Raízes de Equações

Andréa Maria Pedrosa Valli

Laboratório de Computação de Alto Desempenho (LCAD)
Departamento de Informática
Universidade Federal do Espírito Santo - UFES, Vitória, ES, Brasil

Raízes de Equações

Objetivo: encontrar as raízes ou o zero de uma função [1],[2]. Encontrar x tal que $f(x) = 0$. Exemplos:

$$\begin{aligned} f(x) &= 3x - e^x = 0 \\ f(x) &= 2x^3 - cos(x+1) = 0 \\ f(x) &= 5x^2 - x^3 + 7x^6 = 0 \end{aligned}$$

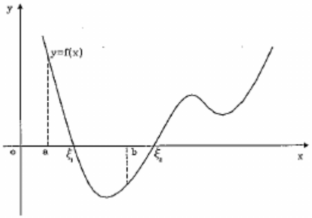
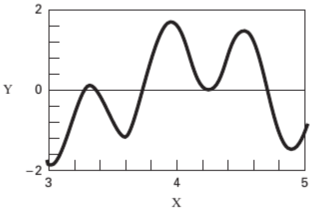


Figura 6.1 Raízes da equação $f(x) = 0$.



Idéia dos métodos:

1. Isolamento das raízes: encontrar um intervalo $[a, b]$ que contenha uma, e somente uma, raiz ξ de $f(x) = 0$.
2. Refinamento: a partir de uma aproximação inicial, $x_0 \in [a, b]$, gerar uma sequência $x_1, x_2, \cdots, x_k, \cdots$ que convirja para a raiz exata ξ de $f(x) = 0$.

Observação: Alguns métodos não necessitam o isolamento prévio de cada raiz. No entanto, a maioria dos métodos necessita que a raiz ξ esteja confinada em um dado intervalo $[a, b]$ e que esta raiz seja única em $[a, b]$. Além disso, será necessário definir critérios de parada.

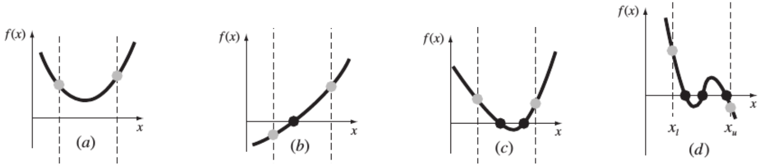
Equações algébricas: as raízes de uma equação polinomial podem ser delimitadas usando o Teorma de Lagrange ou usando um dispositivo prático para facilitar a determinação dos limites das raízes reais [1].

Equações transcendentes: não existem teoremas que forneçam informações sobre os limites e o número de raízes reais. O método gráfico é a maneira mais simples para achar um intervalo que contenha uma única raiz.

Análise gráfica da função. Exemplos:

$$\begin{aligned} f(x) &= 3x - e^x = 0 \\ f(x) &= x^3 - 5x^2 + 1 = 0 \end{aligned}$$

Teorema 1: Seja $f(x)$ uma função contínua em $[a, b]$. Se $f(a) \cdot f(b) < 0$ então existe pelo menos um ponto x entre a e b tal que $f(x) = 0$.



Critérios de Parada:

Seja ξ a raiz exata de $f(x) = 0$ isolada no intervalo $[a, b]$. Dado uma tolerância ϵ e uma aproximação inicial x_0, calcular $x_1, x_2, \cdots, x_k$ até que:

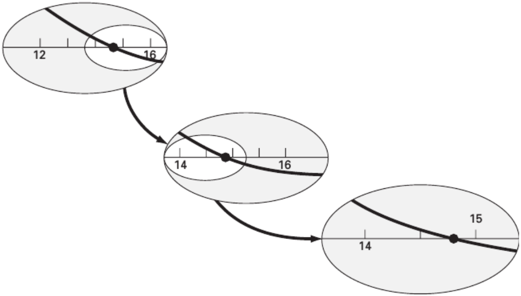
$$
\begin{aligned}
|x_k - \xi| &< \epsilon \qquad (1)\\
&\text{e/ou}\\
|f(x_k)| &< \epsilon \qquad (2)
\end{aligned}
$$

ou até que um número máximo de iterações $iter_{max}$ seja alcançado $(iter > iter_{nmax})$.

