Introdução ao Cálculo Numérico

Métodos para cálculo de raízes de polinômios

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
UFRGS

Prof. Rudnei Dias da Cunha

- Métodos para cálculo de raízes de polinômios
  - Como visto anteriormente (vide *localização de raízes de polinômios*), existem procedimentos (regras de *Descartes*, de *Du Gua* e da *lacuna*) que nos permitem enumerar e determinar se há raízes complexas.
  - Pode-se ainda determinar o raio de um disco, centrado na origem, na qual todas as raízes se encontram (cotas de *Fujiwara*, *Kojima*, *Cauchy*).

- Métodos para cálculo de raízes de polinômios
  - O cálculo das raízes reais é relativamente fácil de ser feito, bastando usar um método de inclusão (como o da *bissecção*) juntamente com um método de convergência mais rápida (*Newton-Raphson*, *Halley*, *secante*, dentre outros) para se determinar com segurança tais raízes.

- Métodos para cálculo de raízes de polinômios
  - Já para raízes complexas, a situação não é tão simples, já que a determinação de uma estimativa inicial para o cálculo de tais raízes não é óbvia
  - Uma maneira de se localizar no plano complexo essas raízes é utilizar uma função auxiliar, que calcule a distância do valor do polinômio ao plano complexo:

Métodos para cálculo de raízes de polinômios

- Então, seja a função polinômio $p(z)$, $z = x + yi$

$$
\begin{aligned}
p\colon\ \mathbb{C} &\to \mathbb{R} \\
z &\longmapsto p(z)
\end{aligned}
$$

e considere a função $D(p(z))$, definida como

$$
\begin{aligned}
D\colon\ \mathbb{C} &\to \mathbb{R} \\
p(z) &\longmapsto |p(z)|
\end{aligned}
$$

- Métodos para cálculo de raízes de polinômios
  - Note que, quando z é um zero do polinômio, $p(z) = 0$ por definição. Logo, $D(p(z)) = 0$.
  - Além disso, $D(p(z))$ é uma função positiva, pois $|z| = \sqrt{x^2 + y^2} \geq 0$.
  - Dessa forma, se fizermos um gráfico da função D, teremos uma superfície tridimensional que apresenta "lóbulos" que encostam no plano $Z = 0$; justamente nos pontos de coordenadas (x, y) no plano complexo onde $p(x + yi) = 0$!

- Métodos para cálculo de raízes de polinômios
  - Pode-se calcular um gráfico tridimensional de D usando-se a região do plano complexo delimitada no quadrado

$$X \times Y = [-c, +c] \times [-c, +c]$$

onde c é o raio do disco contendo todas as raízes (obtido, por exemplo, pela cota de *Kojima*):

• Métodos para cálculo de raízes de polinômios

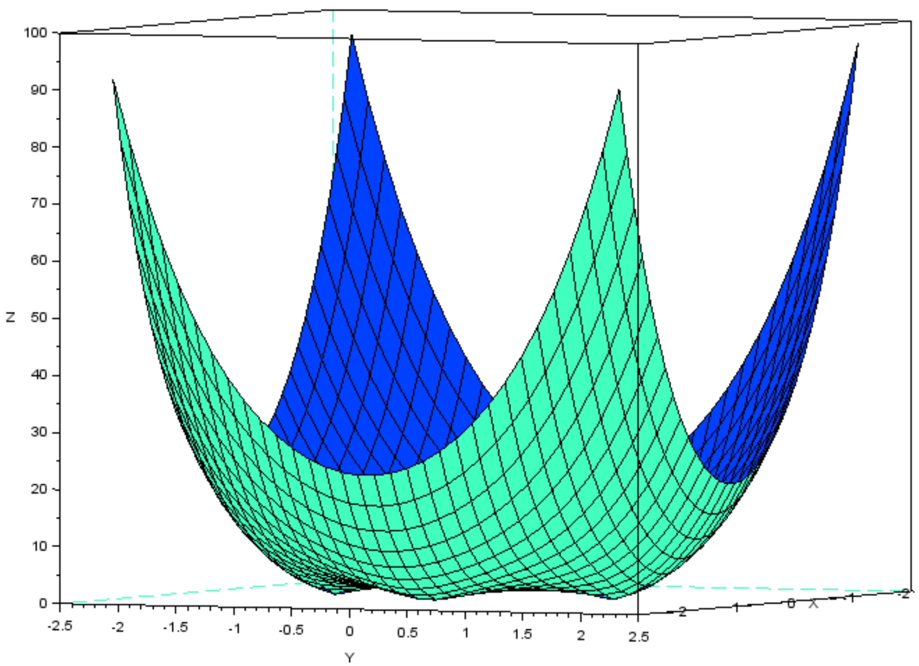


Gráfico de $|z^4 + z - 2|$:

