. Dessa forma, $\varphi(x) = x + A(x)f(x) \Rightarrow \varphi'(x) = 1 + A'(x) + A(x)f'(x)$. Segue que $\varphi'(\bar{x}) = 1 + A'(\bar{x})f(\bar{x}) + A(\bar{x})f'(\bar{x}) \Rightarrow 0 = 1 + A(x)f'(x)$, assim $A(x) = -\frac{1}{f'(x)}$.

Ou seja, devemos tomar $\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ para que tenhamos $\varphi'(x) = 0$. Portanto a sequência que devemos tomar é

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

Graficamente, temos:

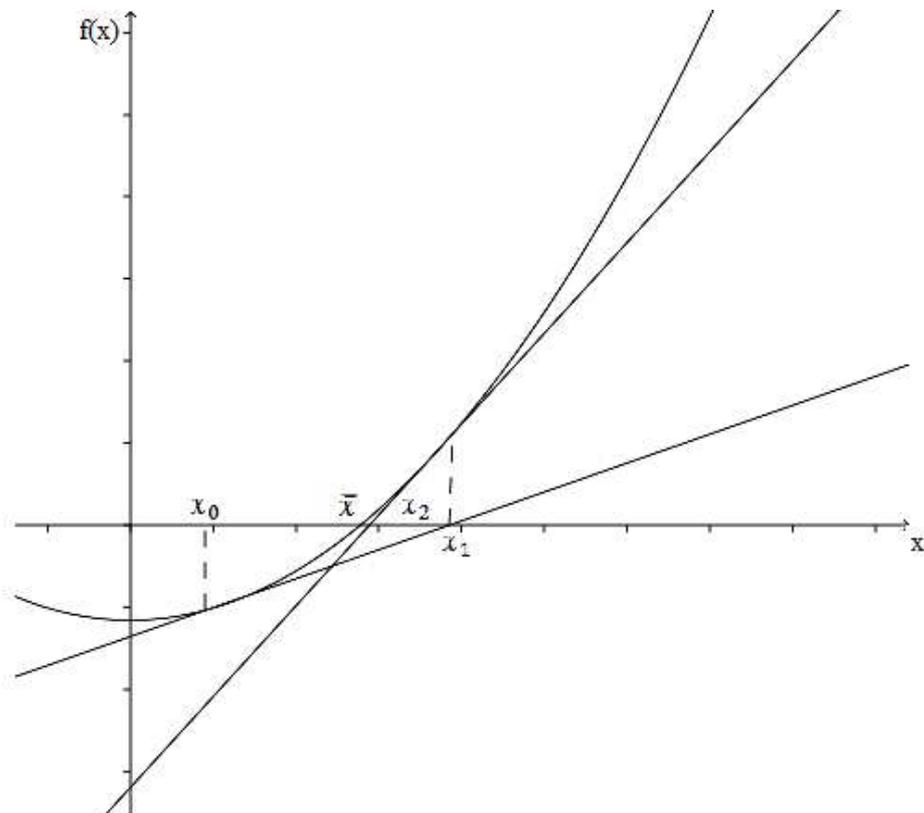


Figura 11: Interpretação geométrica do Método de Newton

Temos que, dado x_k , calculamos $f(x_k)$. A interseção da reta tangente à $f(x)$ passando por $(x_k, f(x_k))$ com o eixo x , nos determina x_{k+1} . De fato temos $\tan \alpha = f'(x_k) = \frac{f(x_k)}{x_k - x_{k+1}}$. Daí, $x_k - x_{k+1} = \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$. Logo, $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$.

Por esse motivo, o método de Newton também é conhecido como Método das Tangentes. O próximo exemplo mostra como tal método é utilizado para calcular raízes de funções reais.

Exemplo 11. *Vamos determinar as raízes da equação $f(x) = 4 \cos x - e^x$ com erro inferior a 10^{-2} .*

Inicialmente precisamos obter um valor inicial x_0 . A maneira mais simples de se determinar esse valor inicial é traçando o gráfico de $f(x)$. Podemos tomar então $h(x) = 4 \cos x$ e $g(x) = e^x$. Como já visto anteriormente, a interseção dessas duas curvas determina a raiz de $f(x)$.

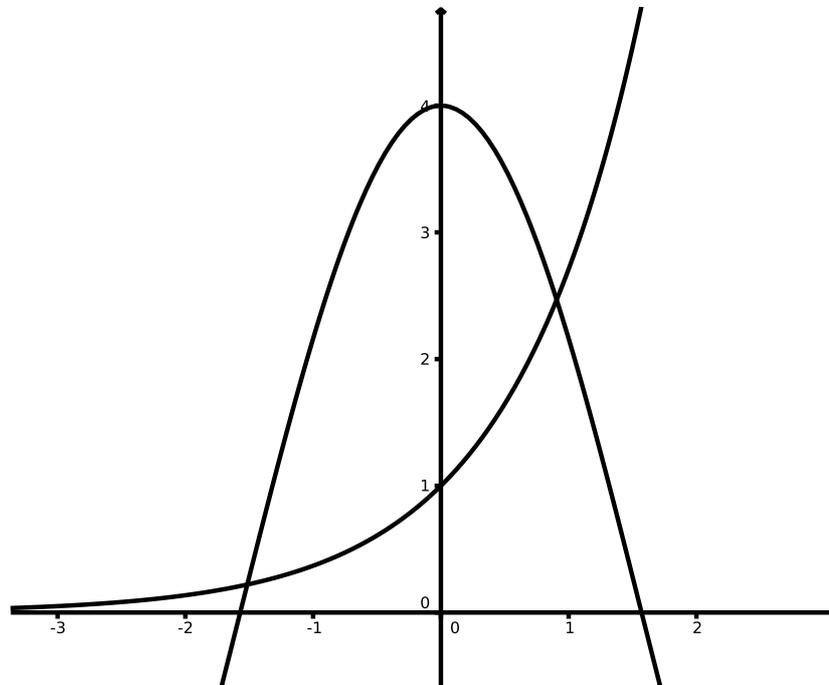


Figura 12: Intersecção de $g(x) = e^x$ e $h(x) = 4 \cos x$

Vamos determinar, então a raiz positiva de $f(x)$. Podemos tomar $x_0 = 1$ e considerando as informações abaixo, podemos completar a tabela com as iterações necessárias.

$$\begin{aligned} f(x) &= 4 \cos x - e^x \\ f'(x) &= -4 \sin x - e^x \\ x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \end{aligned}$$

Número de iterações	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	x_{k+1}	Erro
1	1	-0,557	-6,084	0,908	0,101
2	0,908	-0,019	-5,631	0,905	0,0033

Neste caso só precisamos de duas iterações para encontrar $x_2 = 0,905$ com $\varepsilon = 0,0033 < 0,01$. Portanto, o Método de Newton é um método bastante rápido e por isso é tão utilizado.

Na próxima sessão vamos estudar a convergência do Método de Newton, ou seja, vamos demonstrar que a sequência gerada pelo método converge para a raiz de uma função real.

4.3 Convergência

Suponha que $f(x)$, $f'(x)$ e $f''(x)$ sejam contínuas em um intervalo I que contém a raiz exata de $f(x)$, tal que $f'(\bar{x}) \neq 0$. Temos que:

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= x - \frac{f(x)}{f'(x)} \\ \Rightarrow \varphi'(x) &= 1 - \frac{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} \\ &= \frac{[f'(x)]^2 - [f'(x)]^2 + f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} \\ &= \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}. \end{aligned}$$

Como $f'(x)$ é contínua em I , é possível selecionar outro intervalo I_1 contido em I tal que $f'(x) \neq 0$. Isso é possível uma vez que $f(\bar{x}) = 0$, $f'(x)$ e $f''(x)$ são contínuas. Podemos concluir, então que $\varphi(x)$ e $\varphi'(x)$ são contínuas em I_1 . Temos, ainda, que $\varphi'(x) = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$ é contínua em I_1 e satisfaz $\varphi'(\bar{x}) \neq 0$. Podemos escolher outro intervalo I_2 contido em I_1 de forma que para todo $x \in I_2$ tem-se $|\varphi'(x)| < 1$. Dessa forma, se $x_0 \in I_2$, pelo Teorema 3, o processo iterativo $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ gera uma sequência $\{x_k\}$ que converge para a raiz exata \bar{x} .

Provamos agora que o Método de Newton realmente gera uma sequência $\{x_k\}$ que converge para a raiz exata. Vamos ver a seguir a ordem de convergência do Método.

Definição 2. Um método iterativo apresenta convergência quadrática se $\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = k$. Onde e_i e e_{i+1} são tais que $e_i = |x_i - \bar{x}|$ e $e_{i+1} = |x_{i+1} - \bar{x}|$ são os erros cometidos a cada iteração e k é a chamada constante assintótica de proporcionalidade.

Teorema 4. Se $f'(\bar{x}) \neq 0$, então o método de Newton apresenta convergência quadrática.

Demonstração. Já sabemos que $x = \varphi(x) \Rightarrow \bar{x} = \varphi(\bar{x})$ e que $f'(\bar{x}) \Rightarrow \varphi'(\bar{x})$. Suponha $\varphi(x)$ e $\varphi'(x)$ sejam contínuas em um intervalo I centrado na raiz \bar{x} . Em torno de \bar{x} , vamos desenvolver $\varphi(x)$ em série de Taylor até os membros de 2ª ordem:

$$\varphi(x_i) = \varphi(\bar{x}) + \frac{\varphi'(\bar{x})}{1!}(x - \bar{x}) + \frac{\varphi''(\xi)}{2!}(x - \bar{x})^2 \Rightarrow \varphi(x_i) = \bar{x} + \frac{\varphi''(\xi)}{2!}(x - \bar{x})^2$$

onde ξ está entre x e \bar{x} . Fazendo $x = x_i$, temos $\varphi(x_i) = \bar{x} + \frac{\varphi''(\xi_i)}{2!}(x_i - \bar{x})^2$, onde ξ_i está entre x_i e \bar{x} . Como $x_{k+1} = \varphi(x_k)$, obtemos

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= \bar{x} + \frac{\varphi''(\xi_i)}{2!}(x_i - \bar{x})^2 \\ \Rightarrow x_{i+1} - \bar{x} &= \frac{\varphi''(\xi_i)}{2!}(x_i - \bar{x})^2 \\ \Rightarrow |x_{i+1} - \bar{x}| &= \frac{|\varphi''(\xi_i)|}{2!}|(x_i - \bar{x})|^2 \\ \Rightarrow e_{i+1} &= \frac{|\varphi''(\xi_i)|}{2!}e_i^2 \\ \Rightarrow \frac{e_{i+1}}{e_i^2} &= \frac{|\varphi''(\xi_i)|}{2!} \\ \Rightarrow \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} &= \lim_{i \rightarrow \infty} \frac{|\varphi''(\xi_i)|}{2!} = k \end{aligned}$$

□

Portanto, o método de Newton tem convergência quadrática, ou seja, à medida que as iterações trazem raízes aproximadas da raiz exata, o número de dígitos significativos corretos são duplicados a cada iteração. O que torna o método vantajoso pela velocidade da convergência. A desvantagem do método é a quantidade de cálculos que ele exige.

