Introdução ao Cálculo Numérico

Métodos para cálculo de raízes de funções não-lineares: bissecção, posição falsa, Newton-Raphson, Halley e secante

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

- Seja o seguinte problema:

  Dada uma função

$$f: \quad \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
$$x \longmapsto f(x)$$

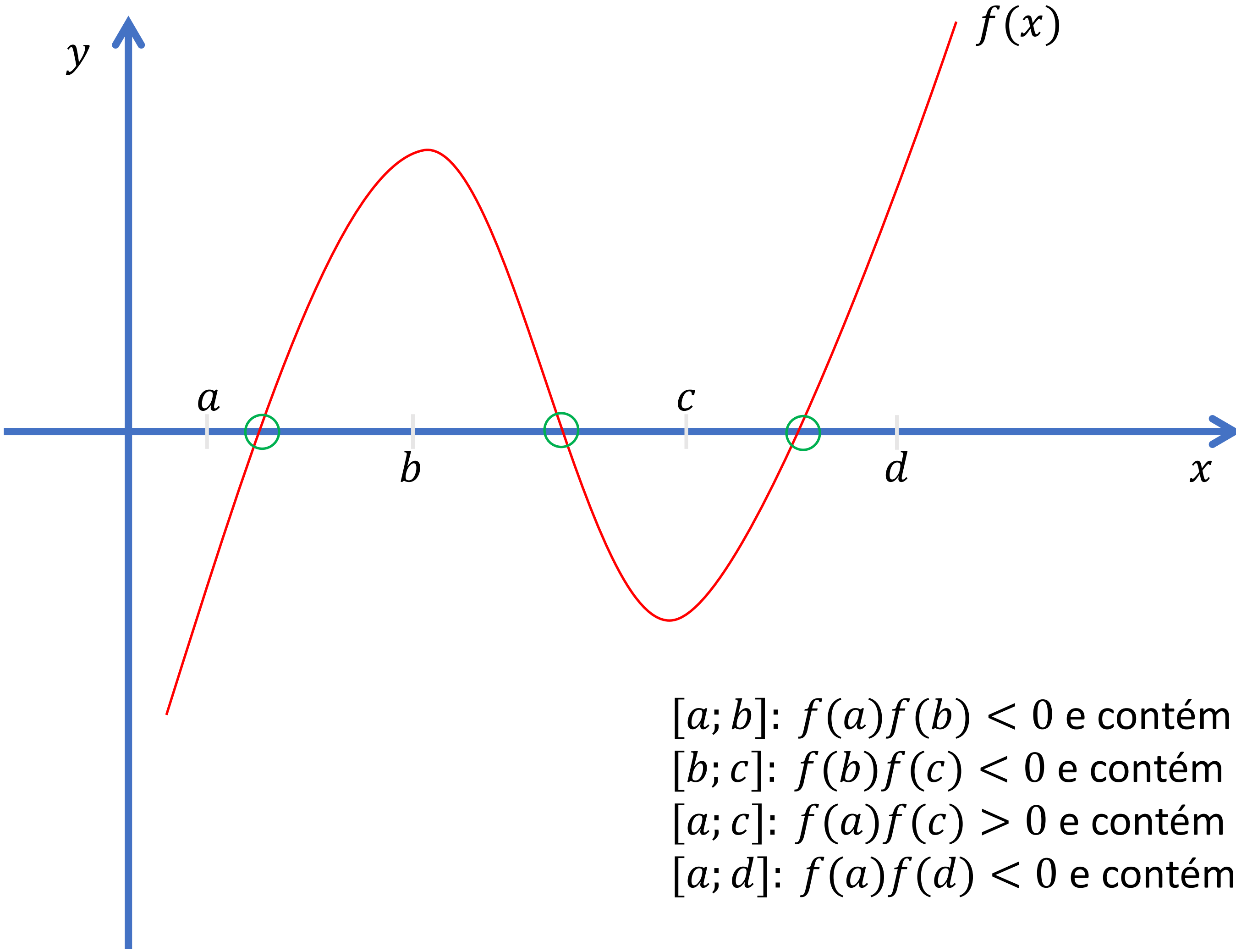
  determine ξ *tal que* $f(\xi) = 0$.

- Se $f(x)$ é não-linear, o problema acima pode não ser trivial de resolver:
  - Existe algum ξ para o qual $f(\xi) = 0$?
  - Quantos valores de ξ existem para os quais $f(\xi) = 0$?
  - Onde se localizam?

- Agora, suponha que $f(x)$ é uma função contínua num intervalo $[a; b]$; a condição *suficiente* para que exista uma raiz real naquele intervalo é

$$\boxed{f(a)f(b) < 0.}$$

  - Observe, no entanto, que se essa condição não for satisfeita, ainda assim é possível que haja uma (ou mais) raiz(es) real(is) naquele intervalo, como mostra a figura a seguir:

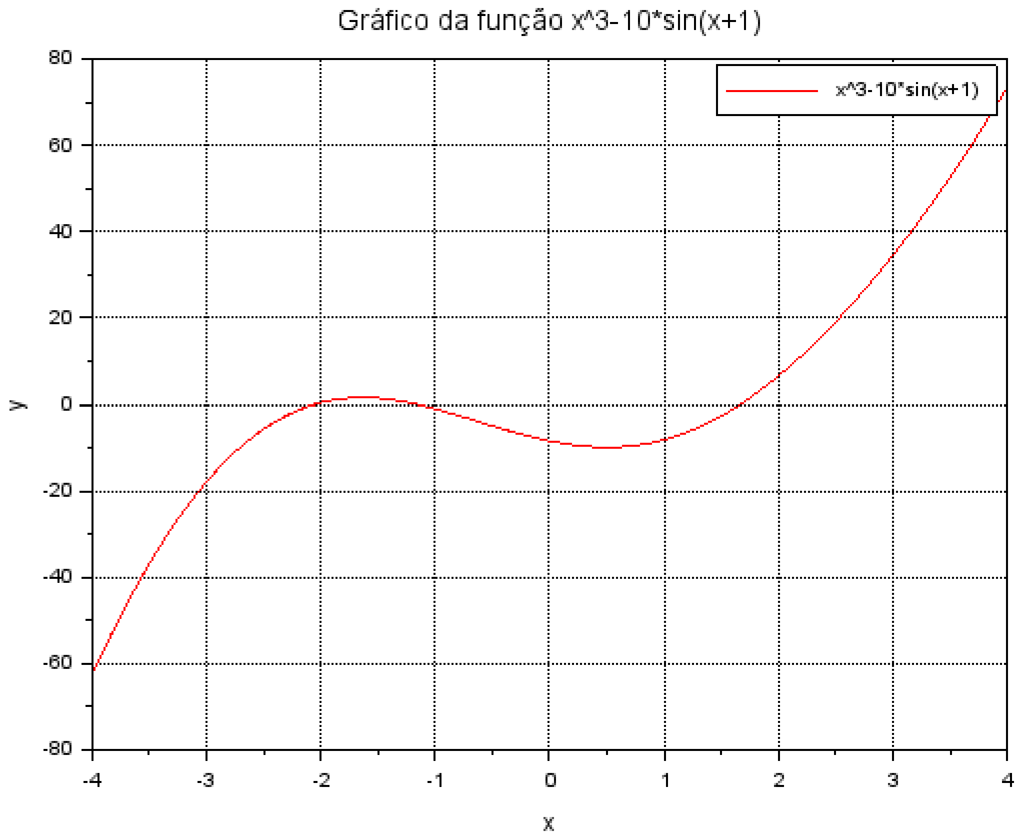


$[a;b]$: $f(a)f(b) < 0$ e contém uma raiz
$[b;c]$: $f(b)f(c) < 0$ e contém uma raiz
$[a;c]$: $f(a)f(c) > 0$ e contém duas raízes
$[a;d]$: $f(a)f(d) < 0$ e contém três raízes

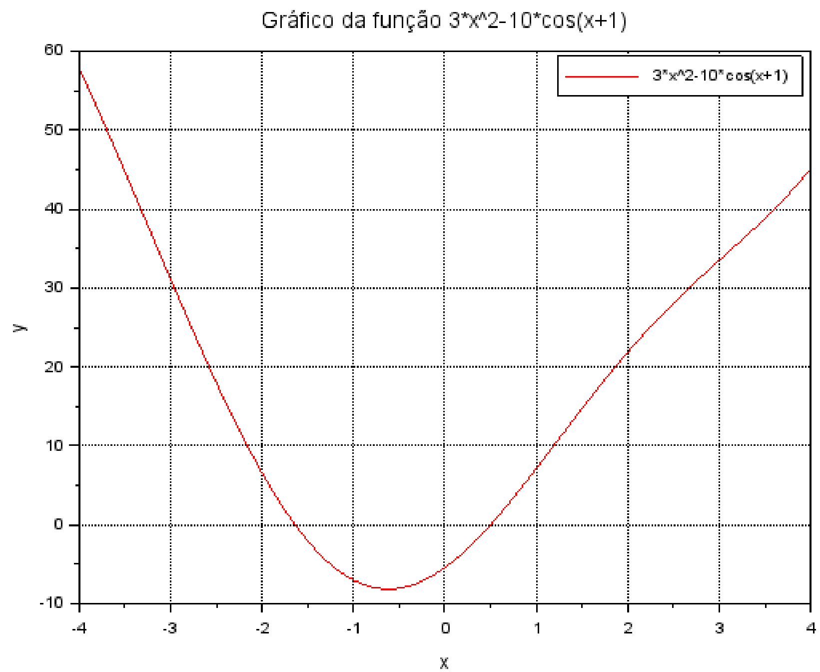
- Existe um teorema que nos permite determinar quantas raízes *reais* de $f(x)$ encontram-se num intervalo $[a; b]$:
- **Teorema de Bolzano**: seja $f(x)$ uma função contínua em um intervalo $[a; b]$. Então:
  - 1. Se $f(a)f(b) < 0$, então existe um número *ímpar* de raízes reais em $[a; b]$;
  - 2. Se $f(a)f(b) > 0$, então existe um número *par* de raízes reais em $[a; b]$;
  - 3. Se a derivada $f'(x)$ é contínua em $[a; b]$ e o seu sinal é constante no intervalo, então:
    - Se $f(a)f(b) < 0$, então existe apenas uma raiz real em $[a; b]$;
    - Se $f(a)f(b) > 0$, então não existe raiz real em $[a; b]$.

- Como exemplo da aplicação do teorema de Bolzano, considere a função

$f(x) = x^3 - 10\sin(x+1)$ no intervalo $[-4; 4]$:



- Observe que $f(-4)f(4) < 0$ (por simples inspeção do gráfico), logo, o teorema de Bolzano nos diz que há um número *ímpar* de raízes no intervalo $[-4; 4]$ – o que é confirmado por inspeção.
  - Por outro lado, o gráfico da sua derivada, $f'(x) = 3x^2 - 10\cos(x+1)$, mostra que ela não tem sinal constante no intervalo em questão, logo não há como se aplicar o item 3 do teorema:



- Retomando o problema inicial, note que é possível tentar obter uma solução para $f(x) = 0$ através de manipulação algébrica da equação, como no exemplo a seguir:

$$sin^2x - 1 = -{}^1/_4 \therefore sin^2x + cos^2x = 1 \therefore$$
$$cos^2x = {}^1/_4$$
$$x = cos^{-1}\sqrt{{}^1/_4} = {}^\pi/_3$$

- Porém, nem sempre é possível resolver a equação $f(x) = 0$ de forma algébrica!

- Nesse caso, deve-se usar um método numérico para determinar x que satisfaça a equação $f(x) = 0$, em termos numéricos, i.e. determinar ξ tal que $|f(\xi)| < \tau \ll 1$ onde τ é uma *tolerância* escolhida preliminarmente (tipicamente, 10^{-7} ou 10^{-12}, para 32 ou 64 bits de precisão).
- Dentre os métodos numéricos existentes, podemos classificá-los em:
  - Métodos de *enquadramento;*
  - Métodos de *busca.*

- Um método de *enquadramento* caracteriza-se por produzir uma sequência de *intervalos*

$$[a_0; b_0], [a_1; b_1], \dots, [a_k; b_k]$$

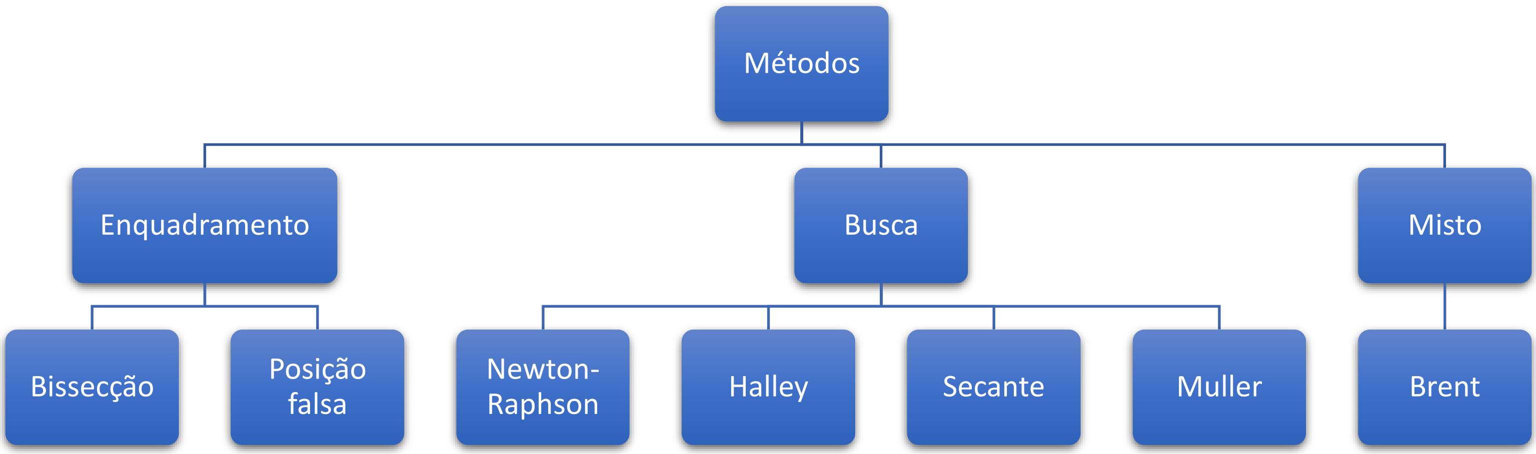
tais que $a_0 > a_1 > \cdots > a_k$ e $b_0 < b_1 < \cdots < b_k$, i.e. os comprimentos $|b_k - a_k|$ satisfazem a relação de enquadramento, $|b_0 - a_0| > |b_1 - a_1| > \cdots > |b_k - a_k|$, através de um processo de refinamento do intervalo que produza tal sequência monotônica decrescente dos comprimentos dos intervalos.