- A cota de Kojima retorna como resultado $|z|<2.1892$, mas pode-se reduzir a região para destacar mais onde as raízes se encontram.
- As raízes são:

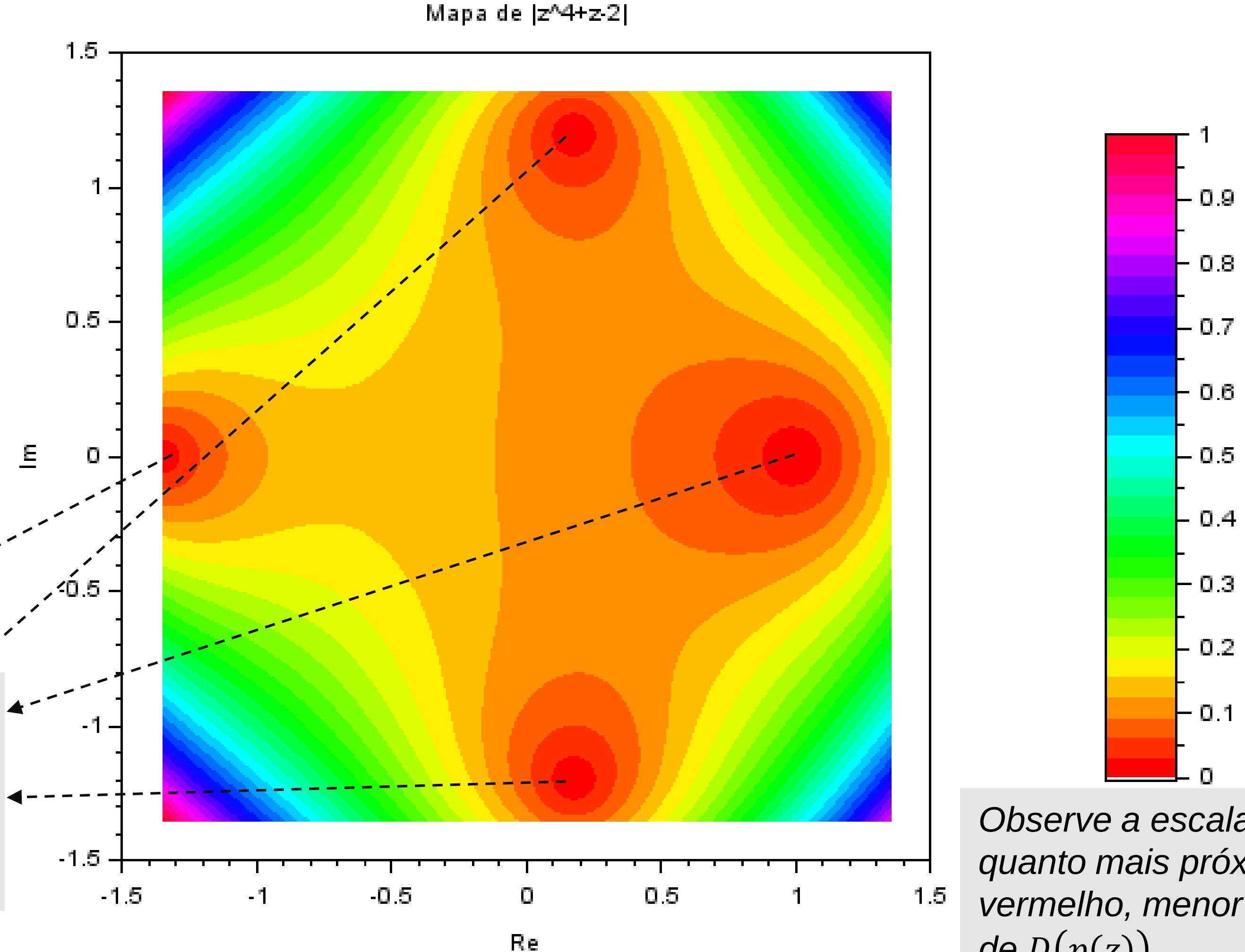
1,0;

-1,353209965;

0,1766049821±1.202820820i

- Métodos para cálculo de raízes de polinômios
    - Outra alternativa é exibir um gráfico do tipo "mapa de calor", o que facilita a localização das regiões nas quais se encontram as raízes.
    - A função **num_mapa_distancia** da biblioteca NUMÉRICO, permite fazer esse gráfico, bastando para isso fornecer os coeficientes do polinômio.
    - O exemplo a seguir mostra o resultado obtido para o polinômio $p(z) = z^4 + z - 2$.