Exemplo 12. Vamos determinar o valor de $\sqrt{2}$ com precisão de 10^{-4} .

Devemos então encontrar a raiz de $f(x) = x^2 - 2$. Podemos tomar $x_0 = 1$. Como $f(x) = x^2 - 2$, $f'(x) = 2x$ e $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$, a tabela abaixo resume o método.

Número de iterações	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	x_{k+1}	Erro
1	1	-1	2	1,5	0,333
2	1,5	0,25	3	1,41667	0,05882
3	1,41667	0,006953	2,83334	1,41422	0,00173
4	1,41422	0,000182	2,82844	1,41421	0,00001

Portanto $\sqrt{2} \cong 1,41421$.

Pudemos perceber neste capítulo o porquê do método de Newton ser um dos métodos iterativos mais utilizados; é um método eficiente e rápido, que calcula a raiz de funções reais com poucas iterações. Mas, pudemos perceber, também, que o método exige que sejam satisfeitas restrições para que a sua convergência seja garantida e exige, ainda, um número consideravelmente grande de cálculos a serem feitos. No Capítulo seguinte vamos estudar o Método da Secante, uma modificação do Método de Newton, que apesar de apresentar velocidade de convergência menor, exige menos cálculos (como o cálculo da derivada da função), tornando-se uma excelente alternativa para se calcular raízes de funções.

5 Método da Secante

Como foi dito anteriormente, o método de Newton tem como vantagem sua velocidade de convergência, mas a necessidade de se efetuar muitos cálculos, pois a cada iteração é necessário o cálculo do valor da função no ponto encontrado e do valor numérico da derivada no ponto, torna o método desvantajoso. O método da Secante consiste em modificar o método de Newton de forma que os cálculos para gerar a sequência $\{x_k\}$ que converge para a raiz exata, sejam simplificados.

A modificação consiste então em aproximar a derivada $f'(x)$ pelo quociente $f(x_k) \cong \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}$, onde x_k e x_{k-1} são aproximações quaisquer de x . Ou seja, no método de Newton usamos a inclinação da reta tangente à curva, essa modificação faz com que o método da Secante use a inclinação da reta secante à curva $f(x)$. No método de Newton temos

$$\begin{aligned}x_{k+1} &= x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \\ &= x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}} \\ &= x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \\ &= \frac{x_k f(x_k) - x_k f(x_{k-1}) - x_k f(x_k) + x_{k-1} f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})} \\ &= \frac{x_{k-1} f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}.\end{aligned}$$

É claro ver que para o método da Secante ser utilizado é necessário que se tenha disponível duas aproximações, para que os cálculos iniciais possam ser realizados.

Graficamente, nos pontos $(x_k, f(x_k))$ e $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$ traça-se a reta secante à $f(x)$; a intersecção da reta secante com o eixo x é o novo ponto obtido x_{k+1} .

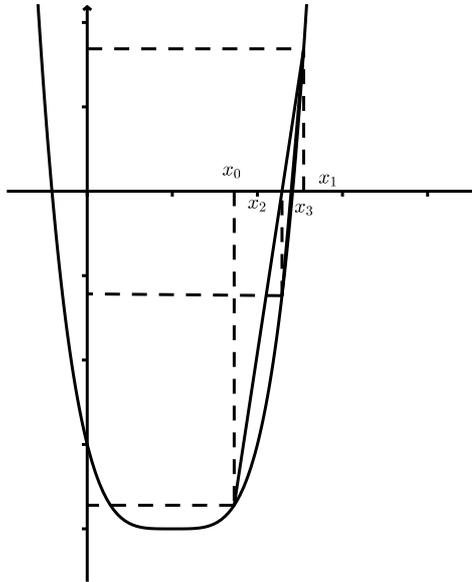


Figura 13: Interpretação geométrica do Método da Secante

Exemplo 13. Vamos determinar as raízes de $f(x) = x^3 - \frac{1}{2}$ com precisão de 0,01. Como não foram dados os pontos iniciais x_0 e x_1 é necessário que façamos primeiro o gráfico de $f(x)$ para encontrarmos essas duas aproximações iniciais. Podemos reescrever f da forma $h(x) = g(x)$, onde $g(x) = x^3$ e $h(x) = \frac{1}{2}$.

No gráfico abaixo vamos encontrar a interseção das funções decompostas g e h afim de encontrarmos um intervalo que contenha a raiz de f .

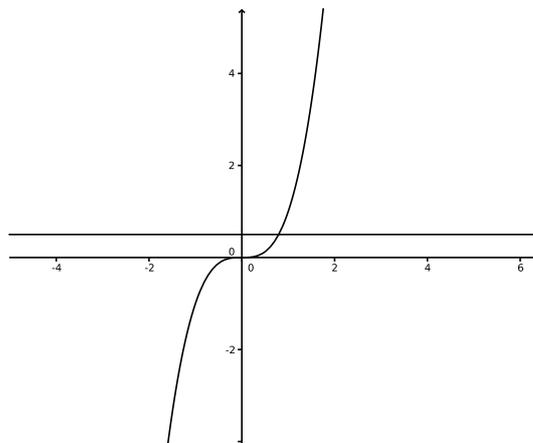


Figura 14: Interseção de $g(x) = x^3$ e $h(x) = \frac{1}{2}$

Analisando a Figura 14 é fácil ver que podemos tomar $x_0 = 0$ e $x_1 = 1$. Usando o processo iterativo do método da Secante temos. $f(x) = x^3 - \frac{1}{2}$, e $x_{k+1} = \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$.

Na tabela a seguir vamos calcular a raiz de $f(x)$.

Número de iterações	x_{k-1}	x_k	x_{k+1}	Erro
1	0	1	0,5	1
2	1	0,5	0,7143	0,3
3	0,5	0,7143	0,8355	0,1451
4	0,7143	0,8355	0,7894	0,0584
5	0,8355	0,7894	0,7932	0,0048

Portanto a raiz aproximada de $f(x)$ com precisão de 0,01 é $x_0 = 0,7932$.

Estudamos até aqui três métodos iterativos, que possuem como objetivo em comum o cálculo de raízes de funções reais. Cada um deles apresenta as suas vantagens e desvantagens; a escolha do melhor método a ser utilizado dependerá, assim, primeiramente da função que está sendo estudada. No próximo Capítulo esses três métodos serão comparados, com o intuito analisar as situações em que o uso de cada método é mais oportuno.

6 Comparação entre os Métodos

Nos capítulos anteriores foram apresentados três métodos iterativos cuja função é o cálculo de raízes aproximadas de funções reais. Cada método apresentado possui vantagens e desvantagens, nesse capítulo serão realizados alguns testes com o intuito de comparar os três métodos e analisar quais deles são mais vantajosos.

É importante ressaltar que a comparação entre os métodos leva em consideração diversos fatores como a garantia e a velocidade de convergência, o esforço computacional, o nível de complexidade dos cálculos exigidos entre outros. Dessa forma, então não basta apenas comparar a quantidade de iterações que cada método precisou para estimar a raiz de uma função com determinada precisão, a comparação entre os métodos exige muito mais que isso.

Neste trabalho os cálculos serão efetuados pelo *software* VCN- Visual Cálculo Numérico, desenvolvido por professores da área e que oferece mais de 100 opções de cálculo que podem ser utilizados, entre eles os cálculos dos métodos iterativos aqui estudados. Nele são inseridos os dados iniciais: função, precisão, pontos iniciais, critério de parada, derivada da função (no caso do método de Newton) e qual método a ser utilizado. Como dado final, o *software* apresenta o resultado dos cálculos necessários, o erro e o número de iterações. Dessa forma, não nos será possível avaliar o esforço computacional, uma vez que para isso seria necessário analisar a quantidade de operações realizadas a cada iteração, o nível de complexidade dessas operações, quais as decisões lógicas que foram tomadas, as avaliações que foram realizadas em relação à função, o número de iterações que foram necessárias etc.

Pensando no esforço computacional, pelo menos uma ideia é possível que tenhamos. Sabemos, por exemplo que o método da bissecção propõe um teste simples de garantia de convergência; é preciso apenas tomar um intervalo $[a, b]$ em que a função seja contínua e que se tenha $f(a) \cdot f(b) < 0$. Já os métodos de Newton e da Secante apresentam maiores restrições em relação à garantia de convergência, mas uma vez que satisfeitas essas restrições, a velocidade de convergência é bem maior que no método da Bissecção.

Em relação aos cálculos exigidos em cada método, o método da bissecção exige cálculos bem simples a cada iteração, a sua desvantagem está na sua ordem de convergência, ou seja, é um método lento, que necessita de muitas iterações para que se tenha uma aproximação de acordo com a precisão pré-estabelecida. Os cálculos exigidos nos métodos de Newton e da Secante são bem mais complexos, exigindo inclusive o

cálculo da derivada da função, que em algumas funções pode ser bem difícil de ser calculado, mas apesar da complexidade o número de iterações é bem menor que no método da bissecção.

Outro ponto relevante é o critério de parada, ou seja, até quando o programa deve executar o método. Como vimos, todos os métodos são desenvolvidos a fim de satisfazer pelo menos um dos critérios de parada, e dependendo do critério escolhido pode ser necessário mais ou menos iterações. Levando em consideração que o melhor método a ser escolhido é aquele que tem a garantia de convergência assegurada, os cálculos mais simples e a velocidade de convergência maior, podemos concluir que se a primeira derivada da função estudada for de fácil cálculo, o método de Newton é aquele que mais traz vantagens. Caso a primeira derivada da função seja muito complexa, o método indicado é o método da Secante, que tem a ordem de convergência menor que a ordem de convergência do método de Newton, mas não é tão lento quanto o método da bissecção. É importante ressaltar que o primeiro ponto a ser observado é a garantia de convergência do método.

Dessa forma, podemos concluir que a escolha do método vai depender muito do estudo da função. Analisar o comportamento da função na vizinhança de sua raiz, a complexidade do cálculo da derivada da função, a escolha do critério de parada, etc. A seguir vamos determinar a raiz de algumas funções através dos três métodos estudados.

Exemplo 14. *Vamos determinar uma das raízes de $f(x) = 5 \cos(x) - 3e^x$, com precisão de 10^{-4} .*

Para podermos determinar um intervalo que contenha uma das raízes, vamos esboçar o gráfico da função. Temos que, $f(x) = h(x) - g(x)$, onde $h(x) = 5 \cos(x)$, $g(x) = 3e^x$. Logo, $f(x) = 5 \cos(x) - 3e^x = 0 \Leftrightarrow h(x) = g(x)$.