Observação: os dois critérios não são equivalentes, ou seja, nem sempre é possível ter (1) e (2) satisfeitos simultaneamente. No critério (1) vamos parar o processo quando $|x_k - x_{k-1}| < \epsilon$.

Método da bisseção: vamos supor que exista uma única raiz ξ de $f(x) = 0$, isolada em $[a, b]$, e que $f(a) \cdot f(b) < 0$.

Idéia do método: subdividir o intervalo ao meio em cada iteração e manter o subintervalo que contenha a raiz, ou seja, aquele em que $f(x)$ tenha sinais opostos nos extremos [2].



Pseudocódigo do método da bisseção:

$iter = 1$

$fa = f(a)$

$fb = f(b)$

Repita até que $b - a < \epsilon$

> $x = \dfrac{a+b}{2}$
>
> $fx = f(x)$
>
> Se $(\ fa \cdot\ fx\ ) > 0$ então
>
> > $a = x$
> >
> > $fa = fx$
>
> Senão
>
> > $b = x$
> >
> > $fb = fx$
>
> Fim-Se
>
> $iter = iter + 1$

Fim-Repita

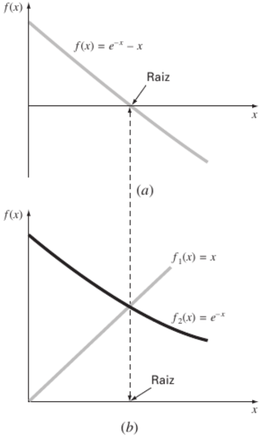
Se $f(x)$ é contínua em $[a,b]$ e $f(a)\cdot f(b) < 0$, o método da bisseção vai gerar uma sequência x_k que converge para a raiz ξ com precisão ϵ.

Estimativa do número de iterações para a convergência:

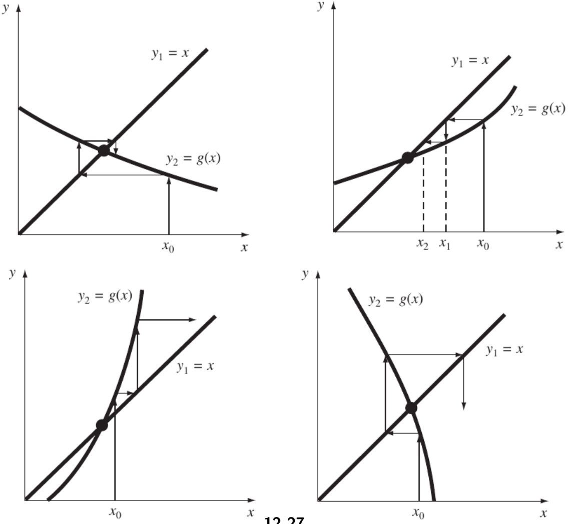
$$b_1 - a_1 = \frac{b_0 - a_0}{2} = \frac{b-a}{2}$$
$$b_2 - a_2 = \frac{b_1 - a_1}{2} = \frac{b_0 - a_0}{2^2} = \frac{b-a}{2^2}$$
$$\vdots$$
$$b_k - a_k = \frac{b-a}{2^k} < \epsilon$$

$$\Rightarrow 2^k > \frac{b-a}{\epsilon} \quad \Rightarrow \quad k > \frac{log(b-a) - log(\epsilon)}{log(2)}$$

Idéia: isolar um x na equação $f(x) = 0$ da seguinte forma: $f(x) = 0 \iff x = g(x)$. Dado x_0, calcular $x_1, x_2, \cdots$, usando $x_{k+1} = g(x_k)$ até que um dos critérios de parada seja satisfeito.