• Métodos para cálculo de raízes de polinômios



As raízes encontram-se nessas regiões.

Observe a escala de cores: quanto mais próximo do vermelho, menor é o valor de $D\big(p(z)\big)$.

- Métodos para cálculo de raízes de polinômios
  - Tendo obtido uma estimativa inicial para uma raiz complexa, podemos usar o *método de Newton-Raphson* ou de *Bairstow.*
  - Vejamos esses dois métodos:

- Método de Newton-Raphson para polinômios
  - A equação governante do método é dada por

$$z_{k+1} = z_k - \frac{p(z_k)}{p'(z_k)}, k = 0,1, \ldots; z \in \mathbb{C}$$

  - Observe que, para corrigir z_k, é necessário calcular tanto $p(z_k)$ como $p'(z_k)$.

- Método de Newton-Raphson para polinômios
  - É sabido que o *método de Horner* (também conhecido como *método das multiplicações aninhadas*) deve ser usado para se avaliar um polinômio, pois
    - Evita-se o cálculo de potências de z;
    - O processo torna-se estável numericamente.

- Método de Newton-Raphson para polinômios
  - Avaliar um polinômio na forma canônica

    $$p(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \cdots + a_1 z + a_0$$

    requer, no mínimo, n adições e $2n - 1$ multiplicações (calculando as potências de z de forma cumulativa).
  - Reescrevendo o polinômio na forma de Horner, obtemos

    $$p(z) = a_0 + z\Big(a_1 + z\big(\ldots + z(a_{n-1} + z a_n)\big)\Big)$$

    a qual requer apenas n adições e n multiplicações.

- Método de Horner
  - O método de Horner pode ser usado também para:
    - Calcular o quociente e o resto da divisão de $p(z)$ por um fator $z - c$;
    - Deflacionar um polinômio;
    - Calcular a expansão de Taylor de um polinômio em torno de um ponto.

- Método de Horner
  - É baseado no Teorema do Resto:
    - *Se um polinômio $p(z)$, de grau $n \geq 1$, é dividido por um fator $z - c$, então $p(z) = (z - c)q(z) + r$, onde $q(z)$ é o quociente (de grau $n - 1$) e r é um número complexo. Se $z = c$, então $p(c) = r$.*
  - Vejamos como o método de Horner usa tal resultado para permitir calcular $q(z)$ e r e, ao mesmo tempo, avaliar $p(z)$ num ponto:

- Método de Horner
  - Seja $p(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \cdots + a_1 z + a_0$, e z_0 um número.
  - Pelo Teorema do Resto, se escrevermos

$$p(z_0) = (z - z_0) q(z) + r,$$

$q(z)$ tem grau $n-1$ e pode ser escrito como

$$q(z) = b_0 + b_1 z + b_2 z^2 + \cdots + b_{n-1} z^{n-1}.$$

- Método de Horner
  - Isolando na equação para $p(z_0)$, e substituindo as expressões para $p(z)$ e $q(z)$, podemos igualar os coeficientes das potências de mesma ordem, obtendo:

$$\begin{array}{rcl} b_{n-1} & = & a_n \\ b_{n-2} & = & a_{n-1} + z_0 b_{n-1} \\ & \vdots & \\ b_0 & = & a_1 + z_0 b_1 \\ r & = & a_0 + z_0 b_0 \end{array}$$

- Método de Horner
  - De forma compacta, podemos escrever a seguinte forma de recorrência:

$$b_{k-1} = a_k + z_0 b_k, k = n-1, n-2, \ldots, 0$$

  - Observe que $r = b_{-1} = p(z_0)$ (verifique!)

- Método de Horner
  - Note, também, que isso é equivalente a escrevermos o polinômio na forma de Horner,

$$p(z) = a_0 + z\left(a_1 + z\big(\ldots + z(a_{n-1} + za_n)\big)\right)$$

  - Porém, em conexão com o método de Newton-Raphson, precisamos também avaliar a derivada $p'(z_0)$.

