Algoritmos Numéricos 2^a edição

Capítulo 6: Raízes de equações

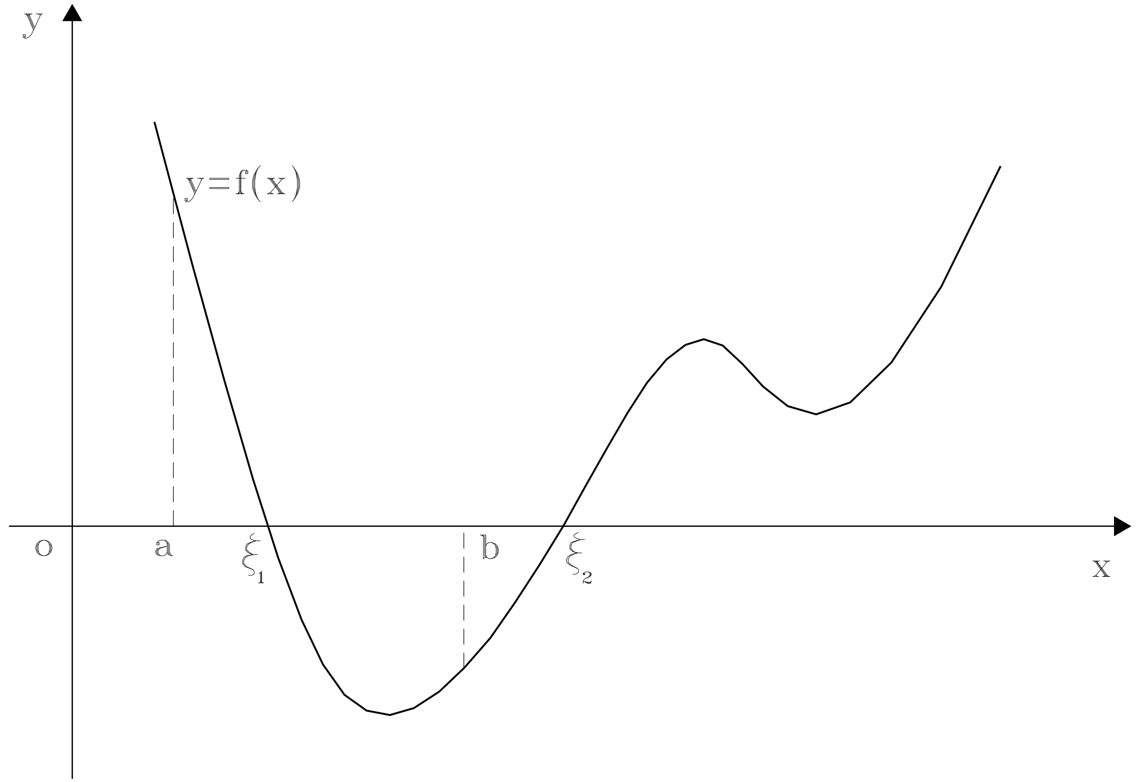
Capítulo 6: Raízes de equações

Raízes de equações

- Encontrar valores de $x = \xi$ que satisfaçam

$$f(x) = 0.$$

- Valores especiais: raízes da equação $f(x) = 0$ ou zeros da função $f(x)$.



Cálculo analítico de uma raiz

- Equações algébricas de grau até quatro podem ter suas raízes calculadas por meio de uma expressão.
- Por exemplo,

$$x = (-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac})/2a$$

para determinar as duas raízes de $f(x) = ax^2 + bx + c = 0$.

- Equações algébricas de grau superior a quatro e grande maioria das equações transcendentes.
- Raízes não podem ser calculadas analiticamente.
- Métodos que encontrem uma solução aproximada para as raízes.

Etapas para cálculo de uma raiz

- Problema de calcular uma raiz pode ser dividido em duas fases:
  1. Isolamento da raiz, isto é, encontrar um intervalo $[a, b]$ que contenha uma, e somente uma, raiz de $f(x) = 0$ (ver figura).
  2. Refinamento da raiz, ou seja, a partir de um valor inicial $x_0 \in [a, b]$, gerar uma seqüência $\{x_0,\ x_1,\ x_2, \ldots, x_k, \ldots\}$ que convirja para uma raiz exata ξ de $f(x) = 0$.
- Maioria dos métodos para cálculo de raízes necessita que a mesma esteja confinada em um dado intervalo.
- Essa raiz deve ser única em tal intervalo.
- Teoremas da Álgebra fornecem informações sobre polinômios.
- Isolamento de raízes: equações algébricas e equações transcendentes.

Equações algébricas

- Equação algébrica de grau n, $n \geq 1$,

$$P(x) = c_n x^n + c_{n-1} x^{n-1} + c_{n-2} x^{n-2} + \cdots + c_2 x^2 + c_1 x + c_0 = 0 \qquad (1)$$

- coeficientes c_i reais e
- $c_n \neq 0$.

Avaliação de polinômio

- Valor de um polinômio

$$P(x) = c_n x^n + c_{n-1} x^{n-1} + c_{n-2} x^{n-2} + \cdots + c_2 x^2 + c_1 x + c_0$$

- em um ponto $x = a$,

$$P(a) = c_n a^n + c_{n-1} a^{n-1} + c_{n-2} a^{n-2} + \cdots + c_2 a^2 + c_1 a + c_0.$$

- Avaliar $P(x)$ de grau n, em $x = a$: $\dfrac{n(n+1)}{2}$ multiplicações e n adições.

Exemplo de avaliação de polinômio na forma de potências

Exemplo 1 Avaliar $P(x) = 3x^5 - 2x^4 + 5x^3 + 7x^2 - 3x + 1$ em $x = 2$.

$$P(2) = 3 \times 2^5 - 2 \times 2^4 + 5 \times 2^3 + 7 \times 2^2 - 3 \times 2 + 1 = 127.$$

- Requer 15 multiplicações e 5 adições.

Método de Horner

- Maneira mais eficiente de avaliar um polinômio.
- Consiste em reescrever o polinômio de forma a evitar potências:

$$
\begin{aligned}
P(x) &= c_n x^n + c_{n-1}x^{n-1} + c_{n-2}x^{n-2} + \cdots + c_2 x^2 + c_1 x + c_0, \\
& \quad (c_n x^{n-1} + c_{n-1}x^{n-2} + c_{n-2}x^{n-3} + \cdots + c_2 x + c_1)x + c_0, \\
& \quad ((c_n x^{n-2} + c_{n-1}x^{n-3} + c_{n-2}x^{n-4} + \cdots + c_2)x + c_1)x + c_0, \\
\ldots \\
P(x) &= \underbrace{(\ldots(}_{n-1} c_n x + c_{n-1})x + c_{n-2})x + \cdots + c_2)x + c_1)x + c_0.
\end{aligned}
$$

- Requer apenas n multiplicações e n adições para avaliar polinômio de grau n.

Exemplo de avaliação de polinômio pelo método de Horner

Exemplo 2 Avaliar $P(x) = 3x^5 - 2x^4 + 5x^3 + 7x^2 - 3x + 1$ em $x = 2$ usando o processo de Horner.

$$P(x) = ((((3x - 2)x + 5)x + 7)x - 3)x + 1,$$

$$P(2) = ((((3 \times 2 - 2) \times 2 + 5) \times 2 + 7) \times 2 - 3) \times 2 + 1 = 127.$$

- Requer 5 multiplicações e 5 adições.

Algoritmo do método de Horner para avaliar polinômio

Algoritmo Horner
{ **Objetivo:** Avaliar um polinômio de grau n no ponto a }
parâmetros de entrada n, c, a
  { grau, coeficientes e ponto a ser avaliado, onde c é tal que }
  { $P(x) = c(1)x^n + c(2)x^{n-1} + \cdots + c(n)x + c(n+1)$ }
parâmetro de saída y { ordenada $P(a)$ }
  $y \leftarrow c(1)$
  para $i \leftarrow 2$ **até** $n+1$ **faça**
    $y \leftarrow y * a + c(i)$
  fimpara
fimalgoritmo

$\Vdash\!\Leftarrow$

Exemplo de uso do algoritmo

Exemplo 3 Avaliar o polinômio $P(x) = 3x^5 - 2x^4 + 5x^3 + 7x^2 - 3x + 1$ do Exemplo 2, em $x = 2$ usando o algoritmo.

```
% Os parametros de entrada
n = 5
c = 3    -2     5     7    -3     1
a = 2
% produzem o resultado
y = 127
```

Propriedades gerais

Teorema 1 *Uma equação algébrica de grau n tem exatamente n raízes, reais ou complexas, contando cada raiz de acordo com a sua multiplicidade.*

- Uma raiz ξ de (1) tem multiplicidade m se

$$P(\xi) = P'(\xi) = P''(\xi) = \ldots = P^{m-1}(\xi) = 0 \text{ e}$$

$$P^{m}(\xi) \neq 0,$$

- sendo

$$P^{i}(\xi) = \left.\frac{d^i P(x)}{dx^i}\right|_{x=\xi,\ i=1,2,\ldots,m.}$$

Exemplo de raiz com multiplicidade

Exemplo 4 Seja

$$
\begin{aligned}
P(x) &= x^4 + 2x^3 - 12x^2 + 14x - 5 \rightarrow P(1) = 0,\\
P'(x) &= 4x^3 + 6x^2 - 24x + 14 \rightarrow P'(1) = 0,\\
P''(x) &= 12x^2 + 12x - 24 \rightarrow P''(1) = 0 \text{ e}\\
P'''(x) &= 24x + 12 \rightarrow P'''(1) = 36.
\end{aligned}
$$

- $\xi = 1$ é uma raiz de multiplicidade $m = 3$.
- Sendo $P(-5) = 0$, o polinômio de grau 4 escrito na forma fatorada é

$$P(x) = (x-1)^3(x+5).$$

Raízes complexas

Teorema 2 *Se os coeficientes de uma equação algébrica forem reais, então suas raízes complexas serão complexos conjugados em pares, ou seja, se* $\xi_1 = a + bi$ *for uma raiz de multiplicidade* m, *então* $\xi_2 = a - bi$ *também será uma raiz e com a mesma multiplicidade.*

Exemplo 5 As raízes de $P(x) = x^2 - 4x + 13 = 0$ são

$$\xi = \frac{4 \pm \sqrt{(-4)^2 - 4 \times 1 \times 13}}{2} \rightarrow \begin{cases} \xi_1 = 2 + 3i \\ \xi_2 = 2 - 3i. \end{cases}$$

Corolário 1 *Uma equação algébrica de grau ímpar com coeficientes reais tem, no mínimo, uma raiz real.*

Exemplo 6 As raízes da equação $P(x) = x^3 - 9x^2 + 33x - 65 = 0$ são

$$\xi_1 = 5,\ \xi_2 = 2 + 3i \ \text{ e } \ \xi_3 = 2 - 3i.$$

- Esta equação de grau 3 tem uma raiz real.

Relações de Girard

- Sendo $\xi_i,\ i = 1, 2, \ldots, n$ as raízes de $P(x) = 0$.
- Polinômio na forma fatorada

$$P(x) = c_n(x - \xi_1)(x - \xi_2) \ldots (x - \xi_n) = 0.$$

- Multiplicando os fatores,

$$\begin{aligned} P(x) = \ & c_n x^n - c_n(\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n)x^{n-1} \\ & + c_n(\xi_1\xi_2 + \xi_1\xi_3 + \cdots + \xi_1\xi_n + \xi_2\xi_3 + \cdots + \xi_2\xi_n + \cdots + \xi_{n-1}\xi_n)x^{n-2} \\ & - c_n(\xi_1\xi_2\xi_3 + \xi_1\xi_2\xi_4 + \cdots + \xi_1\xi_2\xi_n + \xi_1\xi_3\xi_4 + \cdots + \xi_{n-2}\xi_{n-1}\xi_n)x^{n-3} \\ & + \cdots (-1)^n c_n(\xi_1\xi_2\xi_3 \ldots \xi_n) = 0. \end{aligned}$$

Relações de Girard cont.

- Comparando com $P(x) = 0$ escrita na forma de potências.
- Condição de igualdade das equações algébricas.
- Relações entre as raízes e os coeficientes de uma equação algébrica:

$$\xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_n = -\frac{c_{n-1}}{c_n},$$

$$\xi_1\xi_2 + \xi_1\xi_3 + \cdots + \xi_1\xi_n + \xi_2\xi_3 + \cdots + \xi_2\xi_n + \cdots + \xi_{n-1}\xi_n = \frac{c_{n-2}}{c_n},$$

$$\xi_1\xi_2\xi_3 + \xi_1\xi_2\xi_4 + \cdots + \xi_1\xi_2\xi_n + \xi_1\xi_3\xi_4 + \cdots + \xi_{n-2}\xi_{n-1}\xi_n = -\frac{c_{n-3}}{c_n},$$

$$\cdots$$

$$\xi_1\xi_2\xi_3 \ldots \xi_n = (-1)^n\frac{c_0}{c_n}.$$

- Relações válidas também para as raízes complexas.

Exemplo das relações de Girard

Exemplo 7 As raízes da equação do Exemplo 6, $P(x) = x^3 - 9x^2 + 33x - 65 = 0$, são $\xi_1 = 5$, $\xi_2 = 2 + 3i$ e $\xi_3 = 2 - 3i$.

- Relações de Girard:

$$5 + (2 + 3i) + (2 - 3i) = 9 = -\frac{-9}{1},$$

$$5(2 + 3i) + 5(2 - 3i) + (2 + 3i)(2 - 3i) = 33 = \frac{33}{1} \text{ e}$$

$$5(2 + 3i)(2 - 3i) = 65 = (-1)^3 \frac{-65}{1}.$$

Exemplo com os polinômios de Legendre

Exemplo 8 Sejam as equações algébricas de Legendre definidas a partir de $L_0(x) = 1$ e $L_1(x) = x$:

$$L_2(x) = \frac{3x^2 - 1}{2} = 0,$$

$$L_3(x) = \frac{5x^3 - 3x}{2} = 0,$$

$$L_4(x) = \frac{35x^4 - 30x^2 + 3}{8} = 0,$$

$$L_5(x) = \frac{63x^5 - 70x^3 + 15x}{8} = 0.$$

- Todas as equações possuem $c_{n-1} = 0$: a soma das raízes é nula, pois as raízes são simétricas em relação à origem.
- As equações de grau ímpar possuem $c_0 = 0$: elas têm uma raiz nula.

Limites das raízes reais

Teorema 3 (Lagrange) *Dada a equação*

$$P(x) = c_n x^n + c_{n-1} x^{n-1} + c_{n-2} x^{n-2} + \cdots + c_2 x^2 + c_1 x + c_0 = 0,$$

se $c_n > 0$ *e* k $(0 \leq k \leq n-1)$ *for o maior índice de coeficiente escolhido dentre os coeficientes negativos, então o limite superior das raízes positivas de* $P(x) = 0$ *pode ser dado por*

$$\boxed{L = 1 + \sqrt[n-k]{\frac{B}{c_n}}},$$

onde B *é o valor absoluto do maior coeficiente negativo em módulo.*

- Se ξ_p for a maior das raízes positivas de $P(x) = 0$, então $\xi_p \leq L$.

Exemplo de limite da raiz positiva

Exemplo 9 Seja $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24 = 0$.

- Coeficientes negativos: $c_{\underline{2}} = -13$ e $c_{\underline{1}} = -14$.
- Então $k = 2$, pois $\underline{2} > \underline{1}$, $B = |-14|$ e

$$L = 1 + \sqrt[4-2]{\frac{14}{1}} \rightarrow L = 4{,}74.$$

- Teorema de Lagrange garante que $P(x) = 0$ não tem raiz maior que 4,74.
- Se $c_i > 0$ $(i = 0, 1, \ldots, n)$, então $P(x) = 0$ não tem raízes positivas, pois $P(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i x^i > 0$ para $c_i > 0$ e $x > 0$.

Equações auxiliares

- Para os limites superiores e inferiores das raízes positivas e negativas

$$P_1(x) = x^n P(1/x) = 0,$$

$$P_2(x) = P(-x) = 0 \text{ e}$$

$$P_3(x) = x^n P(-1/x) = 0.$$

- Sendo $\xi_i,\ i = 1, 2, \ldots, n$, as raízes de $P(x) = 0$, então $P(x)$ na forma fatorada

$$P(x) = c_n(x - \xi_1)(x - \xi_2) \ldots (x - \xi_n).$$

Raízes de $P_1(x) = 0$

$$P(x) = c_n(x - \xi_1)(x - \xi_2)\ldots(x - \xi_n).$$

$$P_1(x) = x^n P(1/x) = 0,$$

$$P_1(x) = c_n x^n (1/x - \xi_1)(1/x - \xi_2)\ldots(1/x - \xi_n),$$

$$P_1(x) = c_n(1 - x\xi_1)(1 - x\xi_2)\ldots(1 - x\xi_n).$$

- Raízes: $1/\xi_1,\ 1/\xi_2, \ldots, 1/\xi_n$.

Raízes de $P_2(x) = 0$

$$P(x) = c_n(x - \xi_1)(x - \xi_2) \ldots (x - \xi_n).$$

$$P_2(x) = P(-x) = 0,$$

$$P_2(x) = c_n(-x - \xi_1)(-x - \xi_2) \ldots (-x - \xi_n).$$

- Raízes: $-\xi_1,\ -\xi_2, \ldots, -\xi_n$.

Raízes de $P_3(x) = 0$

$$P(x) = c_n(x - \xi_1)(x - \xi_2)\ldots(x - \xi_n).$$

$$P_3(x) = x^n P(-1/x) = 0,$$

$$P_3(x) = c_n x^n(-1/x - \xi_1)(-1/x - \xi_2)\ldots(-1/x - \xi_n),$$

$$P_3(x) = c_n(-1 - x\xi_1)(-1 - x\xi_2)\ldots(-1 - x\xi_n).$$

- Raízes: $-1/\xi_1,\ -1/\xi_2, \ldots, -1/\xi_n$.