- Método de enquadramento (cont.):
  - Se num intervalo $[a_k; b_k]$ existir pelo menos um $a_k \leq \xi \leq b_k$ tal que $f(\xi) = 0$ então, para k suficientemente grande, um método de enquadramento deverá produzir uma sequência de intervalos de comprimentos cada vez menores, tal que $a_k \leq \xi \leq b_k$ e $|b_k - \xi| \leq \delta$ ou $|a_k - \xi| \leq \delta$.
  - Se houver mais do que um ξ em $[a_k; b_k]$ tal que $f(\xi) = 0$, o método de enquadramento produzirá um intervalo $[a_k; b_k]$ que conterá apenas um daqueles ξ.

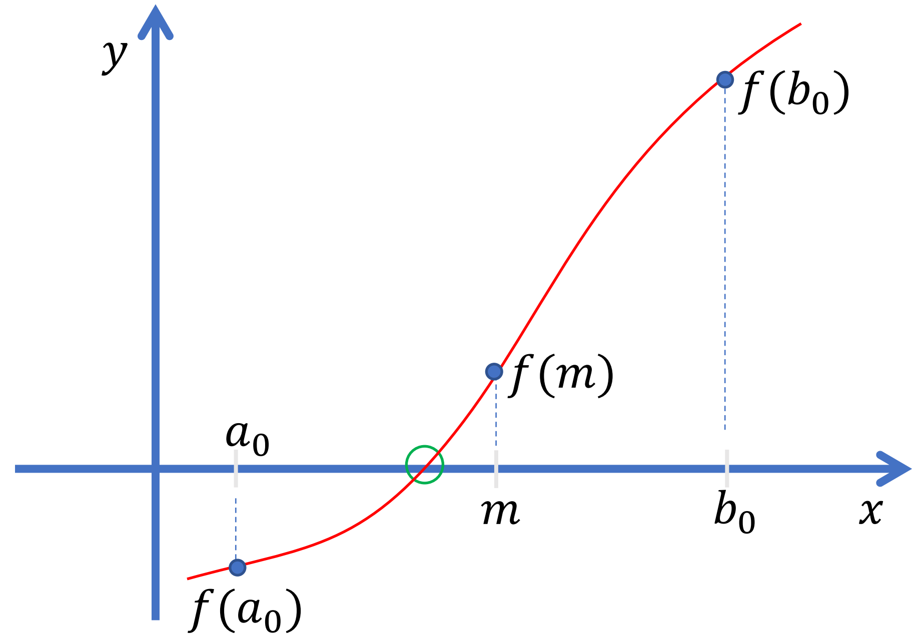
- Já um método de *busca* (também conhecido por método *aberto*) procura refinar uma estimativa inicial x_0, a partir de uma fórmula de correção da estimativa, produzindo uma sequência $x_0, x_1, \ldots, x_k$ tal que, possivelmente (dentro de certas condições impostas por cada método), para k suficientemente grande, $|f(x_k)| < \tau$ e $|x_k - \xi| \leq \delta$, de onde se toma x_k como aproximação da raiz ξ.
  - A convergência desses métodos nem sempre é garantida!

- Os métodos de enquadramento e de busca existentes apresentam diferentes propriedades de convergência e fórmulas de correção dos intervalos e/ou estimativas.
- Existem ainda métodos que são combinações de outros, procurando explorar as suas propriedades de forma adequada.
- Dentre os métodos existentes, podemos classificá-los como segue:

• Classificação de alguns dos métodos numéricos existentes:

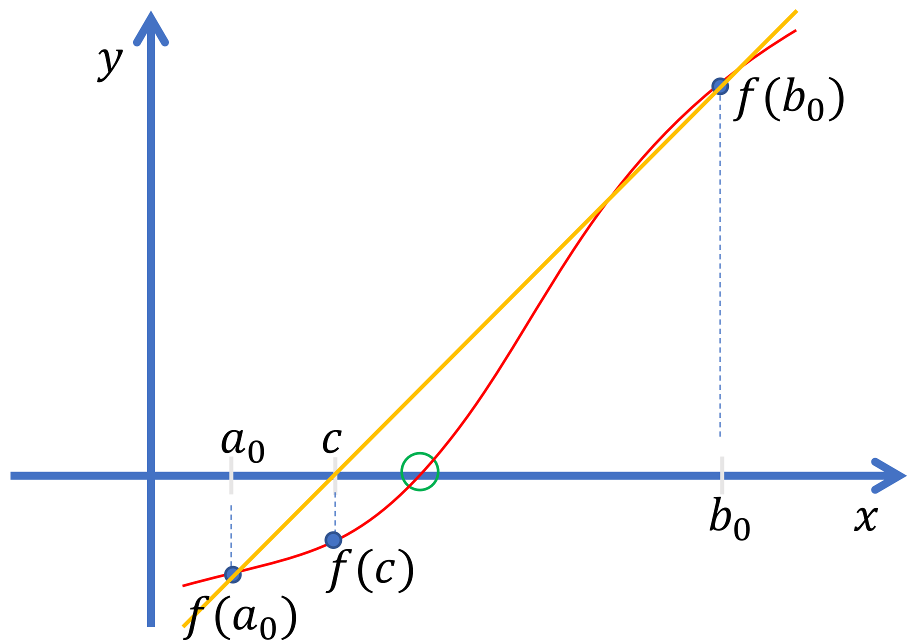


- Características dos métodos
  - Bissecção:
    - Subdivide um intervalo $[a_k; b_k]$ no ponto médio $m = \frac{a_k+b_k}{2}$ e escolhe $[a_{k+1}; b_{k+1}]$ como $[a_k; m]$ ou como $[m; b_k]$, de tal forma que pelo menos uma das raízes de $f(x)$ encontre-se no intervalo $[a_{k+1}; b_{k+1}]$.



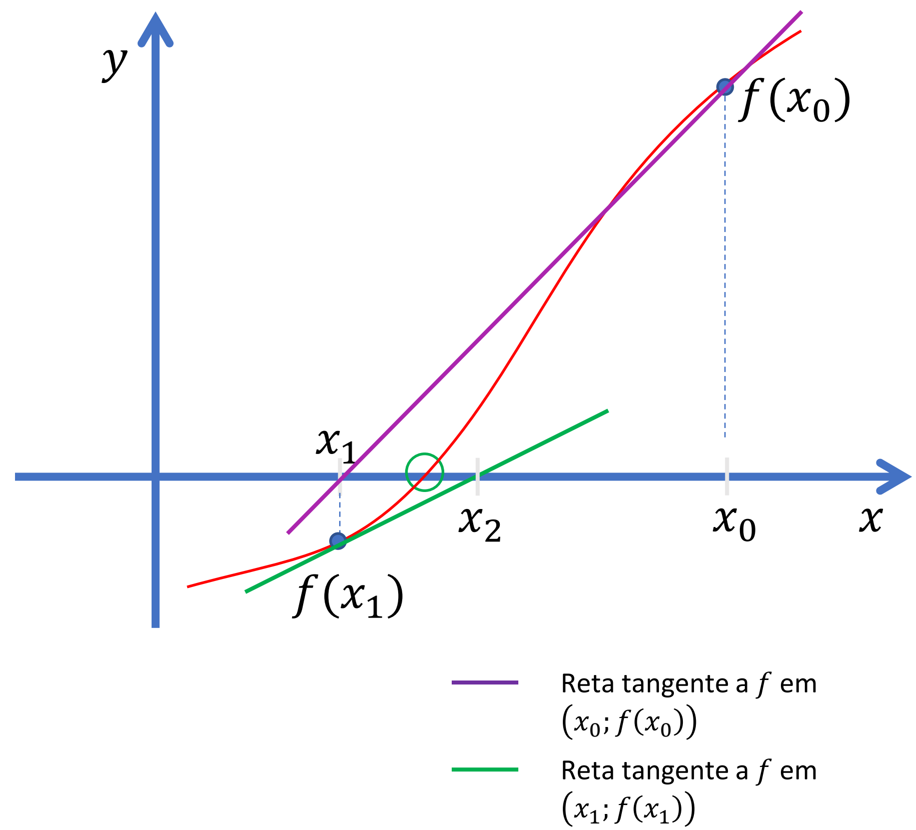
Na situação mostrada aqui, teremos $[a_1; b_1] = [a_0; m]$, pois $f(a_0)f(m) < 0$.

- Características dos métodos
  - Posição falsa:
    - Para um intervalo $[a_k; b_k]$, calcula a intersecção c da reta que passa pelos pontos $\left(a_k; f(a_k)\right)$ e $\left(b_k; f(b_k)\right)$ com o eixo x; escolhe $[a_{k+1}; b_{k+1}]$ como $[a_k; c]$ ou como $[c; b_k]$, de tal forma que pelo menos uma das raízes de $f(x)$ encontre-se no intervalo $[a_{k+1}; b_{k+1}]$.

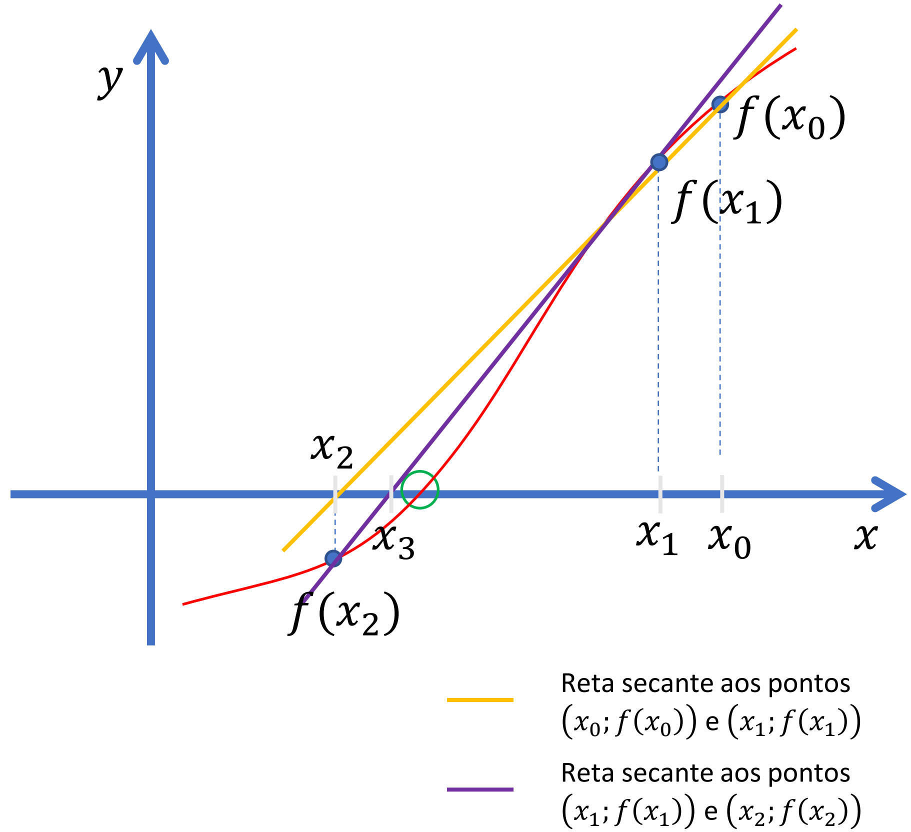


Na situação mostrada aqui, teremos $[a_1; b_1] = [c; b_0]$, pois $f(c)f(b_0) < 0$.

- Características dos métodos
  - Newton-Raphson:
    - Substitui a função $f(x)$ num ponto x_k por uma reta tangente ao ponto $(x_k; f(x_k))$. A nova estimativa, x_{k+1}, será a intersecção dessa reta com o eixo x.
    - Requer que $f(x)$ tenha derivada $f'(x)$ contínua.
    - Convergência quadrática (ordem 2) para x_k próximo de uma raiz.



- Características dos métodos
  - Secante:
    - Substitui a função $f(x)$ num ponto x_k por uma reta que passa pelos pontos $\left(x_k; f(x_k)\right)$ e $\left(x_{k-1}; f(x_{k-1})\right)$. A nova estimativa, x_{k+1}, será a intersecção dessa reta com o eixo x.
    - Convergência quase-quadrática (ordem 1,62) para x_k próximo de uma raíz.



