

Raízes de Equações

Andréa Maria Pedrosa Valli e Lucia Catabriga

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

Raízes de Equações

- 1 Introdução
- 2 Método da Bisseção
- 3 Método do Ponto Fixo
- 4 Método de Newton-Raphson
- 5 Método da Secante
- 6 Ordem de Convergência

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

$$f(x) = 3x - e^x = 0$$

$$f(x) = 2x^3 - \cos(x + 1) = 0$$

$$f(x) = 5x^2 - x^3 + 7x^6 = 0$$

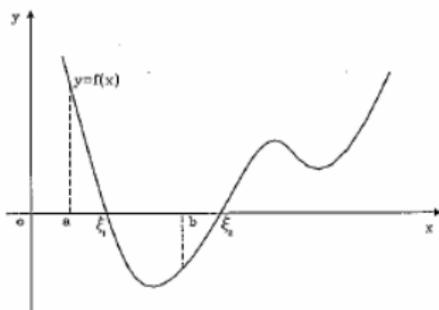
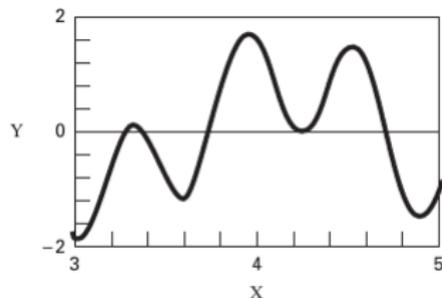


Figura 6.1 Raízes da equação $f(x) = 0$.



Idéia Geral dos métodos:

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

Observações:

- Alguns métodos não necessitam o isolamento prévio de cada raiz
- A maioria dos métodos necessita que a raiz ξ esteja confinada em um dado intervalo $[a, b]$ e que esta raiz seja única em $[a, b]$
- É necessário definir critérios de parada.

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

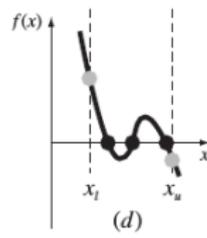
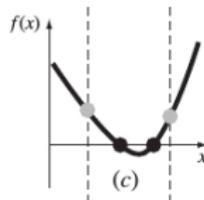
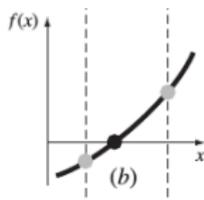
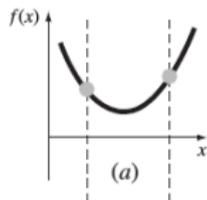
Equações **transcendentes**: não existem teoremas que forneçam informações sobre os limites e o número de raízes reais. O método gráfico é a maneira mais simples para achar um intervalo que contenha uma única raiz.

Análise gráfica da função. Exemplos:

$$f(x) = 3x - e^x = 0$$

$$f(x) = x^3 - 5x^2 + 1 = 0$$

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, \dots, x_k até que:

$$|x_k - \xi| < \epsilon \quad (1)$$

e/ou

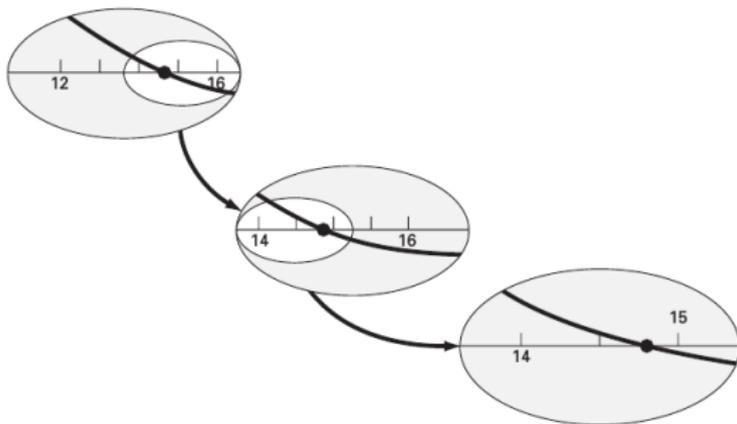
$$|f(x_k)| < \epsilon \quad (2)$$

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. 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 $b - a < \epsilon$

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

$fx = f(x)$

Se $(fa \cdot fx) > 0$ então

$a = x$

$fa = fx$

Senão

$b = x$

$fb = fx$

Fim-Se

$iter = iter + 1$

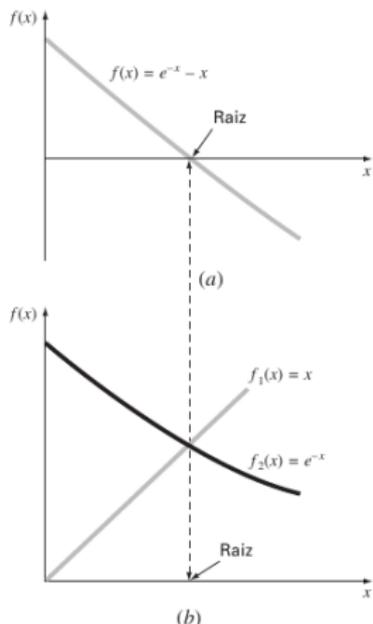
Fim-Repita

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 .