Exemplo de raízes das equações auxiliares

Exemplo 10 Seja $P(x) = x^4 - 6x^3 - 5x^2 + 42x + 40 = 0$, com raízes

$$\xi_1 = -2,\ \xi_2 = -1,\ \xi_3 = 4 \ \text{ e } \ \xi_4 = 5.$$

- Equações auxiliares e suas respectivas raízes

$$P_1(x) = x^4 P(1/x) = 40x^4 + 42x^3 - 5x^2 - 6x + 1,$$
$$(\xi_1 = -0{,}5;\ \xi_2 = -1,\ \xi_3 = 0{,}25;\ \xi_4 = 0{,}2),$$

$$P_2(x) = P(-x) = x^4 + 6x^3 - 5x^2 - 42x + 40,$$
$$(\xi_1 = 2,\ \xi_2 = 1,\ \xi_3 = -4,\ \xi_4 = -5),$$

$$P_3(x) = x^4 P(-1/x) = 40x^4 - 42x^3 - 5x^2 + 6x + 1,$$
$$(\xi_1 = 0{,}5;\ \xi_2 = 1,\ \xi_3 = -0{,}25;\ \xi_4 = -0{,}2).$$

Limite inferior das raízes positivas de $P(x) = 0$

- Se $1/\xi_q$ for a maior das raízes positivas de $P_1(x) = 0$, então ξ_q será a menor das raízes positivas de $P(x) = 0$ (ver Exemplo 10).
- Sendo L_1 o limite superior das raízes positivas de $P_1(x) = 0$, calculado pelo Teorema 3,
$$\frac{1}{\xi_q} \leq L_1 \to \xi_q \geq \frac{1}{L_1}.$$
- Limite inferior das raízes positivas de $P(x) = 0$ é $1/L_1$.
- Se $P(x) = 0$ possuir raízes positivas ξ^+, elas estarão no intervalo
$$\boxed{\frac{1}{L_1} \leq \xi^+ \leq L}.$$

Limite inferior das raízes negativas de $P(x) = 0$

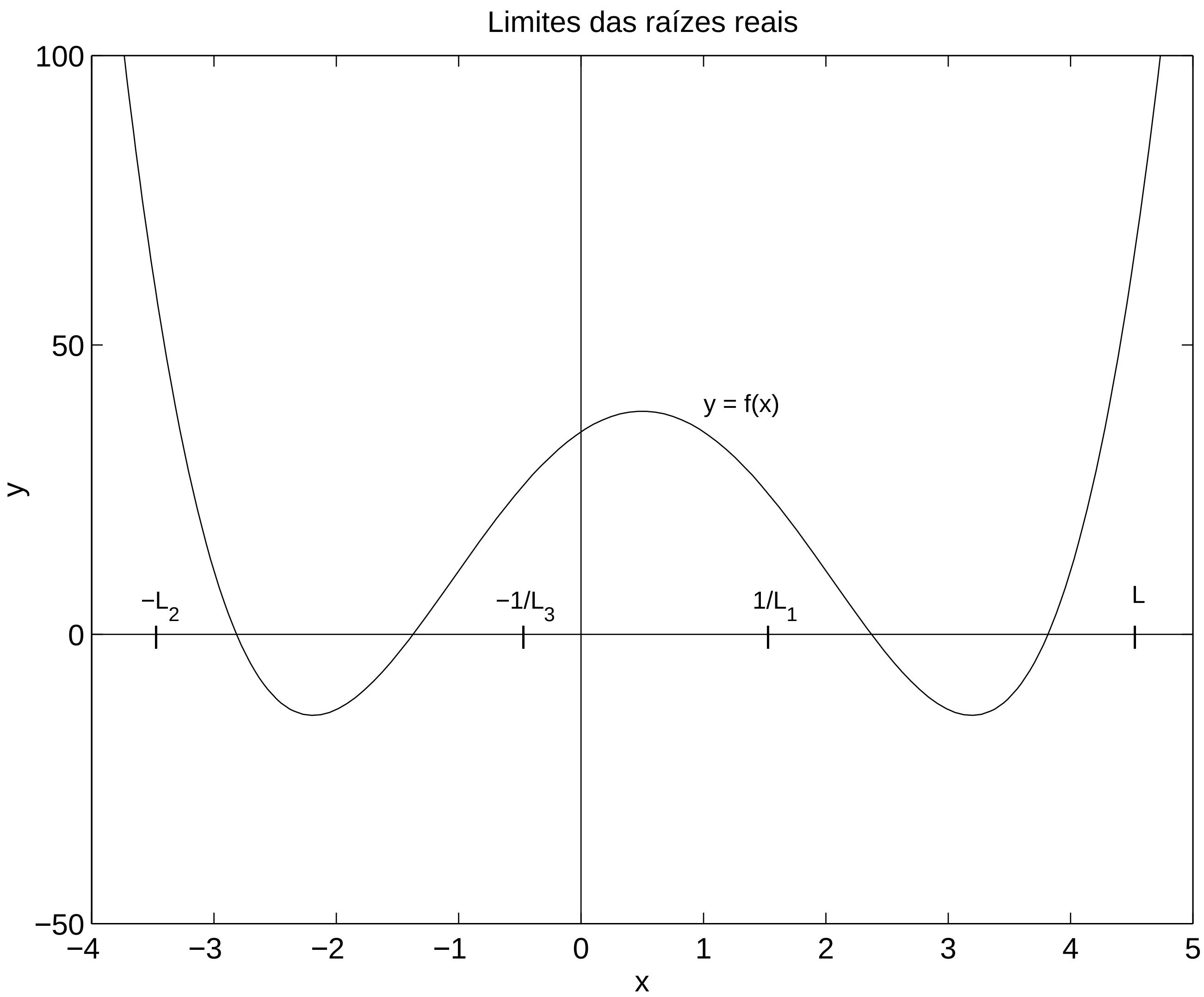
- Se $-\xi_r$ for a maior das raízes positivas de $P_2(x) = 0$, então ξ_r será a menor das raízes negativas de $P(x) = 0$ (ver Exemplo 10).
- Sendo L_2 o limite superior das raízes positivas de $P_2(x) = 0$, dado pelo Teorema 3

$$-\xi_r \leq L_2 \to \xi_r \geq -L_2.$$

Limite superior das raízes negativas de $P(x) = 0$

- Se $-1/\xi_s$ for a maior das raízes positivas de $P_3(x) = 0$, então ξ_s será a maior das raízes negativas de $P(x) = 0$ (ver Exemplo 10).
- Sendo L_3 o limite superior das raízes positivas de $P_3(x) = 0$, dado pelo Teorema 3
$$-\frac{1}{\xi_s} \leq L_3 \to \xi_s \leq -\frac{1}{L_3}.$$
- Se $P(x) = 0$ tiver raízes negativas ξ^-, elas estarão no intervalo
$$\boxed{-L_2 \leq \xi^- \leq -\frac{1}{L_3}},$$
- Os limites não garantem a existência das raízes reais, mas tão somente informam onde as raízes reais estarão caso existam.

Limites das raízes reais de uma equação algébrica



Exemplo dos limites das raízes reais

Exemplo 11 Calcular os limites das raízes reais de $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24 = 0$ do Exemplo 9.

$$P_1(x) = x^4 P\left(\frac{1}{x}\right) = x^4\left(\frac{1}{x^4} + \frac{2}{x^3} - \frac{13}{x^2} - \frac{14}{x} + 24\right) = 0 \rightarrow$$

$$P_1(x) = 24x^4 - 14x^3 - 13x^2 + 2x + 1 = 0,$$

$$L_1 = 1 + \sqrt[4\text{-}3]{\frac{14}{24}} \leadsto \frac{1}{L_1} = 0{,}63,$$

Exemplo dos limites das raízes reais cont.

$$P_2(x) = P(-x) = (-x)^4 + 2(-x)^3 - 13(-x)^2 - 14(-x) + 24 = 0 \rightarrow$$

$$P_2(x) = x^4 - 2x^3 - 13x^2 + 14x + 24 = 0,$$

$$L_2 = 1 + \sqrt[4\text{-}3]{\frac{13}{1}} \rightsquigarrow -L_2 = -14 \text{ e}$$

$$P_3(x) = x^4 P\left(\frac{1}{-x}\right) = x^4\left(\frac{1}{(-x)^4} + \frac{2}{(-x)^3} - \frac{13}{(-x)^2} - \frac{14}{(-x)} + 24\right) = 0 \rightarrow$$

$$P_3(x) = 24x^4 + 14x^3 - 13x^2 - 2x + 1 = 0,$$

$$L_3 = 1 + \sqrt[4\text{-}2]{\frac{13}{24}} \rightsquigarrow -\frac{1}{L_3} = -0{,}58.$$

- Limites das raízes reais: $0{,}63 \leq \xi^+ \leq 4{,}74$ e $-14 \leq \xi^- \leq -0{,}58$.

Dispositivo prático

- Primeiro bloco: define os coeficientes de $P(x) = 0$ e de suas três equações auxiliares $P_1(x) = 0$, $P_2(x) = 0$ e $P_3(x) = 0$:
  1. colocar os coeficientes de $P(x) = 0$ na coluna $P(x)$, com c_n no topo,
  2. inverter a ordem dos coeficientes da coluna $P(x)$ e colocá-los em $P_1(x)$,
  3. trocar o sinal dos coeficientes de $P(x)$, cujos índices sejam ímpares e atribuí-los a $P_2(x)$,
  4. inverter a ordem dos coeficientes da coluna $P_2(x)$ e colocá-los em $P_3(x)$ e
  5. se algum $c_n < 0$, então trocar o sinal de todos os coeficientes da coluna para garantir que $c_n > 0$, conforme exigência do Teorema 3.

Dispositivo prático cont.

- Segundo bloco: atribui os parâmetros necessários para aplicar o Teorema 3 a cada uma das quatro equações:
  - k é o índice do primeiro coeficiente negativo,
  - n é o grau do polinômio,
  - B é o valor absoluto do maior coeficiente negativo em módulo,
  - L_i é o limite superior das raízes positivas de $P_i(x) = 0$ dado pelo Teorema 3 e
  - L_ξ são os limites superiores e inferiores das raízes positivas e negativas de $P(x) = 0$, sendo que $L_{\xi(P)} = L$, $L_{\xi(P_1)} = 1/L_1$, $L_{\xi(P_2)} = -L_2$ e $L_{\xi(P_3)} = -1/L_3$.

Exemplo do dispositivo prático

Exemplo 12 Calcular os limites das raízes de $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24 = 0$ do Exemplo 11 usando o dispositivo prático.

$n=4$	$P(x)$	$P_1(x)$	$P_2(x)$	$P_3(x)$
c_4	1	24	1	24
c_3	2	-14	-2	14
c_2	-13	-13	-13	-13
c_1	-14	2	14	-2
c_0	24	1	24	1
k	2	3	3	2
$n-k$	2	1	1	2
B	$\lvert -14 \rvert$	$\lvert -14 \rvert$	$\lvert -13 \rvert$	$\lvert -13 \rvert$
L_i	4,74	1,58	14	1,74
L_ξ	4,74	0,63	-14	$-0{,}58$

.

Algoritmo para achar os limites das raízes reais pelo teorema de Lagrange

```
Algoritmo LimitesRaízes
{ Objetivo: Achar os limites das raízes reais de uma equação polinomial }
parâmetros de entrada n, c { grau do polinômio e coeficientes, sendo }
   { P(x) = c(1)x^n + c(2)x^(n-1) + ··· + c(n)x + c(n+1) }
parâmetro de saída L
   { limites inferior e superior das raízes positivas e negativas, respectivamente }
   se c(1) = 0 então escreva "coeficiente c(1) nulo", abandone, fimse
   t ← n + 1; c(t + 1) ← 0
   repita   { se c(n+1) for nulo, então o polinômio é deflacionado }
      se c(t) ≠ 0 então interrompa, fimse; t ← t − 1
   fimrepita
   { cálculo dos quatro limites das raízes reais }
   para i ← 1 até 4 faça
      se i = 2 ou i = 4 então   { inversão da ordem dos coeficientes }
         para j ← 1 até t/2 faça; Aux ← c(j); c(j) ← c(t − j + 1); c(t − j + 1) ← Aux, fimpara
      senão
         se i = 3 então
            { reinversão da ordem e troca de sinais dos coeficientes }
            para j ← 1 até t/2 faça; Aux ← c(j); c(j) ← c(t − j + 1); c(t − j + 1) ← Aux, fimpara
            para j ← t − 1 até 1 passo −2 faça c(j) ← −c(j), fimpara
         fimse
      fimse
      { se c(1) for negativo, então é trocado o sinal de todos os coeficientes }
      se c(1) < 0 então
         para j ← 1 até t faça c(j) ← −c(j), fimpara
      fimse
      k ← 2   { cálculo de k, o maior índice dos coeficientes negativos }
      repita
         se c(k) < 0 ou k > t então interrompa, fimse
         k ← k + 1
      fimrepita   { cálculo de B, o maior coeficiente negativo em módulo }
      se k ≤ t então
         B ← 0
         para j ← 2 até t faça
            se c(j) < 0 e abs(c(j)) > B então B ← abs(c(j)), fimse
         fimpara
         { limite das raízes positivas de P(x) = 0 e das equações auxiliares }
         L(i) ← 1 + (B/c(1))^(1/(k−1))
      senão, L(i) ← 10^100, fimse
   fimpara   { limites das raízes positivas e negativas de P(x) = 0 }
   Aux ← L(1); L(1) ← 1/L(2); L(2) ← Aux; L(3) ← −L(3); L(4) ← −1/L(4)
fimalgoritmo
```

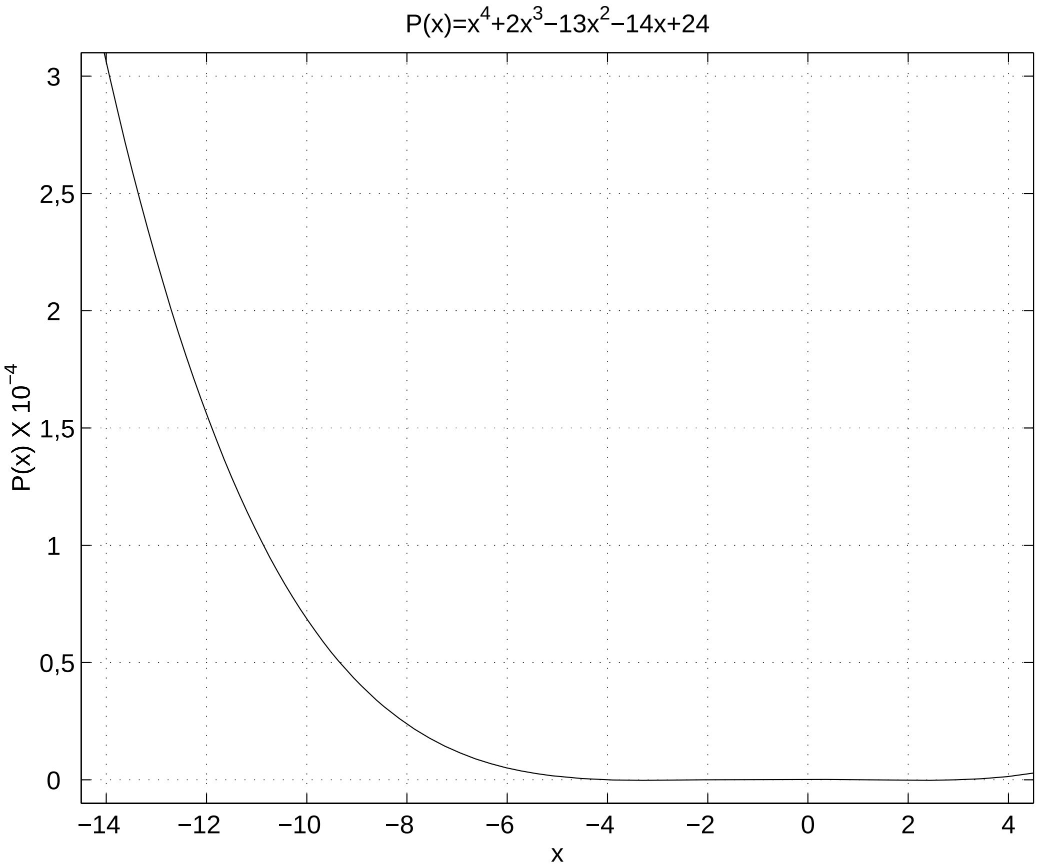
$\Vert\!\Lleftarrow$

Exemplo de uso do algoritmo

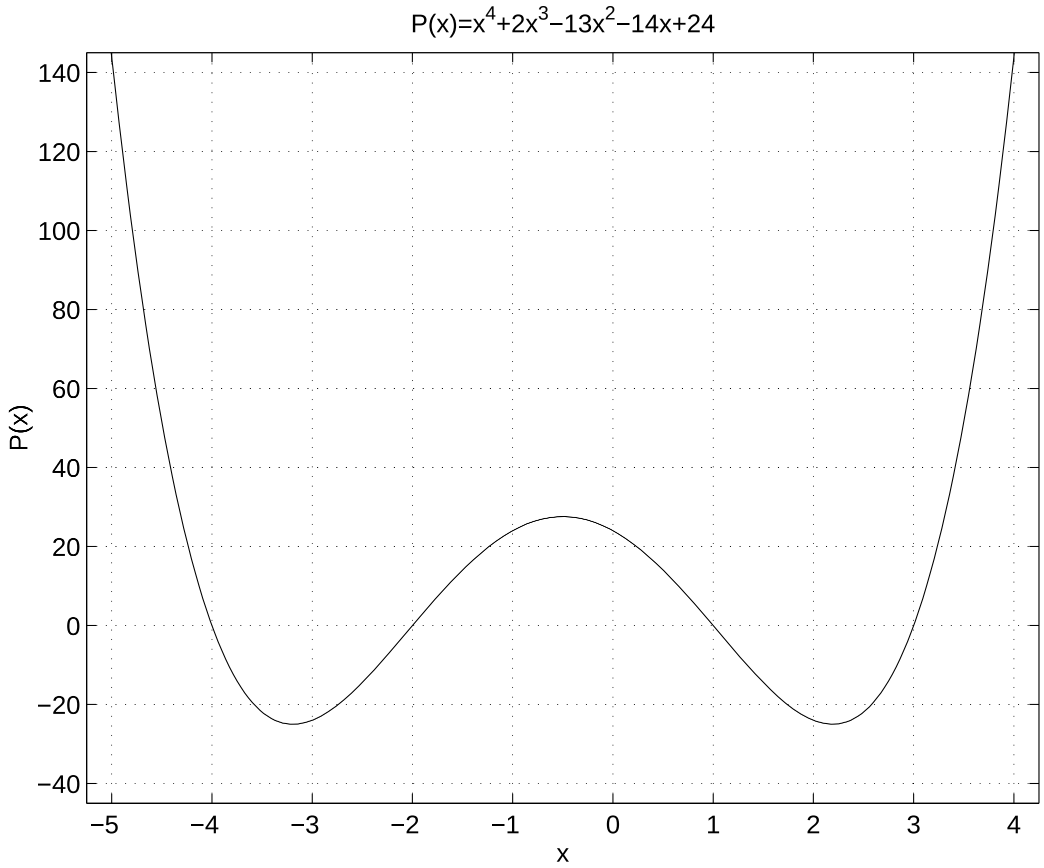
Exemplo 13 Calcular os limites das raízes reais da equação polinomial $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24 = 0$ do Exemplo 11 usando o algoritmo.

```
% Os parametros de entrada
n = 4
c = 1     2   -13   -14    24
% produzem os resultados
L = 0.6316    4.7417  -14.0000   -0.5760
```

Gráficos do polinômio $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24$



$-14 \leq x \leq 4{,}74$



$-5 \leq x \leq 4$

- Quatro raízes isoladas nos intervalos: $[-5, -3]$, $[-3, -1]$, $[0, 2]$ e $[2, 4]$.