- Características dos métodos
  - Halley:
    - Semelhante ao método de Newton-Raphson.
    - Requer que $f(x)$ tenha derivadas $f'(x)$ e $f''(x)$ contínuas.
    - Convergência cúbica (ordem 3) para x_k próximo de uma raiz.
  - Muller:
    - Substitui a função $f(x)$ num ponto x_k por uma parábola que passa pelos pontos $\left(x_k; f(x_k)\right)$, $\left(x_{k-1}; f(x_{k-1})\right)$ e $\left(x_{k-2}; f(x_{k-2})\right)$. A nova estimativa, x_{k+1}, será a intersecção dessa parábola com o eixo X.
    - Convergência quase-quadrática (ordem 1,84) para x_k próximo de uma raiz.

- Características dos métodos
  - Brent:
    - Uma variante de um método misto proposto por Dekker (1969), o método de Brent combina os métodos da bissecção e da secante, juntamente com *interpolação quadrática inversa*, impondo controles adicionais para garantir enquadramento de pelo menos uma raiz no novo intervalo gerado.
    - Convergência superlinear (ordem >1), dependente do intervalo inicial e da função.

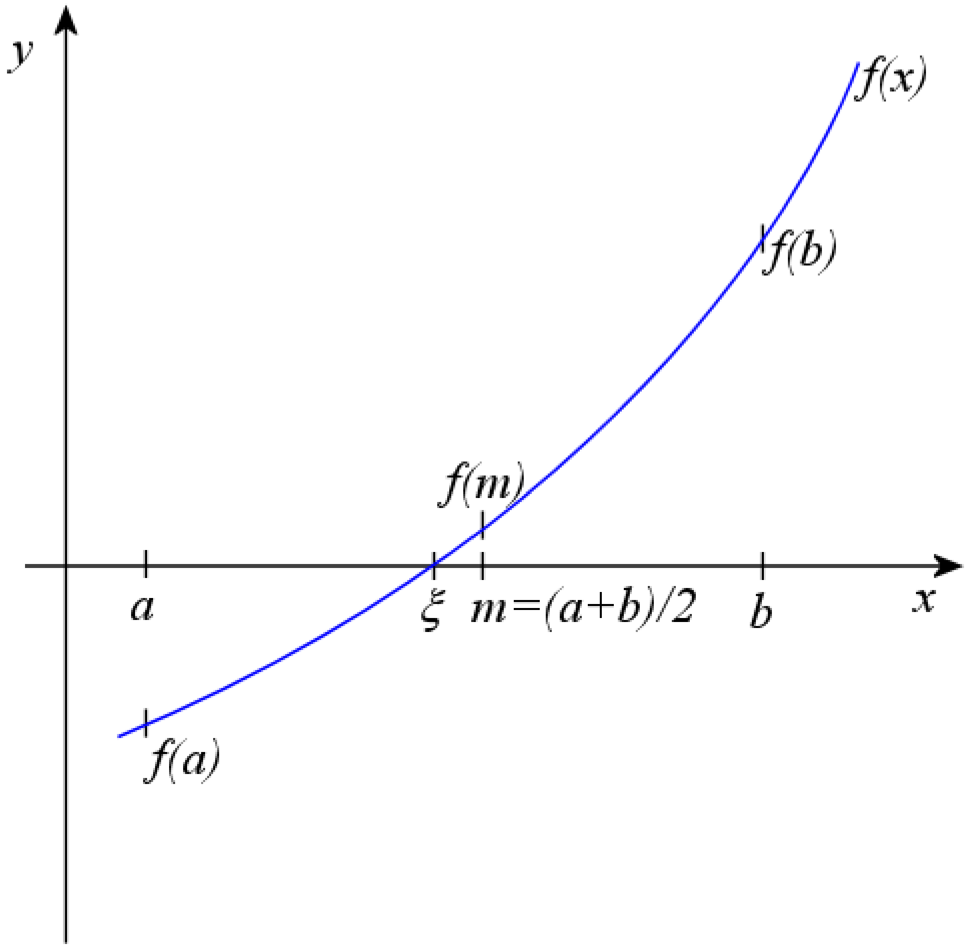
Método da bissecção

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

- O método da bissecção
  - É um dos métodos mais simples – e mais robustos – para se extrair uma ou mais raízes de uma função
$$f: \quad \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
$$x \longmapsto f(x)$$
  - Ou seja, estamos interessados em localizar x, tal que $|f(x)| \cong 0$ (ou seja, x é tal que ele **aproxima numericamente** uma raiz da função).
  - O método exige apenas a função $f(x)$ e um intervalo de busca $[a; b]$, o qual deve satisfazera condição $f(a)f(b) < 0$.

- O método da bissecção
  - Se essa condição for satisfeita, o método garante a localização da raiz (sujeito a uma tolerância pré-especificada).
  - Se o intervalo de busca contiver mais do que uma raiz, e a condição $f(a)f(b) < 0$ for satisfeita, a convergência para uma das raízes dependerá da implementação.
  - Para descrevermos formalmente o método, considere a figura a seguir:

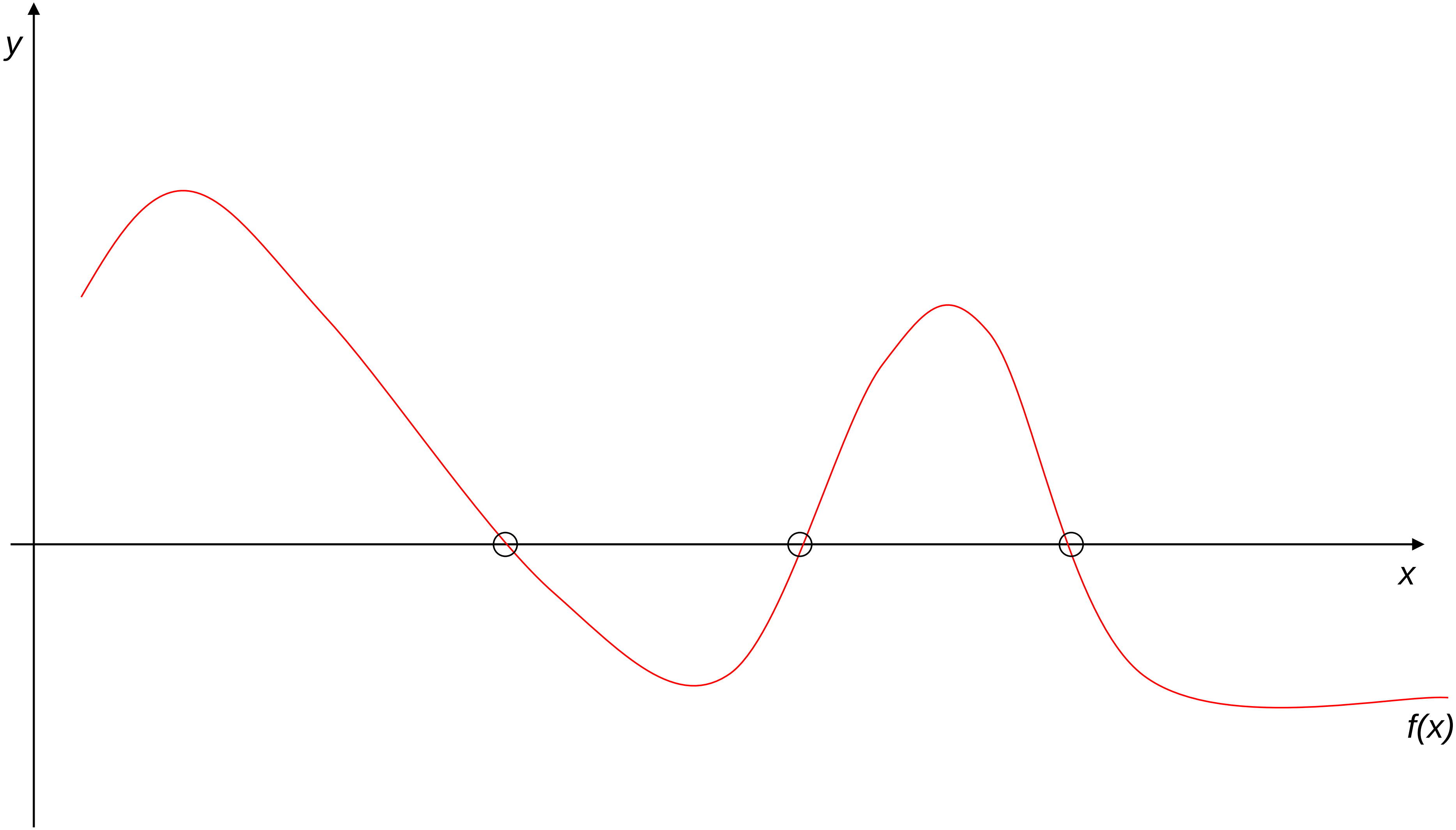
•O método da bissecção



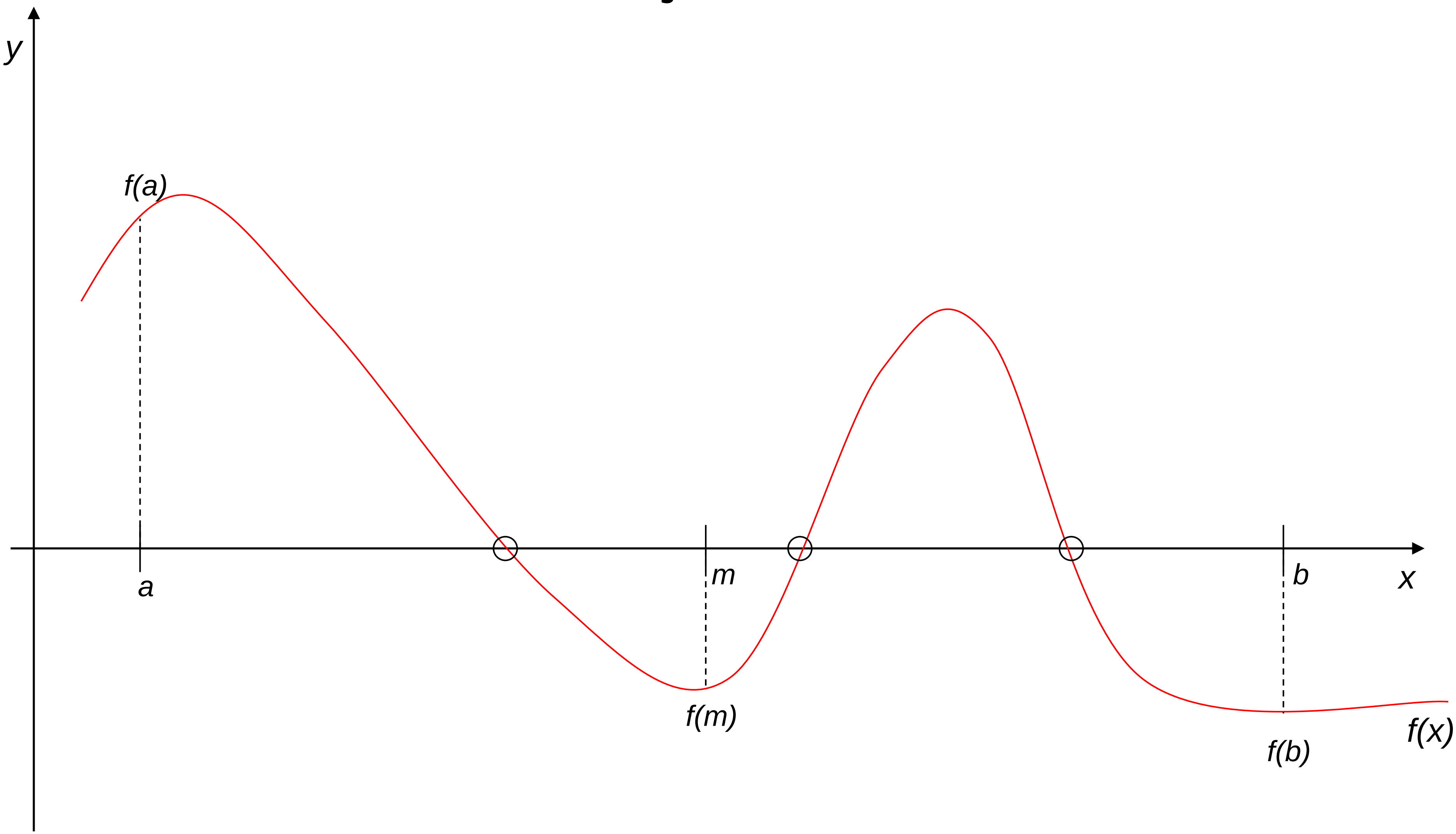
O método da bissecção

1. No intervalo $[a; b]$, $f(a)f(b) < 0$;
2. Se $|b - a| < \delta$, então para as iterações e uma raiz encontra-se no intervalo $[a; b]$;
3. Senão, calcula-se o ponto médio do intervalo $[a; b]$, m e calcula-se $f(m)$;
4. Se $|f(m)| < \epsilon$, então m é uma aproximação para a raiz;
5. Senão, se $f(a)f(m) < 0$, então escolhe $[a; m]$ como novo intervalo de busca $[a; b]$; senão, escolhe $[m; b]$ e repete os passos 2 a 5.