Método de Horner

- Observe que ao dividirmos $p(z)$ por um fator $z - z_0$, obtemos um polinômio $q_1(z)$ e um resto r_1 complexo:

$$q_1(z) = a_n z^{n-1} + (a_{n-1} + z_0 a_n) z^{n-2} + \left(a_{n-2} + z_0(a_{n-1} + z_0 a_n)\right) z^{n-3} + \cdots r_1 = a_0 + z_0 \left(a_1 + z_0 \left(a_2 + z_0(\ldots + z_0(a_{n-1} + z_0 a_n))\right)\right)$$

Por definição, $r_1 = p(z_0)$. Mas, quem é $q_1(z)$? Nada mais, nada menos, do que $p'(z_0)$!

Método de Horner

- Igualando os termos de mesma ordem de $p'(z)$ e $q_1(z)$,

$$[z_0{}^{n-1}]: \quad na_n \equiv \sum_{i=1}^{n} a_n = na_n$$

$$[z_0{}^{n-2}]: \quad (n-1)a_n \equiv \sum_{i=1}^{n-1} a_{n-1} = (n-1)a_n$$

$$\vdots \qquad \qquad \vdots$$

$$[z_0{}^{2}]: \quad 3a_3 \equiv \sum_{i=1}^{3} a_3 = 3a_3$$

$$[z_0{}^{1}]: \quad 2a_2 \equiv \sum_{i=1}^{2} a_2 = 2a_2$$

$$[z_0{}^{0}]: \quad a_1 \equiv \sum_{i=1}^{1} a_1 = a_1$$

- Método de Horner

  (cont.) uma vez que existem n termos envolvendo a_n, $n-1$ termos envolvendo $a_{n\ -\ 1}$, e assim sucessivamente; além disso, no i-ésimo termo de $q_1(z)$, existem i produtos envolvendo z_0, o que é igual a ${z_0}^i$.

  - Por analogia, se aplicarmos o método de Horner sobre o polinômio $q_1(z)$, obteremos $q_2(z)$ e $r_2 = p'(z_0)$.
  - Com isso, é possível escrever uma versão do método de Newton-Raphson, específico para calcular raízes de polinômios.

- Raízes complexas de equações polinomiais
  - Retomemos agora o problema de se extrair raízes complexas de equações polinomiais:
  - A cada par de raízes complexas (conjugadas) de um polinômio com coeficientes reais $p(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \cdots + a_1 z + a_0$ está associado um fator *quadrático* de $p(z)$, na forma $z^2 - \alpha z - \beta$, onde α e β são números reais.
  - Se $r = a \pm bi$ é uma raiz de $p(z)$, então $$\alpha = 2a \text{ e } \beta = -(a^2 + b^2).$$

- Raízes complexas de equações polinomiais
  - Dessa forma, o polinômio $p(z)$ pode ser escrito como

$$p(z) = (z^2 - \alpha z - \beta)q(z) + b_1(z - \alpha) + b_0$$

onde os termos $b_1(z - \alpha) + b_0$ são o resto da divisão de $p(z)$ por $z^2 - \alpha z - \beta$ e $q(z)$ é um polinômio de grau $n - 2$,

$$q(z) = b_n z^{n-2} + \cdots + b_4 z^2 + b_3 z + b_2.$$

- Raízes complexas de equações polinomiais
  - Substituindo essa expressão em $p(z)$ e expandindo os termos, obtemos:

$$
\begin{aligned}
p(z) = b_n z^n &+ (b_{n-1} - \alpha b_n) z^{n-1} + \\
&(b_{n-2} - \alpha b_{n-1} - \beta b_n) z^{n-2} + \cdots + \\
&(b_k - \alpha b_{k+1} - \beta b_{k+2}) z^k + \cdots + \\
&(b_1 - \alpha b_2 - \beta b_3) z + \\
&b_0 - \alpha b_1 - \beta b_2
\end{aligned}
$$

- Raízes complexas de equações polinomiais
  - Comparando a equação anterior com o polinômio

$$p(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \cdots + a_1 z + a_0,$$

podemos obter as seguintes fórmulas de recorrência, para calcular os coeficientes b_k de $q(z)$:

$$b_n = a_n$$
$$b_{n-1} = a_{n-1} + \alpha b_n$$
$$b_k = a_k + \alpha b_{k+1} + \beta b_{k+2}, k = n-2, n-3, \dots, 0$$

  - Observe a semelhança com o método de Horner!