Número de raízes reais

Teorema 4 (Regra de sinais de Descartes) *O número de raízes reais positivas* n^+ *de* $P(x) = 0$ *é igual ao número de variações de sinais na seqüência dos coeficientes ou é menor que este número por um inteiro par, sendo as raízes contadas de acordo com a sua multiplicidade e não sendo considerados os coeficientes nulos.*

Corolário 2 *Se* $P(x) = 0$ *não possuir coeficientes nulos, então o número de raízes reais negativas* n^- *(contando multiplicidades) é igual ao número de permanências de sinais na seqüência dos coeficientes ou é menor que este número por um inteiro par.*

- Regra de sinais de Descartes discerne as raízes positivas das negativas.
- Não consegue distingüir as raízes reais das complexas, as quais aparecem em pares conjugados (Teorema 2).
- Por exemplo, se o número de variações de sinais for 5: $n^+ = 5$ ou 3 ou 1.

Exemplo da regra de sinais de Descartes

Exemplo 14 Para $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24 = 0$, tem-se que

$$n^+ = 2 \text{ ou } 0, \quad \text{e} \quad n^- = 2 \text{ ou } 0.$$

- Se existirem duas raízes positivas, elas satisfarão a

$$0{,}63 \leq \xi^+ \leq 4{,}74.$$

- Se houver duas negativas, elas estarão no intervalo

$$-14 \leq \xi^- \leq -0{,}58.$$

- Ver Exemplo 11 e figura.
- Combinando a Regra de sinais de Descartes e o Teorema de Lagrange, conseguem-se importantes informações para o isolamento das raízes.

Exemplo de limites e número de raízes reais

Exemplo 15 Calcular os limites e o número de raízes reais de
$P(x) = x^3 - 3x^2 - 6x + 8 = 0.$

$n=3$	$P(x)$	$P_1(x)$	$P_2(x)$	$P_3(x)$
c_3	1	8	-1	8
c_2	-3	-6	-3	6
c_1	-6	-3	6	-3
c_0	8	1	8	-1
k				
$n-k$				
B				
L_i				
L_ξ				

$\xrightarrow[\text{de } P_2(x)]{\text{Trocar sinal}}$

$n=3$	$P(x)$	$P_1(x)$	$P_2(x)$	$P_3(x)$
c_3	1	8	1	8
c_2	-3	-6	3	6
c_1	-6	-3	-6	-3
c_0	8	1	-8	-1
k	2	2	1	1
$n-k$	1	1	2	2
B	$\lvert -6 \rvert$	$\lvert -6 \rvert$	$\lvert -8 \rvert$	$\lvert -3 \rvert$
L_i	7	$1{,}75$	$3{,}83$	$1{,}61$
L_ξ	7	$0{,}57$	$-3{,}83$	$-0{,}62$

.

- Limites das raízes: $0{,}57 \leq \xi^+ \leq 7$ e $-3{,}83 \leq \xi^- \leq -0{,}62$.
- Número de raízes reais: $n^+ = 2$ ou 0 e $n^- = 1$.
- Existe uma raiz real negativa e as outras duas serão ou reais positivas ou complexas.

Exemplo de limites e número de raízes reais

Exemplo 16 Achar os limites e o número de raízes reais de

$$P(x) = x^6 - 5x^5 + 7x^4 + 19x^3 - 98x^2 - 104x = (x^5 - 5x^4 + 7x^3 + 19x^2 - 98x - 104)x = 0.$$

$n=5$	$P(x)$	$P_1(x)$	$P_2(x)$	$P_3(x)$
c_5	1	-104	-1	-104
c_4	-5	-98	-5	98
c_3	7	19	-7	19
c_2	19	7	19	-7
c_1	-98	-5	98	-5
c_0	-104	1	-104	-1
k				
$n-k$				
B				
L_i				
L_ξ				

$$\xrightarrow[P_1(x),\,P_2(x),\,P_3(x)]{\text{Trocar sinal de}}$$

$n=5$	$P(x)$	$P_1(x)$	$P_2(x)$	$P_3(x)$
c_5	1	104	1	104
c_4	-5	98	5	-98
c_3	7	-19	7	-19
c_2	19	-7	-19	7
c_1	-98	5	-98	5
c_0	-104	-1	104	1
k	4	3	2	4
$n-k$	1	2	3	1
B	$\lvert -104 \rvert$	$\lvert -19 \rvert$	$\lvert -98 \rvert$	$\lvert -98 \rvert$
L_i	105	$1{,}43$	$5{,}61$	$1{,}94$
L_ξ	105	$0{,}70$	$-5{,}61$	$-0{,}51$

.

- Limites das raízes: $0{,}70 \leq \xi^+ \leq 105$ e $-5{,}61 \leq \xi^- \leq -0{,}51$.
- Número de raízes reais: $n^+ = 3$ ou 1 e $n^- = 2$ ou 0.

Equações transcendentes

- Equações transcendentes não dispõem de teoremas que forneçam informações sobre os limites e o número de raízes reais.
- Uma equação transcendente pode ter um número infinito de raízes:

$$f(x) = \operatorname{sen}(x) = 0,$$

- ou mesmo não ter raízes:

$$f(x) = \operatorname{sen}(x) - 2 = 0.$$

- Método gráfico: maneira mais simples para achar um intervalo que contenha uma única raiz.
- Esboço da função no intervalo de interesse.
- Dificuldade em determinar este intervalo.
- Na prática: usar a intuição, o conhecimento a respeito da função e o método da tentativa e erro.

Algoritmo para achar um intervalo onde função troca de sinal

- Fornece um intervalo $[a, b]$, no qual uma função $f(x)$ troca de sinal, ou seja, $f(a)f(b) < 0$.
- A raiz não esta necessariamente isolada, pois pode haver um número ímpar de raízes.

```
Algoritmo TrocaSinal
{ Objetivo: Achar um intervalo [a, b] onde uma função troca de sinal }
parâmetros de entrada z
   { ponto a partir do qual o intervalo será gerado }
parâmetros de saída a, b, CondErro
   { limite inferior e superior do intervalo e condição de erro, sendo }
   { CondErro = 0 se f(a)f(b) ≤ 0 e CondErro = 1 se f(a)f(b) > 0. }
   se z = 0 então
      a ← −0,05; b ← 0,05
   senão
      a ← 0,95 ∗ z; b ← 1,05 ∗ z
   fim se
   Iter ← 0; Aureo ← 2/( raiz2(5) − 1)
   Fa ← f(a); Fb ← f(b)   { avaliar a função em a e b }
   escreva Iter, a, b, Fa, Fb
   repita
      se Fa ∗ Fb ≤ 0 ou Iter ≥ 20 então interrompa, fim se
      Iter ← Iter + 1
      se abs(Fa) < abs(Fb) então
         a ← a − Aureo ∗ (b − a)
         Fa ← f(a)   { avaliar a função em a }
      senão
         b ← b + Aureo ∗ (b − a)
         Fb ← f(b)   { avaliar a função em b }
      fim se
      escreva Iter, a, b, Fa, Fb
   fim repita
   se Fa ∗ Fb ≤ 0 então
      CondErro ← 0
   senão
      CondErro ← 1
   fim se
fim algoritmo
```

$\Vert\!\Leftarrow$

Exemplo de uso do algoritmo

Exemplo 17 Achar um intervalo, a partir de $z = 5$, onde $f(x) = 2x^3 - \cos(x+1) - 3$ troca de sinal, utilizando o algoritmo.

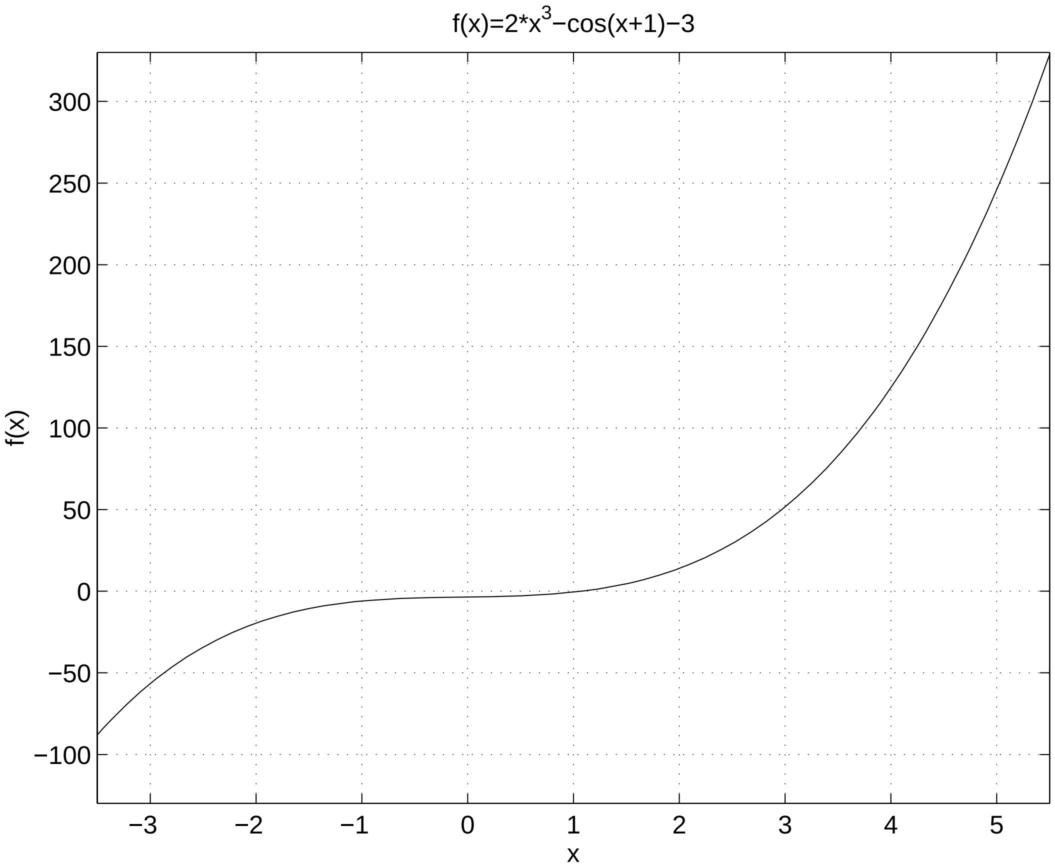
```
% O parametro de entrada
z = 5
% produz os resultados
Determinacao de intervalo onde ocorre troca de sinal
iter      a          b             Fa            Fb
  0     4.7500     5.2500     210.4826     285.4068
  1     3.9410     5.2500     119.1909     285.4068
  2     1.8229     5.2500      10.0655     285.4068
  3    -3.7221     5.2500    -105.2218     285.4068
a = -3.7221
b = 5.2500
CondErro = 0
```

- A função muda de sinal no intervalo $[-3{,}7221;\ 5{,}2500]$:

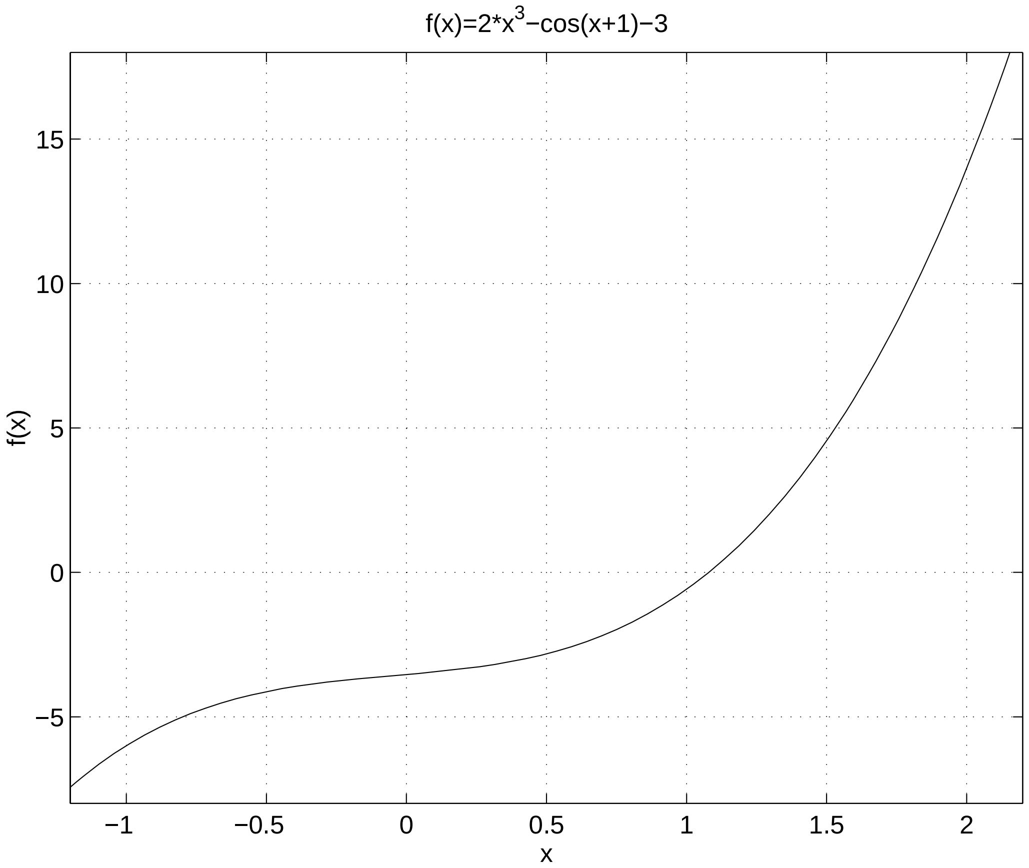
$$f(-3{,}7221) = -105{,}2218 \text{ e } f(5{,}2500) = 285{,}4068.$$