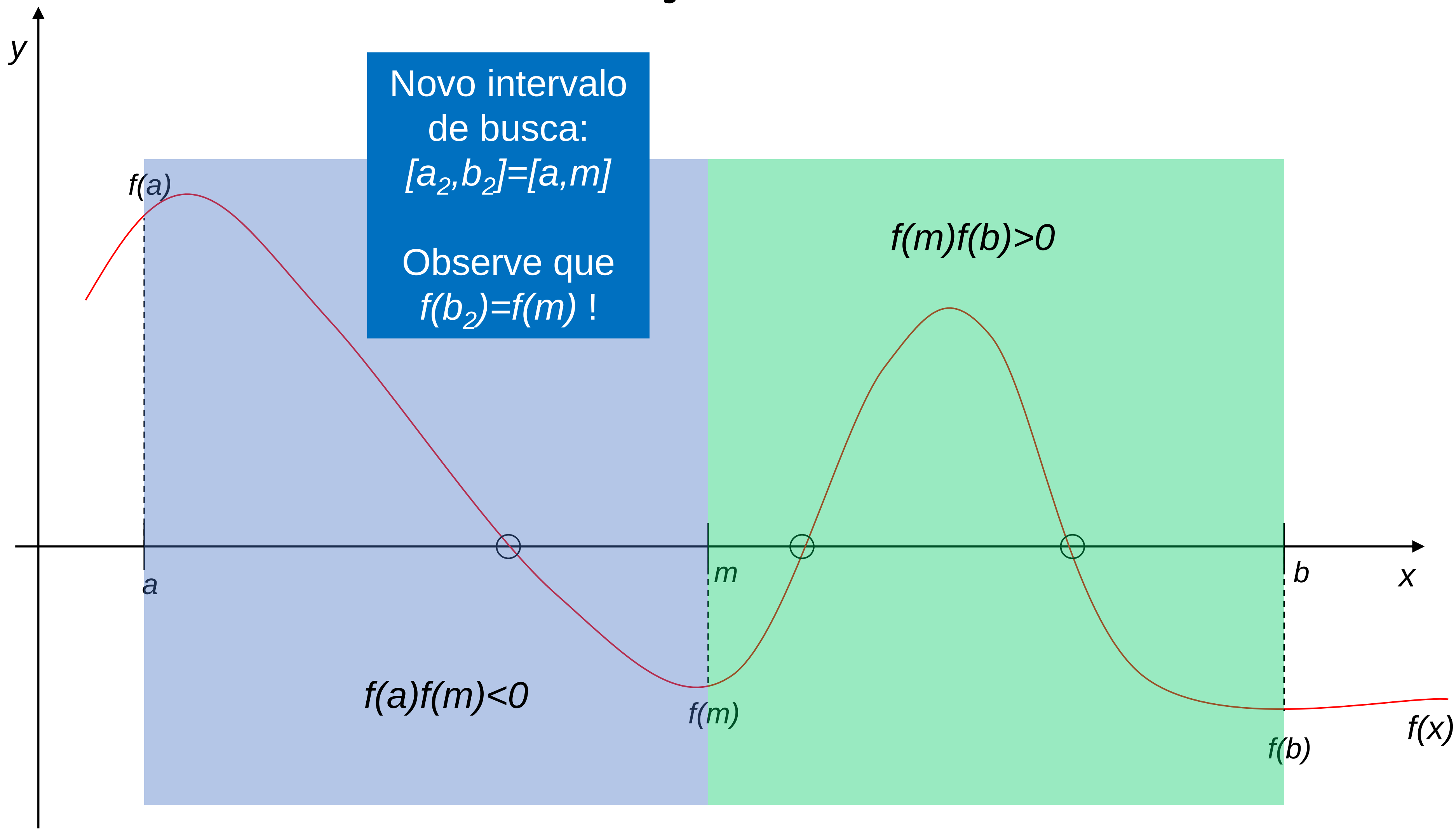
- O método da bissecção



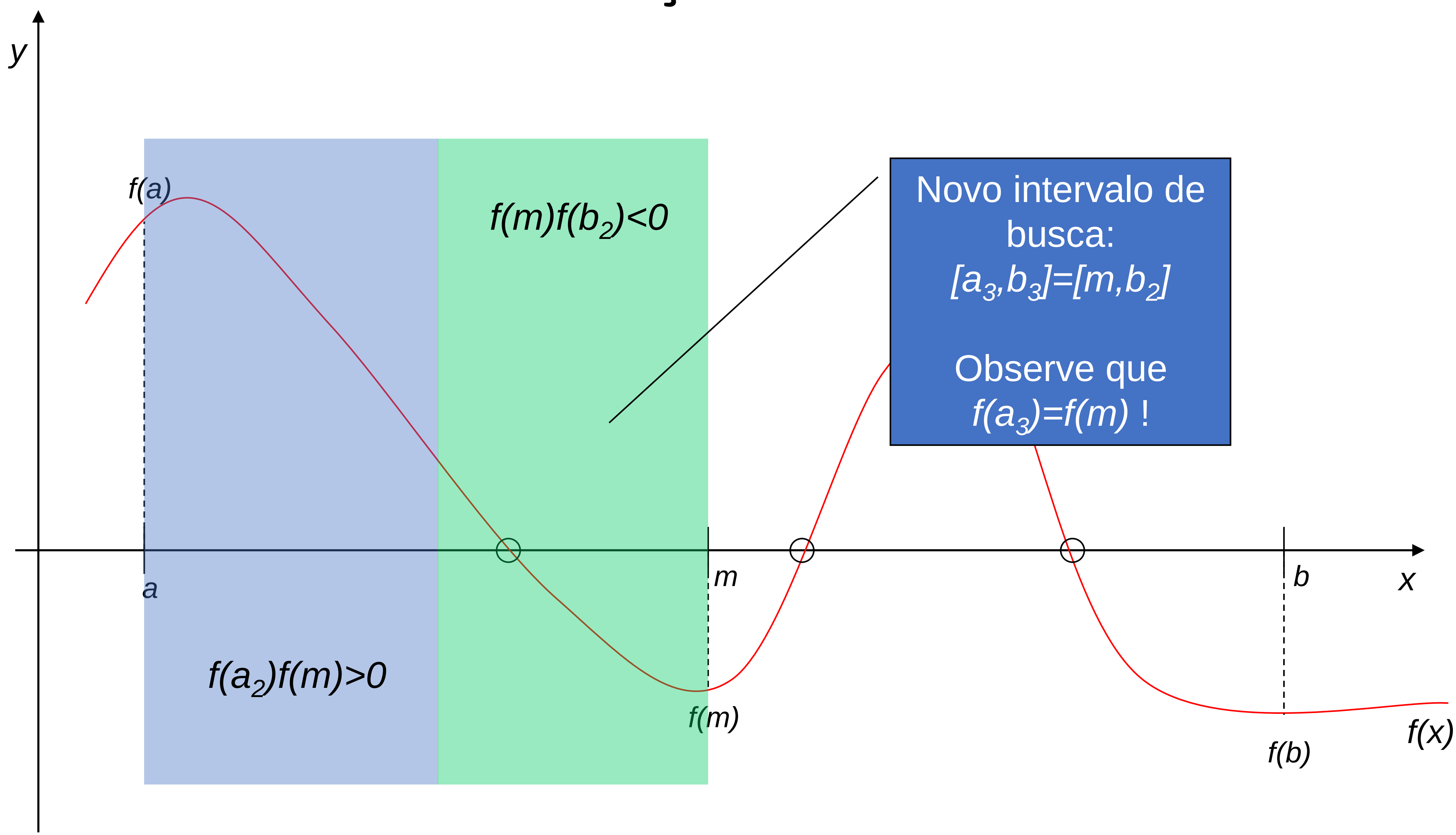
•O método da bissecção



•O método da bissecção



•O método da bissecção



- O método da bissecção
  - Observe que, a menos da avaliação inicial de $f(a)$ e de $f(b)$, o método precisa apenas de uma avaliação da função – em m – durante cada iteração, bastando para isso que se guarde convenientemente os valores prévios de $f(a)$ ou de $f(b)$ (dependendo de qual subintervalo é escolhido).
  - Nesse sentido, o método é extremamente rápido em termos do número de operações a serem executadas, apesar de apresentar uma taxa de convergência pequena, de ordem linear.

- O método da bissecção
  - Note que, a cada k-ésima iteração, o comprimento do intervalo $[a_k; b_k]$ é a metade do comprimento do intervalo $[a_{k-1}; b_{k-1}]$, de onde podemos escrever:

$$|b_2 - a_2| = \frac{1}{2}|b_1 - a_1| = \frac{1}{2}|b - a|$$

$$|b_3 - a_3| = \frac{1}{2}|b_2 - a_2| = \frac{1}{2^2}|b_1 - a_1| = \frac{1}{2^2}|b - a|$$

$$\vdots$$

$$|b_k - a_k| = \frac{1}{2}|b_{k-1} - a_{k-1}| = \cdots = \frac{1}{2^k}|b_1 - a_1| = \frac{1}{2^k}|b - a|$$

  - Podemos então nos perguntar: quantas iterações são necessárias para que se obtenha um intervalo cujo comprimento seja menor do que uma tolerância δ ?

- O método da bissecção
  - Se considerarmos o erro na k-ésima iteração,

$$e_k = m_k - \xi$$

onde $m_k = (a_k + b_k)/2$ é o ponto médio a cada iteração, e usarmos a equação anterior, podemos escrever

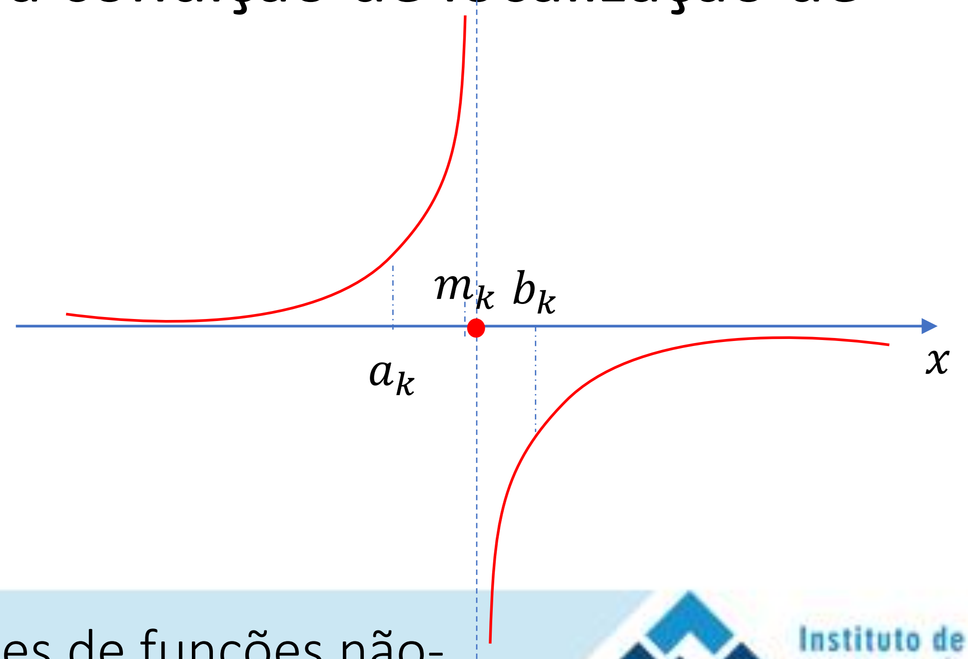
$$|e_k| = |m_k - \xi\ | \leq \frac{1}{2}(b_k - a_k) = \frac{1}{2^k}|b - a| < \delta$$

de onde, aplicando logaritmos,

$$-k\ \log 2 < \log \delta - \log(b - a)$$

$$k > \frac{\log(b - a) - \log \delta}{\log 2}.$$

- O método da bissecção
  - Observe que, eventualmente, dependendo da função e da posição relativa dos extremos de um intervalo de busca em relação a uma raiz, é possível que o método da bissecção produza intervalos de busca cada vez menores sem, no entanto, satisfazer a condição de localização de raiz, $|f(m)| < \epsilon$:



- O método da bissecção
  - Uma boa implementação do método da bissecção deve, portanto, parar as iterações quando um dos três **critérios de parada** a seguir for satisfeito:
    - **Aproximação numérica de uma raiz:**
$$|f(m_k)| < \epsilon$$
onde $\epsilon \ll 1$.
    - **Intervalo é pequeno:**
$$|b_k - a_k| < \delta$$
onde $\delta \ll 1$.
    - **Número máximo de iterações foi excedido:**
$$k > k_{max}$$

