

Cálculo Numérico - 2025/02

Notas de aula - Solução de Equações Algébricas

Prof. Yuri Dumaresq Sobral

Departamento de Matemática
Universidade de Brasília

2025

- Um dos problemas mais corriqueiros em Cálculo Numérico é determinar a **solução de uma equação algébrica**. Ou seja, queremos determinar o valor de x que **satisfaz uma equação algébrica**. Por exemplo:

$$\begin{aligned}x^2 + x^3 + x^8 - 18 &= \log(x) \\ \sin(x) - 3 \tan(x^2) + 5x &= e^x - 5 \\ &\vdots\end{aligned}$$

- Note que podemos reescrever o problema de **encontrar a solução de uma equação algébrica** como o de **encontrar a raiz de uma função**! De fato:

$$x^2 + x^3 + x^8 - 18 = \log(x) \Leftrightarrow f(x) = x^2 + x^3 + x^8 - 18 - \log(x) = 0.$$

- Portanto, utilizaremos indistintamente as terminologias **encontrar a solução de uma equação algébrica** como o de **encontrar a raiz de uma função** daqui para frente!

- A idéia central que se utiliza para resolver este tipo de problema computacionalmente é transformá-lo num **processo iterativo** tal que, a partir de um **chute inicial**, a **solução do problema (ou raiz da função)** seja um **ponto fixo assintoticamente estável** do processo iterativo.
- Exemplo: encontrar x tal que $x^3 - x - 1 = 0$. (ou, equivalentemente, encontrar a raiz de $f(x) = x^3 - x - 1$) Podemos pensar, por exemplo, em reescrever o problema como:

$$x^3 - x - 1 = 0 \Leftrightarrow x = \sqrt[3]{x + 1},$$

a partir de onde podemos construir o processo iterativo

$$x_{n+1} = \sqrt[3]{x_n + 1} = g(x_n).$$

Partindo de $x_0 = 1.5$, encontramos $x_6 = 1.32472594\dots$, que já aproxima com 5 algarismos significativos a raiz (ponto fixo)

$$x^* = 1.32471795\dots$$

- Note que, no exemplo anterior, a escolha do processo iterativo a partir da equação a ser resolvida não era única. De fato,

$$x_{n+1} = x_n^3 - 1, \quad x_{n+1} = \frac{x_n + 1}{x_n^2}, \quad x_{n+1} = 2x_n^3 - x_n - 2, \quad \dots$$

eram escolhas igualmente possíveis para se construir o processo iterativo. Porém... nossa escolha foi acertada pois:

$$g(x) = \sqrt[3]{x+1} \Leftrightarrow g'(x) = \frac{1}{3\sqrt[3]{(x+1)^2}}.$$

Já sabemos da teoria de processos iterativos, que se $|g'(x^*)| < 1$, seu ponto fixo x^* é assintoticamente estável e o processo converge para ele! De fato, para nossa escolha de $g(x)$:

$$\forall x > 0, \quad |g'(x)| = \left| \frac{1}{3\sqrt[3]{(x+1)^2}} \right| \leq \frac{1}{3} < 1.$$

Portanto, este processo iterativo converge para seu ponto fixo, isto é, para a raiz de $f(x) = x^3 - x - 1$.

- Além da escolha do **processo iterativo**, temos um problema **MUITO MAIOR**: a escolha do **chute inicial**.
- Em problemas reais, devemos ter muitas informações sobre onde estão as raízes que buscamos antes de pensar em encontrá-las. Esta pode ser (e em geral é) a parte **mais difícil**.
- Uma boa ajuda é o seguinte teorema:

TEOREMA: Considere uma função $f(x)$ contínua no intervalo real $[a, b]$ e derivável no intervalo (a, b) , tal que $f(a) \cdot f(b) < 0$. Então, existe pelo menos um número $x^* \in (a, b)$ tal que $f(x^*) = 0$, isto é, existe pelo menos uma raiz da função $f(x)$ no intervalo (a, b) .