Esboços da função $f(x) = 2x^3 - \cos(x+1) - 3$

$\Vert\Leftarrow$



$-3{,}7221 \leq x \leq 5{,}2500$

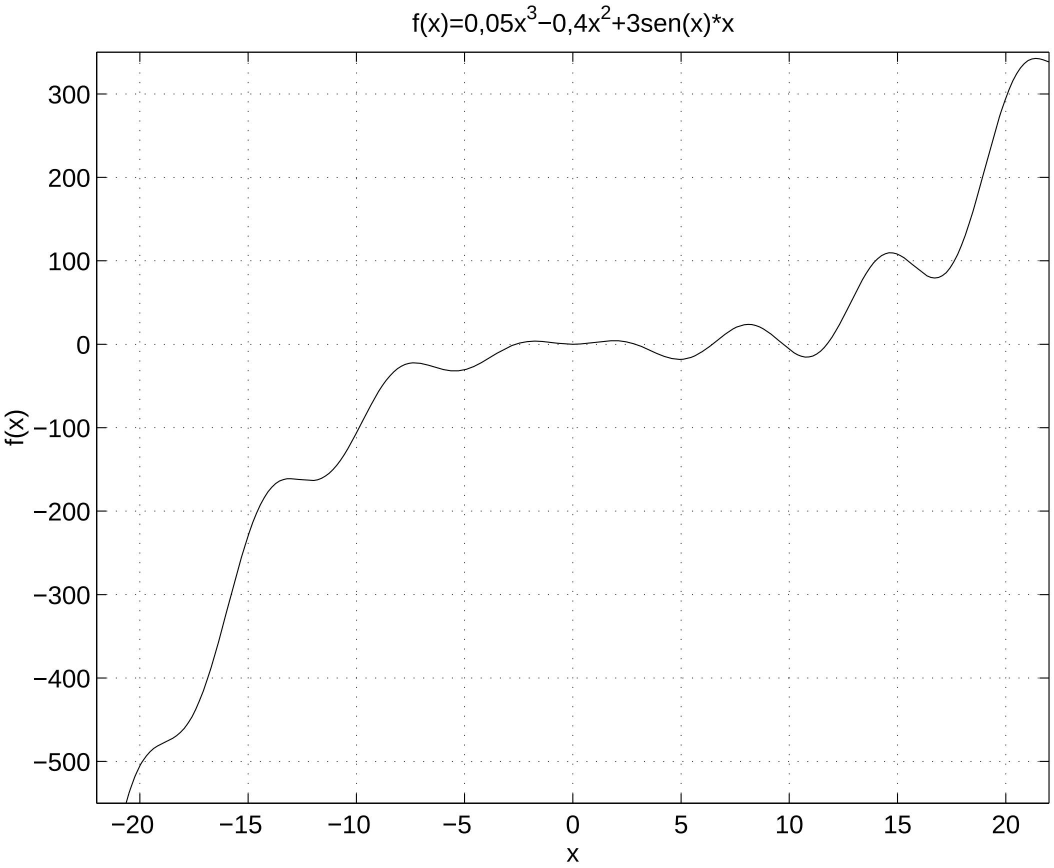


$-1 \leq x \leq 2$

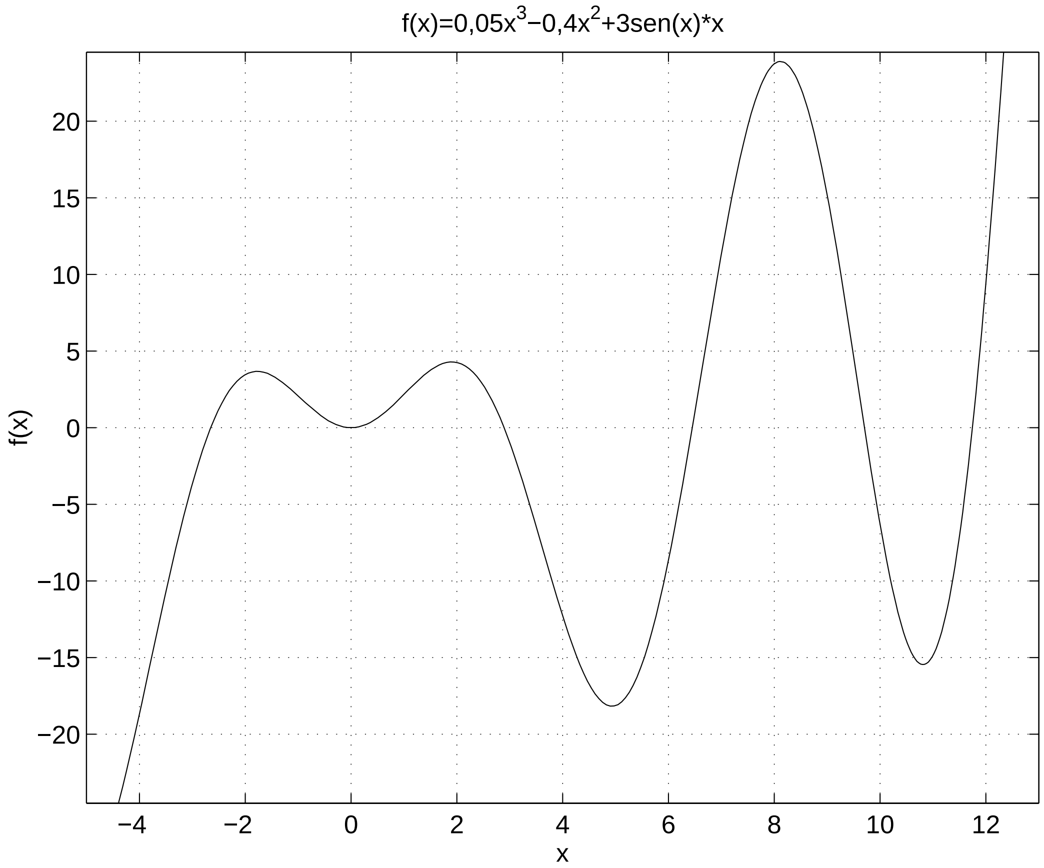
Exemplo de isolamento gráfico de raízes

Exemplo 18 Isolar, graficamente, os zeros da função $f(x) = 0{,}05x^3 - 0{,}4x^2 + 3\,\mathrm{sen}(x)x$.

- Intervalos: $-20 \leq x \leq 20$ e $-4 \leq x \leq 12$.
- Intervalos das raízes: $[-4, -2]$, $[-1, 1]$, $[2, 4]$, $[6, 8]$, $[8, 10]$ e $[10, 12]$.



$-20 \leq x \leq 20$



$-4 \leq x \leq 12$

Convergência da raiz

- Seja a raiz ξ isolada em um intervalo $[a, b]$.
- Gerar uma seqüência $\{x_0, x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots, \xi\} \in [a, b]$ que convirja para a raiz exata ξ de $f(x) = 0$.
- Critério de parada baseado em teorema.

Teorema 5 *Sejam ξ uma raiz exata e x_k uma raiz aproximada de $f(x) = 0$, sendo ξ e $x_k \in [a, b]$ e $|f'(x)| \geq m > 0$ para $a \leq x \leq b$, com*

$$m = \min_{a \leq x \leq b} |f'(x)|.$$

Então, o erro absoluto satisfaz

$$|x_k - \xi| \leq \frac{|f(x_k)|}{m}.$$

Exemplo de critério de parada

Exemplo 19 Avaliar o erro absoluto cometido ao considerar $x_k = 2{,}23$ como aproximação da raiz positiva de $f(x) = x^2 - 5 = 0$ no intervalo $[2, 3]$.

$$m = \min_{2 \leq x \leq 3} |2x| = 4.$$

$$|2{,}23 - \xi| \leq \frac{0{,}0271}{4} = 0{,}0068 \rightarrow$$

$$2{,}23 - 0{,}0068 \leq \xi \leq 2{,}23 + 0{,}0068 \;\; (\xi = \sqrt{5} \approx 2{,}2361).$$

Critério de parada

- O Teorema 5 é de aplicação muito restrita.
- Requer que seja avaliado o mínimo da derivada primeira da função $f(x)$.
- Seqüência é interrompida quando seus valores satisfizerem a pelo menos um dos critérios

$$\boxed{|x_k - x_{k-1}| \leq \varepsilon}, \tag{2}$$

$$\boxed{\left|\frac{x_k - x_{k-1}}{x_k}\right| \leq \varepsilon}, \tag{3}$$

$$\boxed{|f(x_k)| \leq \varepsilon}, \tag{4}$$

- ε: tolerância fornecida.

Ordem de convergência

- Definir a rapidez com que a seqüência gerada por um dado método, $\{x_0, x_1, x_2, \ldots, x_k, \ldots\}$, converge para a raiz exata ξ.
- Seja o erro da k-ésima iteração

$$\epsilon_k = x_k - \xi, \tag{5}$$

- diferença entre a raiz ξ e a sua estimativa x_k.
- Critério para avaliar a convergência

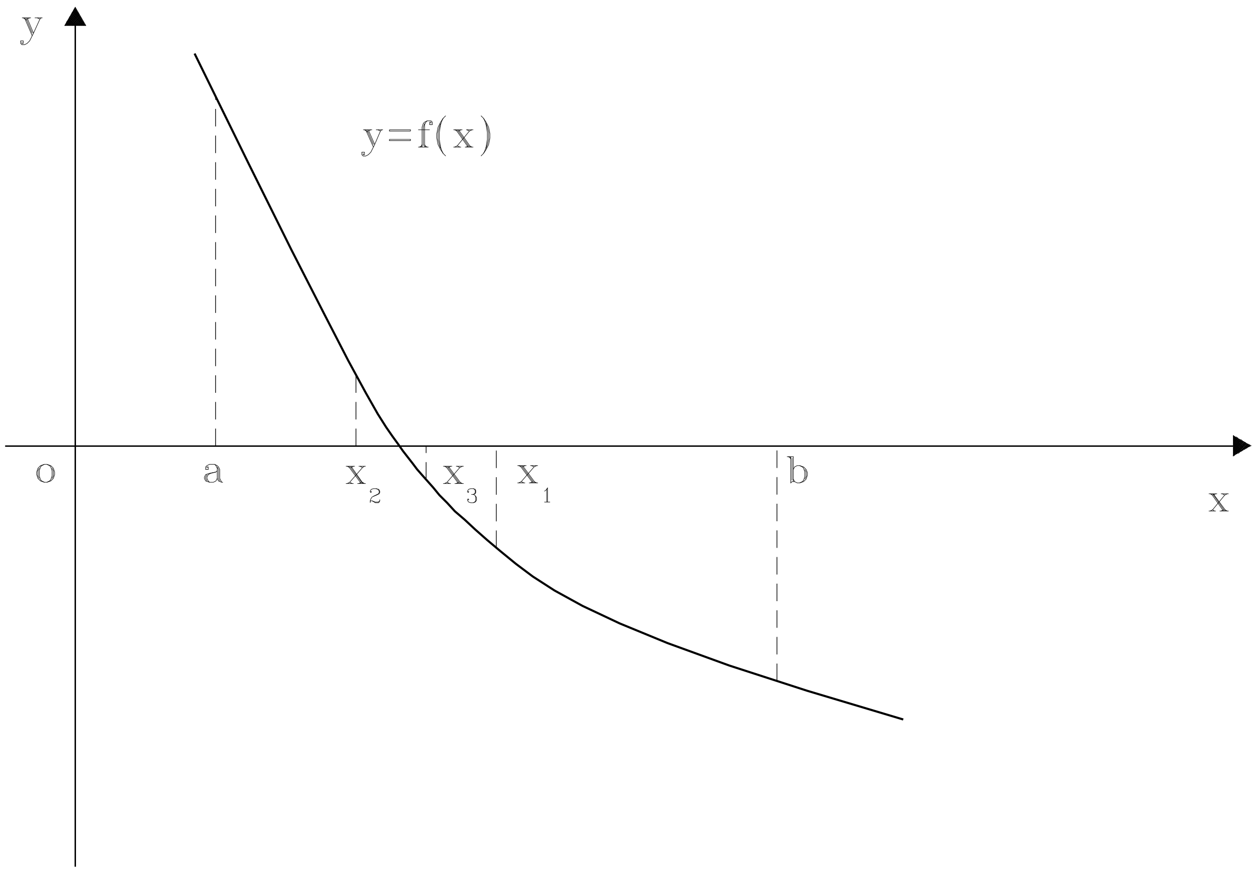
$$\lim_{k\to\infty} |\epsilon_{k+1}| = K|\epsilon_k|^\gamma \tag{6}$$

- K: constante de erro assintótico.
- γ: ordem de convergência do método gerador da seqüência.
- Quanto maior o valor de γ, mais rápida a seqüência convergirá para a raiz ξ.

Método da bisseção

- Seja $f(x)$ contínua no intervalo $[a, b]$, sendo ξ a única raiz de $f(x) = 0$ neste intervalo.
- O método da bisseção consiste em subdividir o intervalo ao meio a cada iteração.
- Manter o subintervalo que contenha a raiz, ou seja, aquele em que $f(x)$ tenha sinais opostos nos extremos.

Interpretação gráfica do método da bisseção



Método da bisseção

- Seqüência de intervalos encaixados

$$\{[a_1, b_1],\ [a_2, b_2],\ [a_3, b_3], \ldots, [a_k, b_k]\}$$
$$f(a_i)f(b_i) < 0,\ i = 1, 2, \ldots k. \tag{7}$$

- Na k-ésima iteração

$$b_k - a_k = \frac{b-a}{2^k}. \tag{8}$$

- Seqüência $\{a_1, a_2, a_3, \ldots, a_k\}$ é monotônica não decrescente limitada.
- Seqüência $\{b_1, b_2, b_3, \ldots, b_k\}$ é monotônica não crescente limitada.
- Por (8), essas duas seqüências possuem um limite comum ξ

$$\lim_{k\to\infty} a_k = \lim_{k\to\infty} b_k = \xi.$$

- Passando ao limite da desigualdade (7) com $k \to \infty$ e
- considerando que $f(x)$ é contínua: $[f(\xi)]^2 \leq 0 \to f(\xi) = 0$,
- ou seja, ξ é uma raiz de $f(x) = 0$.

Número de iterações

- O método da bisseção tem convergência garantida se $f(x)$ for contínua em $[a,b]$ e se $\xi \in [a,b]$.
- É possível determinar *a priori* o número de iterações necessárias para calcular a raiz com uma tolerância ε a partir de um intervalo $[a,b]$.
- Substituindo $x_k = (b_k - a_k)/2$ em (8),

$$|x_k - x_{k-1}| = \frac{b-a}{2^{k+1}}.$$

- Utilizando o critério (2),

$$\frac{b-a}{2^{k+1}} \leq \varepsilon.$$

- Número de iterações para calcular uma raiz no intervalo $[a,b]$ com tolerância ε

$$\boxed{k \geq \log_2\left(\frac{b-a}{\varepsilon}\right) - 1}. \tag{9}$$

Algoritmo do método da bisseção

```
Algoritmo Bisseção
{ Objetivo: Calcular a raiz de uma equação pelo método da bisseção }
parâmetros de entrada a, b, Toler, IterMax
   { limite inferior, limite superior, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída Raiz, Iter, CondErro
   { raiz, número de iterações gastas e condição de erro, sendo }
   { CondErro = 0 se a raiz foi encontrada e CondErro = 1 em caso contrário. }
   Fa ← f(a); Fb ← f(b)   { avaliar a função em a e b }
   se Fa ∗ Fb > 0 então
      escreva "função não muda de sinal nos extremos do intervalo dado"
      abandone
   fimse
   DeltaX ← abs(b − a)/2; Iter ← 0
   repita
      x ← (a + b)/2; Fx ← f(x)   { avaliar a função em x }
      escreva Iter, a, Fa, b, Fb, x, Fx, DeltaX
      se (DeltaX ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler) ou Iter ≥ IterMax então
         interrompa
      fimse
      se Fa ∗ Fx > 0 então
         a ← x; Fa ← Fx
      senão
         b ← x
      fimse
      DeltaX ← DeltaX/2; Iter ← Iter + 1
   fimrepita
   Raiz ← x
   { teste de convergência }
   se DeltaX ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler então
      CondErro ← 0
   senão
      CondErro ← 1
   fimse
fimalgoritmo
```

Exemplo do método da bisseção

Exemplo 20 Calcular a raiz de $f(x) = 2x^3 - \cos(x+1) - 3 = 0$ do Exemplo 17, que está no intervalo $[-1, 2]$, com $\varepsilon \leq 0{,}01$ pelo algoritmo do método da bisseção.

```
% Os parametros de entrada
a = -1
b = 2
Toler = 0.0100
IterMax = 100
% produzem os resultados
            Calculo de raiz de equacao pelo metodo da bissecao
iter    a          Fa         b         Fb         x          Fx         Delta_x
  0  -1.00000  -6.00000   2.00000  13.98999   0.50000  -2.8207e+00  1.50000
  1   0.50000  -2.82074   2.00000  13.98999   1.25000   1.5344e+00  0.75000
  2   0.50000  -2.82074   1.25000  13.98999   0.87500  -1.3606e+00  0.37500
  3   0.87500  -1.36062   1.25000  13.98999   1.06250  -1.2895e-01  0.18750
  4   1.06250  -0.12895   1.25000  13.98999   1.15625   6.4419e-01  0.09375
  5   1.06250  -0.12895   1.15625  13.98999   1.10938   2.4356e-01  0.04688
  6   1.06250  -0.12895   1.10938  13.98999   1.08594   5.3864e-02  0.02344
  7   1.06250  -0.12895   1.08594  13.98999   1.07422  -3.8393e-02  0.01172
  8   1.07422  -0.03839   1.08594  13.98999   1.08008   7.5211e-03  0.00586

Raiz     =  1.08008
Iter     =  8
CondErro =  0
```


Observações sobre os resultados

- A raiz é $\xi \approx x_8 = 1{,}08008$.
- Por (9), o número de iterações $k \geq \log_2((2-(-1))/0{,}01) - 1 \approx 7,23$.
- Para alcançar o critério de parada (2) $|x_k - x_{k-1}| \leq \varepsilon$ (ver coluna **`Delta_x`**) foram necessárias 8 iterações.
- Poderiam ser gastas mais iterações para atender ao outro critério de parada (4): $|f(x_k)| \leq \varepsilon$.

Exemplo do método da bisseção

Exemplo 21 Determinar a maior raiz de $f(x) = 0{,}05x^3 - 0{,}4x^2 + 3\,\text{sen}(x)x = 0$ com $\varepsilon \leq 0{,}005$, usando o algoritmo.

- Pela figura do Exemplo 18, tem-se que $\xi \in [10, 12]$.

```
% Os parametros de entrada
a = 10
b = 12
Toler = 0.0050
IterMax = 100
% produzem os resultados
            Calculo de raiz de equacao pelo metodo da bissecao
iter    a         Fa        b         Fb        x         Fx         Delta_x
  0  10.00000  -6.32063  12.00000   9.48337  11.00000  -1.4850e+01  1.00000
  1  11.00000 -14.84968  12.00000   9.48337  11.50000  -7.0594e+00  0.50000
  2  11.50000  -7.05935  12.00000   9.48337  11.75000   2.0128e-01  0.25000
  3  11.50000  -7.05935  11.75000   9.48337  11.62500  -3.6975e+00  0.12500
  4  11.62500  -3.69752  11.75000   9.48337  11.68750  -1.8136e+00  0.06250
  5  11.68750  -1.81359  11.75000   9.48337  11.71875  -8.2229e-01  0.03125
  6  11.71875  -0.82229  11.75000   9.48337  11.73438  -3.1451e-01  0.01562
  7  11.73438  -0.31451  11.75000   9.48337  11.74219  -5.7611e-02  0.00781
  8  11.74219  -0.05761  11.75000   9.48337  11.74609   7.1585e-02  0.00391
  9  11.74219  -0.05761  11.74609   9.48337  11.74414   6.9247e-03  0.00195
 10  11.74219  -0.05761  11.74414   9.48337  11.74316  -2.5359e-02  0.00098
 11  11.74316  -0.02536  11.74414   9.48337  11.74365  -9.2209e-03  0.00049
 12  11.74365  -0.00922  11.74414   9.48337  11.74390  -1.1491e-03  0.00024

Raiz     = 11.74390
Iter     = 12
CondErro =  0
```

Observações sobre o método da bisseção

- O método da bisseção é robusto.
- Ele não é eficiente devido à sua convergência lenta.
- O valor de $f(x)$ não decresce monotonicamente.
- Somente o sinal de $f(x_{k-1})$ é usado para o cálculo do próximo x_k, sem levar em consideração o seu valor.
- O método da bisseção é mais usado para reduzir o intervalo antes de usar um outro método de convergência mais rápida.