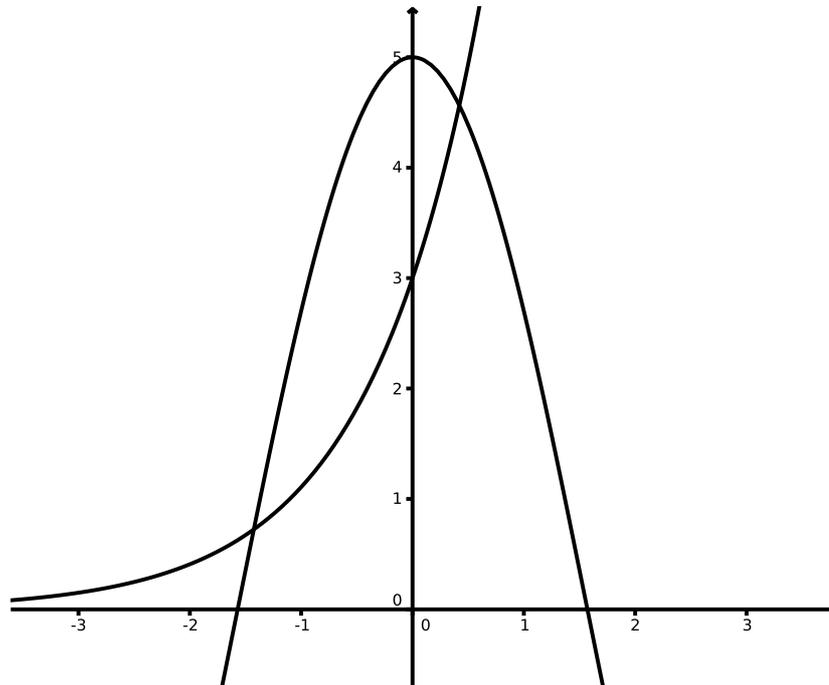


Figura 15: Interseção de $g(x) = 3e^x$ e $h(x) = 5 \cos(x)$

Vamos determinar, neste caso a raiz positiva de $f(x)$, que por sua vez, está situada no intervalo $[0, 1]$, como pode ser observado no gráfico acima.

a) Método da bissecção

k	a	Sinal de $f(a)$	b	Sinal de $f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	0	+	1	-	0,5	-0,558251	-
2	0	+	0,5	-	0,25	0,992486	1
3	0,25	+	0,5	-	0,375	0,287564	0,333333
4	0,375	+	0,5	-	0,4375	-0,117422	0,142857
5	0,375	+	0,4375	-	0,40625	0,089512	0,076923
6	0,40625	+	0,4375	-	0,421875	-0,012840	0,037037
7	0,40625	+	0,421875	-	0,414062	0,038614	0,018867

8	0,4140625	+	0,421875	-	0,417968	0,012957	0,009345
9	0,41796875	+	0,421875	-	0,419921	0,000076	0,004651

Foram necessárias 9 iterações, para obter $\bar{x} = 0,419921$.

b) Método de Newton

A primeira derivada de $f(x)$, é $f'(x) = -5\text{sen}(x) - 3e^x$.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	Erro relativo
1	0	2	-3	-
2	0,666667	-1,913766	-8,935051	1
3	0,452480	-0,219793	-6,902609	0,473361
4	0,420638	-0,004657	-6,610515	0,075699
5	0,419934	-0,000002	-6,604082	0,001678

Foram necessárias 5 iterações para obter $\bar{x} = 0,41993726$.

c) Método da Secante

k	a	$f(a)$	b	$f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	1	-5,453333	0	2	0,268336	0,897706	
2	0	2	0,268336	0,897706	0,486868	-0,462628	0,448853
3	0,268336	0,897706	0,486868	-0,462628	0,412549	0,048516	0,180147
4	0,486868	-0,462628	0,412549	0,048516	0,419603	0,002178	0,016811
5	0,412549	0,048516	0,419603	0,002178	0,419935	-0,000011	0,000789

Foram necessárias 5 iterações para obter $\bar{x} = 0,419935$.

Exemplo 15. Vamos determinar uma das raízes de $f(x) = x^4 - 8$, com precisão de 10^{-5} .

Esboçando o gráfico encontramos:

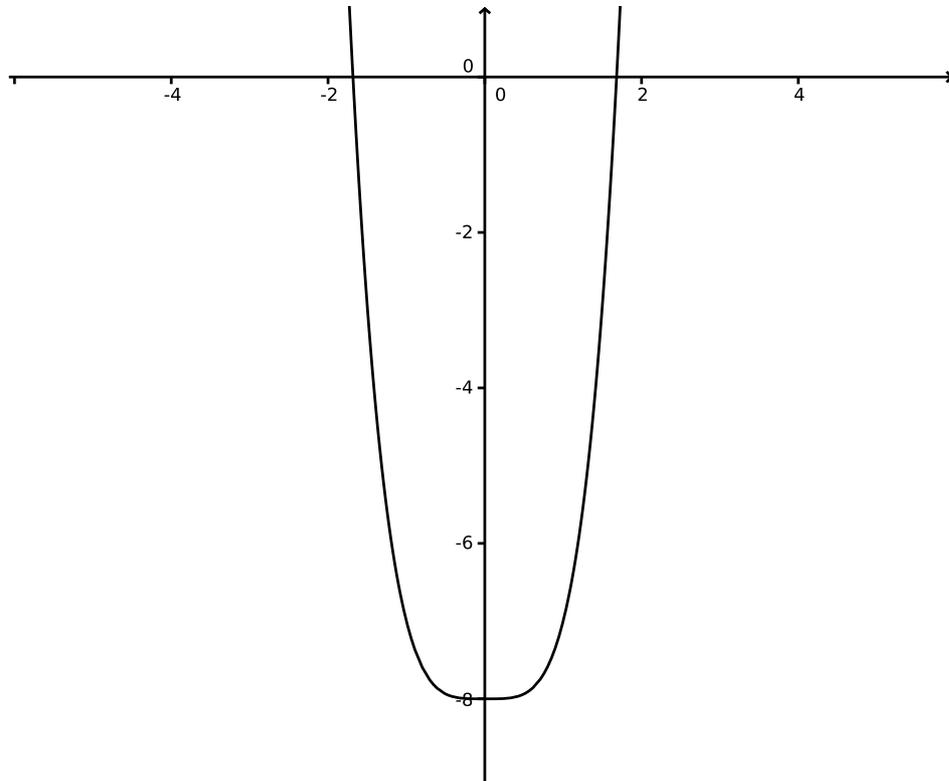


Figura 16: Gráfico de $f(x) = x^4 - 8$

Neste caso a função possui duas raízes, mas basta que encontremos uma, pois a outra raiz é simétrica à primeira. Consideremos, então, a raiz que pertence ao intervalo $[1, 2]$.

a) Método da Bissecção

k	a	Sinal de $f(a)$	b	Sinal de $f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	1	-	2	+	1,5	-2,9375	-
2	1,5	-	2	+	1,75	1,3789062	0,1428571
3	1,5	-	1,75	+	1,625	-1,0270996	0,0769230
4	1,625	-	1,75	+	1,6875	0,1091461	0,0370370

5	1,625	-	1,6875	+	1,65625	-0,4750509	0,0188679
6	1,65625	-	1,6875	+	1,671875	-0,1870469	0,0093457
7	1,671875	-	1,6875	+	1,6796875	-0,0399836	0,0046511
8	1,6796875	-	1,6875	+	1,6835937	0,0343217	0,0023201
9	1,6796875	-	1,6835937	+	1,6816406	-0,0028956	0,0011614
10	1,6816406	-	1,6835937	+	1,6826171	0,0156968	0,0005803
11	1,6816406	-	1,6826171	+	1,6821289	0,00639653	0,00029027
12	1,6816406	-	1,6821289	+	1,6818847	0,00174942	0,00014515
13	1,6816406	-	1,6818847	+	1,6817626	-0,0005733	0,00007258
14	1,6817626	-	1,6818847	+	1,6818237	$5,88 \cdot 10^{-4}$	$3,63 \cdot 10^{-5}$
15	1,6817626	-	1,6818237	+	1,6817932	$7,28 \cdot 10^{-6}$	$1,81 \cdot 10^{-5}$

Foram necessárias 15 iterações para obter $\bar{x} = 1,6817932$.

b) Método de Newton

A primeira derivada de $f(x)$ é $f'(x) = 4x^3$

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	Erro relativo
1	2	8	32	-
2	1,75	1,37890625	21,4375	0,142857143
3	1,6856778	0,074177881	19,1594803	0,038158037
4	1,6818062	0,00025516240	19,0277689	0,0023020499
5	1,6817928	0,00000000305	19,027313	0,0000079736

Foram necessárias 5 iterações para obter $\bar{x} = 1,6817928$.

c) Método da secante

k	a	$f(a)$	b	$f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	2	8	1	-7	1,466666	-3,372720	-
2	1	-7	1,466666	-3,37272	1,900583	5,048109	0,228307
3	1,900583	5,048109	1,466666	-3,37272	1,640459	-0,75794	0,158567
4	1,466666	-3,372720	1,640459	-0,75794	1,690836	0,173469	0,029794
5	1,640459	-0,75794	1,690836	0,173469	1,681454	-0,00644	0,005579
6	1,690836	0,173469	1,681454	-0,00644	1,681790	-0,00005	0,000199
7	1,681454	-0,00644	1,681790	-0,00005	1,681792	0,000000	0,000001

Foram necessárias 7 iterações para obter $\bar{x} = 1,681790$.

Como pudemos perceber nesses três exemplos, os métodos de Newton e da Secante são bastante vantajosos no quesito velocidade de convergência, porém, a cada iteração desses dois métodos o nível de complexidade dos cálculos que devem ser feitos é bem maior que no método da bissecção. Dessa forma, sempre que se for usar um método iterativo para estimar a aproximação da raiz de uma função, a primeira coisa a observar é a própria função, sua derivada e os cálculos que serão exigidos, a fim de se optar pelo método mais apropriado, de acordo com a conveniência.

É importante observar, também que o esboço do gráfico continua sendo essencial, seja por qualquer método, uma vez que determina um intervalo seguro que contém a raiz.

Com os exemplos dados, uma importante observação é que o critério de parada foi $|f(x_k)| < \varepsilon$ satisfeito em todos os casos, e o critério $\left| \frac{x_{n+1} - x_n}{x_{n+1}} \right| < \varepsilon$ em poucos casos, logo se esse último fosse o único critério de parada a ser satisfeito, os métodos necessitariam de mais iterações. Portanto, o critério de parada escolhido é de suma importância para analisar cada método.