- Portanto, se encontrarmos a e b que satisfaçam as condições do teorema, **um chute no intervalo (a, b) pode*** nos levar à **raiz desejada!**
- * Observação: **pode**, a depender do **processo iterativo escolhido**, da **qualidade** do chute inicial, etc.
- **Atenção:** Muito cuidado na hora de usar este **TEOREMA!**
 - É possível que, se $f(a) \cdot f(b) < 0$, então exista **mais de uma** raiz no intervalo (a, b) . Então, para encontrar a raiz desejada, será necessário ter mais informações sobre $f(x)$.
 - Se $f(a) \cdot f(b) > 0$, não podemos afirmar nada sobre a existência de raízes no intervalo (a, b) . Cuidado!
 - A continuidade de $f(x)$ é **essencial** para que o resultado do **TEOREMA** funcione. Considere, por exemplo $f(x) = \frac{1}{x}$ e o intervalo $[-1, 1]$. Note que $f(-1) \cdot f(1) < 0$, porém **não há** raízes de $f(x)$ no intervalo $[-1, 1]$.

- Será que não há uma maneira mais **sistemática** de construirmos os processos iterativos para encontrarmos as raízes desejadas?
- Até agora, temos as seguintes idéias:
 - Queremos construir um **processo iterativo** $x_{n+1} = g(x_n)$ tal que $x^* = g(x^*)$ quando $f(x^*) = 0$;
 - Precisamos construí-lo tal que $|g'(x^*)| < 1$;
 - E... se $g'(x^*) = 0$, podemos ter **convergência quadrática**!
- Então, se vamos pensar em uma maneira sistemática de construir processos iterativos, vamos tentar construí-lo com convergência quadrática!
- Vamos começar. Voltando à definição de ponto fixo:

$$x^* = g(x^*) \Leftrightarrow x^* - g(x^*) = 0 = f(x^*) \Leftrightarrow g(x^*) = x^* - f(x^*)$$

- Portanto, a partir desta relação **triviais**, já temos alguma indicação de como pode ser $g(x)$: $g(x) = x - f(x)$

- Porém, como no ponto fixo x^* do processo iterativo temos que $f(x^*) = 0$, podemos **generalizar** mais a construção de $g(x)$ escolhendo uma função $h(x)$ tal que

$$g(x) = x - h(x) \cdot f(x).$$

- Claramente, temos várias escolhas possíveis para $h(x)$. Vamos escolher aquela que implique em $g'(x^*) = 0$. Então:

$$g'(x) = 1 - h'(x) \cdot f(x) - h(x) \cdot f'(x).$$

- No ponto fixo, teremos:

$$\begin{aligned} g'(x^*) &= 1 - h'(x^*) \cdot f(x^*) - h(x^*) \cdot f'(x^*) \\ &= 1 - h'(x^*) \cdot 0 - h(x^*) \cdot f'(x^*) \\ &= 1 - h(x^*) \cdot f'(x^*) = 0. \end{aligned}$$

De onde, se $h(x^*) \neq 0$ e $f'(x^*) \neq 0$, concluímos que

$$h(x^*) = \frac{1}{f'(x^*)}.$$

- Devemos, portanto, escolher $h(x)$ tal que, no ponto fixo,

$$h(x^*) = \frac{1}{f'(x^*)}.$$

- Porém...**não conhecemos o ponto fixo!** De fato, é o que queremos encontrar! Isto complica nossa escolha...
- ...a não ser que escolhamos simplesmente

$$h(x) = \frac{1}{f'(x)} \quad \forall x,$$

de forma que tenhamos

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

- Desta forma, o processo iterativo $x_{n+1} = g(x_n)$ para encontrar, com convergência quadrática, a raiz de $f(x)$ será dado por:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Método de Newton-Raphson

- EXEMPLO: Encontrar a solução de $x^3 - x - 1 = 0$.
Buscamos, então, a raiz de $f(x) = x^3 - x - 1$. Calculando a derivada de $f(x)$, temos que $f'(x) = 3x^2 - 1$. Portanto, o método de Newton-Raphson para este problema será dado por:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n^3 - x_n - 1}{3x_n^2 - 1}.$$

Começando o processo iterativo de $x_0 = 1.5$, obtemos $x_4 = 1.32471795 \dots$, com 9 algarismos significativos.