Métodos baseados em aproximação linear

- Consistem em aproximar $f(x)$ por um polinômio linear no intervalo $[x_0, x_1]$.
- Se o intervalo for pequeno, essa aproximação é válida para a maioria das funções.
- Uma estimativa da raiz ξ é tomada como o valor onde a reta cruza o eixo das abscissas.

Métodos baseados em aproximação linear cont.

- Equação do polinômio de grau 1 que passa pelos pontos de coordenadas $[x_0, f(x_0)]$ e $[x_1, f(x_1)]$:

$$y = f(x_1) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_1).$$

- Abscissa x_2, para a qual $y = 0$, tomada como aproximação da raiz

$$\boxed{x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f(x_1) - f(x_0)}(x_1 - x_0)}.$$

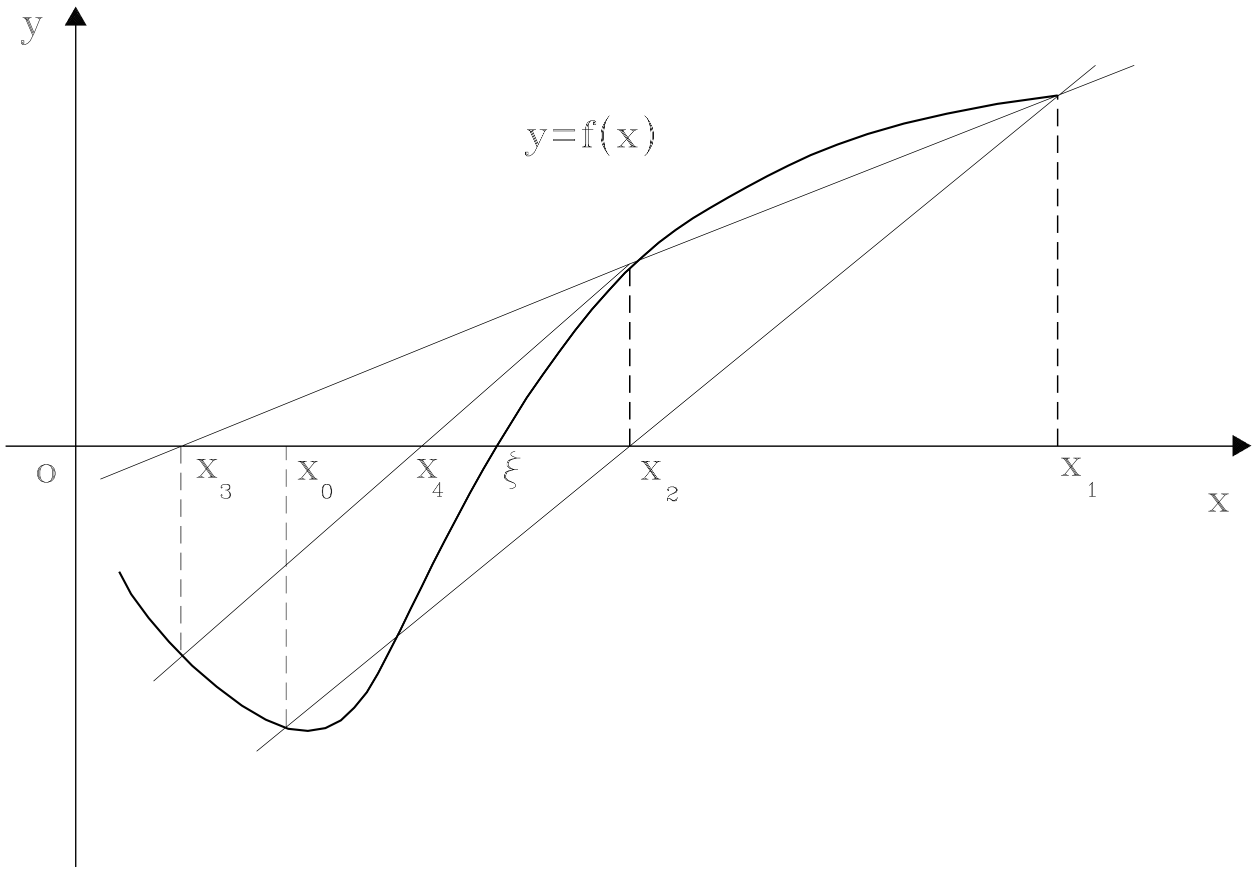
- Na próxima iteração, um dos pontos extremos do intervalo $[x_0, x_1]$ será substituído por x_2.

- Família de métodos baseados em aproximação linear: secante, *regula falsi* (posição falsa) e pégaso, entre outros.

Método da secante

- Usa os pontos obtidos nas duas últimas iterações como pontos-base por onde passará o polinômio linear.

||⇐



Algoritmo do método da secante

Algoritmo Secante
{ **Objetivo:** Calcular a raiz de uma equação pelo método da secante }
parâmetros de entrada a, b, $Toler$, $IterMax$
  { limite inferior, limite superior, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída $Raiz$, $Iter$, $CondErro$
  { raiz, número de iterações gastas e condição de erro, sendo }
  { $CondErro = 0$ se a raiz foi encontrada e $CondErro = 1$ em caso contrário. }
  $Fa \leftarrow f(a)$; $Fb \leftarrow f(b)$ { avaliar a função em a e b }
  se abs(Fa) $<$ abs(Fb) **então**
    $t \leftarrow a$; $a \leftarrow b$; $b \leftarrow t$; $t \leftarrow Fa$; $Fa \leftarrow Fb$; $Fb \leftarrow t$
  fimse
  $Iter \leftarrow 0$; $x \leftarrow b$; $Fx \leftarrow Fb$
  repita
    $DeltaX \leftarrow -Fx/(Fb - Fa) * (b - a)$
    $x \leftarrow x + DeltaX$; $Fx \leftarrow f(x)$ { avaliar a função em x }
    escreva $Iter$, a, Fa, b, Fb, x, Fx, $DeltaX$
    se (abs($DeltaX$) $\leq Toler$ **e** abs(Fx) $\leq Toler$) **ou** $Iter \geq IterMax$ **então**
      interrompa
    fimse
    $a \leftarrow b$; $Fa \leftarrow Fb$; $b \leftarrow x$; $Fb \leftarrow Fx$; $Iter \leftarrow Iter + 1$
  fimrepita
  $Raiz \leftarrow x$
  { teste de convergência }
  se abs($DeltaX$) $\leq Toler$ **e** abs(Fx) $\leq Toler$ **então**
    $CondErro \leftarrow 0$
  senão
    $CondErro \leftarrow 1$
  fimse
fimalgoritmo

$\Vert\Leftarrow$

Exemplo do método da secante

Exemplo 22 Determinar a raiz de $f(x) = 2x^3 - \cos(x+1) - 3 = 0$ do Exemplo 17 pelo algoritmo do método da secante, com $\varepsilon \leq 0{,}01$, sabendo-se que $\xi \in [-1, 2]$.

```
% Os parametros de entrada
a = -1
b = 2
Toler = 0.0100
IterMax = 100
% produzem os resultados
             Calculo de raiz de equacao pelo metodo da secante
iter    a          Fa         b          Fb         x         Fx         Delta_x
  0   2.00000  13.98999  -1.00000  -6.00000  -0.09955 -3.623e+00  9.005e-01
  1  -1.00000  -6.00000  -0.09955  -3.62323   1.27313  1.773e+00  1.373e+00
  2  -0.09955  -3.62323   1.27313   1.77312   0.82210 -1.640e+00 -4.510e-01
  3   1.27313   1.77312   0.82210  -1.64011   1.03883 -3.068e-01  2.167e-01
  4   0.82210  -1.64011   1.03883  -0.30676   1.08869  7.576e-02  4.986e-02
  5   1.03883  -0.30676   1.08869   0.07576   1.07881 -2.438e-03 -9.875e-03

Raiz     =  1.07881
Iter     =  5
CondErro =  0
```

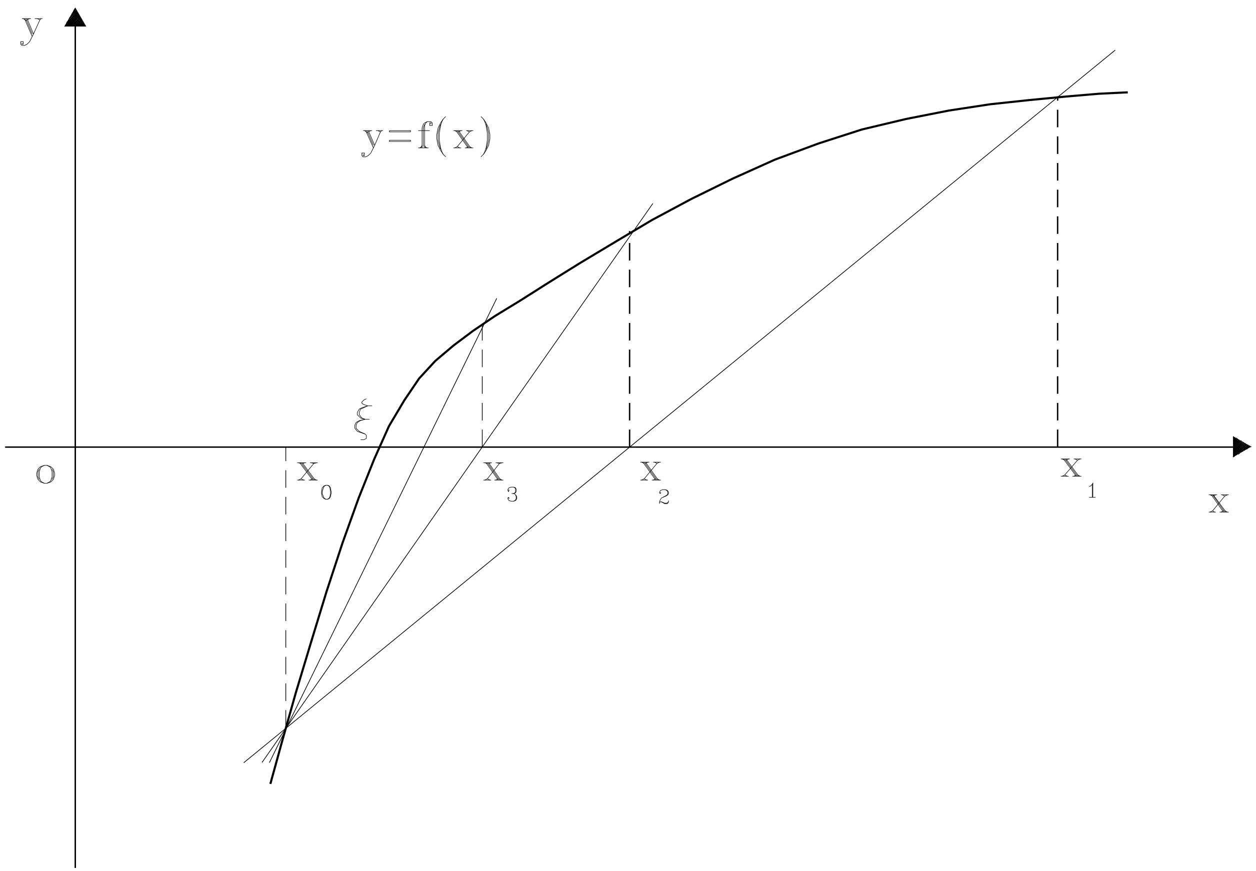
Observações sobre o método da secante

- O método da secante pode apresentar alguns problemas.
- Se a função não for, aproximadamente, linear no intervalo que contém a raiz, uma aproximação sucessiva pode sair deste intervalo.
- Ver figura.

Método da *regula falsi*

- Maneira de evitar problemas é garantir que a raiz esteja isolada no intervalo inicial e continue dentro dos novos intervalos gerados.
- Método da *regula falsi* retém o ponto no qual o valor da função tem sinal oposto ao valor da função no ponto mais recente.

|⇐



Algoritmo do método da *regula falsi*

```
Algoritmo RegulaFalsi
{ Objetivo: Calcular a raiz de uma equação pelo método da regula falsi }
parâmetros de entrada a, b, Toler, IterMax
   { limite inferior, limite superior, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída Raiz, Iter, CondErro
   { raiz, número de iterações gastas e condição de erro, sendo }
   { CondErro = 0 se a raiz foi encontrada e CondErro = 1 em caso contrário. }
   Fa ← f(a); Fb ← f(b); { avaliar a função em a e b }
   se Fa ∗ Fb > 0 então
      escreva "função não muda de sinal nos extremos do intervalo dado"
      abandone
   fimse
   se Fa > 0 então
      t ← a; a ← b; b ← t; t ← Fa; Fa ← Fb; Fb ← t
   fimse
   Iter ← 0; x ← b; Fx ← Fb
   repita
      DeltaX ← −Fx/(Fb − Fa) ∗ (b − a)
      x ← x + DeltaX; Fx ← f(x); { avaliar a função em x }
      escreva Iter, a, Fa, b, Fb, x, Fx, DeltaX
      se (abs(DeltaX) ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler) ou Iter ≥ IterMax então
         interrompa
      fimse
      se Fx < 0 então
         a ← x; Fa ← Fx
      senão
         b ← x; Fb ← Fx
      fimse; Iter ← Iter + 1
   fimrepita
   Raiz ← x
   { teste de convergência }
   se abs(DeltaX) ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler então
      CondErro ← 0
   senão
      CondErro ← 1
   fimse
fimalgoritmo
```

$\Vdash\!\Leftarrow$

Exemplo do método da *regula falsi*

Exemplo 23 Achar a raiz de $f(x) = 2x^3 - \cos(x+1) - 3 = 0$ do Exemplo 17 usando o algoritmo do método da *regula falsi*, com $\varepsilon \leq 0{,}01$, sabendo-se que $\xi \in [-1, 2]$.

```
% Os parametros de entrada
a = -1
b = 2
Toler = 0.0100
IterMax = 100
% produzem os resultados
          Calculo de raiz de equacao pelo metodo da regula falsi
iter    a         Fa         b         Fb         x         Fx         Delta_x
  0  -1.00000  -6.00000   2.00000  13.98999  -0.09955 -3.623e+00 -2.100e+00
  1  -0.09955  -3.62323   2.00000  13.98999   0.33235 -3.163e+00  4.319e-01
  2   0.33235  -3.16277   2.00000  13.98999   0.63985 -2.407e+00  3.075e-01
  3   0.63985  -2.40710   2.00000  13.98999   0.83952 -1.551e+00  1.997e-01
  4   0.83952  -1.55114   2.00000  13.98999   0.95534 -8.810e-01  1.158e-01
  5   0.95534  -0.88102   2.00000  13.98999   1.01723 -4.631e-01  6.189e-02
  6   1.01723  -0.46306   2.00000  13.98999   1.04872 -2.333e-01  3.149e-02
  7   1.04872  -0.23328   2.00000  13.98999   1.06432 -1.150e-01  1.560e-02
  8   1.06432  -0.11498   2.00000  13.98999   1.07195 -5.607e-02  7.628e-03
  9   1.07195  -0.05607   2.00000  13.98999   1.07565 -2.719e-02  3.704e-03
 10   1.07565  -0.02719   2.00000  13.98999   1.07745 -1.315e-02  1.793e-03
 11   1.07745  -0.01315   2.00000  13.98999   1.07831 -6.355e-03  8.666e-04

Raiz     =  1.07831
Iter     = 11
CondErro =  0
```

Observações sobre o método da *regula falsi*

- No exemplo, a convergência para a raiz só se fez de um lado do intervalo.
- Isto torna o método mais lento que o método da secante.
- No entanto, mais robusto.
- Quanto mais longe o ponto fixo for da raiz, mais lenta será a convergência.
- Método da *regula falsi* tem ordem de convergência menor que o método da secante.
- Ponto mantido fixo não é geralmente um dos mais recentes.

Método pégaso

- Seqüência $\{x_i\}$ é obtida pela fórmula de recorrência

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1}),\ k = 1, 2, 3, \ldots}$$

- Pontos $[x_{k-1}, f(x_{k-1})]$ e $[x_k, f(x_k)]$ são escolhidos de modo que $f(x_{k-1})$ e $f(x_k)$ tenham sempre sinais opostos, garantindo assim que $\xi \in [x_{k-1}, x_k]$.
- Para evitar a retenção de um ponto, valor de $f(x_{k-1})$ é reduzido pelo fator

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

- Reta pode ser traçada por um ponto não pertencente à curva de $f(x)$.