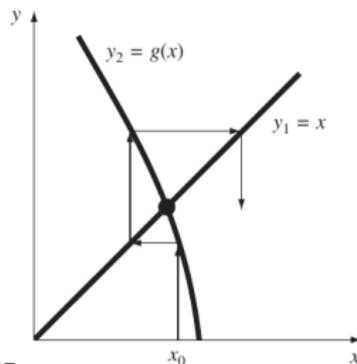
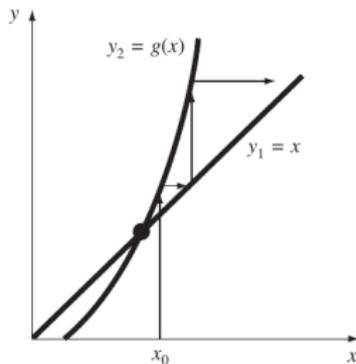
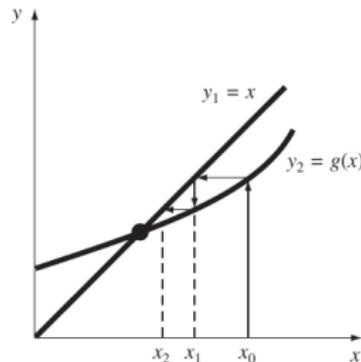
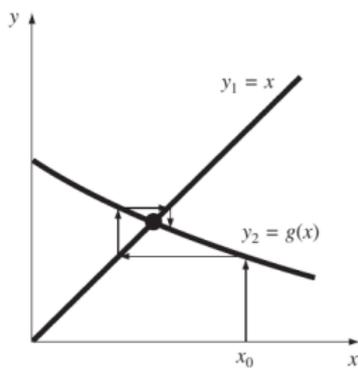
Estimativa do **número de iterações** para a convergência:

$$\begin{aligned}b_1 - a_1 &= \frac{b_0 - a_0}{2} = \frac{b - a}{2} \\b_2 - a_2 &= \frac{b_1 - a_1}{2} = \frac{b_0 - a_0}{2^2} = \frac{b - a}{2^2} \\&\vdots \\b_k - a_k &= \frac{b - a}{2^k} < \epsilon \\ \Rightarrow 2^k &> \frac{b - a}{\epsilon} \quad \Rightarrow \quad k > \frac{\log(b - a) - \log(\epsilon)}{\log(2)}\end{aligned}$$

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, \dots , 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

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

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 $g'(c) = \frac{g(b) - g(a)}{b - a}$

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

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

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

Observe que

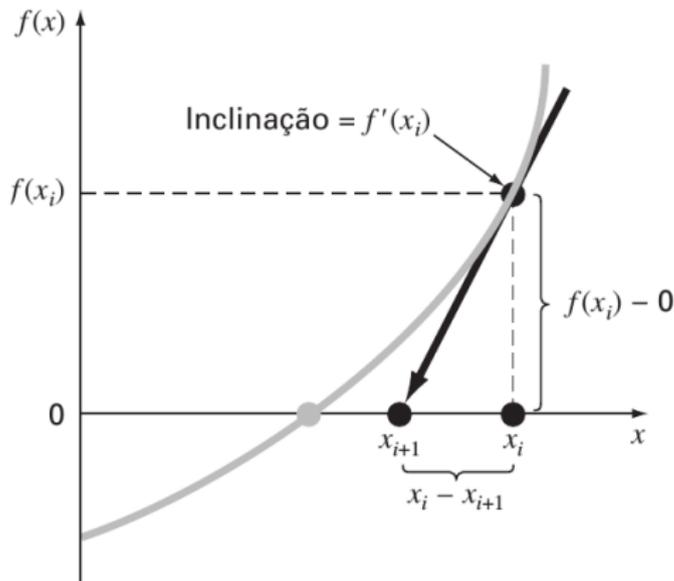
$$g'(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}$$