No próximo capítulo a seguir vamos estudar algumas situações que permitem a aplicação dos métodos numéricos em diversas áreas.

7 Aplicações

Como vimos, os métodos numéricos são utilizados para estimar raízes de funções reais. Encontrar zeros dessas funções é algo que comumente é problema para diversas áreas das Ciências Exatas, como a Matemática, a Física, as Engenharias e a Astronomia. Nesse âmbito, os métodos iterativos são uma excelente forma de se resolver alguns desses problemas. Neste capítulo veremos algumas aplicações práticas dos métodos iterativos estudados.

Aplicação 1: Equação de Kepler. A equação abaixo, conhecida como Equação de Kepler, determina órbitas de satélites e é dada por:

$$M = x - E \operatorname{sen}(x)$$

Onde, M é a anomalia média, x é a anomalia excêntrica e e é a excentricidade orbital.

A equação relaciona anomalias, transformando anomalias excêntricas em médias. A sua importância está no fato de a equação permitir que se relacione movimentos dinâmicos (anomalias médias) de um bloco estelar e parâmetros geométricos (anomalias excêntricas e excentricidades orbitais).

Sabendo que $E = 0,2$ e $M = 0,5$, vamos obter a anomalia excêntrica usando o Método de Newton. Temos que: $f(x) = x - 0,2 \operatorname{sen}(x) - 0,5$, e $f'(x) = 1 - 0,2 \cos(x) = 0$.

Vamos esboçar o gráfico da função f , afim de melhor obter x_0 . Sabemos que $h(x) = x - 0,5$ e $g(x) = 0,2 \operatorname{sen}(x)$.

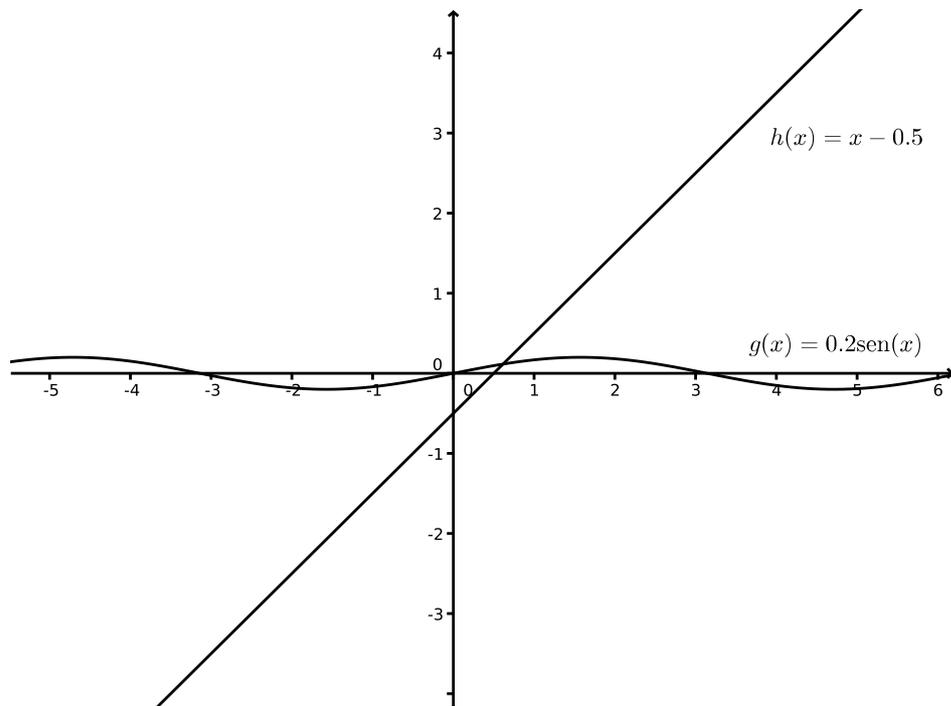


Figura 17: Interseção de $g(x) = 0,2\text{sen}(x)$ e $h(x) = x - 0,5$

Logo, podemos tomar $x_0 = 0$. Vamos calcular a raiz da equação de Kepler com precisão de 10^{-5} através do método de Newton.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	Erro relativo
1	0	-0,5	0,8	-
2	0,625	0,007980	0,837807	1
3	0,615474	0,000005	0,8367001	0,015477

Com apenas 3 iterações pudemos estimar a raiz da equação de Kepler:

$$\bar{x} = 0,615474 \text{ e } |f(x)| < \varepsilon = 0,000005.$$

Aplicação 2: O problema das vigas. Duas vigas de madeira se apóiam nas paredes de um galpão, conforme a figura abaixo. As vigas têm 30 e 20 metros e o ponto de intercessão das duas dista 8 metros do chão. Queremos determinar a largura desse galpão.

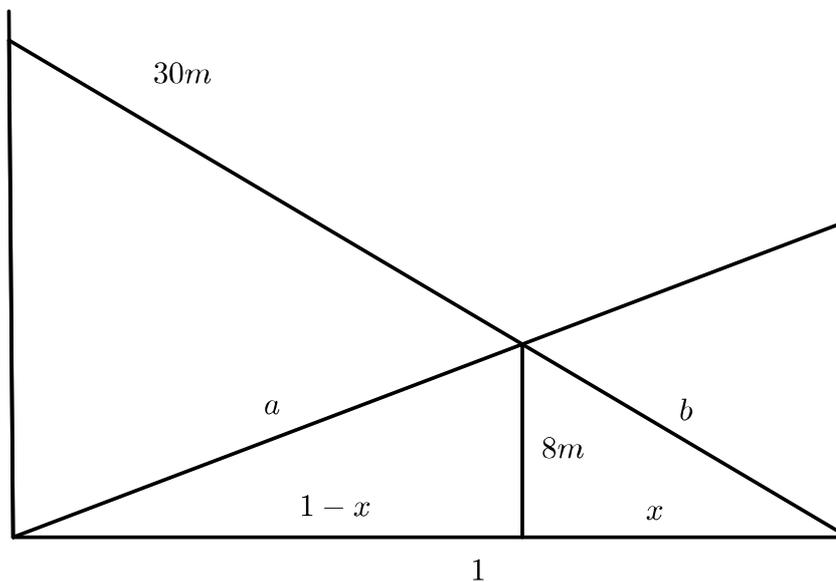


Figura 18: Esboço do problema das vigas

Pelo Teorema de Pitágoras e semelhança de triângulos, encontramos as equações:

$$a^2 = (l - x)^2 + 8^2$$

$$b^2 = x^2 + 8^2$$

$$\frac{l}{30} = \frac{x}{b}$$

$$\frac{l}{20} = \frac{l - x}{a}.$$

Fazendo as substituições adequadas encontramos a seguinte equação:

$$l^4 - \frac{16l^4}{\sqrt{900 - l^2}} + \frac{64l^4}{900 - l^2} + \frac{6400l^2}{\sqrt{900 - l^2}} - \frac{25600l^2}{900 - l^2} - 336l^2 = 0.$$

Esboçando o gráfico da função

$$f(x) = l^4 - \frac{16l^4}{\sqrt{900 - l^2}} + \frac{64l^4}{900 - l^2} + \frac{6400l^2}{\sqrt{900 - l^2}} - \frac{25600l^2}{900 - l^2} - 336l^2, \text{ obtemos}$$

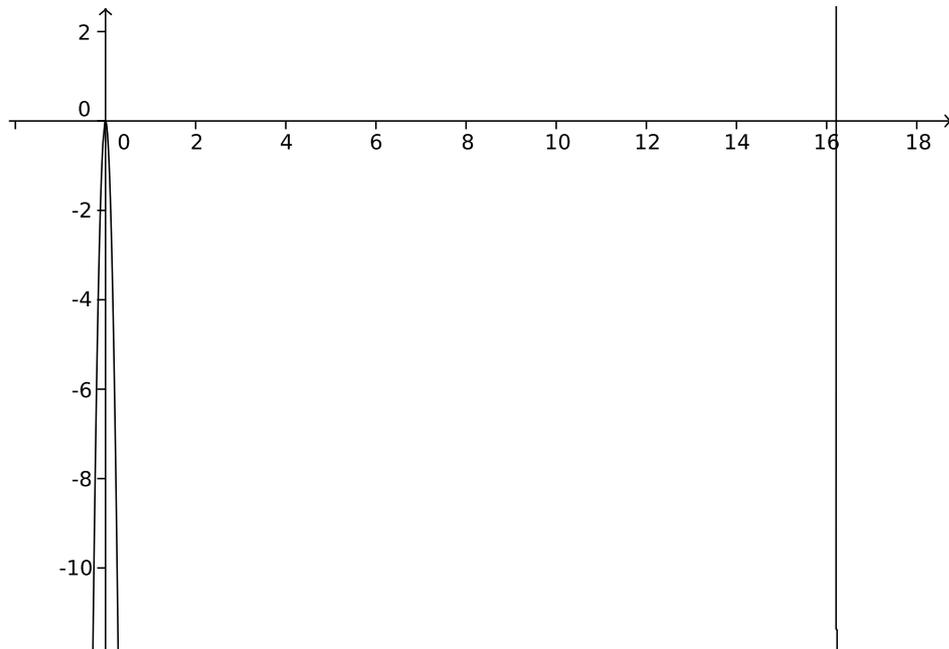


Figura 19: Gráfico de $f(l)$

Portanto, a raiz procurada está situada no intervalo $[16, 17]$. Neste caso, usaremos o método da secante, isso por que a função estudada não possui uma derivada de fácil cálculo, para se usar o método de Newton, e pelo método da secante ter ordem de convergência mais que o da bissecção. Vamos utilizar aqui precisão de 10^{-2} . Temos assim:

k	a	$f(a)$	b	$f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	17	3821,28	16	901,18	16,19	92,87	-
2	16	901,18	16,19	92,87	16,21	2,75	0,001352

Vemos assim, que a largura do galpão é de 16,21 metros.

Aplicação 3: Cálculo de pH . O potencial hidrogeniônico (pH) de soluções diluídas de ácidos fracos pode ser obtido através da fórmula

$$[H^+]^3 + K_a[H^+]^2 - (K_aC_a + K_w)[H^+] - K_wK_a = 0,$$

onde:

$$pH = -\log[H^+]$$

K_a = constante de dissociação do ácido

C_a = concentração molar do ácido

K_w = produto iônico da água.

Alguns autores afirmam que quando o ácido é muito fraco pode-se desconsiderar o valor de $\frac{K_w}{[H^+]}$, por ser muito pequeno, logo a fórmula acima se torna:

$$[H^+]^2 + K_a[H^+] - K_aC_a = 0.$$

Dessa forma, vamos determinar o pH de um ácido fraco, para o qual $K_a = 2,0 \cdot 10^{-4} \text{ mol/l}$ e $C_a = 1,0 \cdot 10^{-2} \text{ mol/l}$.