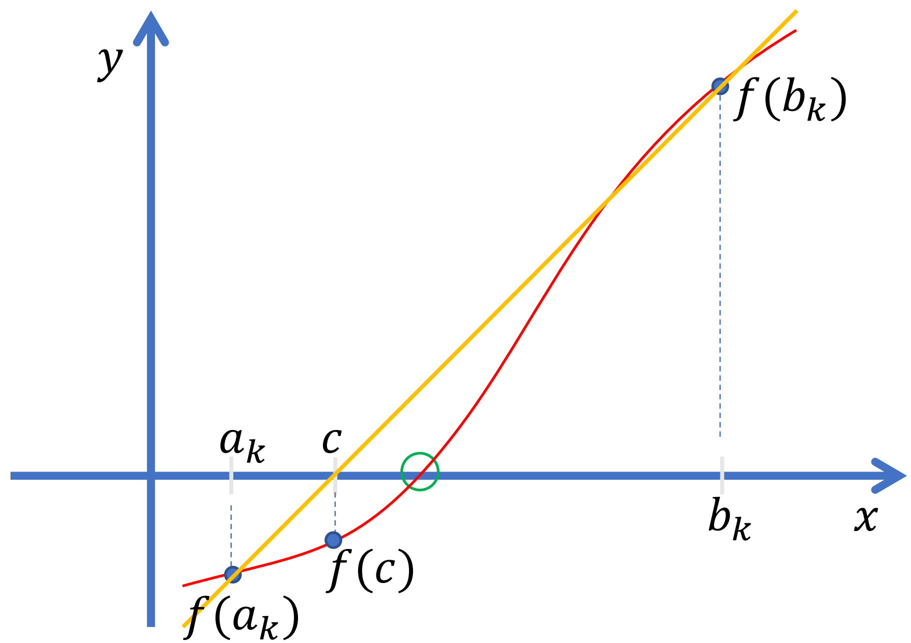
•O método da bissecção

```
proc bisseccao(entrada: a,b,eps,del,kmax; saida: a,b,m,resultado)
  f_a:=f(a) ; f_b:=f(b)
  para k:=1 até kmax faça
    m:=(a+b)/2.0
    f_m:=f(m)
    se abs(f_m)<eps então
      resultado:=0 ! valor avaliado de f(m) é pequeno, aceita m como raiz
      para
    senão se abs(a-b)<=del então
      resultado:=1 ! comprimento do intervalo de busca < del
      para
    senão se sinal(f_m)/=sinal(f_a) então
      b:=m ; f_b:=f_m ! escolhe subintervalo à esquerda de m
    senão se sinal(f_m)/=sinal(f_b)
      a:=m ; f_a:=f_m ! escolhe subintervalo à direita de m
    senão
      resultado:=-1 ! não pode proceder, f(a)*f(b)> 0
      para
    fim se
  fim para
  se k>kmax então
    resultado:= -3
  fim se
fim proc
```

Método da Posição Falsa

•O método da posição falsa

- Esse é um método de enquadramento, similar ao da bissecção.
- A diferença está na forma como é calculado o valor que dividirá o intervalo de busca em dois: ele é a coordenada x da intersecção de uma reta secante aos extremos do intervalo, com o eixo horizontal.



- O método da posição falsa
  - Dado o intervalo de busca $[a_k; b_k]$, e usando a forma explícita, $y(x) = mx + l$, para expressar a equação da reta secante a reta que passa pelos pontos $\left(a_k; f(a_k)\right)$ e $\left(b_k; f(b_k)\right)$, escrevemos
$$y(a_k) = f(a_k) = ma_k + l$$
e
$$y(b_k) = f(b_k) = mb_k + l$$
de onde, subtraindo a primeira equação, da segunda, obtemos
$$m = \frac{f(b_k) - f(a_k)}{b_k - a_k}.$$

- O método da posição falsa
  - Para determinar o coeficiente linear l, usamos a primeira equação:

$$y(a_k) = f(a_k) = ma_k + l$$

de onde

$$l = \frac{f(a_k)b_k - f(b_k)a_k}{b_k - a_k}.$$

  - Para determinarmos c, impomos a condição $y(c) = 0$, de onde

$$c = \frac{f(b_k)a_k - f(a_k)b_k}{f(b_k) - f(a_k)}.$$

• O método da posição falsa

- Esse método pode, sob determinadas situações, apresentar convergência pior do que o método da bissecção.
- Em particular, se $f''(x)$ tem sinal constante no intervalo $[a_k; b_k]$ (ou seja, a função não tem ponto de inflexão nele), então um dos extremos do intervalo (aquele para o qual $\text{sinal}\big(f(x)\big) = \text{sinal}\big(f''(x)\big)$), permanecerá constante, sendo alterado apenas o outro.
- Dessa forma, o comprimento do intervalo pode não reduzir de forma regular ao longo das iterações.
- Há variantes do método, como o chamado **algoritmo de Illinois**, que remedia esse problema, com taxa de convergência $O\big(\sqrt{2}\big)$.

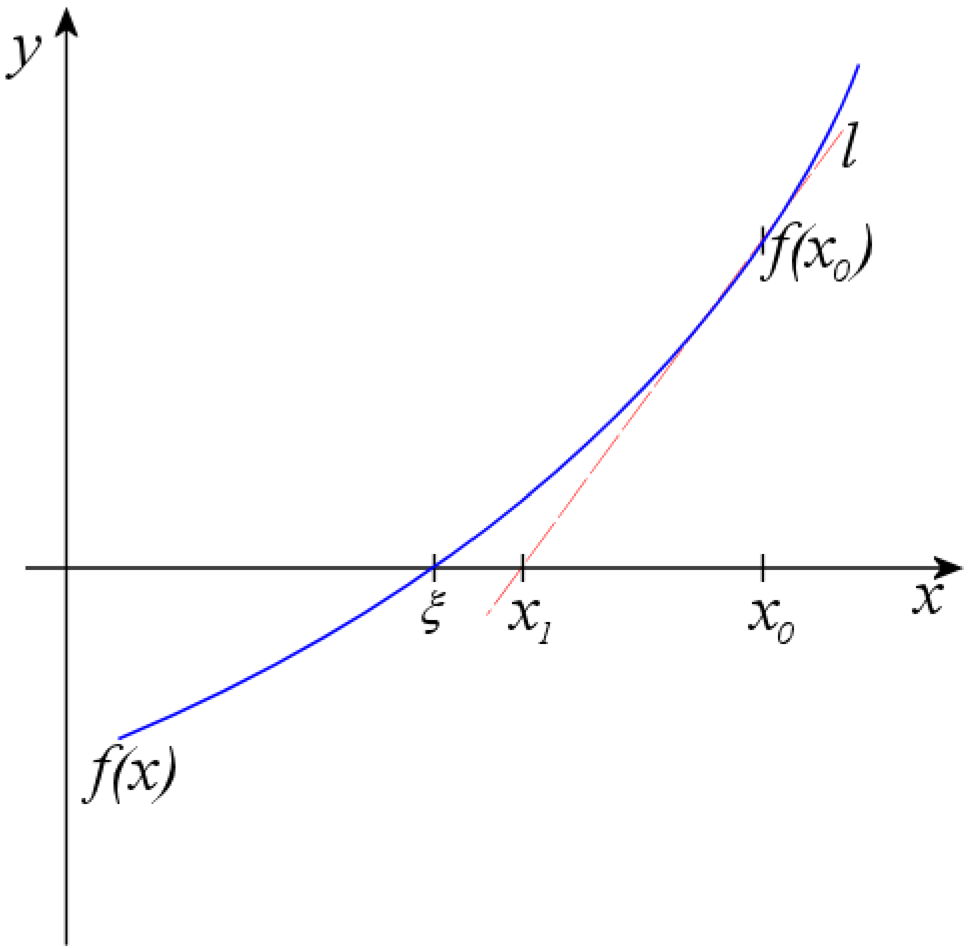
•O método da posição falsa

```
proc posicao_falsa(entrada: a,b,eps,del,kmax; saida: a,b,c,resultado)
  f_a:=f(a) ; f_b:=f(b)
  para k:=1 até kmax faça
    c:=(f_b*a-f_a*b)/(f_b-f_a)
    f_c:=f(c)
    se abs(f_c)<eps então
      resultado:=0 ! valor avaliado de f(c) é pequeno, aceita c como raiz
      para
    senão se abs(a-b)<=del então
      resultado:=1 ! comprimento do intervalo de busca < del
      para
    senão se sinal(f_c)/=sinal(f_a) então
      b:=c ; f_b:=f_c ! escolhe subintervalo à esquerda de c
    senão se sinal(f_x)/=sinal(f_b)
      a:=c ; f_a:=f_c ! escolhe subintervalo à direita de c
    senão
      resultado:=-1 ! não pode proceder, f(a)*f(b)> 0
      para
    fim se
  fim para
  se k>kmax então
    resultado:= -3
  fim se
fim proc
```

Método de Newton-Raphson

- Método de Newton-Raphson
  - O método de Newton-Raphson é um método extremamente eficiente para localizar uma raiz ξ de $f(x)$, desde que a estimativa inicial x_0 esteja suficientemente próxima da raiz.
  - O método procede da seguinte maneira: dada uma estimativa inicial x_0 , obtém-se a equação da reta l, tangente ao ponto $\left(x_0; f(x_0)\right)$.
  - De posse da reta l, calcula-se a sua intersecção com o eixo dos x, obtendo-se o ponto x_1, conforme pode-se ver na figura a seguir:

•Método de Newton-Raphson



Observe que o ponto x_1 já se encontra bem próximo da raiz ξ !

- Método de Newton-Raphson
  - A equação da reta l pode ser escrita na forma explícita como $y = ax$ +b e, como a reta l passa pelos pontos $\left(x_0; f(x_0)\right)$ e $(x_1; 0)$, podemos escrever a sua equação como $f(x_0) = ax_0 - x_1$.
  - Como l é tangente a $f(x)$ no ponto $\left(x_0; f(x_0)\right)$, a sua declividade, a, é dada pela *derivada* $f'(x_0)$.
  - Logo, obtemos $f(x_0) = f'(x_0)(x_0 - x_1)$, de onde

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

- Método de Newton-Raphson
  - Se x_1 é distante de ξ, i.e. $|f(x_1)| > 0$, então calculamos

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

  - Isso sugere a generalização

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

a qual é a *equação governante do método de Newton-Raphson.*

- Método de Newton-Raphson
  - A equação governante anterior também pode ser obtida através de uma expansão em série de Taylor.
  - Seja ξ uma raiz de f e x uma aproximação para ξ (i.e. $x + \Delta x = \xi$); se f'' existe e é contínua, pelo teorema de Taylor, temos

$$0 = f(\xi) = f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x f'(x) + O\big((\Delta x)^2\big).$$

- Método de Newton-Raphson
  - Se $\Delta x \approx 0$, então podemos escrever

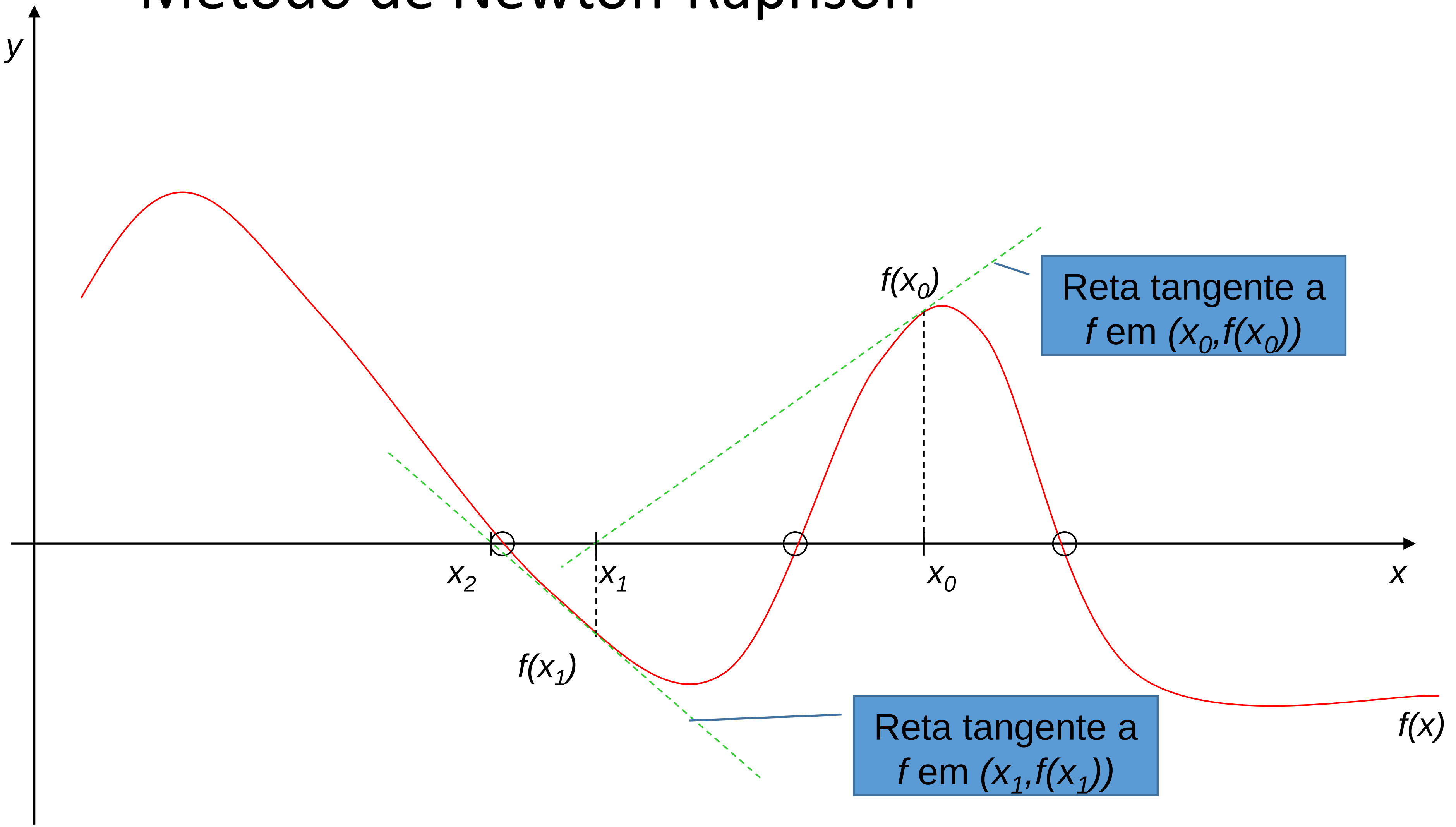
$$0 = f(x) + \Delta x f'(x) \;\therefore\; \Delta x = -\frac{f(x)}{f'(x)}$$

e, como $\Delta x = \xi - x$,

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

Como ξ é desconhecida, então essa equação sugere um processo iterativo, corrigindo sucessivamente x pela distância (estimada) Δx.