Descrição gráfica da convergência da iteração de ponto fixo [2]:



Convergência da iteração de ponto fixo. Suponha que ξ seja a solução exata, ou seja, $\xi = g(\xi)$. Temos que

$$x_{k+1} = g(x_k) \quad \Rightarrow \quad \xi - x_{k+1} = g(\xi) - g(x_k)$$

Pelo Teorema do Valor Médio temos que, se a função $g(x)$ e sua derivada forem contínuas sobre um intervalo $a \leq x \leq b$, então existe pelo menos um valor de $x = c$ dentro do intervalo tal que $g'(c) = \frac{g(b)-g(a)}{b-a}$

$$\Rightarrow g(\xi) - g(x_k) = g'(c)(\xi - x_k) \quad \Rightarrow \quad |\xi - x_{k+1}| = |g'(c)||\xi - x_k|$$

onde c está entre x_k e ξ. Sendo assim, temos

$$Erro_{k+1} = |g'(c)|\, Erro_k \ \Rightarrow \ Erro_{k+1} \approx C\ Erro_k$$

Os erros diminuem a cada iteração se $|g'(x)| < 1$ em torno da raiz ξ. A iteração do ponto fixo é dita linearmente convergente.

Vamos escolher uma função de iteração da forma

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \tag{3}$$

Observe que

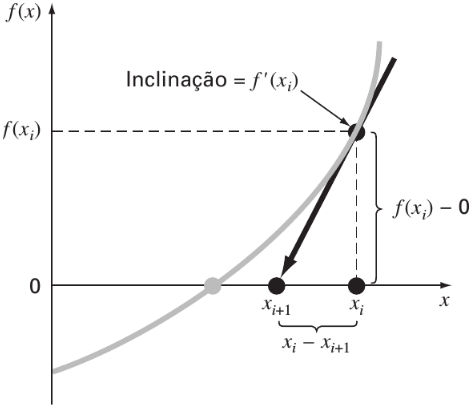
$$g'(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}$$

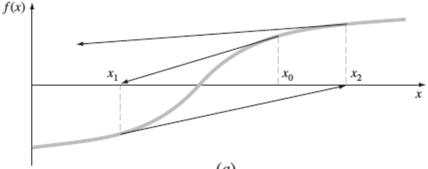
Se $f'(\xi) \neq 0$, temos $g'(\xi) = 0$. Mais ainda, se $g'(x)$ é contínua, então existe um intervalo em torno da raiz ξ tal que $|g'(x)| < 1$.

A função de iteração (3) produz uma sequência de ponto fixo convergente se escolhermos um x_0 suficientemente próximo da raiz ξ. Vamos verificar que temos neste caso convergência quadrática ($Erro_{k+1} \approx C\ Erro_k{}^2$).

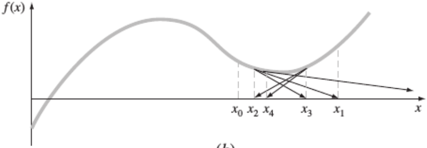
Descrição gráfica do método de Newton-Raphson: $f'(x_i) = \frac{f(x_i)-0}{x_i - x_{i+1}}$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, \cdots$$

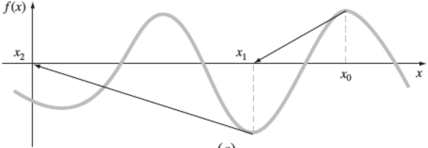




(a)



(b)



(c)

Teorema de convergência [1]: Se $f(a)f(b) < 0$, e $f'(x)$ e $f''(x)$ forem não nulas e preservarem o sinal em $[a, b]$, então partindo-se da aproximação inicial $x_0 \in [a, b]$ tal que $f(x_0)f''(x_0) > 0$ é possível construir, pelo método de Newton-Raphson, uma sequência $\{x_i\}$ que convirja para a raiz ξ de $f(x) = 0$.

Para os casos onde o método de Newton-Raphson exibe convergência insatisfatória:

- Mude a escolha da aproximação inicial x_0.
- Incluir um limite superior no número de iterações para se prevenir de soluções oscilantes, lentamente convergentes ou divergentes que poderiam persistir interminavelmente.
- Levar em conta a possibilidade de que $f'(x)$ possa ser igual a zero a qualquer instante durante os cálculos.