Queremos determinar a raiz da equação:

$$f(x) = x^2 + (2,0 \cdot 10^{-4})x - 2,0 \cdot 10^{-6}.$$

Com $pH = -\log(x)$. Na Figura 20, esboçamos o gráfico de $f(x)$:

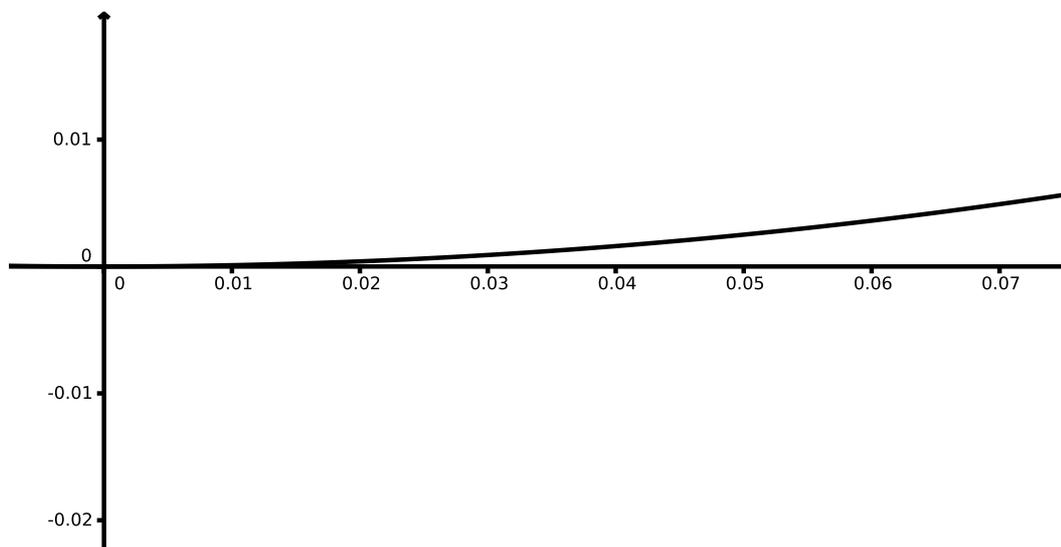


Figura 20: Gráfico de $f(x) = x^2 + (2,0 \cdot 10^{-4})x - 2,0 \cdot 10^{-6}$

Como podemos observar o valor de x encontra-se no intervalo $[0; 0,01]$. Vamos determinar através do método da bissecção, qual o valor de x com precisão de 10^{-7} .

k	a	Sinal de $f(a)$	b	Sinal de $f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	0	–	0,001	+	0,005	$2,4 \cdot 10^{-5}$	–
2	0	–	0,005	+	0,0025	$4,75 \cdot 10^{-6}$	1
3	0	–	0,0025	+	0,00125	$-1,86 \cdot 10^{-7}$	1
4	0,00125	–	0,0025	+	0,0018	$1,89 \cdot 10^{-6}$	0,33333
5	0,00125	–	0,0018	+	0,0015	$7,54 \cdot 10^{-7}$	0,2
6	0,00125	–	0,0015	+	0,0014	$2,59 \cdot 10^{-7}$	0,111111
7	0,00125	–	0,0014	+	0,0013	$2,95 \cdot 10^{-8}$	0,0588235

Encontramos então $x = 0,0013$. Como $pH = -\log(x)$, concluímos que o pH do ácido procurado vale 2,88.

Aplicação 4: Matemática financeira. Uma loja de eletrodomésticos oferece dois planos para a venda de uma televisão, cujo preço à vista é R\$ 1.620,00. São eles:

Plano I: R\$ 220,00 à vista mais 9 prestações mensais de R\$ 265,25.

Plano II: R\$ 220,00 à vista e mais 12 prestações mensais de R\$ 215,22.

Qual dos dois planos é mais vantajoso para o consumidor? Para escolhermos o plano mais vantajoso precisamos calcular em qual plano está inserido a menor taxa de juros. Para o cálculo de financiamentos utiliza-se a fórmula abaixo:

$$V_f = \frac{1 - (1 + j)^{-n}}{j} p, \quad (2)$$

onde V_f é o valor financiado, j é a taxa de juros, n é o número de prestações e p é o valor das prestações. Podemos fazer $k = \frac{V_f}{p}$ e $x = 1 + j$, e vamos reescrever a Equação (2) da forma:

$$f(x) = kx^{n+1} - (1 + k)x^n + 1 = 0.$$

Dessa forma, para saber qual dos planos é mais vantajoso precisamos en-

contrar os zeros das funções

$$f_I(x) = 5,278x^{10} - 6,278x^9 + 1$$

e

$$f_{II}(x) = 6,505x^{13} - 7,505x^{12} + 1.$$

na Figura 21, vamos esboçar o gráfico das duas funções.

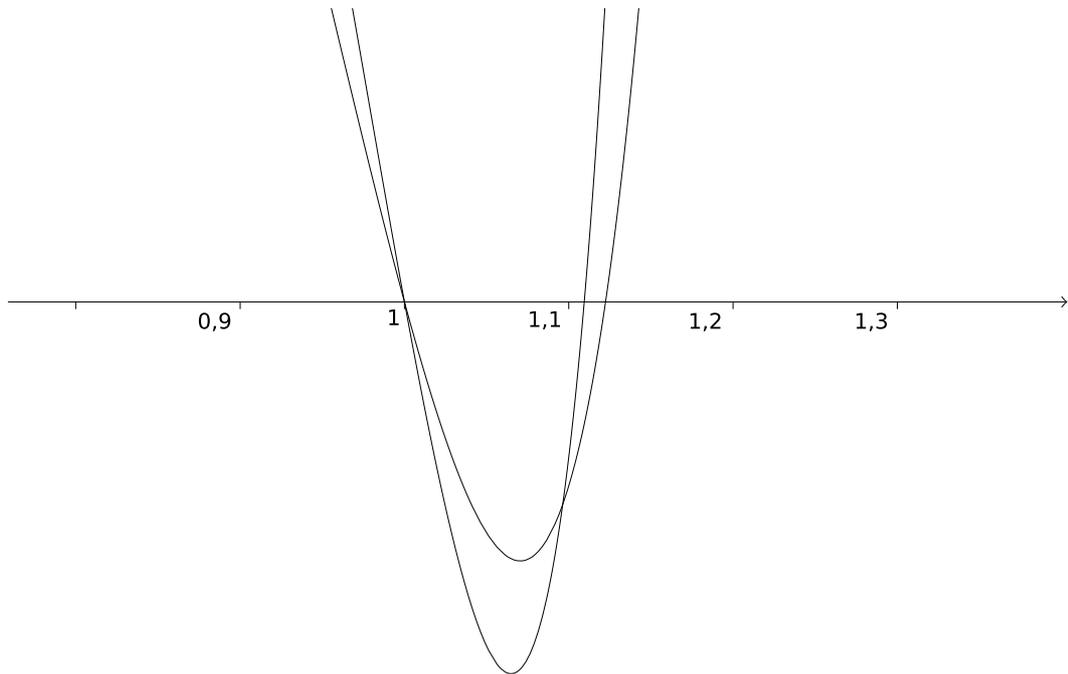


Figura 21: Interseção de $f_I(x)$ e $f_{II}(x)$

É fácil ver que $x = 1$ é raiz de ambas as funções, e ainda é possível verificar que a raiz de $f_I(x)$ é maior que a raiz de $f_{II}(x)$, logo a taxa de juros de do plano I é maior que a taxa de juros do plano II, tornando o segundo plano mais vantajoso para o consumidor. Mas vamos calcular qual o valor da taxa de juros de cada uma delas, utilizando o método de Newton com precisão de 10^{-3} . Para o Plano I, temos a seguinte situação:

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	Erro relativo
1	1, 1	-0, 1134	3, 3354	-
2	1, 1340	0, 0922	9, 1637	0, 02999
3	1, 1239	0, 0102	7, 1806	0, 00895
4	1, 1225	0, 0002	6, 9200	0, 00126

Para o Plano II temos:

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	Erro relativo
1	1, 1	-0, 0969	8, 4495	-
2	1, 1115	0, 0229	12, 5711	0, 01032
3	1, 1096	0, 0006	11, 8633	0, 00164

Com a precisão estabelecida pudemos encontrar para o Plano I, $x = 1, 1225$ o que nos dá $j = 0, 1225$. Já para o Plano II, obtemos $x = 1, 1096$ o que nos dá $j = 0, 1096$. O que comprovou que a análise do gráfico já nos proporcionava: que o plano *II* é o plano mais vantajoso ao consumidor por possuir a menor taxa de juros.

Aplicação 5: Cálculo da concentração de oxigênio. Em Engenharia Ambiental para se calcular a concentração de oxigênio em um rio usa-se a equação:

$$f(x) = 10 - 20(e^{-0,2x} - e^{-0,75x}),$$

Onde x é a distância a partir do local de descarga de poluentes. Vamos calcular qual a distância do local de descarga de poluentes para o qual o nível de oxigênio é o valor 5. Vamos utilizar a precisão de 10^{-4} . Precisamos então resolver a equação:

$$5 - 20(e^{-0,2x} - e^{-0,75x}) = 0$$

Antes de iniciar os cálculos, precisamos esboçar o gráfico de $f(x) = 5 - 20(e^{-0,2x} - e^{-0,75x})$.