• Método de Newton-Raphson



- Método de Newton-Raphson
  - Para a função $f(x) = x^2 - 2$ e tomando $x_0 = 6$, o método fornece as seguintes estimativas, convergindo para a raiz $\xi = 1{,}414213562\ldots$

x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$
6,000000000	34,000000000	12,000000000
3,166666667	8,027777778	6,333333333
1,899122807	1,606667436	3,798245614
1,476120295	0,178931125	2,952240590
1,415511710	0,003673401	2,831023420
1,414214158	$1{,}68364\times10^{-06}$	2,828428315
1,414213562	$3{,}54383\times10^{-13}$	2,828427125

- Método de Newton-Raphson
  - Observe, na tabela anterior, que x_3 apresenta um dígito exato; x_4 apresenta dois dígitos exatos; x_5 apresenta quatro dígitos exatos; e x_6 apresenta nove dígitos exatos.
  - Esse comportamento exibe a característica de *convergência quadrática* do método, à medida que as estimativas aproximam-se da raíz.

- Método de Newton-Raphson
  - O erro na k-ésima iteração do método de Newton-Raphson é dado por $e_k = x_k - \xi$.
  - Assumindo que $f''(x)$ é contínua e ξ é uma raiz simples de $f(x)$ (não é raiz simultânea de $f(x)$ e de $f'(x)$), podemos escrever

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

- Método de Newton-Raphson
  - Pelo teorema de Taylor, temos

$$0 = f(\xi) = f(x_k - e_k)$$
$$= f(x_k) - e_k f'(x_k) + \frac{1}{2} {e_k}^2 f''(\mu_k)$$

onde $x_k \leq \mu_k \leq \xi$. Rearranjando os termos, vem

$$e_k f'(x_k) - f(x_k) = \frac{1}{2} {e_k}^2 f''(\mu_k)$$

- Método de Newton-Raphson
  - Como

$$e_{k+1} = \frac{e_k f'(x_k) - f(x_k)}{f'(x_k)},$$

podemos escrever

$$e_{k+1} = \frac{1}{2}\frac{f''(\mu_k)}{f'(x_k)}{e_k}^2 \approx \frac{1}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(\xi)}{e_k}^2 = C{e_k}^2.$$

  - A equação

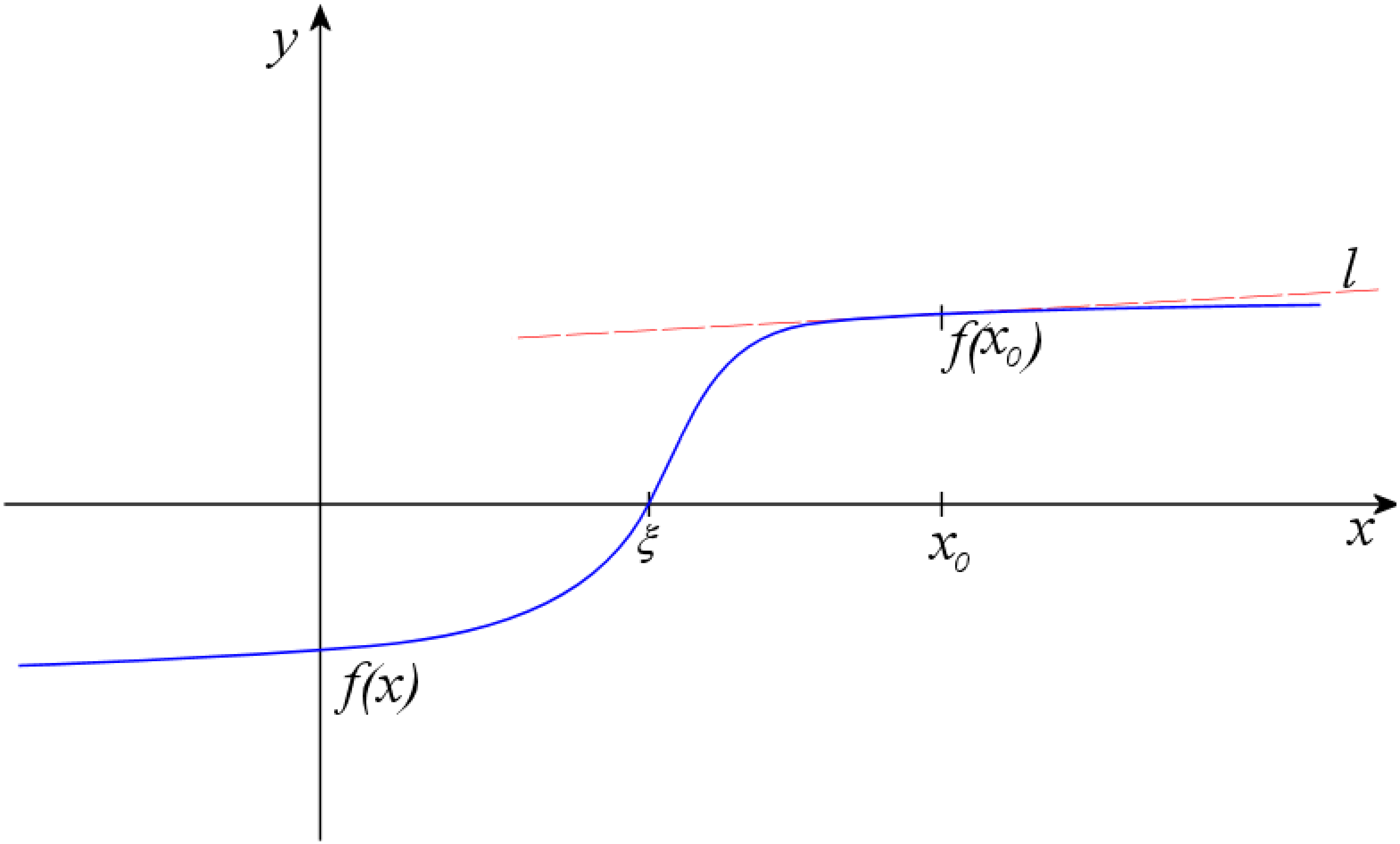
$$\boxed{e_{k+1} = C{e_k}^2}$$

mostra que (pelas hipóteses assumidas), quando a estimativa x_k ***é próxima de*** ξ, o erro a cada iteração é reduzido de forma quadrática.

Método de Newton-Raphson

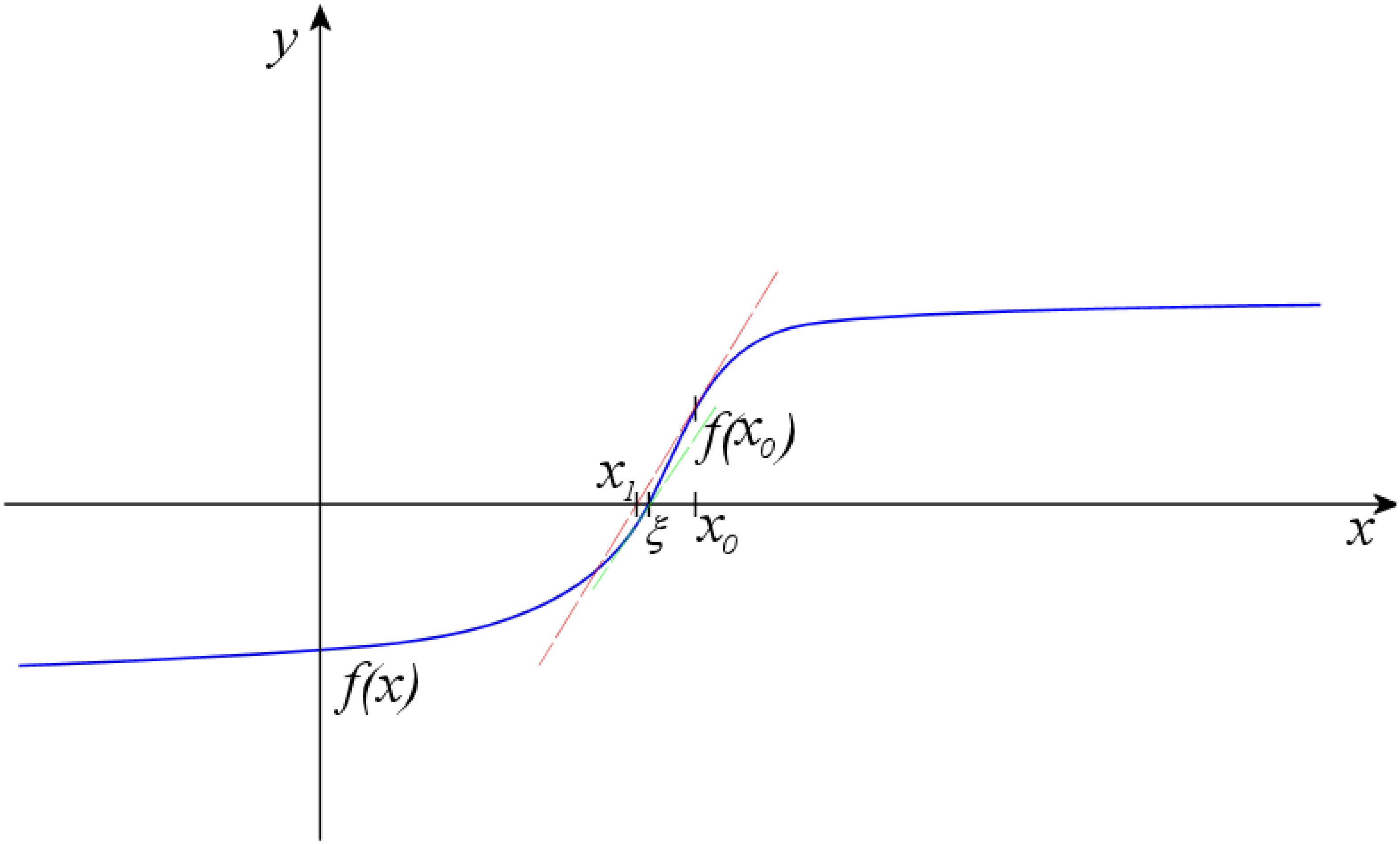
- O método pode falhar em duas situações:
  - Quando $f'(x_k) = 0$, ocorre uma **divisão por zero** e o processo de busca da raiz deve ser interrompido;
  - Quando $|f'(x_k)| \approx 0$ – o que significa que a reta tangente ao ponto $\left(x_k; f(x_k)\right)$ é **quase paralela ao eixo dos $\boldsymbol{x}$** – pode acontecer que os pontos $x_k, x_{k+1}, \ldots$ se afastam de ξ, como na figura a seguir:

• Método de Newton-Raphson



- Método de Newton-Raphson
  - Na figura anterior, observe que a estimativa x_1 estará bem afastada da raiz ξ e, pior ainda, $|f'(x_1)| \approx 0$ – logo, x_2 será uma estimativa ainda mais afastada de ξ.
  - Por outro lado, observe que o método pode perfeitamente localizar ξ, desde que a estimativa inicial seja *suficientemente próxima* de ξ, como mostra a figura a seguir:

• Método de Newton-Raphson



- Método de Newton-Raphson
  - Os dois exemplos anteriores denotam a necessidade de se combinar o método de Newton-Raphson (ou outro similar, como o método de Halley) com um *método de enquadramento*, como o da *bissecção*, a fim de se localizar um intervalo dentro do qual fica garantida a convergência do método de Newton-Raphson.

- Método de Newton-Raphson
  - **Critérios de parada** do método:
    - **Aproximação numérica de uma raiz:**

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

onde $\epsilon \ll 1$.

- **Aproximações sucessivas muito próximas:**

$$|x_{k+1} - x_k| < \delta$$

onde $\delta < \epsilon \ll 1$. Quando essa condição é satisfeita, indica que a raiz provavelmente encontra-se entre x_{k+1} e x_k, mas o valor de ϵ é muito pequeno para a precisão do computador.

- **Número máximo de iterações foi excedido:**

$$k > k_{max}$$

Método de Newton-Raphson

- O método pode ser expresso como segue:

```
proc newton_raphson(entrada: x0,kmax,eps,del; saida: x,resultado)
  para k:=1 até kmax faça
    se abs(f’(x))<sqrt(epsilon_maquina) então
      resultado:= -1
      para
    senão
      x_ant:= x
      x:= x_ant-f(x_ant)/f’(x_ant)
      se abs(f(x))<eps então
        resultado:= 0
        para
      senão se abs(x-x_ant)<del então
        resultado:= -2
        para
      fim se
    fim se
  fim para
  se k>kmax então
    resultado:= -3
  fim se
fim proc
```

- Método de Newton-Raphson
  - Aproximação numérica da derivada
    - Como visto, o método exige a avaliação da derivada de $f(x)$ a cada iteração.
    - É possível que, em algumas situações, a derivada não esteja disponível ou, ainda, que ela seja bastante custosa para se avaliar (mais do que a própria função).
    - Nesse caso, pode-se aproximar numericamente $f'(x)$.