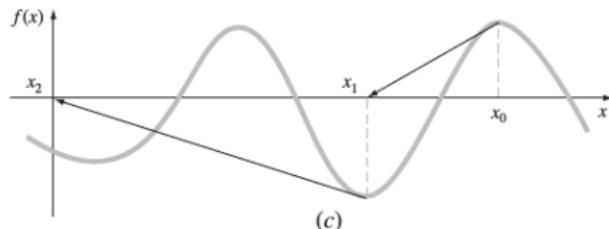
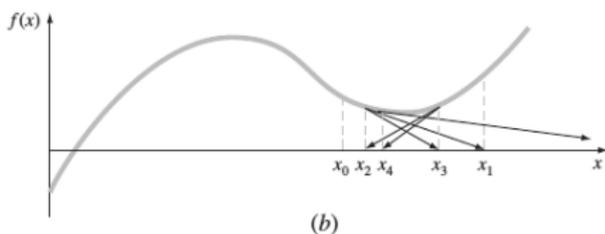
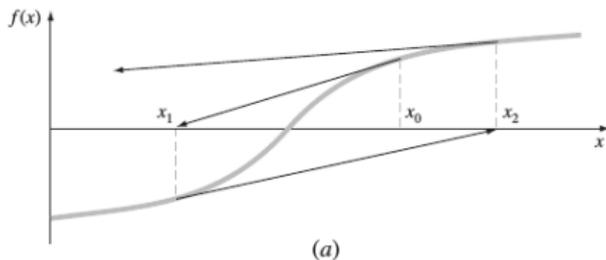
Se $f'(\xi) \neq 0$, temos $g'(\xi) = 0$. Mais ainda, se $g'(x)$ é contínua, então existe um intervalo em torno da raiz ξ tal que $|g'(x)| < 1$.

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

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





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 exhibe 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 , $iter_{max}$, $f(x)$, $f'(x)$

$iter = 0$

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

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

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

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

$iter = iter + 1$

$x = x + deltax$

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

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

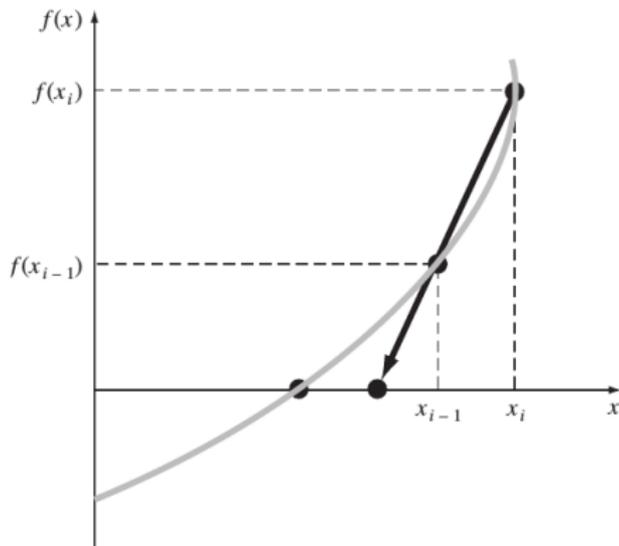
Escreva $iter$, x , fx , $deltax$

Fim-Enquanto

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

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

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



Pseudocódigo do método da secante:

Entrada: $a, b, \epsilon, iter_{max}, f(x)$

$iter = 0$

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

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 $((|deltax| > \epsilon) \text{ ou } (|fx| > \epsilon))$ 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 $\{x_0, x_1, x_2, \dots\}$ 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

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

onde $\gamma =$ 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 $x_k \rightarrow \xi$. O método de **Newton-Raphson** pode ser escrito como

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

A expansão em série de Taylor pode ser representada por

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

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

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

Fazendo (6) - (4), obtemos

$$0 = f'(x_k)(\xi - x_{k+1}) + \frac{f''(c_x)}{2!}(\xi - x_k)^2$$

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

É possível mostrar que, para o método da secante,

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

Generalizando,

$$e_{k+1} \approx C e_{k-1} e_k$$

$$e_{k+1} \approx K e_k^\gamma$$

$$\Rightarrow e_{k+1} = C \left(\frac{e_k}{K} \right)^{1/\gamma} e_k = K e_k^\gamma$$

$$\Rightarrow C e_k^{1+1/\gamma} = K^{1+1/\gamma} e_k^\gamma$$

$$\Rightarrow 1 + 1/\gamma = \gamma \Rightarrow \gamma^2 - \gamma - 1 = 0$$

$$\Rightarrow \gamma = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 1.61803$$

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

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

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.