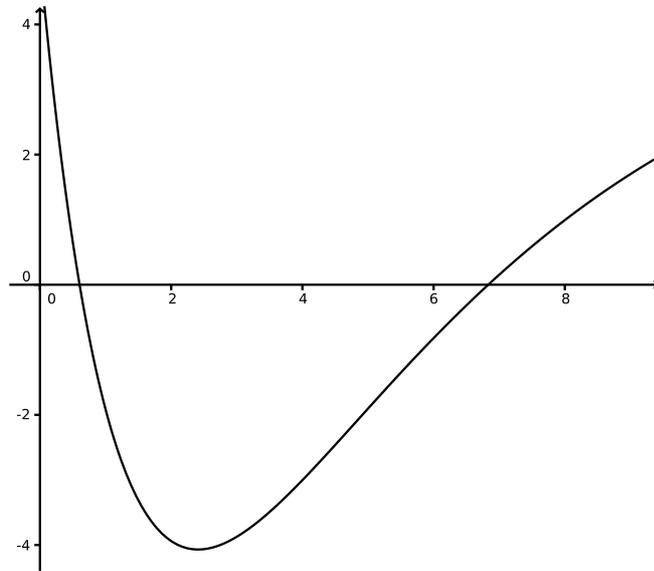


Figura 22: Gráfico de $f(x) = 5 - 20(e^{-0,2x} - e^{-0,75x})$

Observamos que $f(x)$ possui duas raízes. Vamos calcular a raiz que se encontra no intervalo $[0, 1]$, e para isso vamos utilizar o método da Bissecção.

k	a	Sinal de $f(a)$	b	Sinal de $f(b)$	x_k	$f(x_k)$	Erro relativo
1	0	+	1	-	0,5	0,649037	
2	0,5	+	1	-	0,75	-0,818503	0,333333
3	0,5	+	0,75	-	0,625	-0,134257	0,2
4	0,5	+	0,625	-	0,5625	0,244373	0,111111
5	0,5625	+	0,625	-	0,59375	0,051885	0,052631
6	0,59375	+	0,625	-	0,609375	-0,041969	0,025641
7	0,59375	+	0,609375	-	0,601562	0,004761	0,012987
8	0,601562	+	0,609375	-	0,605468	-0,018653	0,006451
9	0,601562	+	0,605468	-	0,603515	-0,006958	0,003236
10	0,601562	+	0,603515	-	0,602539	-0,001101	0,001620

11	0,601562	+	0,602539	-	0,602050	0,001828	0,000811
12	0,601562	+	0,602539	-	0,602050	0,001828	0,000811
13	0,601562	+	0,602539	-	0,602050	0,001828	0,000811
14	0,601562	+	0,602539	-	0,602050	0,001828	0,000811

Portanto, para se ter a concentração de oxigênio igual a 5 é necessário que a distância de despejo de poluentes seja de aproximadamente 0,602355957.

Aplicação 6: Pressão em um cabo metálico. A pressão máxima exercida em um cabo metálico é dada pela equação:

$$f(x) = 25x^2 + \ln(x),$$

onde x é o diâmetro do cabo dado em mm. Vamos determinar qual o tamanho do diâmetro necessário de um cabo para suportar um pressão de $1,5 \cdot 10^{-4} kg/mm^2$. Precisamos então determinar a raiz da função:

$$25x^2 + \ln(x) = 1,5 \cdot 10^{-4}$$

Através do esboço do gráfico vamos determinar um intervalo seguro que contenha a raiz

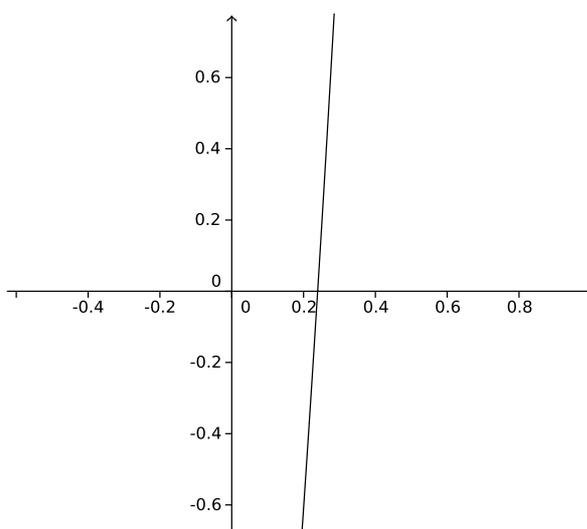


Figura 23: Gráfico de $f(x) = 25x^2 + \ln(x) - 1,5 \cdot 10^{-4}$

Podemos tomar, então o intervalo $[0, 2; 0, 4]$. Vamos calcular a raiz da função com precisão de 10^{-5} através do método de Newton.

k	x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$	Erro relativo
1	0, 2	-0, 609588	15	-
2	0, 240639	0, 023074	16, 187559	0, 168880
3	0, 239214	$3, 32 \cdot 10^{-5}$	16, 141050	0, 005959
4	0, 239211	$6, 87 \cdot 10^{-11}$	16, 1409833	$8, 59 \cdot 10^{-6}$

Assim, o diâmetro procurado é de 0, 239212 *mm*.

Neste capítulo vimos uma série de exemplos em que os métodos iterativos podem ser utilizados. Em um contexto geral, sempre que nos depararmos com situações em que é necessário estimar-se a raiz de uma função real, é possível que se use os métodos numéricos. E essas são algumas das inúmeras situações que estão no cotidiano de diversas áreas das ciências exatas.

8 Método de Monte Carlo

O Método de Monte Carlo (MMC) é um método numérico que se utiliza de amostragem aleatória para a resolução de problemas. É utilizado em diversas áreas como a Física, a Economia, a Geologia, a Biologia, a Matemática etc. Atualmente, ele pode ser descrito como um método de simulação estatística que desenvolve simulações através de números aleatórios. O método é baseado em simulações estocásticas, ou seja, têm origem em processos oriundos de eventos aleatórios. A princípio devemos supor que tenhamos um gerador de números aleatórios equiprováveis. O que chamamos aqui de número aleatório deve ser entendido como o valor de uma variável aleatória que está distribuída uniformemente no intervalo $(0, 1)$.

O método foi desenvolvido por Stanislaw Ulam em 1946, mas só foi formalizado em 1949, no artigo “Monte Carlo Method” publicado por ele e por John Von Neumann. O método recebeu esse nome por seus estudos estarem intimamente relacionados com a aleatoriedade e com as repetidas atividades que acontecia em um cassino em Monte Carlo.

Para se entender a ideia básica do método vamos supor que queiramos calcular o valor da área da figura A, que está contida dentro de um quadrado de lado unitário, conforme a Figura 24. Suponhamos, ainda, que seja possível distribuir uniformemente pontos dentro desse quadrado. Seja N o número de pontos dentro do quadrado e N_1 o número de pontos dentro da figura A. É intuitivo que, para se estabelecer uma relação entre a área da figura A e o número de pontos distribuídos, basta fazer $\frac{N_1}{N}$. É fácil ver que quanto maior a quantidade de pontos distribuídos, melhor a aproximação do valor da área procurada.

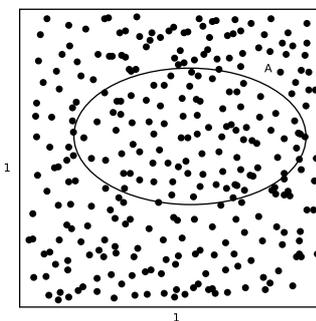


Figura 24: Ilustração do Método de Monte Carlo para cálculo de áreas

O exemplo dado nos permite caracterizar o MMC como uma técnica simples, mas é importante ressaltar que para que se tenha o sucesso do método é necessário que tenhamos uma forma confiável de se obter números aleatórios e que o método possa ser utilizado repetidas vezes, a fim de minimizar o erro da estimativa.

Determinar áreas conforme o exemplo acima é mais prático, mas se tratando do MMC, o cálculo de áreas está relacionado com o cálculo de integrais. Uma importante aplicação do método é a transformação de equações diferenciais em integrais. Veremos então como podemos utilizar o método para a resolução de integrais.

Vamos calcular a integral de uma função real $f(x)$ no intervalo $[a, b]$, ou seja, calcular a área definida pela curva, o eixo x e as retas $x = a$ e $x = b$, construindo as somas de Riemann.

A integral de f pode ser definida como:

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=1}^k f(x_i)\Delta x.$$

Ou seja, o intervalo $[a, b]$ pode ser dividido em intervalos menores e iguais com extremos x_i para cada novo intervalo Δx , para os quais calculamos $f(x_i)$. A partir disso podemos calcular a área do retângulo de base Δx e altura $f(x_i)$. A soma das áreas de todos os retângulos corresponde a uma aproximação da área sob a curva. É fácil ver que quanto menor o intervalo dos x_i , melhor a aproximação do valor da área procurada.

Para obtermos a variação Δx basta subdividirmos o intervalo $[a, b]$ em k intervalos iguais, basta calcularmos $\frac{b-a}{k}$, teremos então:

$$I = \frac{b-a}{k} \sum_{i=1}^k f(x_i) = (b-a) \frac{\sum_{i=1}^k f(x_i)}{k} = (b-a)E(f(x_i)),$$

onde $E(f(x_i))$ é a média dos valores de $f(x_i)$. Assim, para calcularmos a integral da função $f(x)$ precisamos estimar a média dos valores de $f(x_i)$. A equação foi encontrada supondo que os pontos x_i são constantes e igualmente distribuídos ao longo do intervalo $[a, b]$, dessa forma, podemos desconsiderar a necessidade de se obter intervalos constantes, considerando, então uma amostra de números aleatórios de forma que estejam igualmente distribuídos no intervalo. Concluimos assim, a possibilidade de usarmos o método de Monte Carlo para estimar o valor da integral I .

Um impasse maior ao se utilizar o método de Monte Carlo é a necessidade de se utilizar meios computacionais para os cálculos exigidos. Pode-se dizer que o

método é praticamente inutilizável se a técnica empregada for exclusivamente manual. A exigência de uso de meios computacionais é iniciada pela necessidade de se obter números aleatórios.

São muitas as técnicas que podem ser utilizadas para a obtenção de números aleatórios. No caso de uso de computadores, podemos chamar de técnica para geração de números pseudo-aleatórios, isso por que os números gerados não são totalmente aleatórios; cada número aleatório gerado depende de uma iteração anterior, que são obtidos através de relações matemáticas recursivas que vão determinando os números pseudo-aleatórios.

Uma técnica bastante usada para gerar números aleatórios é o método congruencial. Este consiste em gerarmos números aleatórios através de um número inicial x_0 a partir da relação

$$x_{i+1} = (ax_i + c) \text{ mod } m, \quad (3)$$

onde, a , x_0 , c e m são inteiros não negativos e $0 \leq i \leq m - 1$. Chamamos de x_0 somente, a de multiplicador, c de incremento e m de módulo. Se tivermos $c \neq 0$, o método é chamado de congruencial misto, se $c = 0$, o método é chamado de congruencial multiplicativo.