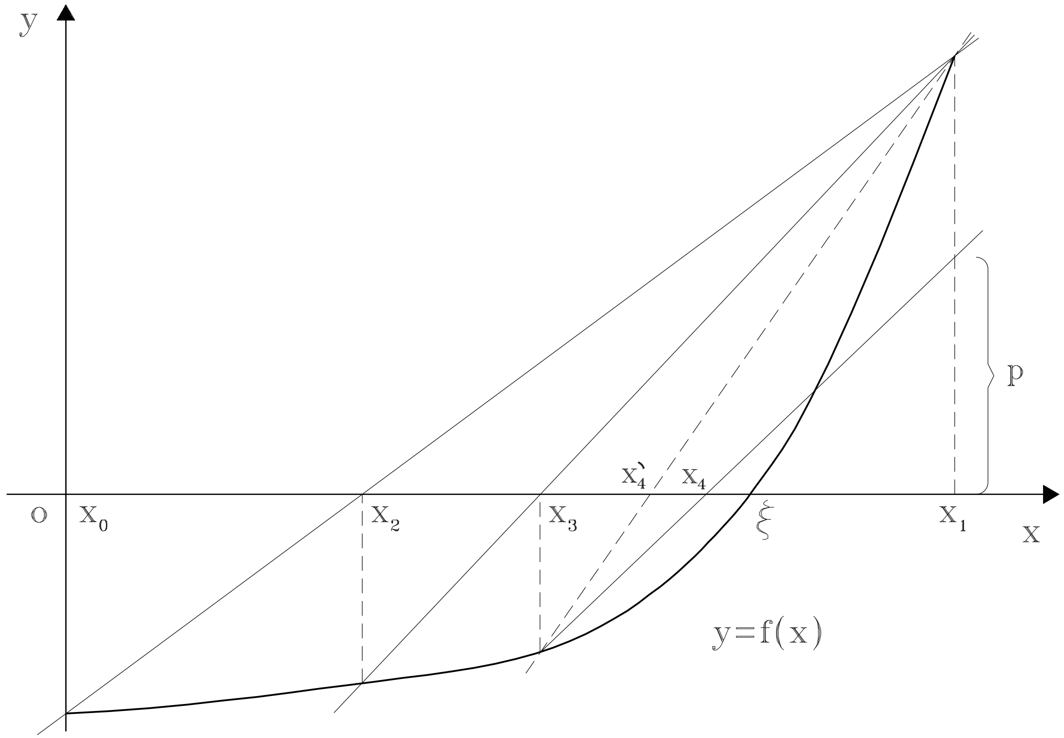
Interpretação gráfica do método pégaso

- Estimativa x_4 obtida usando os pontos $[x_3, f(x_3)]$ e $[x_1, p]$, sendo

$$p = f(x_1) \times \frac{f(x_2)}{f(x_2) + f(x_3)}.$$

- x_4 é uma melhor aproximação da raiz do que x'_4 (*regula falsi*).

||⇐



Algoritmo do método pégaso

```
Algoritmo Pégaso
{ Objetivo: Calcular a raiz de uma equação pelo método pégaso }
parâmetros de entrada a, b, Toler, IterMax
  { limite inferior, limite superior, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída Raiz, Iter, CondErro
  { raiz, número de iterações gastas e condição de erro, sendo }
  { CondErro = 0 se a raiz foi encontrada e CondErro = 1 em caso contrário. }
  Fa ← f(a); Fb ← f(b); { avaliar a função em a e b }
  x ← b; Fx ← Fb; Iter ← 0
  repita
    DeltaX ← −Fx/(Fb − Fa) ∗ (b − a)
    x ← x + DeltaX; Fx ← f(x); { avaliar a função em x }
    escreva Iter, a, Fa, b, Fb, x, Fx, DeltaX
    se (abs(DeltaX) ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler) ou Iter ≥ IterMax então
      interrompa
    fimse
    se Fx ∗ Fb < 0 então
      a ← b; Fa ← Fb
    senão
      Fa ← Fa ∗ Fb/(Fb + Fx)
    fimse
    b ← x; Fb ← Fx
    Iter ← Iter + 1
  fimrepita
  Raiz ← x
  { teste de convergência }
  se abs(DeltaX) ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler então  CondErro ← 0
  senão  CondErro ← 1, fimse
fimalgoritmo
```

Exemplo do método pégaso

Exemplo 24 Calcular com $\varepsilon \leq 0{,}01$, a raiz de $f(x) = 2x^3 - \cos(x+1) - 3 = 0$ do Exemplo 17, pelo algoritmo do método pégaso, sabendo-se que $\xi \in [-1, 2]$.

```
% Os parametros de entrada
a = -1
b = 2
Toler = 0.0100
IterMax = 100
% produzem os resultados
               Calculo de raiz de equacao pelo metodo pegaso
iter    a         Fa         b         Fb         x         Fx         Delta_x
  0  -1.00000  -6.00000   2.00000  13.98999  -0.09955 -3.623e+00 -2.100e+00
  1   2.00000  13.98999  -0.09955  -3.62323   0.33235 -3.163e+00  4.319e-01
  2   2.00000   7.46964   0.33235  -3.16277   0.82842 -1.608e+00  4.961e-01
  3   2.00000   4.95180   0.82842  -1.60817   1.11563  2.954e-01  2.872e-01
  4   0.82842  -1.60817   1.11563   0.29537   1.07106 -6.294e-02 -4.457e-02
  5   1.11563   0.29537   1.07106  -0.06294   1.07889 -1.807e-03  7.828e-03

Raiz     =  1.07889
Iter     =  5
CondErro =  0
```

Exemplo do método pégaso

Exemplo 25 Achar o ponto de máximo μ do polinômio $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24$, pelo método pégaso, com $\varepsilon \leq 10^{-5}$, sabendo-se que $\mu \in [-1, 1]$, de acordo com a figura.

- Condição de máximo de $f(x)$: derivada primeira se anule e derivada segunda seja negativa.
- Problema equivalente a calcular uma raiz de $P'(x) = 4x^3 + 6x^2 - 26x - 14 = 0$.

```
% Os parametros de entrada
a = -1
b = 1
Toler = 1.0000e-05
IterMax = 100
% produzem os resultados
               Calculo de raiz de equacao pelo metodo pegaso
iter    a         Fa         b         Fb         x         Fx        Delta_x
  0  -1.00000  14.00000   1.00000 -30.00000  -0.36364 -3.944e+00 -1.364e+00
  1  -1.00000  12.37317  -0.36364  -3.94440  -0.51746  5.064e-01 -1.538e-01
  2  -0.36364  -3.94440  -0.51746   0.50640  -0.49996 -1.135e-03  1.750e-02
  3  -0.51746   0.50640  -0.49996  -0.00114  -0.50000  4.764e-08 -3.914e-05
  4  -0.49996  -0.00114  -0.50000   0.00000  -0.50000  0.000e+00  1.643e-09

Raiz     = -0.50000
Iter     =  4
CondErro =  0
```

- $P''(x) = 12x^2 + 12x - 26$ e $P''(-0{,}5) = -29 < 0$: $\mu \approx x_4 = -0{,}5$ é um ponto de máximo.

Ordem de convergência

- Seja uma estimativa x_2 da raiz ξ obtida por uma reta passando pelos pontos $[x_0, f(x_0)]$ e $[x_1, f(x_1)]$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f(x_1) - f(x_0)}(x_1 - x_0) = \frac{x_1 f(x_0) - x_0 f(x_1)}{f(x_0) - f(x_1)}.$$

- Expandindo $f(x_k)$ em série de Taylor com relação à raiz ξ e considerando o erro da k-ésima iteração dado por (5),

$$\epsilon_2 + \xi = \frac{(\epsilon_1 + \xi)\left(\epsilon_0 f'(\xi) + \epsilon_0^2 \frac{f''(\xi)}{2} + \cdots\right) - (\epsilon_0 + \xi)\left(\epsilon_1 f'(\xi) + \epsilon_1^2 \frac{f''(\xi)}{2} + \cdots\right)}{(\epsilon_0 - \epsilon_1) f'(\xi) + (\epsilon_0^2 - \epsilon_1^2)\frac{f''(\xi)}{2} + \cdots}.$$

- Simplificando

$$\epsilon_2 = \frac{\frac{f''(\xi)}{2}\epsilon_0 \epsilon_1 (\epsilon_0 - \epsilon_1) + \cdots}{f'(\xi)(\epsilon_0 - \epsilon_1) + \frac{f''(\xi)}{2}(\epsilon_0 - \epsilon_1)(\epsilon_0 + \epsilon_1) + \cdots}.$$

Ordem de convergência do método da *regula falsi*

- Dividindo por $f'(\xi)(\epsilon_0 - \epsilon_1)$

$$\epsilon_2 = \frac{\dfrac{f''(\xi)}{2f'(\xi)}\epsilon_0\epsilon_1 + \cdots}{1 + \dfrac{f''(\xi)}{2f'(\xi)}(\epsilon_0 + \epsilon_1) + \cdots},$$

$$\epsilon_2 \approx \frac{f''(\xi)}{2f'(\xi)}\epsilon_0\epsilon_1. \tag{10}$$

- No método da *regula falsi* a raiz deve ficar sempre isolada em um intervalo.
- x_0 será geralmente fixo durante várias iterações.
- O erro ϵ_0 também será fixo resultando que o erro da k-ésima iteração será

$$\epsilon_{k+1} = K_r\epsilon_k.$$

- Por (6), o método da *regula falsi* apresenta convergência de primeira ordem.

Ordem de convergência do método da secante

- Os valores de x_k e x_{k-1} são sempre atualizados.
- Generalizando (10)

$$\epsilon_{k+1} = C\epsilon_{k-1}\epsilon_k.$$

- Por (6)

$$|\epsilon_{k+1}| = K|\epsilon_k|^\gamma.$$

- Usando esta equação na equação anterior,

$$K|\epsilon_k|^\gamma = |C||\epsilon_k| \left(\frac{|\epsilon_k|}{K}\right)^{\frac{1}{\gamma}}.$$

- Rearranjando,

$$K^{1+\frac{1}{\gamma}}|\epsilon_k|^\gamma = |C||\epsilon_k|^{1+\frac{1}{\gamma}}.$$

- A ordem de convergência γ deve ser positiva e pela equação acima

$$\gamma = 1 + \frac{1}{\gamma} \longrightarrow \gamma^2 - \gamma - 1 = 0 \rightsquigarrow \gamma = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1{,}61803.$$

Ordem de convergência dos métodos da secante e pégaso

- O método da secante tem ordem de convergência igual à relação áurea.
- Além disso,

$$K^{1+\frac{1}{\gamma}} = |C|.$$

- Como $1 + \frac{1}{\gamma} = \gamma$,

$$K^{\gamma} = |C| \longrightarrow K = |C|^{\frac{1}{\gamma}} = |C|^{\gamma-1}.$$

- Por (6) e (10), o método da secante apresenta

$$|\epsilon_{k+1}| \approx \left|\frac{f''(\xi)}{2f'(\xi)}\right|^{\gamma-1} |\epsilon_k|^{\gamma}.$$

- Segundo Dowell e Jarratt, o método pégaso tem ordem de convergência 1,642.
- Resumindo: $\gamma_{regula\ falsi} = 1$, $\gamma_{\text{secante}} = 1,618$ e $\gamma_{\text{pégaso}} = 1,642$.

Métodos baseados em aproximação quadrática

- Métodos para cálculo de raízes baseados na aproximação de $f(x)$ por polinômio de grau 1.
- Estimativa da raiz é o ponto onde a reta intercepta o eixo das abscissas.
- Estimativa da raiz de $f(x) = 0$ pode ser ainda melhor se for utilizado um polinômio de grau 2.
- Métodos: Muller e de van Wijngaarden-Dekker-Brent.

Método de Muller

- Consiste em aproximar $f(x)$, na vizinhança da raiz $\xi \in [x_0, x_2]$, por um polinômio quadrático.
- Polinômio construído de modo a passar pelos três pontos:

$$[x_0, f(x_0)],\ [x_1, f(x_1)] \ \text{ e } \ [x_2, f(x_2)].$$

- Zero do polinômio usado como uma estimativa da raiz ξ de $f(x) = 0$.
- Processo é repetido usando sempre os três pontos mais próximos da raiz.
- Polinômio de segundo grau que passa pelos três pontos

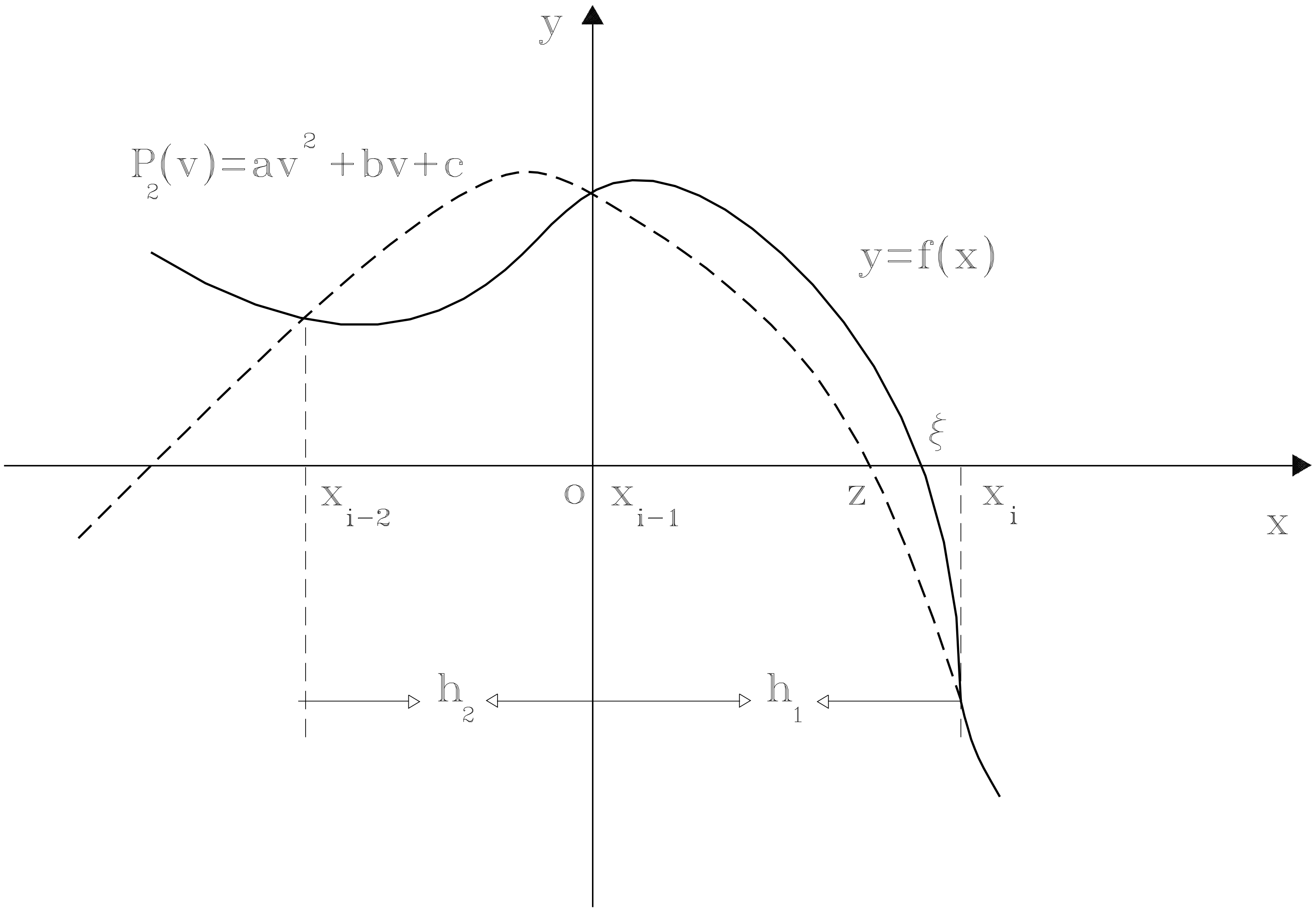
$$[x_{i-2}, f(x_{i-2})],\ [x_{i-1}, f(x_{i-1})] \ \text{ e } \ [x_i, f(x_i)],$$

- na forma

$$P_2(v) = av^2 + bv + c \tag{11}$$

- onde $v = x - x_{i-1}$ pode ser construído de acordo com a figura.

Interpretação gráfica do método de Muller



Método de Muller cont.

- Para cada um dos três pontos,

$$P_2(x_{i-2}) = f(x_{i-2}) \to a(x_{i-2} - x_{i-1})^2 + b(x_{i-2} - x_{i-1}) + c = f(x_{i-2}),$$
$$P_2(x_{i-1}) = f(x_{i-1}) \to a(0)^2 + b(0) + c = f(x_{i-1}) \to c = f(x_{i-1}) \text{ e} \qquad (12)$$
$$P_2(x_i) = f(x_i) \to a(x_i - x_{i-1})^2 + b(x_i - x_{i-1}) + c = f(x_i).$$

- Definindo

$$h_1 = x_i - x_{i-1} \quad \text{e}$$
$$h_2 = x_{i-1} - x_{i-2}.$$

- Por (12), é obtido o sistema linear

$$h_2^2 a - h_2 b = f(x_{i-2}) - f(x_{i-1}),$$

$$h_1^2 a + h_1 b = f(x_i) - f(x_{i-1}).$$

Método de Muller cont.

- Solução do sistema linear

$$a = \frac{1}{h_1(h_1 + h_2)}(f(x_i) - (r+1)f(x_{i-1}) + rf(x_{i-2})) \tag{13}$$

- sendo $r = h_1/h_2$ e

$$b = \frac{1}{h_1}(f(x_i) - f(x_{i-1})) - ah_1, \tag{14}$$

- onde a é dado por (13).
- Os dois zeros do polinômio de grau 2 em v (11) são

$$z = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

- Raiz mais próxima de x_{i-1}: sinal na expressão escolhido de modo a tornar o numerador o menor possível.

Método de Muller cont.