- Método de Newton-Raphson
  - Aproximação numérica da derivada
    - Usando a aproximação progressiva para a derivada,

$$D_+(h) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, h \ll 1,$$

o método *aproximado* de Newton-Raphson tem sua equação governante expressa por:

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - f(x_k)\frac{h}{f(x_k + h) - f(x_k)}, k \geq 0}$$

- Método de Newton-Raphson
  - Aproximação numérica da derivada
    - As aproximações **regressiva**, $D_{-}(h)$, e **central**, $D_0(h)$, também podem ser usadas, resultando nas seguintes equações governantes do método aproximado de Newton-Raphson:
    - Equação governante com aproximação regressiva:

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - f(x_k)\frac{h}{f(x_k) - f(x_k - h)}, k \geq 0}$$

    - Equação governante com aproximação central:

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - f(x_k)\frac{2h}{f(x_k + h) - f(x_k - h)}, k \geq 0}$$

- Método de Newton-Raphson
  - Aproximação numérica da derivada
    - Note, porém, que o uso da aproximação central $D_0(h)$ irá requerer três avaliações da função f por iteração, ao passo que as outras aproximações requerem apenas duas.
    - Em certas situações, é recomendável usar essa aproximação, tendo em vista seu menor erro de truncamento.

Método de Halley

- Método de Halley
  - É obtido a partir de uma expansão da função $f(x)$ numa série de Taylor em torno de x_k:

$$f(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}f''(x_k)(x - x_k)^2 + \cdots$$

  - Se x é raiz de $f(x)$, então, tomando apenas os termos até 2ª ordem,

$$0 \approx f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}f''(x_k)(x - x_k)^2.$$

  - Assumindo que x_{k+1} aproxima x, podemos escrever

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

- Método de Halley
  - Colocando em evidência $(x_{k+1} - x_k)$, vem

$$0 = f(x_k) + (x_{k+1} - x_k)\left(f'(x_k) + \frac{1}{2} f''(x_k)(x_{k+1} - x_k)\right)$$

  e, isolando x_{k+1},

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k) + \frac{1}{2} f''(x_k)(x_{k+1} - x_k)}$$

  - Usando a equação governante do método de Newton-Raphson, escrevemos

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

- Método de Halley
  - Substituindo $x_{k+1} - x_k$ por $-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ na equação para x_{k+1}, obtemos

$$\boxed{x_{k+1} = x_k - \frac{2f(x_k)f'(x_k)}{2[f'(x_k)]^2 - f(x_k)f''(x_k)}}$$

  que é a *equação governante do método de Halley*.
  - Esse método tem uma taxa de convergência cúbica, mas ele falha numa iteração k se $f'(x_k) = f''(x_k) = 0$.
  - Além disso, tanto f' como f'' devem existir em toda a sequência de estimativas x_k calculadas.

- Método de Halley
  - O que o método de Halley faz, a cada iteração, é substituir a função $f(x)$ pela função

$$y(x) = \frac{(x - x_k) + c}{a(x - x_k) + b}$$

onde

$$a = f''(x_k)/d$$

$$b = 2f'(x_k)/d$$

$$c = 2f(x_k)f'(x_k)/d$$

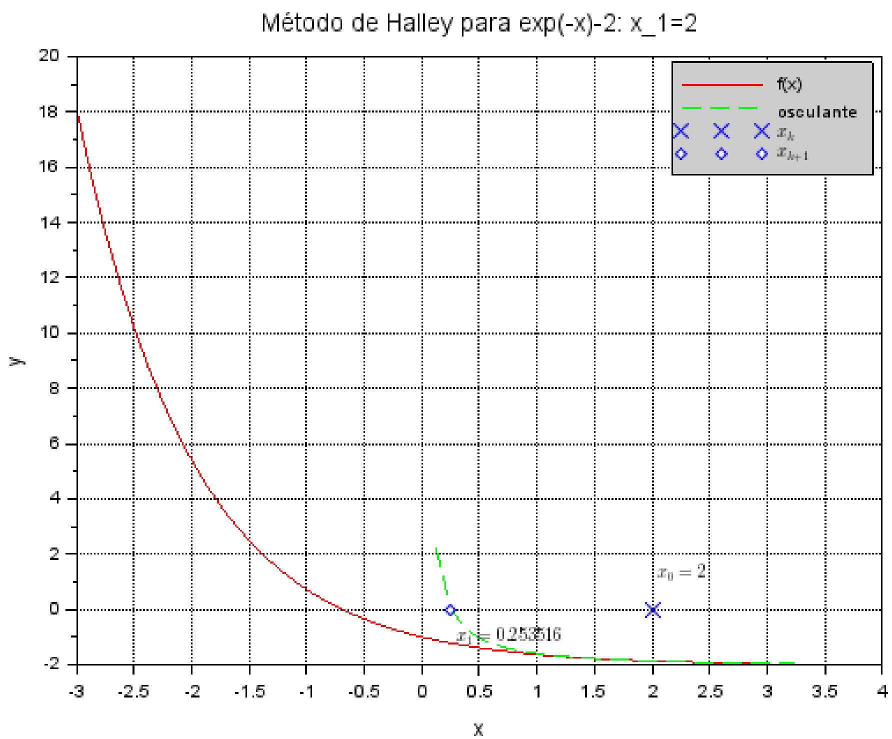
$$d = 2[f'(x_k)]^2 - f(x_k)f''(x_k)$$

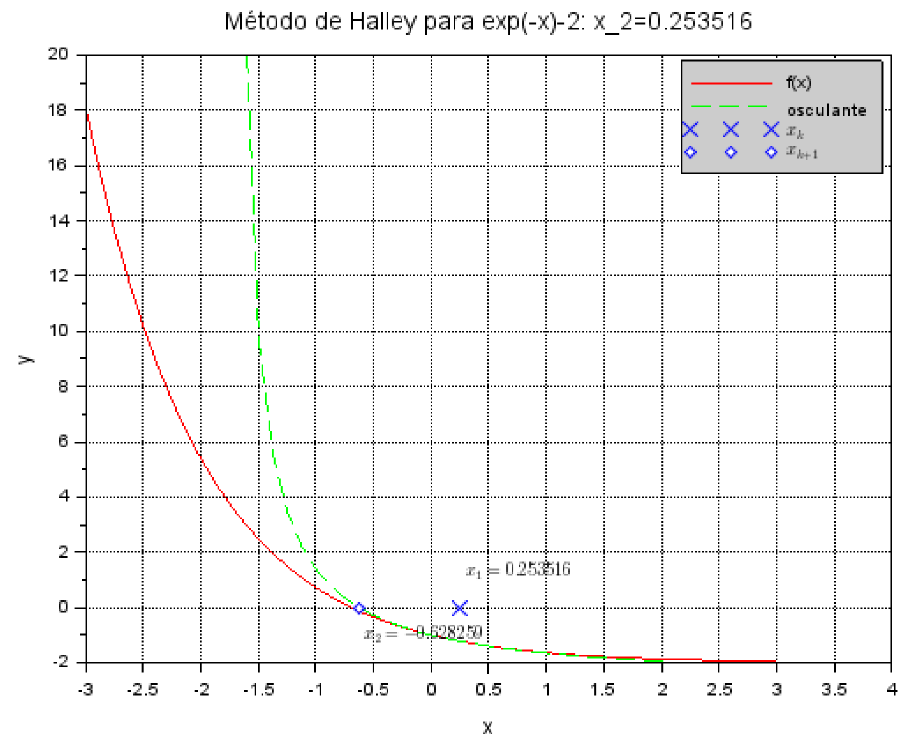
- Método de Halley
  - A função $y(x)$ é uma *função osculante* a $f(x)$ em x_k, isto é, ela satisfaz as seguintes igualdades:

$$y(x_k) = f(x_k)$$
$$y'(x_k) = f'(x_k)$$
$$y''(x_k) = f''(x_k)$$

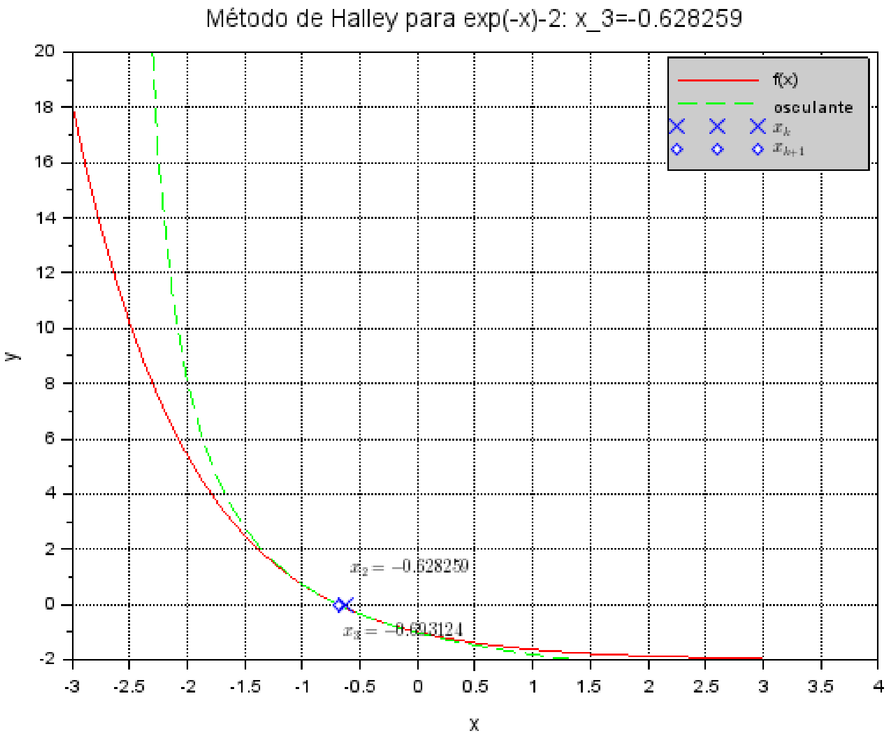
    ou seja, além de ser igual à função, ela é tangente a f e tem a mesma curvatura, em x_k.
  - Note que, impondo a condição $y(x_{k+1}) = 0$, se obtém a equação governante para o método de Halley.

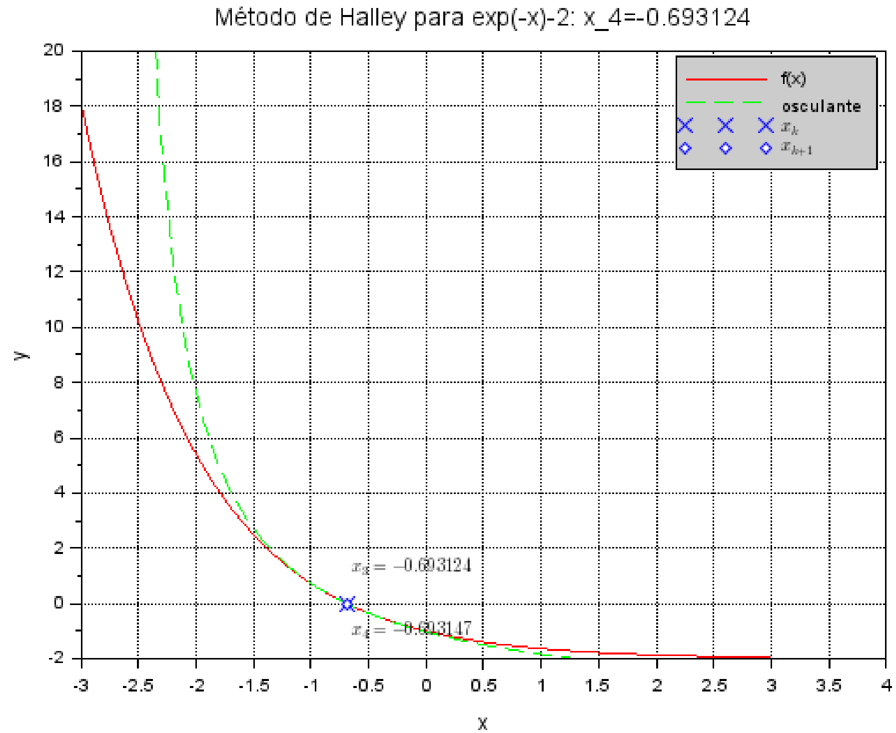
- Método de Halley
  - Mais ainda, a intersecção da curva osculante com o eixo $y = 0$ produz a próxima estimativa x_{k+1}, como vemos nos gráficos a seguir:





- Método de Halley
  - Mais ainda, a intersecção da curva osculante com o eixo $y = 0$ produz a próxima estimativa x_{k+1}, como vemos nos gráficos a seguir:





• Método de Halley

- Para a função $f(x) = x^2 - 2$ e tomando $x_0 = 6$, o método fornece as seguintes estimativas, convergindo para a raiz $\xi = 1{,}414213562\ldots$

x_k	$f(x_k)$	$f'(x_k)$
6,000000000	34,000000000	12,000000000
1,452186608	3,248264463	4,581818182
1,414222014	0,108845944	2,904372154
1,414213562	$1{,}85998\times10^{-05}$	2,828440277

- Observe que para essa função, f'' é constante.