É fácil perceber que a fórmula do método congruencial só permite um número máximo de geração de m números aleatórios distintos, mas não significa que sempre serão gerados apenas números distintos. O gerador pode apresentar um ciclo ou período, ou seja, a partir de um certo número, os números gerados passam a se repetir; por esse motivo, ao usarmos o método precisamos tomar a e m de forma que se houver ciclos, estes sejam grandes. Analisando o método do ponto de vista prático, o número m é limitado pelo maior inteiro que pode ser representado pelo computador, então podemos tomar m pela quantidade do número total de bits das palavras que o computador que está sendo usado possui. Assim, podemos tomar $m = 2^{32}$. Para a escolha do número a , de modo que o ciclo de geração de números aleatórios seja grande, podemos tomar uma potência grande de um número primo, por exemplo, $a = 7^6$. Encontrando todos os x_i possíveis, os números pseudo-aleatórios são da forma u_i , tais que:

$$u_i = \frac{x_i}{m}, 0 \leq i \leq m - 1$$

Exemplo 16. *Vamos gerar, através do método congruencial multiplicativo, números pseudoaleatórios em que a semente é $x_0 = 17$, $a = 7$ e $m = 100$.*

Utilizando a recorrência (3), obtemos a seguinte sequência.

$$x_0 = 17; x_1 = 19; x_2 = 33; x_3 = 31; x_4 = 17 \dots$$

Note que, a partir de x_4 os números passam a se repetir, formando um ciclo de tamanho 4. Como,

$$u_i = \frac{x_i}{m} = \frac{x_i}{100},$$

segue que, os números aleatórios procurados são:

$$u_0 = 0,17; u_1 = 0,19; u_2 = 0,33; u_3 = 0,31; u_4 = 0,17 \dots$$

Outra forma de gerar números aleatórios é através de planilhas eletrônicas como o Excel. Através da função *aleatório()* a planilha fornece números aleatórios distribuídos uniformemente entre 0 e 1. Os números são calculados a cada vez que a planilha é solicitada. Pela maior simplicidade do uso do Excel, usaremos a planilha para gerar números aleatórios e realizar os cálculos necessários para obtermos os resultados aqui apresentados.

Exemplo 17. *Vamos calcular a integral: $\int_0^1 x^2 dx$.*

Pelo método convencional, a resolução dessa integral é:

$$\int_0^1 x^2 dx = \frac{1^3}{3} - \frac{0^3}{3} = 0,3333$$

Agora vamos resolver pelo Método de Monte Carlo:

$$\int_0^1 x^2 dx = (1 - 0) \frac{\sum_{i=1}^k f(x_i)}{k}$$

Vamos aproximar essa integral utilizando 100 números aleatórios distribuídos uniformemente no intervalo $(0, 1)$. Devemos seguir os passos:

1. Gerar $x_1, x_2, x_3, \dots, x_{100}$ distribuídos uniformemente no intervalo $(0, 1)$;
2. Calcular $f(x_1), f(x_2), f(x_3), \dots, f(x_{100})$;
3. Calcular a média da amostra gerada, ou seja $\frac{\sum_{i=1}^{100} f(x_i)}{100}$;
4. Multiplicamos o resultado da etapa 3 por $(1 - 0)$.

Utilizando o Excel para calcularmos o valor da integral, encontramos valores próximos de 0,3333, mas percebemos que ao recalcularmos o programa os valores podem variar bastante. Com algumas tentativas, podemos perceber que a maioria dos valores oscila entre 0,27 e 0,38 (alguns valores passam desses limites, mas estão em minoria). Essa discrepância dos valores se dá por vários motivos, mas o principal deles é pelo pequeno valor de números aleatórios que usamos para aproximar a integral. Para mostrar esse valor, recalcular a integral utilizando mais números aleatórios, vamos utilizar 1.000 e 10.000 números aleatórios para calcularmos a integral acima. Ao calcularmos a integral utilizando 1.000 números aleatórios encontramos valores mais próximos ainda de 0,3333, mas dessa vez ao recalcularmos várias vezes os números aleatórios e conseqüentemente as operações que devem ser realizadas, a maioria dos valores encontrados oscilam entre 0,31 e 0,35.

Repetindo o procedimento, mas com 10.000 números aleatórios. Recalculando por algumas vezes o programa encontramos valores que variam, em sua maioria entre 0,32 e 0,34.

Gerar números aleatórios e calcular as etapas acima mencionadas é um método bastante simples, utilizarmos de mais números aleatórios não dificulta em nada os cálculos que serão realizados. Fizemos o mesmo procedimento nos três casos, com 100, 1.000 e 10.000 números aleatórios, em todos os três o encontramos um valor aproximado para a integral proposta, mas como já tínhamos dito quanto mais números aleatórios usarmos, melhor teremos a aproximação. O nível de dificuldade em gerar 10 ou 10.000 números aleatórios e realizar os cálculos necessários é o mesmo, uma vez que quem faz tudo é a planilha eletrônica. Quanto mais números usarmos, melhor será a aproximação da integral, já tínhamos dito isso na teoria, mas vimos agora como funciona na prática.

Podemos aferir, então, que o MMC é bastante eficiente, e sua eficiência aumenta na mesma proporção em que aumentamos a quantidade de números aleatórios utilizados.

Exemplo 18. *Vamos calcular a integral $\int_0^1 e^{-\frac{x^2}{2}} dx$ pelo Método de Monte Carlo.*

Vamos calcular o valor da integral utilizando 1.000 números aleatórios distribuídos uniformemente no intervalo $(0, 1)$. Para isso devemos seguir os passos:

1. Gerar $x_1, x_2, x_3, \dots, x_{1000}$ distribuídos uniformemente no intervalo $(0, 1)$;
2. Calcular $f(x_1), f(x_2), f(x_3), \dots, f(x_{1000})$, onde $f(x_i) = e^{-\frac{x_i^2}{2}}$;

3. Calcular a média da amostra gerada, ou seja $\frac{\sum_{i=1}^{1000} f(x_i)}{1000}$;
4. Multiplicamos o resultado da etapa 3 por $(1 - 0)$.

Usando o Excel para realizar as etapas acima descritas encontramos valores que variam entre 0,84 e 0,87 (variações apresentadas sempre que o programa é recalculado). De fato, a estimativa do valor da integral está correta e matematicamente aceitável, como vamos ver a seguir.

De acordo com [4] a variável aleatória z , tem distribuição normal padrão se sua função de densidade é dada por $\phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{z^2}{2}}$ para todo z real. Desse modo, para encontrarmos o valor da integral de $f(x)$ podemos utilizar a tabela de distribuição de probabilidade (também trabalhada pela autora), calcularmos $P(0 \leq z \leq 1)$ e multiplicarmos o valor encontrado por $\sqrt{2\pi}$.

Conforme explicado acima, o resultado encontrado é 0,8555, o que mostra a eficácia do Método de Monte Carlo, que estimou um valor bem próximo do real.

Diante do exemplo anterior, vimos que o MMC é bastante eficiente, e que pode ser utilizado também no cálculo de integrais mais complexas. Porém, foi fácil perceber que o método é um tanto quanto lento, ou seja, necessita de uma quantidade muito grande de pontos para que sua convergência seja eficaz. A questão é: seria possível acelerar a convergência do método? No exemplo acima usamos variáveis que estavam igualmente distribuídas no intervalo $(0, 1)$, mas e se pudéssemos “escolher” os números a serem utilizados de forma que contribuam de forma mais efetiva para o cálculo da integral procurada? Essa forma de “escolher” números que facilitem o cálculo da integral é chamada de amostragem por preferência, e seu objetivo é acelerar a convergência do método de Monte Carlo. Veremos adiante como essa escolha pode ser feita.

Queremos calcular $I = \int_a^b f(x)dx$ e, para isso, precisamos encontrar uma função densidade $p(x)$ tal que $\int_a^b p(x)dx = 1$. Podemos reescrever I da seguinte forma:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}p(x)dx = \int_a^b \frac{f(x)}{p(x)}dy,$$

onde $p(x)dx = dy \Rightarrow y(x) = \int p(x)dx$.

Aparentemente as integrais são iguais, mas se analisarmos melhor obteremos conclusões diferentes; o resultado será o mesmo, mas encontrando uma função

de densidade, que atenda a alguns requisitos, é possível fazer com que a convergência do método seja mais rápida. O objetivo de se encontrar uma função densidade de probabilidade $p(x)$ é mapear uma região de interesse. Enquanto no primeiro exemplo usamos números aleatórios que estavam uniformemente distribuídos no intervalo, a função densidade nos permite escolher uma região em que os pontos sejam mais favoráveis à resolução da integral. Primeiramente $p(x)$ deve ser escolhida de modo a se comportar de acordo com a função $f(x)$; deve ser tão próxima de $f(x)$ o quanto se queira, de modo que o integrando se aproxime de uma constante. Como dissemos acima, ela deve ser normalizada, ou seja, $\int_a^b p(x)dx = 1$, isso para que a função densidade tenha probabilidade finita no intervalo de que se tem interesse, deve ser sempre positiva e que seja fácil de ser calculada.

Exemplo 19. Vamos resolver a integral $I = \int_0^1 e^x dx$. Calculando a integral pelo método convencional encontramos:

$$I = \int_0^1 e^x = e^1 - e^0 \cong 1,718281828$$

Agora vamos calcular a integral via o MMC, utilizando, neste caso, a amostragem por preferência. Para acelerarmos a convergência do Método de Monte Carlo precisamos tomar uma função densidade $p(x)$ que satisfaça as restrições exigidas. Uma função semelhante de $f(x) = e^x$ é sua própria expansão em série de Taylor em torno de 0:

$$p(x) = 1 + x.$$

Temos então:

$$I = \int_0^1 e^x dx = \int_0^1 \frac{e^x}{(1+x)}(1+x)dx = \int_0^1 \frac{e^x}{(1+x)}dy$$

$$\text{Com } dy = (1+x)dx \Rightarrow y = \int_0^x (1+x')dx' = x + \frac{x^2}{2}$$

Como $y = x + \frac{x^2}{2}$, temos:

$$x^2 + 2x - 2y = 0 \Rightarrow x = -1 \pm \sqrt{1+2y}$$

Se $x = 0 \Rightarrow y = 0$

Se $x = 1 \Rightarrow y = \frac{3}{2}$

Temos então $0 \leq y \leq \frac{3}{2}$, para isso devemos considerar apenas o sinal positivo, logo obtemos:

$$I = \int_0^{\frac{3}{2}} \frac{e^{-1+\sqrt{1+2y}}}{\sqrt{1+2y}} dy$$

Devemos então gerar números aleatórios no intervalo $\left(0, \frac{3}{2}\right)$ e calcularmos a integral acima, conforme as instruções do Exemplo 19; neste caso vamos gerar 1.000 números aleatórios.

1. Gerar $x_1, x_2, x_3, \dots, x_{1000}$ distribuídos uniformemente no intervalo $\left(0, \frac{3}{2}\right)$;
2. Calcular $f(x_1), f(x_2), f(x_3), \dots, f(x_{1000})$;
3. Calcular a média da amostra gerada, ou seja $\frac{\sum_{i=1}^{1000} f(x_i)}{1000}$;
4. Multiplicamos o resultado da etapa 3 por $\left(\frac{3}{2} - 0\right)$.

Desenvolvendo o método conforme as etapas acima, encontramos valores entre 1,70 e 1,73. Vemos assim, que o erro encontrado é bem menor do que do exemplo anterior, esse fato se deve à escolha de uma região que mais favorecesse o cálculo da integral em questão. Com esse exemplo constatamos, mais uma vez, a eficiência do método de Monte Carlo no cálculo de integrais.