- Em vista da transformação $v = x - x_{i-1}$, a próxima estimativa da raiz ξ é

$$\boxed{x_{i+1} = x_{i-1} + \frac{-b + \text{sinal}(b)\sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}},$$

- onde a, b e c são dados por (13), (14) e (12).
- Na próxima iteração, devem ser utilizados os três pontos mais próximos de ξ.

Algoritmo do método de Muller

```
Algoritmo Muller
{ Objetivo: Calcular a raiz de uma equação pelo método de Muller }
parâmetros de entrada a, c, Toler, IterMax
   { limite inferior, limite superior, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída Raiz, Iter, CondErro
   { raiz, número de iterações gastas e condição de erro, sendo }
   { CondErro = 0 se a raiz foi encontrada e CondErro = 1 em caso contrário. }
   { avaliar a função em a, c e b }
   Fa ← f(a); Fc ← f(c); b ← (a + c)/2; Fb ← f(b)
   x ← b; Fx ← Fb; DeltaX ← c − a; Iter ← 0
   repita
      h1 ← c − b; h2 ← b − a; r ← h1/h2; t ← x
      A ← (Fc − (r + 1) ∗ Fb + r ∗ Fa)/(h1 ∗ (h1 + h2))
      B ← (Fc − Fb)/h1 − A ∗ h1
      C = Fb; z ← (−B + sinal(B) ∗ raiz2(B^2 − 4 ∗ A ∗ C))/(2 ∗ A)
      x ← b + z; DeltaX ← x − t; Fx ← f(x); { avaliar a função em x }
      escreva Iter, a, b, c, x, Fx, DeltaX
      se (abs(DeltaX) ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler) ou Iter ≥ IterMax então
         interrompa
      fimse
      se x > b então
         a ← b; Fa ← Fb
      senão
         c ← b; Fc ← Fb
      fimse
      b ← x; Fb ← Fx; Iter ← Iter + 1
   fimrepita
   Raiz ← x
   { teste de convergência }
   se abs(DeltaX) ≤ Toler e abs(Fx) ≤ Toler então
      CondErro ← 0
   senão
      CondErro ← 1
   fimse
fimalgoritmo
```

Exemplo do método de Muller

Exemplo 26 Calcular com $\varepsilon \leq 0{,}01$, a raiz de $f(x) = 2x^3 - \cos(x+1) - 3 = 0$ do Exemplo 17, pelo método de Muller apresentado no algoritmo, sabendo-se que $\xi \in [-1,\ 2]$.

```
% Os parametros de entrada
a = -1
b = 2
Toler = 0.0100
IterMax = 100
% produzem os resultados
            Calculo de raiz de equacao pelo metodo de Muller
iter     a          b          c          x        Fx             Delta_x
  0   -1.00000    0.50000    2.00000    0.86331 -1.42476e+00  3.63315e-01
  1    0.50000    0.86331    2.00000    1.05488 -1.86933e-01  1.91564e-01
  2    0.86331    1.05488    2.00000    1.07803 -8.58214e-03  2.31508e-02
  3    1.05488    1.07803    2.00000    1.07912 -4.55606e-05  1.08694e-03

Raiz     =  1.07912
Iter     =  3
CondErro =  0
```

Exemplo do método de Muller

Exemplo 27 Achar a raiz de $f(x) = 0{,}05x^3 - 0{,}4x^2 + 3\,\mathrm{sen}(x)x = 0$ do Exemplo 18, com $\varepsilon \leq 10^{-10}$, que se encontra no intervalo $[10,\ 12]$, usando o método de Muller.

```
% Os parametros de entrada
a = 10
b = 12
Toler = 1.0000e-10
IterMax = 100
% produzem os resultados
            Calculo de raiz de equacao pelo metodo de Muller
iter     a          b          c          x         Fx            Delta_x
  0   10.00000   11.00000   12.00000   11.74014 -1.25090e-01  7.40141e-01
  1   11.00000   11.74014   12.00000   11.74398  1.54925e-03  3.83681e-03
  2   11.74014   11.74398   12.00000   11.74393 -1.45315e-07 -4.68547e-05
  3   11.74014   11.74393   11.74398   11.74393  1.06581e-14  4.39453e-09
  4   11.74393   11.74393   11.74398   11.74393  1.06581e-14  0.00000e+00

Raiz     = 11.74393
Iter     =  4
CondErro =  0
```

Ordem de convegência

- Hildebrand mostrou que a expressão (6) apresenta a forma

$$|\epsilon_{k+1}| \approx \left|\frac{f'''(\xi)}{6f'(\xi)}\right|^{\frac{\gamma-1}{2}} |\epsilon_k|^{\gamma}$$

- onde γ é a raiz positiva da equação

$$\gamma = 1 + \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} \longrightarrow \gamma^3 - \gamma^2 - \gamma - 1 = 0.$$

- Método de Muller tem ordem de convergência $\gamma \approx 1{,}8393$.

Método de van Wijngaarden-Dekker-Brent

- Resultado da combinação da interpolação inversa quadrática e da bisseção.
- Garante que a raiz continue sempre isolada.
- Interpolação quadrática: $P_2(x) \approx f(x) = y$ determinado a partir de três pontos:

$$[x_{i-2}, f(x_{i-2})],\ [x_{i-1}, f(x_{i-1})] \text{ e } [x_i, f(x_i)].$$

- Valor aproximado de $f(t)$: avaliar $P_2(t)$.
- Interpolação inversa quadrática: polinômio interpolador de grau 2

$$\Pi_2(y) \approx f^{-1}(y) = x \qquad (15)$$

- construído a partir dos três pontos:

$$[f(x_{i-2}), x_{i-2}],\ [f(x_{i-1}), x_{i-1}] \text{ e } [f(x_i), x_i].$$

- Valor aproximado de $f^{-1}(z)$: avaliar $\Pi_2(z)$.

Método de van Wijngaarden-Dekker-Brent cont.

- Polinômio $\Pi_2(y)$ obtido por interpolação de Lagrange

$$\begin{aligned}\Pi_2(y) &= x_{i-2}\frac{(y-f(x_{i-1}))(y-f(x_i))}{(f(x_{i-2})-f(x_{i-1}))(f(x_{i-2})-f(x_i))} \\ &+ x_{i-1}\frac{(y-f(x_{i-2}))(y-f(x_i))}{(f(x_{i-1})-f(x_{i-2}))(f(x_{i-1})-f(x_i))} \\ &+ x_i\frac{(y-f(x_{i-2}))(y-f(x_{i-1}))}{(f(x_i)-f(x_{i-2}))(f(x_i)-f(x_{i-1}))}.\end{aligned}$$

- Como $y = f(x) \longrightarrow x = f^{-1}(y)$.
- Aproximação da raiz ξ de $f(x) = 0$ é o ponto de abscissa correspondente à $f^{-1}(0)$.
- Por (15), esta aproximação é dada por $x = \Pi_2(0)$.

Algoritmo do método de van Wijngaarden-Dekker-Brent

```
Algoritmo van Wijngaarden-Dekker-Brent
{ Objetivo: Calcular a raiz pelo método de van Wijngaarden-Dekker-Brent }
parâmetros de entrada a, b, Toler, IterMax
  { limite inferior, limite superior, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída Raiz, Iter, CondErro
  { raiz, número de iterações gastas e condição de erro, sendo }
  { CondErro = 0 se a raiz foi encontrada e CondErro = 1 em caso contrário. }
  Fa ← f(a); Fb ← f(b); { avaliar a função em a e b }
  se Fa ∗ Fb > 0 então
    escreva "a função não muda de sinal nos extremos do intervalo dado"
    abandone
  fim se
  c ← b; Fc ← Fb; Iter ← 0
  repita
    { altera a, b e c para que b seja a melhor estimativa da raiz }
    se Fb ∗ Fc > 0 então c ← a, Fc ← Fa, d ← b − a, e ← d, fim se
    se abs(Fc) < abs(Fb) então
      a ← b; b ← c; c ← a; Fa ← Fb; Fb ← Fc; Fc ← Fa
    fim se
    Tol ← 2 ∗ Toler ∗ max(abs(b), 1); z ← (c − b)/2
    escreva Iter, a, c, b, Fb, z
    { teste de convergência }
    se abs(z) ≤ Tol ou Fb = 0 ou Iter ≥ IterMax então interrompa, fim se
    { escolha entre interpolação e bisseção }
    se abs(e) ≥ Tol e abs(Fa) > abs(Fb) então
      s ← Fb/Fa
      se a = c então  { interpolação linear }
        p ← 2 ∗ z ∗ s; q ← 1 − s
      senão  { interpolação inversa quadrática }
        q ← Fa/Fc; r ← Fb/Fc; p ← s ∗ (2 ∗ z ∗ q ∗ (q − r) − (b − a) ∗ (r − 1))
        q ← (q − 1) ∗ (r − 1) ∗ (s − 1)
      fim se
      se p > 0 então q ← −q, senão p ← −p, fim se
      se 2∗p < min(3∗z∗q−abs(Tol∗q), abs(e∗q)) então  { aceita interpolação }
        e ← d; d ← p/q
      senão  { usa bisseção devido à falha na interpolação }
        d ← z; e ← z
      fim se
    senão  { bisseção }
      d ← z; e ← z
    fim se
    a ← b; Fa ← Fb
    se abs(d) > Tol então b ← b + d, senão b ← b + sinal(z) ∗ Tol, fim se
    Iter ← Iter + 1; Fb ← f(b)  { avaliar a função em b }
  fim repita
  Raiz ← b
  se abs(z) ≤ Tol ou Fb = 0 então CondErro ← 0, senão CondErro ← 1, fim se
fim algoritmo
```

Exemplo do método de van Wijngaarden-Dekker-Brent

Exemplo 28 Calcular pelo método de van Wijngaarden-Dekker-Brent, descrito no algoritmo, a menor raiz de $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24 = 0$ do Exemplo 11, com $\varepsilon \leq 10^{-10}$, sabendo-se que $\xi \in [-5, -3]$.

```
% Os parametros de entrada
a = -5
b = -3
Toler = 1.0000e-10
IterMax = 100
% produzem os resultados
  Calculo de raiz pelo metodo de van Wijngaarden-Dekker-Brent
iter     a           c           b          Fb             z
  0   -5.00000   -5.00000   -3.00000  -2.40000e+01  -1.00000e+00
  1   -3.00000   -5.00000   -3.28571  -2.47397e+01  -8.57143e-01
  2   -3.28571   -3.28571   -4.14286   1.12453e+01   4.28571e-01
  3   -4.14286   -4.14286   -3.87500  -7.85522e+00  -1.33929e-01
  4   -3.87500   -4.14286   -3.98516  -1.02599e+00  -7.88495e-02
  5   -3.98516   -3.98516   -4.00032   2.26777e-02   7.58292e-03
  6   -4.00032   -4.00032   -4.00000  -2.86125e-04  -1.63983e-04
  7   -4.00000   -4.00032   -4.00000  -7.80927e-08  -1.61940e-04
  8   -4.00000   -4.00032   -4.00000   0.00000e+00  -1.61940e-04

Raiz     = -4.00000
Iter     =  8
CondErro =  0
```

Exemplo do método de van Wijngaarden-Dekker-Brent

Exemplo 29 Calcular a raiz de $f(x) = 0{,}05x^3 - 0{,}4x^2 + 3\,\mathrm{sen}(x)x = 0$ do Exemplo 18, com $\varepsilon \leq 10^{-10}$, que se encontra no intervalo $[10,\ 12]$, utilizando o método de van Wijngaarden-Dekker-Brent.

```
% Os parametros de entrada
a = 10
b = 12
Toler = 1.0000e-10
IterMax = 100
% produzem os resultados
  Calculo de raiz pelo metodo de van Wijngaarden-Dekker-Brent
iter     a           c           b          Fb             z
  0   12.00000   12.00000   10.00000  -6.32063e+00   1.00000e+00
  1   10.79988   10.79988   12.00000   9.48337e+00  -6.00061e-01
  2   12.00000   12.00000   11.54358  -5.94963e+00   2.28208e-01
  3   11.54358   12.00000   11.71954  -7.96853e-01   1.40231e-01
  4   11.71954   11.71954   11.74464   2.34449e-02  -1.25507e-02
  5   11.74464   11.74464   11.74392  -2.86520e-04   3.58711e-04
  6   11.74392   11.74464   11.74393  -1.00128e-07   3.54380e-04
  7   11.74393   11.74393   11.74393   1.06581e-14  -1.51400e-09

Raiz     = 11.74393
Iter     =  7
CondErro =  0
```

Observações

- Segundo Brent, a convergência pelo método é garantida desde que haja uma raiz no intervalo.
- Combinação da certeza de convergência do método da bisseção com a rapidez de um método de ordem de convergência maior como o da interpolação inversa quadrática.
- Esquema robusto e eficiente.
- Método de van Wijngaarden-Dekker-Brent é recomendado como o mais adequado para calcular zero de função quando a derivada não estiver disponível.

Métodos baseados em tangente

- Bisseção.
- Aproximação de $f(x)$ por polinômio linear e quadrático.
- Métodos baseados no cálculo da tangente à curva de $f(x)$: Newton e Schröder.

Método de Newton

- Seja ξ a única raiz de $f(x) = 0$ no intervalo $[a, b]$.
- Seja x_k uma aproximação desta raiz, sendo $x_0 \in [a, b]$.
- As derivadas $f'(x)$ e $f''(x)$ devem existir, ser contínuas e com sinal constante neste intervalo.
- Geometricamente, o método de Newton é equivalente a aproximar um arco da curva por uma reta tangente traçada a partir de um ponto da curva.
- Conhecido também como método das tangentes.

Interpretação gráfica do método de Newton

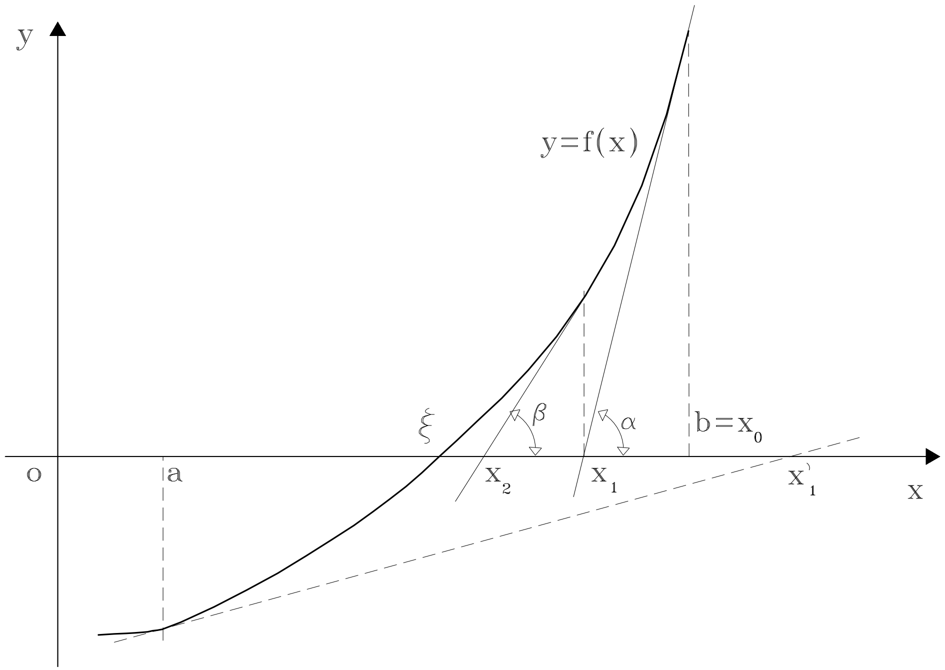
- Tangentes

$$\tan(\alpha) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} = f'(x_0) \longrightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad \text{e}$$

$$\tan(\beta) = \frac{f(x_1)}{x_1 - x_2} = f'(x_1) \longrightarrow x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}.$$

- Generalizando: fórmula de recorrência do método de Newton

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots} \tag{16}$$



Dedução analítica do método de Newton

- Seja

$$\xi = x_k + \delta_k \tag{17}$$

- tal que δ_k tenha um valor pequeno.
- Fazendo uma expansão em série de Taylor

$$f(\xi) = f(x_k + \delta_k) \approx f(x_k) + f'(x_k)\delta_k = 0 \to \delta_k = -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}.$$

- Substituindo essa correção em (17), obtém-se

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots}$$

Condição de convergência

- Pela figura, seqüência produzida por (16) convergirá para a raiz ξ se o valor inicial for $x_0 = b$.
- Processo pode não convergir se $x_0 = a$, pois ter-se-á $x_1' \notin [a, b]$.
- Escolha do valor inicial de modo a garantir a convergência para a raiz:

  Teorema 6 *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, uma seqüência $\{x_i\}$ que convirja para a raiz ξ de $f(x) = 0$.*

- Valor inicial x_0 deve ser um ponto no qual a função tenha o mesmo sinal de sua derivada segunda.
- Se $f''(x_0) > 0$: x_0 é tal que $f(x_0) > 0$.
- Se $f''(x_0) < 0$: $f(x_0) < 0$.