Interpretação geométrica do Método de Newton-Raphson

- Partindo da expressão que define o processo iterativo do Método de Newton-Raphson, temos:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \Leftrightarrow x_{n+1} - x_n = -\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \Leftrightarrow (x_{n+1} - x_n)f'(x_n) = -f(x_n).$$

- Reescrevendo esta expressão, temos:

$$0 - f(x_n) = f'(x_n)(x_{n+1} - x_n). \quad (\clubsuit)$$

Vamos deixar o 0 apenas por conveniência.

- Agora, vamos escrever a equação da reta tangente a $f(x)$ que passa pelo ponto $(x_n, f(x_n))$. Do Cálculo 1, temos que:

$$y - f(x_n) = f'(x_n)(x - x_n).$$

- Note que a raiz x_{raiz} desta reta será dada quando $y = 0$. Então:

$$0 - f(x_n) = f'(x_n)(x_{raiz} - x_n). \quad (\spadesuit)$$

- Comparando as equações (\clubsuit) e (\spadesuit), observamos que

$$x_{\text{raiz}} = x_{n+1}. \quad (!!!!!!)$$

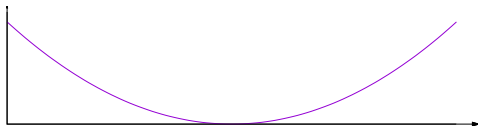
- Isto é, o Método de Newton-Raphson aproxima sucessivamente a raiz da função $f(x)$ pela raiz da reta tangente no ponto $(x_n, f(x_n))$.
- Graficamente, o método de Newton-Raphson funciona da seguinte maneira:

- **ATENÇÃO:** o Método de Newton-Raphson **não é infalível!**

- A raiz x^* buscada deve ser tal que $f'(x^*) \neq 0$ (ver dedução do Método de Newton-Raphson e sua equação do ponto fixo).

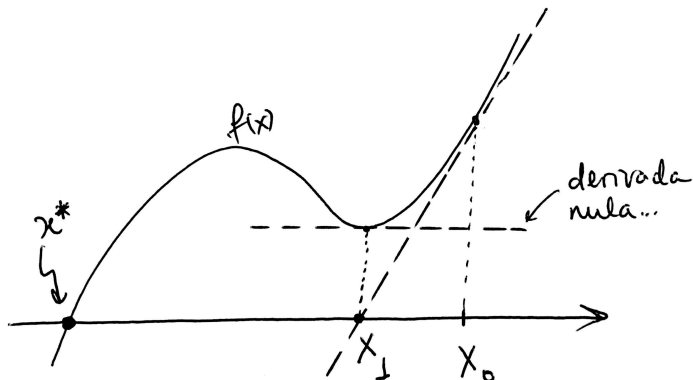
Portanto, a raiz deve ser **simples!**

Dizemos que x^* é uma **raiz dupla** se $f'(x^*) = 0$. De fato, se $f(x^*) = f'(x^*) = f''(x^*) = \dots = f^{N-1}(x^*) = 0$, dizemos que x^* é uma raiz de **multiplicidade N** . Graficamente, funções com raízes múltiplas têm gráficos parecidos ao gráfico abaixo:



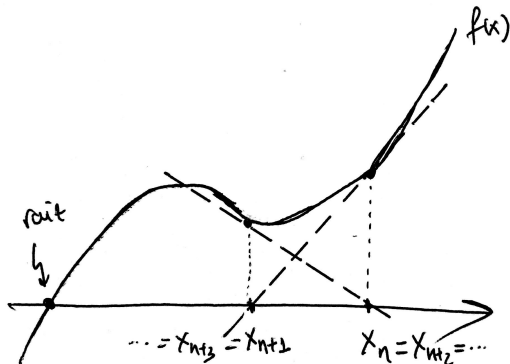
- A **qualidade** do **chute inicial** é **crucial** para que o Método de Newton-Raphson convirja para a raiz x^* . O chute inicial deve estar **suficientemente próximo** da raiz buscada (o que pode ser difícil).
- Vamos ver dois exemplos de problemas de convergência bastante comuns que podem estar ligados tanto ao chute inicial como à própria função $f(x)$:

- Em algum ponto x_n do processo iterativo, $f'(x^n) = 0$, e o método para.



Como a derivada em x_n é nula, a reta tangente à função $f(x)$ neste ponto não terá raiz e, portanto, o Método de Newton-Raphson não pode prosseguir...

- O método pode ficar **preso** em um **loop infinito** como ilustrado abaixo.