Exemplo 20. *Vamos estimar o valor de π . Como já sabemos, o valor de π , com 10 casas decimais é:*

$$\pi = 3,1415926536.$$

Para calcularmos o valor de π utilizando o método de Monte Carlo, vamos analisar a Figura 25:

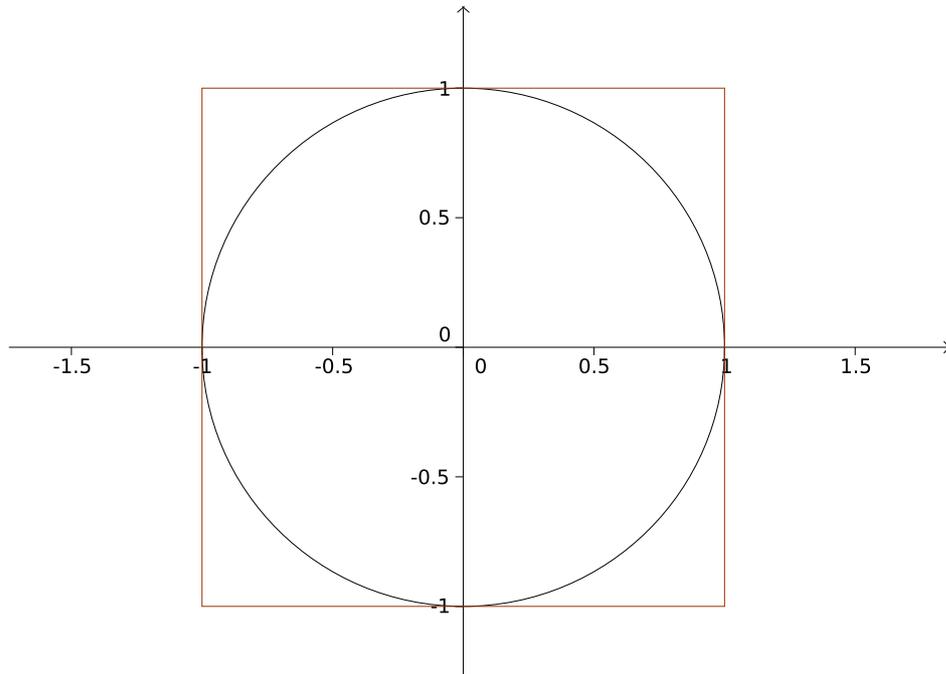


Figura 25: Circunferência unitária inscrita em um quadrado

Temos um círculo com 1 unidade de raio centrado na origem e inscrito em um quadrado de lado 2 unidades. Para nossos estudos vamos considerar apenas o primeiro quadrante. Para calcularmos o valor de π , podemos utilizar a forma mais simples do Método de Monte Carlo. A área total do círculo nós já sabemos:

$$A = \pi r^2 \Rightarrow A = \pi.$$

Dessa forma, a área abaixo da curva definida pela circunferência unitária e os eixos x e y no primeiro quadrante é dada por $\frac{\pi}{4}$.

No primeiro quadrante temos uma curva dentro de um quadrado unitário. Vamos supor que tenhamos um dardo para atirmos na figura do primeiro quadrante. A área definida acima será dada então pela razão entre a quantidade de dardos acertados abaixo da curva (N_0) e a quantidade de dados acertados em todo o quadrado unitário (N_T).

Temos então:

$$\frac{\pi}{4} = \frac{N_0}{N_T} \Rightarrow \pi = 4 \frac{N_0}{N_T}$$

Faz-se necessário cumprir as seguintes etapas:

- i) Geramos números aleatórios no intervalo $(0,1)$ que correspondam à variável x ;

- ii) Geramos números aleatórios no intervalo $(0,1)$ que correspondam à variável y . Teremos assim o par ordenado (x, y) que corresponde a localização de cada dardo lançado);
- iii) Calculados $\sqrt{x^2 + y^2}$, se esse valor for maior ou igual a 1, então o par ordenado e conseqüentemente o dardo estará dentro da curva à qual procuramos a área, caso contrário o dardo está fora da curva, mas dentro do quadrado unitário;
- iv) Somamos o número encontrados dentro da curva, dividimos pelo número total de pontos e multiplicamos por 4. Esse será o valor de procurado.

Com todo o algoritmo mostrado fica claro que a precisão do resultado vai depender da quantidade de pontos utilizados. Neste caso vamos utilizar 1000 números aleatórios.

Os valores encontrados oscilam em um intervalo de 3 a 3,4, que vão sendo alterados a cada vez que o programa é recalculado. Matematicamente o erro do intervalo é totalmente aceitável. Estamos utilizando um método embasado em probabilidades, a partir disso, encontrar resultados com menos de 5% de erro é bastante satisfatório. Vemos, assim, a eficiência do método ao estimarmos o valor de π .

Com todos os exemplos apresentados, pudemos perceber a eficiência do Método de Monte Carlo. Em todos os exemplos os números aleatórios foram gerados pelo Excel, assim como todos os cálculos necessários. Utilizar o Excel para esses exemplos é consideravelmente simples, não necessitando de muito conhecimento em programas e softwares; estes últimos existem e são de bastante eficiência, mas exigem que o leitor tenha um conhecimento a mais sobre programação.

Apresentamos, neste capítulo, apenas uma ideia simplificada do método, as suas aplicações vão muito além disso. Nosso intuito aqui é mostrar mais um método numérico que nos permite realizar cálculos que são imprescindíveis a qualquer estudante da área de exatas.

9 Conclusão

Os temas abordados nesse trabalho são de extrema importância para diversas áreas. Como foi apresentado são várias as situações em que estudantes e profissionais, principalmente das Ciências Exatas, se deparam com situações em que precisam saber utilizar alguns métodos que permitam determinar os zeros de uma função ou calcular a área abaixo de uma curva. Neste trabalho abordamos quatro métodos práticos que permitem a resolução de alguns problemas que envolvem funções. Os métodos iterativos da Bisseção, de Newton e da Secante permitem determinar uma estimativa de raízes de funções, enquanto o método de Monte Carlo permite o cálculo da área sob uma curva. Calcular raízes e áreas é algo imprescindível para quem lida com situações que envolvem funções, e nesse contexto o conhecimento de métodos como os que foram apresentados neste trabalho são de suma importância.

Pudemos perceber a eficiência de todos os métodos estudados, mas é importante salientar que são métodos que praticamente necessitam da utilização de softwares e de computadores, uma vez que necessitam de muitos cálculos e comparações. O uso de tecnologias se faz necessário a partir do momento em que precisamos traçar o gráfico de funções. Funções mais simples permitem cálculos e desenho de gráficos manuais, mas são exceções, como pudemos observar no decorrer do trabalho.

Um relevante ponto é o uso dos métodos no ensino básico. O estudo de demonstrações da maior parte dos teoremas e resultados no ensino básico já é bem pouco usual, uma vez que é desinteressante ao aluno (muitas vezes esses alunos necessitam de conhecimentos além do que está sendo buscado). Dessa forma, trabalhar os métodos estudados com alunos do ensino básico seria um trabalho mais superficial, sem demonstrações e provas, mas nem por isso desinteressante e desmotivador. Dos métodos trabalhados, os mais indicados para serem usados são os métodos da bissecção e de Monte Carlo, por serem métodos mais simples e exigirem menos aprofundamento que nos demais. No contexto, os métodos de Newton e da Secante são menos indicados por apresentarem uma dificuldade bem maior, além disso, a derivada de funções não faz parte dos conteúdos programáticos para o ensino básico.

O professor possui uma infinidade de formas de utilizar os métodos em sala de aula, os métodos indicados são bem interessantes e permitem inclusive que os alunos possam entender toda a metodologia utilizada, sem se prender a fórmulas. Basta, então que os professores tenham interesse em realizar aulas diferenciadas e que busquem material para isso. Dois exemplos, que foram tratados ao longo do trabalho,

são bem interessantes para serem trabalhados, como o cálculo de $\sqrt{2}$ e de π .

Como pudemos perceber, não existe um único método que resolva a todos os problemas; o que apresentamos neste trabalho foram alternativas que o leitor pode escolher dependendo de sua necessidade. Os métodos convencionais para encontrar raízes de funções reais e de resolução de integrais definidas, muitas vezes podem ser dificilmente aplicados em algumas situações, neste âmbito, o uso de métodos numéricos práticos, como os estudados, apresentam ainda maior importância.

Referências

- [1] ANGELOTTI, W.F.D.; FONSECA, A.L. DA; TORRES, G.B.; CUSTODIO, R., *Uma abordagem simplificada do método Monte Carlo Quântico: da solução de integrais ao problema da distribuição eletrônica*, Revista Química Nova, vol.31, nº 2, São Paulo, 2008, p.433-444.
- [2] ARENALES, S.; DAREZZO, A., *Cálculo Numérico: Aprendizagem com Apoio de Software*, São Paulo: Cengage Learning, 2010.
- [3] BARROSO, L.C.; BARROSO, M.M.A.; FILHO, F.F.C.; CARVALHO, L.B. DE; MAIA, M.L., *Cálculo Numérico (Com Aplicações)*, São Paulo: HARBRA, 2ª edição, 1987.
- [4] FARIAS, A.M.L. DE, *Variáveis Aleatórias Contínuas*, Universidade Federal Fluminense, Instituto de Matemática e Estatística, Departamento de Estatística.
- [5] FRANCO, N.B., *Cálculo Numérico*, São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006.
- [6] *Equação de Kepler*. Disponível em <<http://elmaxilab.com/definicao-abc/letra-a/a-equacao-de-kepler.php#Resolvendo-a-equação-de-Kepler>>. Acessado em 28 mai. 2015.
- [7] MONTEIRO, M.T.T., *Métodos Numéricos: exercícios resolvidos aplicados à Engenharia e outras Ciências*, Universidade do Minho, 2012.
- [8] MORETTIN, P.A.; BUSSAB, W.O., *Estatística Básica*, São Paulo: Saraiva, 2004.
- [9] RUGGIERO, M.A.G.; LOPES, V.L. DA, *Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais*, São Paulo: Pearson Prentice Hall.
- [10] SANCHES, I.J.; FURLAN, D.C., *Métodos Numéricos*, Universidade Federal do Paraná: Departamento de Informática, 2007.
- [11] SILVA, R.V. DA, *Estudo do Método Monte Carlo: Seu uso para o cálculo de integrais definidas no ambiente Octave*, Monografia(Graduação) - Licenciatura em Matemática, Universidade do Estado da Bahia, 2010.
- [12] WEYNE, G.R.S.; FERRAZ, G.B.; MOYA, H.D., *Metodologia para o cálculo do valor de pH em soluções aquosas de ácidos fracos monoproticos. Uma revisão nos livros de graduação*, Revista de Integração, nº 51, 2007, p. 371-376.