Pseudocódigo do método de Newton-Raphson:

Entrada:x, ϵ, $iter_{max}$, $f(x)$, $f'(x)$

$iter = 0$

$fx = f(x),\ dfx = f'(x)$

$deltax = -\dfrac{fx}{dfx}$

Escreva $iter$, x, fx, $deltax$

Enquanto (($|deltax| > \epsilon$) ou ($|fx| > \epsilon$)) e ($iter \leq iter_{max}$)

  $iter = iter + 1$

  $x = x + deltax$

  $fx = f(x),\ dfx = f'(x)$

  $deltax = -\dfrac{fx}{dfx}$

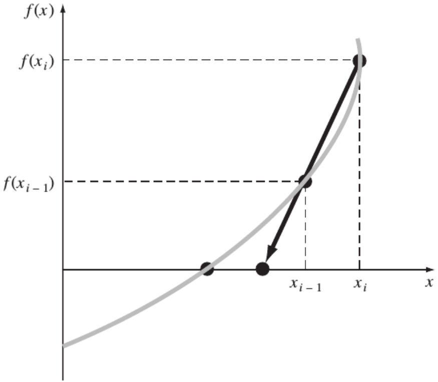
  Escreva $iter$, x, fx, $deltax$

Fim-Enquanto

Observação: necessita do cálculo da derivada de $f(x)$

Descrição gráfica do método da secante: $f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1})-f(x_i)}{x_{i-1}-x_i}$

$$x_{i+1} = x_i - f(x_i)\,\frac{x_i - x_{i-1}}{f(x_i) - f(x_{i-1})}, \quad i = 0, 1, 2, \cdots$$



Pseudocódigo do método da secante:

Entrada:a, b, ϵ, $iter_{max}$, $f(x)$

$iter = 0$

$fa = f(a), \;\; fb = f(b)$

Se $|fa| < |fb|$ então troque a e b, fa e fb

$$deltax = -fb\frac{b-a}{fb-fa}$$

$x = b + deltax, \;\; fx = f(x)$

Escreva $iter, a, fa, b, fb, x, fx, deltax$

Enquanto (($|deltax| > \epsilon$) ou ($|fx| > \epsilon$)) e ($iter \leq iter_{max}$)

  $iter = iter + 1$

  $a = b, \;\; fa = fb$

  $b = x, \;\; fb = fx$

  $$deltax = -fb\frac{b-a}{fb-fa}$$

  $x = b + deltax, \;\; fx = f(x)$

  Escreva $iter, a, fa, b, fb, x, fx, deltax$

Fim-Enquanto

Ordem de convergência: define a rapidez com que a sequência $\{x_0, x_1, x_2, \cdots\}$ gerada por um dado método converge para a raiz exata ξ. Seja $e_k = |\xi - x_k|$ o erro da k-ésima iteração. Se existe $\gamma > 1$ e uma constante C tal que

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

onde γ = ordem de convergência do método e C = constante de erro assintótico.

Para $\gamma = 1$ temos $0 \leq C < 1$, temos que a convergência é pelo menos linear. Quanto maior γ mais rápida a sequência converge.

Suponha que $x_k \to \xi$. O método de Newton-Raphson pode ser escrito como

$$0 = f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) \tag{4}$$

A expansão em série de Taylor pode ser representada por

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) + \frac{f''(c_x)}{2!}(x_{k+1} - x_k)^2 \tag{5}$$

onde c_x está em algum ponto do intervalo de x_k a x_{k+1}. Vamos supor que $x_{k+1} = \xi$, ou seja $f(\xi) = 0$. Substituindo em (5) temos

$$0 = f(x_k) + f'(x_k)(\xi - x_k) + \frac{f''(c_x)}{2!}(\xi - x_k)^2 \tag{6}$$

Fazendo (6) - (4), obtemos

$$\begin{aligned} 0 &= f'(x_k)(\xi - x_{k+1}) + \frac{f''(c_x)}{2!}(\xi - x_k)^2 \\ 0 &= |f'(x_k)|E_{k+1} + \frac{|f''(c_x)|}{2!}E_k^2 \Rightarrow E_{k+1} = \left|\frac{-f''(\xi)}{2f'(\xi)}\right| E_k^2 \text{ (quadrática)} \end{aligned}$$