A sequência de pontos x_n gerada pelo método será tal que $x_n = x_{n+2} = x_{n+4} = \dots$ e $x_{n+1} = x_{n+3} = x_{n+5} = \dots$ e o método não convergirá...

- É possível deduzir outros métodos a partir da técnica que utilizamos para deduzir o Método de Newton-Raphson, que podem ser úteis em aplicações mais específicas (**tailor made**).
- Até agora, aprendemos métodos que foram construídos a partir de **processos iterativos** e, portanto, são métodos que têm os mesmos problemas comuns a processos iterativos (dependência do chute inicial, não-convergência, ...).
- Será que podemos construir um método que seja mais **a prova de falhas**? **Sim!** É um método infalível mas é um método relativamente lento...**Só deve ser usado em casos de dificuldades extremas!**
- Considere que $f(x)$ seja contínua e que conheçamos um intervalo $[a, b]$, com $a < b$, sem perda de generalidade, no qual $f(a) \cdot f(b) < 0$. Pelo teorema da raiz, sabemos que existe pelo menos uma raiz (não necessariamente simples) de $f(x)$ neste intervalo. **Vamos considerar que exista apenas uma raiz.**

- Podemos, então, pensar em um método que **encolha** gradativamente o intervalo $[a, b]$, deixando a raiz **dentro dele!** Isto é, para cada iteração i faremos:

$$a \leq a_1 \leq a_2 \leq \cdots \leq a_k \leq x^* \leq b_k \leq \cdots \leq b_2 \leq b_1 \leq b$$

- Uma maneira de conseguirmos isto é **dividirmos pela metade** o intervalo **a cada iteração**, e determinarmos **em qual dos novos intervalos a raiz se encontra!**
- O algoritmo para este método poderia ser assim:

$$x_k = \frac{1}{2}(a_k + b_k) \text{ (ponto médio do intervalo)}$$

$$\text{Se } |f(x_k)| \leq TOL$$

Então $x^* = x_k$ e programa termina

Senão, se $f(x_k) \cdot f(a_k) < 0$ (x^* no int. da esquerda)

$$\text{então } a_{k+1} = a_k \text{ e } b_{k+1} = x_k$$

$$\text{senão, } a_{k+1} = x_k \text{ e } b_{k+1} = b_k \text{ (} x^* \text{ no int. da direita)}$$

- Este é o **Método da Bisseção**.

- Note que podemos **garantir** que o **Método da Bisseção** sempre **converge** para a raiz. De fato:

$$\begin{aligned} |x_k - x^*| &\leq \frac{1}{2}|a_k - b_k| = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}|a_{k-1} - b_{k-1}| \right) = \\ &= \left(\frac{1}{2} \right)^2 \left(\frac{1}{2}|a_{k-2} - b_{k-2}| \right) = \dots = \left(\frac{1}{2} \right)^{k-1} \left(\frac{1}{2}|a_1 - b_1| \right) = \\ &= \left(\frac{1}{2} \right)^{k+1} |a - b| \rightarrow 0, \quad k \rightarrow \infty \end{aligned}$$

- Portanto, **se houver uma raiz no intervalo $[a, b]$, o Método da Bisseção irá encontrá-la!**
- Note, porém, que a convergência é muito lenta (linear), a uma taxa de $\frac{1}{2}$.

- Note, também, que conhecido o intervalo $[a, b]$ e determinada uma **precisão** para o valor da raiz x^* , podemos determinar quantas iterações k precisamos fazer!
- Exemplo: Para encontrarmos a raiz de $f(x) = x^3 - x - 1$, com precisão de 8 casas decimais, partindo do intervalo $[1, 2]$, precisaremos de:

$$|x_k - x^*| = \left(\frac{1}{2}\right)^{k+1} |1 - 2| < 10^{-8} \Leftrightarrow \left(\frac{1}{2}\right)^{k+1} < 10^{-8} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow 2^{k+1} > 10^8 \Leftrightarrow (k+1) \log(2) > 8 \Leftrightarrow k > 26$$

- Portanto, precisaremos de 27 iterações para alcançar a mesma precisão para a raiz que foi obtida com **4 iterações com o Método de Newton-Raphson...**
- Conclusão: apenas devemos usar o Método da Bisseção em caso de extrema necessidade!