Algoritmo do método de Newton

Algoritmo Newton
{ **Objetivo:** Calcular a raiz de uma equação pelo método de Newton }
parâmetros de entrada $x0$, $Toler$, $IterMax$
  { valor inicial, tolerância e número máximo de iterações }
parâmetros de saída $Raiz$, $Iter$, $CondErro$
  { raiz, número de iterações gastas e condição de erro, sendo }
  { $CondErro = 0$ se a raiz foi encontrada e $CondErro = 1$ em caso contrário. }
  { avaliar a função e sua derivada em x_0 }
  $Fx \leftarrow f(x0)$; $DFx \leftarrow f'(x0)$; $x \leftarrow x0$; $Iter \leftarrow 0$
  escreva $Iter$, x, DFx, Fx
  repita
    $DeltaX \leftarrow -Fx/DFx$; $x \leftarrow x + DeltaX$
    $Fx \leftarrow f(x)$; $DFx \leftarrow f'(x)$; { avaliar a função e sua derivada em x }
    $Iter \leftarrow Iter + 1$
    escreva $Iter$, x, DFx, Fx, $DeltaX$
    se $(\text{abs}(DeltaX) \leq Toler$ **e** $\text{abs}(Fx) \leq Toler)$ **ou** $DFx = 0$ **ou** $Iter \geq IterMax$
      então interrompa
    fimse
  fimrepita
  $Raiz \leftarrow x$
  { teste de convergência }
  se $\text{abs}(DeltaX) \leq Toler$ **e** $\text{abs}(Fx) \leq Toler$ **então**
    $CondErro \leftarrow 0$
  senão
    $CondErro \leftarrow 1$
  fimse
fimalgoritmo

Exemplo do método de Newton

Exemplo 30 Determinar a maior raiz de $P(x) = x^4 + 2x^3 - 13x^2 - 14x + 24 = 0$ com $\varepsilon \leq 10^{-5}$, utilizando o método de Newton.

- $\xi \in [2, 4]$, $f(2) < 0$ e $f(4) > 0$.
- Derivadas: $P'(x) = 4x^3 + 6x^2 - 26x - 14$ e $P''(x) = 12x^2 + 12x - 26 > 0$, $2 \leq x \leq 4$.
- Valor inicial: $x_0 = 4$, pois $P(4)P''(4) > 0$.

Exemplo do método de Newton cont.

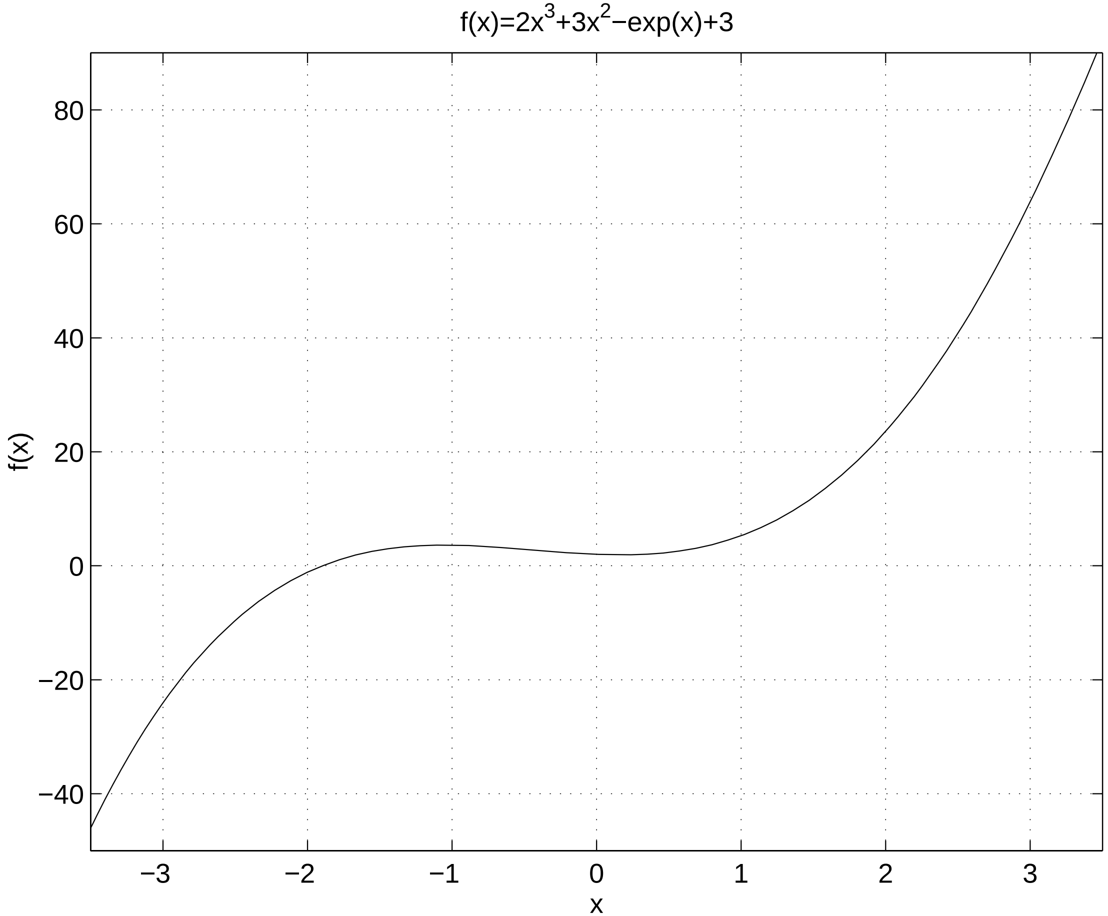
```
% Os parametros de entrada
x0 = 4
Toler = 1.0000e-05
IterMax = 100
% produzem os resultados
      Calculo de raiz de equacao pelo metodo de Newton
  iter      x          DFx            Fx             Delta_x
    0     4.00000    2.34000e+02    1.44000e+02
    1     3.38462    1.21825e+02    3.64693e+01   -6.15385e-01
    2     3.08526    8.03682e+01    6.40563e+00   -2.99358e-01
    3     3.00555    7.06567e+01    3.90611e-01   -7.97036e-02
    4     3.00003    7.00030e+01    1.80793e-03   -5.52830e-03
    5     3.00000    7.00000e+01    3.93537e-08   -2.58264e-05
    6     3.00000    7.00000e+01    1.42109e-14   -5.62196e-10

Raiz     =  3.00000
Iter     =  6
CondErro =  0
```

Exemplo do método de Newton

Exemplo 31 Calcular o ponto de inflexão $\imath$ da função $f(x) = 2x^3 + 3x^2 - e^x + 3$ com $\varepsilon \leq 10^{-5}$ pelo método de Newton, usando o algoritmo.

- Condição de ponto de inflexão de $f(x)$: derivada segunda se anule.
- Deve-se achar uma raiz de $f''(x) = 0$: $g(x) = f''(x) = 12x - e^x + 6 = 0$.
- $\imath \in [-2, 1]$.



Exemplo do método de Newton cont.

- Derivadas: $g'(x) = 12 - e^x$ e $g''(x) = -e^x < 0\ \forall\ x$.
- Função nos limites: $g(-2) \approx -1{,}1353 < 0$ e $g(1) \approx 5{,}2817 > 0$.
- Valor inicial: $x_0 = -2$ porque $g(-2)g''(-2) > 0$.

```
% Os parametros de entrada
x0 = -2
Toler = 1.0000e-05
IterMax = 100
% produzem os resultados
      Calculo de raiz de equacao pelo metodo de Newton
  iter      x          DFx            Fx            Delta_x
    0    -2.00000   1.18647e+001   -1.81353e+01
    1    -0.47148   1.13759e+001   -2.81878e-01    1.52852e+00
    2    -0.44671   1.13603e+001   -1.93175e-04    2.47785e-02
    3    -0.44669   1.13603e+001   -9.24905e-11    1.70045e-05
    4    -0.44669   1.13603e+001    0.00000e+00    8.14158e-12

Raiz     = -0.44669
Iter     =  4
CondErro =  0
```

- Ponto de inflexão: $\imath \approx x_4 = -0{,}44669$.

Ordem de convergência

- Considere (16)

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

- Em vista do erro da k-ésima iteração

$$\epsilon_{k+1} = \epsilon_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \tag{18}$$

- Expandindo $f(x_k)$ em série de Taylor em torno da raiz ξ

$$f(x_k) = f(\xi) + \epsilon_k f'(\xi) + \epsilon_k^2 \frac{f''(\xi)}{2} + \cdots,$$

$$f'(x_k) = f'(\xi) + \epsilon_k f''(\xi) + \cdots$$

Ordem de convergência cont.

- Substituindo as duas expressões acima em (18)

$$\epsilon_{k+1} = \epsilon_k - \frac{\epsilon_k f'(\xi) + \epsilon_k^2 \frac{f''(\xi)}{2} + \cdots}{f'(\xi) + \epsilon_k f''(\xi) + \cdots}$$

$$\epsilon_{k+1} = \frac{\epsilon_k f'(\xi) + \epsilon_k^2 f''(\xi) + \cdots - \epsilon_k f'(\xi) - \epsilon_k^2 \frac{f''(\xi)}{2} - \cdots}{f'(\xi) + \epsilon_k f''(\xi) + \cdots}$$

$$|\epsilon_{k+1}| \approx \frac{f''(\xi)}{2f'(\xi)} |\epsilon_k|^2.$$

- Método de Newton tem convergência quadrática.
- Nas proximidades da raiz, o número de dígitos corretos da estimativa da raiz praticamente dobra a cada iteração.

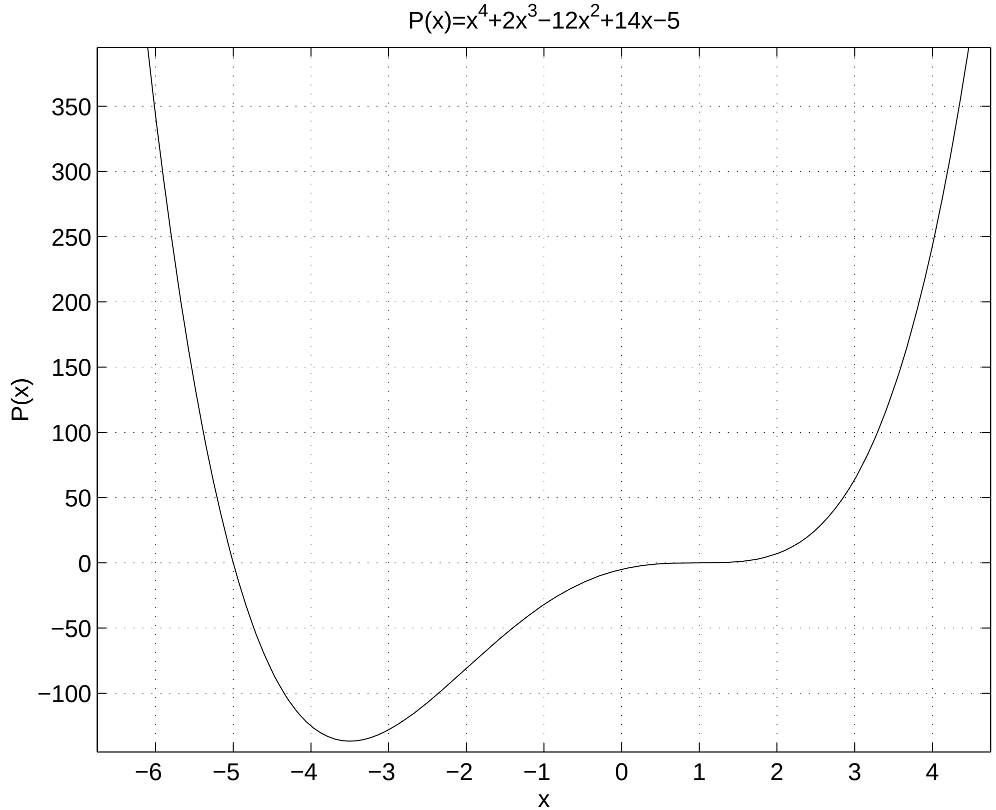
Método de Schröder

- Método de Newton apresenta uma convergência apenas linear quando uma raiz tem multiplicidade $m > 1$.
- Pela fórmula
$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$
- à medida que $f(x_k) \to 0$, o denominador $f'(x_k) \to 0$
- Modificação simples permite o cálculo de raiz de multiplicidade m, mantendo a convergência quadrática
$$\boxed{x_{k+1} = x_k - m\frac{f(x_k)}{f'(x_k)},\ k = 0, 1, 2, \ldots} \tag{19}$$
- Algoritmo do método de Schröder é basicamente o de Newton da figura.
- Utiliza um parâmetro extra m para definir a multiplicidade.

Exemplo do método de Schröder

Exemplo 32 Calcular a raiz de $P(x) = x^4 + 2x^3 - 12x^2 + 14x - 5 = 0$ de multiplicidade $m = 3$, com tolerância $\varepsilon \leq 10^{-5}$, pelo método de Schröder usando o algoritmo adaptado.

- $\xi \in [0{,}5\ 1{,}5]$.
- $P'(x) = 4x^3 + 6x^2 - 24x + 14$ e $P''(x) = 12x^2 + 12x - 24 > 0\ \forall\ x > 1$.
- $x_0 = 1{,}5$.
- $P(1{,}5)P''(1{,}5) > 0$.



Exemplo do método de Schröder cont.

```
% Os parametros de entrada
m = 3
x0 = 1.5
Toler = 1.0000e-05
IterMax = 100
% produzem os resultados
      Calculo de raiz de equacao pelo metodo de Schroder
  iter      x          DFx            Fx             Delta_x
    0     1.50000    5.00000e+00    8.12500e-01
    1     1.01250    2.82031e-03    1.17432e-05   -4.87500e-01
    2     1.00001    1.34883e-09    4.44089e-15   -1.24913e-02
    3     1.00000    2.68212e-11    0.00000e+00   -9.87718e-06

Raiz     =  1.00000
Iter     =  3
CondErro =  0
```

- $\xi = x_3 = 1.$
- Método de Newton gasta 26 iterações.

Comparação dos métodos para cálculo de raízes

- Estudo comparativo do desempenho de métodos utilizando uma série de equações está longe de ser perfeito.
- Pode existir uma dependência do resultado na escolha dessas equações.
- Determinação da ordem de convergência é mais adequada.
- Não é baseada em nenhum empirismo.
- Interessante verificar o desempenho dos métodos.

Equações de teste

- Cinco equações e intervalos que isolam as raízes:

$$f_1(x) = 2x^4 + 4x^3 + 3x^2 - 10x - 15 = 0, \ \xi \in [0, 3].$$

$$f_2(x) = x^5 - 2x^4 - 9x^3 + 22x^2 + 4x - 24 = 0, \ \xi \in [0, 5], \ \text{com } m = 3.$$

$$f_3(x) = 5x^3 + x^2 - e^{1-2x} + \cos(x) + 20 = 0, \ \xi \in [-5, 5].$$

$$f_4(x) = \ \text{sen}(x)x + 4 = 0, \ \xi \in [1, 5].$$

$$f_5(x) = (x - 3)^5 \log_e(x) = 0, \ \xi \in [2, 5], \ \text{com } m = 5.$$

Observações sobre os testes

- Número máximo de iterações = 500.
- Tolerância $\varepsilon = 10^{-10}$.
- Critério de parada: $|x_k - x_{k-1}| < \varepsilon$ **e** $|f(x_k)| < \varepsilon$.
- Método de van Wijngaarden-Dekker-Brent usa critério ligeiramente diferente.
- Método de Newton: x_0 foi escolhido como o ponto médio do intervalo dado, sem considerar o Teorema 6.

$$f_1(x) = 2x^4 + 4x^3 + 3x^2 - 10x - 15$$

Método	Raiz	Iter	Erro	t_{rel}
bisseção	1,49288	37		1,00
secante	−1,30038	8	sim	0,28
regula falsi	1,49288	77		2,06
pégaso	1,49288	10		0,35
Muller	1,49288	4		0,25
W-D-Brent	1,49288	9		0,63
Newton	1,49288	4		0,20

$$f_2(x) = x^5 - 2x^4 - 9x^3 + 22x^2 + 4x - 24$$

Método	Raiz	Iter	Erro	t_{rel}
bisseção	1,99999	35		1,00
secante	2,00000	47		1,36
regula falsi	1,82374	500	sim	13,42
pégaso	1,99999	60		1,76
Muller	2,00001	500	sim	17,85
W-D-Brent	2,00001	57		3,59
Newton	2,00001	37		1,55
Schröder	2,00000	4	sim	0,23

$$f_3(x) = 5x^3 + x^2 - e^{1-2x} + \cos(x) + 20$$

Método	Raiz	Iter	Erro	t_{rel}
bisseção	$-0{,}92956$	41		1,00
secante	$-0{,}92956$	21		0,56
regula falsi	0,69661	500	sim	12,33
pégaso	$-0{,}92956$	19		0,57
Muller	$-0{,}92956$	32		1,16
W-D-Brent	$-0{,}92956$	8		0,51
Newton	$-0{,}92956$	11		0,48

$$f_4(x) = \mathsf{sen}(x)x + 4$$

Método	Raiz	Iter	Erro	t_{rel}
bisseção	4,32324	36		1,00
secante	4,32324	7		0,27
regula falsi	4,32324	9		0,32
pégaso	4,32324	7		0,28
Muller	4,32324	6		0,35
W-D-Brent	4,32324	7		0,57
Newton	4,32324	6		0,30

$$f_5(x) = (x-3)^5 \log_e(x)$$

Método	Raiz	Iter	Erro	t_{rel}
bisseção	3,00000	34		1,00
secante	3,00000	137		3,90
regula falsi	2,67570	500	sim	13,89
pégaso	3,00000	187		5,47
Muller	3,01289	500	sim	18,82
W-D-Brent	3,00000	80		5,45
Newton	3,00000	95		4,45
Schröder	3,00000	4		0,26

Observações sobre os métodos para cálculo de raízes de equações

- Bisseção mostrou sua robustez, pois não falhou apesar de não ser o mais eficiente.
- Secante, embora seja rápida, encontrou uma raiz fora do intervalo dado.
- *Regula falsi* apresentou uma convergência muito lenta e falhou três vezes.
- Pégaso, além de ser robusto, foi competitivo com relação ao sofisticado van Wijngaarden-Dekker-Brent.
- Muller não foi robusto, embora eficiente, pois falhou nos casos onde a raiz possui multiplicidade.
- van Wijngaarden-Dekker-Brent foi robusto, mas também foi menos eficiente na presença de multiplicidade.
- Schröder é uma efetiva modificação do método de Newton para evitar problemas com raízes de multiplicidade.

Capítulo 6: Raízes de equações

Fim