É possível mostrar que, para o método da secante,

$$e_2 \approx \left| \frac{f''(\xi)}{2f'(\xi)} \right| e_0\, e_1$$

Generalizando,

$$\begin{aligned}
e_{k+1} &\approx C\, e_{k-1}\, e_k \\
e_{k+1} &\approx K\, e_k^{\gamma} \\
\Rightarrow e_{k+1} &= C\, \left(\frac{e_k}{K}\right)^{1/\gamma} e_k = K e_k^{\gamma} \\
\Rightarrow C\, e_k^{1+1/\gamma} &= K^{1+1/\gamma}\, e_k^{\gamma} \\
\Rightarrow 1 + 1/\gamma &= \gamma \quad \Rightarrow \gamma^2 - \gamma - 1 = 0 \\
\Rightarrow \gamma &= \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.61803
\end{aligned}$$

No método de Newton-Raphson, fizemos a restrição de que $f'(\xi) \neq 0$, onde ξ é a solução de $f(x) = 0$. A garantia da existência de um intervalo I em torno da raiz ξ onde o método de Newton converge de forma quadrática para uma aproximação inicial $x_0 \in I$, acontece desde que ξ seja um zero da equação com multiplicidade 1.

Se modificarmos o método de Newton-Raphson para

$$
\begin{aligned}
g(x) &= x - \frac{\mu(x)}{\mu'(x)}, \quad \text{onde} \quad \mu(x) = \frac{f(x)}{f'(x)} \\
\Rightarrow g(x) &= x - \frac{f(x)f'(x)}{[f'(x)]^2 - f(x)f''(x)}
\end{aligned}
$$

podemos conseguir convergência quadrática para zeros com multiplicidade maiores que 1. Na prática podemos ter problemas graves de arredondamento pois o denominador consiste na diferença de dois números que são próximos de zero.

Ex: $f(x) = e^x - x - 1 = 0$ tem um zero de multiplicidade 2 em $\xi = 0$. Observe que neste caso o método de Newton-Raphson com $x_0 = 1$ e $\epsilon = 10^{-5}$ converge para a raiz $\xi = 0$ mas não quadraticamente.

n	p_n
0	1,0
1	0,58198
2	0,31906
3	0,16800
4	0,08635
5	0,04380
6	0,02206
7	0,01107
8	0,005545
9	$2{,}7750 \times 10^{-3}$
10	$1{,}3881 \times 10^{-3}$
11	$6{,}9411 \times 10^{-4}$
12	$3{,}4703 \times 10^{-4}$
13	$1{,}7416 \times 10^{-4}$
14	$8{,}8041 \times 10^{-5}$
15	$4{,}2610 \times 10^{-5}$
16	$1{,}9142 \times 10^{-6}$

Ex: $f(x) = e^x - x - 1 = 0$ tem um zero de multiplicidade 2 em $\xi = 0$. Utilizando a modificação do método de Newton-Raphson com $x_0 = 1$ e $\epsilon = 10^{-5}$ conseguimos melhorar a taxa de convergência.

n	x_n
0	1
1	$-2.3421061 \times 10^{-1}$
2	$-8.4582788 \times 10^{-3}$
3	$-1.1889524 \times 10^{-5}$
4	$-6.8638230 \times 10^{-6}$

Bibliografia Básica

[1] Algoritmos Numéricos, Frederico F. Campos, Filho - 2ª Ed., Rio de Janeiro, LTC, 2007.

[2] Métodos Numéricos para Engenharia, Steven C. Chapa e Raymond P. Canale, Ed. McGraw-Hill, 5ª Ed., 2008.

[3] Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais, Márcia A. G. Ruggiero e Vera Lúcia da Rocha Lopes, Ed. Pearson Education, 2ª Ed., 1996.