- Método de Halley
  - Assim como no método de Newton-Raphson, as derivadas podem ser aproximadas por aproximações numéricas.
  - Em particular, como $f'' = (f')'$, a derivada de 2ª ordem pode ser calculada como

$$f''(x) \cong \frac{f'(x+h) - f'(x)}{h}.$$

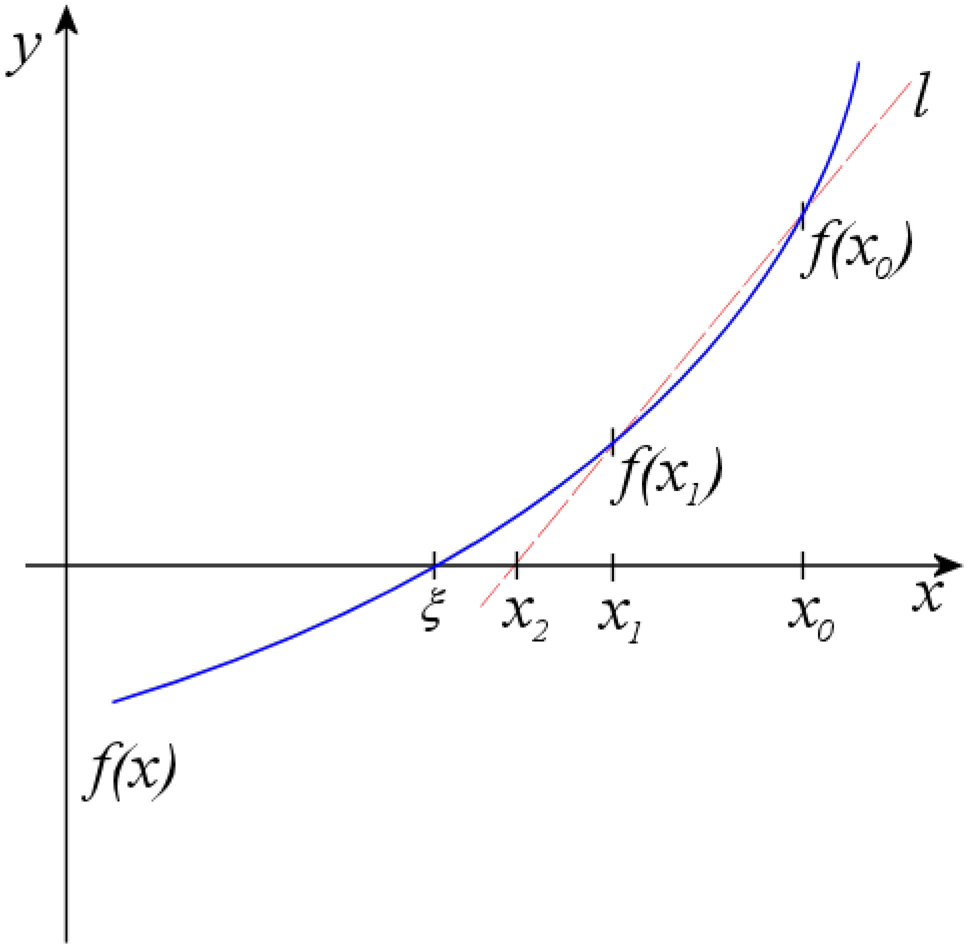
Método da secante

Método da secante

- O método da secante é similar ao método de Newton-Raphson.
- Como discutido anteriormente, uma das dificuldades com o método de Newton-Raphson é a necessidade de se utilizar a derivada da função a cada iteração (portanto, a derivada deve existir em x_k).
- O método da secante, como o próprio nome diz, utiliza uma reta *secante* à curva da função $f(x)$, i.e., essa reta corta a curva em dois pontos da função.

- Método da secante
  - Note a similaridade com o método de Newton-Raphson, que utiliza uma reta *tangente* à curva da função.
  - O método procede da seguinte maneira: dadas duas estimativas iniciais x_0 e x_1, obtém-se a equação da reta secante l que passa pelos pontos $\big(x_0; f(x_0)\big)$ e $\big(x_1; f(x_1)\big)$.
  - De posse da reta l, calcula-se a sua intersecção com o eixo dos x, obtendo-se o ponto x_2, conforme pode-se ver na figura a seguir:

- Método da secante



Observe que o ponto x_2 já se encontra bem próximo da raiz ξ !

- Método da secante
  - A equação da reta l pode ser escrita na forma explícita como $y = ax + b$ e, como ela passa pelos pontos $\left(x_1; f(x_1)\right)$ e $(x_2; 0)$, podemos escrever a sua equação como

$$f(x_1) = ax_1 - ax_2.$$

  - Como a reta l também passa pelo ponto $\left(x_0; f(x_0)\right)$, a sua declividade é dada por

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

- Método da secante
  - Logo, podemos escrever

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

de onde

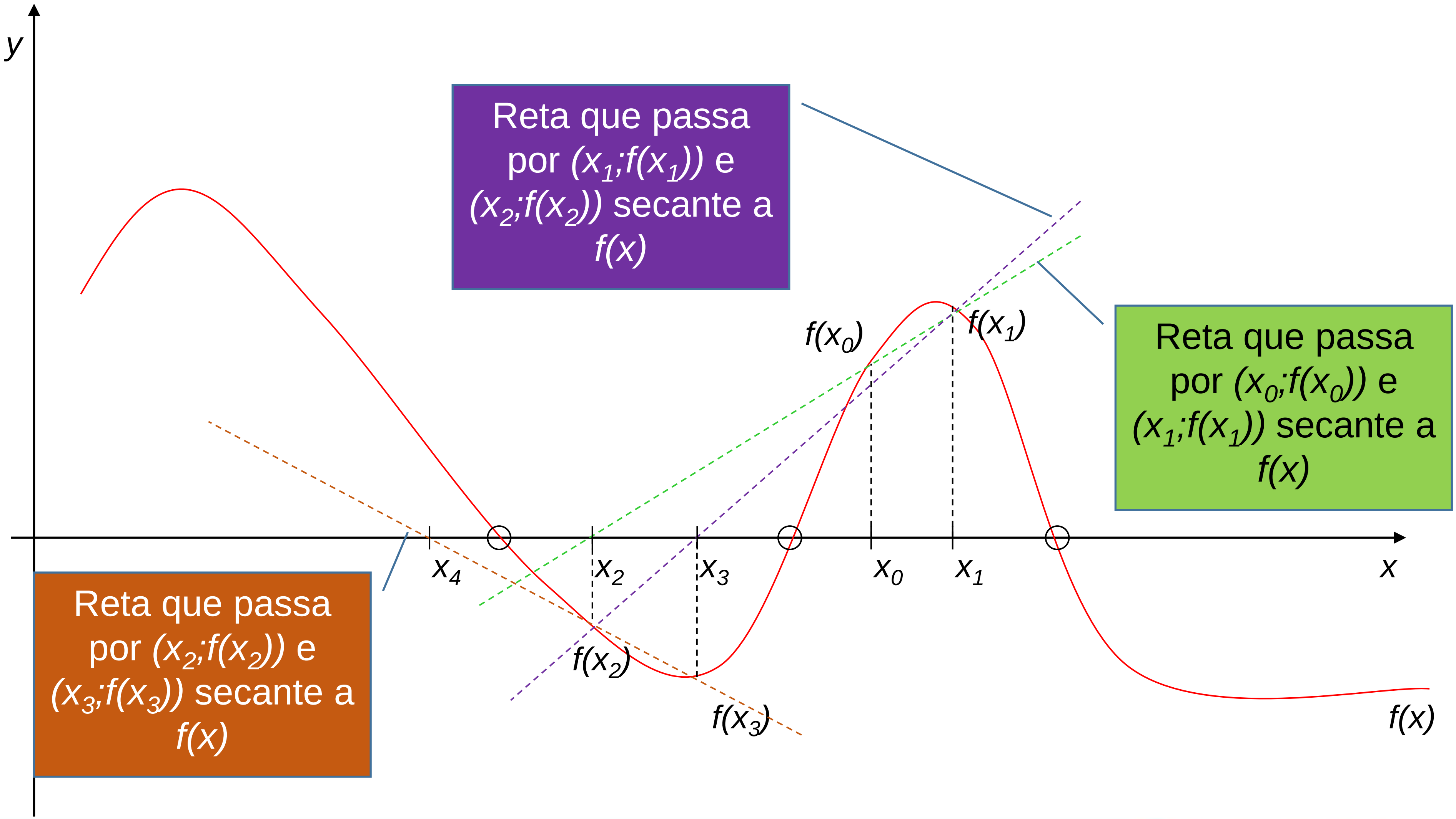
$$x_2 = x_1 - f(x_1)\frac{x_1 - x_0}{f(x_1) - f(x_0)}.$$

  - Generalizando para x_{k-1}, x_k e x_{k+1}, obtemos

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

a qual é a *equação governante do método da secante*.

• Método da secante



Métodos para cálculo de raízes de funções não-lineares

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

- Método da secante
  - Para a função $f(x) = x^2 - 2$ e usando estimativas iniciais $x_0 = 6$ e $x_1 = 4$, obtemos os valores a seguir:

k	x_k	$f(x_k)$	x_{k+1}	$f(x_{k+1})$	x_{k+2}	$f(x_{k+2})$
0	6	34	4	14	2,6	4,76
1	4	14	2,6	4,76	1,87879	1,52984
2	2,6	4,76	1,87879	1,52984	1,53721	0,363022
3	1,87879	1,52984	1,53721	0,363022	1,43094	0,0475931
4	1,53721	0,363022	1,43094	0,0475931	1,41491	0,00196112
5	1,43094	0,0475931	1,41491	0,00196112	1,41422	$1,15246\times10^{-5}$
6	1,41491	0,00196112	1,41422	$1,15246\times10^{-5}$	1,41421	$2,82375\times10^{-9}$

- Método da secante
  - Observe, na tabela anterior, que x_3 apresenta um dígito exato; x_4 apresenta três dígitos exatos; e x_6 apresenta cinco dígitos exatos.
  - Esse comportamento é similar ao método de Newton-Raphson, mas observe que, aqui, demora-se um pouco mais para se obter a mesma quantidade de dígitos exatos, se comparado ao método de Newton-Raphson.

- Método da secante – medida do erro
  - O erro na iteração $k+1$ pode ser estimado por

$$\boxed{e_{k+1} = Ce_k e_{k-1}}$$

(Compare com o erro do método de Newton-Raphson: $e_{k+1} = C{e_k}^2$).

  - Observe que, à medida que as iterações convergem para uma raiz, os valores de x_{k-1} e x_k tendem a ficar cada vez mais próximos entre si.
  - Nesse sentido, podemos dizer que, quando $|x_k - x_{k-1}| \cong 0$, a reta secante passa a ser *tangente* à curva da função $f(x)$.

- Método da secante vs. método de Newton-Raphson
  - Observando as equações do método da secante e do método *aproximado* de Newton-Raphson, podemos notar que o termo

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

aproxima o inverso da derivada $f'(x)$ quando

$$|x_k - x_{k-1}| \cong 0.$$

- Método da secante vs. método de Newton-Raphson
  - Secante:

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

  - Newton-Raphson aproximado com $D_+(h)$:

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k)\boxed{\frac{h}{f(x_k + h) - f(x_k)}}, k \geq 0$$

- Método da secante vs. método de Newton-Raphson
  - Ou seja: podemos concluir que, se as estimativas x_{k-1} e x_k forem suficientemente próximas da raiz, então o método da secante comportar-se-á de maneira similar ao método de Newton-Raphson.
  - Essa conclusão reflete-se, também, nas medidas de erro apresentadas.

- Método da secante
  - Assim como no método de Newton-Raphson, o método pode falhar em duas situações:
    - Quando $f(x_k) - f(x_{k-1})$, ocorre uma divisão por zero e o processo de busca da raiz deve ser interrompido;
    - Quando $|f(x_k) - f(x_{k-1})| \cong 0$ – o que significa que a reta secante aos pontos $\left(x_k; f(x_k)\right)$ e $\left(x_{k-1}; f(x_{k-1})\right)$ é quase paralela ao eixo dos x – pode acontecer que os pontos x_k, x_{k+1}, ... se afastem de ξ.
  - Por isso, também o método da secante é combinado, em geral, com um método de enquadramento.

- Método da secante
  - **Critérios de parada** do método
  - **Aproximação numérica de uma raiz:**

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

onde $\epsilon \ll 1$.

  - **Aproximações sucessivas muito próximas:**

$$|x_{k+1} - x_k| < \delta$$

onde $\delta < \epsilon \ll 1$. Quando essa condição é satisfeita, indica que a raiz provavelmente encontra-se entre x_{k+1} e x_k, mas o valor de ϵ é muito pequeno para a precisão do computador.

  - **Número máximo de iterações foi excedido:**

$$k > k_{max}.$$

• Método da secante

```
proc secante(entrada: x0,x1,kmax,eps,del; saida: x,resultado)
  fx0:= f(x0) ; fx1:= f(x1)
  para k:=1 até kmax faça
    se abs(fx1-fx0)<sqrt(epsilon_maquina) então
      resultado:= -1
      para
    senão
      x:= x1-fx1*(x1-x0)/(fx1-fx0)
      x0:= x1 ; fx0:= fx1
      x1:= x; fx1:= f(x)
      se abs(fx1)<eps então
        resultado:= 0
        para
      senão se abs(x1-x0)<del então
        resultado:= -2
        para
      fim se
    fim se
  fim para
  se k>kmax então
    resultado:= -3
  fim se
fim proc
```