- Raízes complexas de equações polinomiais
  - Observe, agora, que se α e β são tais que $z^2 - \alpha z - \beta$ é um divisor exato de $p(z)$, então o resto $b_1(z - \alpha) + b_0$ deve ser nulo, i.e., $b_1 = b_0 = 0$.
  - O *método de Bairstow*, apresentado a seguir, explora essa característica, buscando encontrar α e β para os quais o resto seja nulo; daí, um par conjugado de raízes complexas será obtido, extraindo-se as raízes de $z^2 - \alpha z - \beta$.

Método de Bairstow

- A partir das estimativas iniciais α_0 e β_0, $p(z)$ pode ser expresso como

$$p(z) = (z^2 - \alpha_0 z - \beta_0)q(z) + b_1(z - \alpha_0) + b_0$$

- Se, de alguma forma, corrigirmos α_0 e β_0, produzindo α_1 e β_1, ..., α_i e β_i e, após i iterações, obtivermos $|b_0| \cong |b_1| \cong 0$, então teremos encontrado um fator (aproximado) de $p(z)$.

- Método de Bairstow
  - Observe que b_0 e b_1 podem ser considerados, nesse caso, como funções de α e β, $b_0 = b_0(\alpha, \beta)$ e $b_1 = b_1(\alpha, \beta)$ e, como desejamos que eles sejam (numericamente) nulos simultaneamente, podemos escrever

$$\begin{cases} b_0(\alpha, \beta) = 0 \\ b_1(\alpha, \beta) = 0 \end{cases}$$

• Método de Bairstow

- Esse sistema pode ser resolvido através do **método de Newton**: fazendo uma expansão de Taylor em torno de $\Delta\alpha$ e $\Delta\beta$, vem

$$0 = b_0(\alpha + \Delta\alpha, \beta + \Delta\beta)$$
$$= b_0(\alpha, \beta) + \Delta\alpha \frac{\partial b_0}{\partial \alpha} + \Delta\beta \frac{\partial b_0}{\partial \beta} + O(\Delta\alpha^2) + O(\Delta\beta^2)$$

$$0 = b_1(\alpha + \Delta\alpha, \beta + \Delta\beta)$$
$$= b_1(\alpha, \beta) + \Delta\alpha \frac{\partial b_1}{\partial \alpha} + \Delta\beta \frac{\partial b_1}{\partial \beta} + O(\Delta\alpha^2) + O(\Delta\beta^2)$$

- Método de Bairstow
  - Desprezando os termos de ordem igual ou superior a 2, vem:

$$0 \cong b_0(\alpha, \beta) + \Delta\alpha \frac{\partial b_0}{\partial \alpha} + \Delta\beta \frac{\partial b_0}{\partial \beta}$$

$$0 \cong b_1(\alpha, \beta) + \Delta\alpha \frac{\partial b_1}{\partial \alpha} + \Delta\beta \frac{\partial b_1}{\partial \beta}$$

- Método de Bairstow
  - Essas duas equações podem ser escritas em forma matricial como

$$\begin{bmatrix} b_0(\alpha,\beta) \\ b_1(\alpha,\beta) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \dfrac{\partial b_0}{\partial \alpha} & \dfrac{\partial b_0}{\partial \beta} \\ \dfrac{\partial b_1}{\partial \alpha} & \dfrac{\partial b_1}{\partial \beta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\alpha \\ \Delta\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

De onde $\Delta\alpha$ e $\Delta\beta$ podem ser calculados resolvendo-se o sistema

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial b_0}{\partial \alpha} & \dfrac{\partial b_0}{\partial \beta} \\ \dfrac{\partial b_1}{\partial \alpha} & \dfrac{\partial b_1}{\partial \beta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\alpha \\ \Delta\beta \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} b_0(\alpha,\beta) \\ b_1(\alpha,\beta) \end{bmatrix}$$

- Método de Bairstow
  - Como não há fórmula explícita para os termos b_0 e b_1, deve-se derivar as fórmulas recursivas para os coeficientes b_k de $q(z)$, considerando que os a_k são constantes e que os b_k são funções de α e β (exceto b_n):

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial b_{n-1}}{\partial \alpha} &= b_{n-1} \\
\frac{\partial b_{n-2}}{\partial \alpha} &= b_{n-1} + \alpha \frac{\partial b_{n-1}}{\partial \alpha} \\
\frac{\partial b_{n-3}}{\partial \alpha} &= b_{n-2} + \alpha \frac{\partial b_{n-2}}{\partial \alpha} + \beta \frac{\partial b_{n-1}}{\partial \alpha} \\
&\vdots \\
\frac{\partial b_1}{\partial \alpha} &= b_2 + \alpha \frac{\partial b_2}{\partial \alpha} + \beta \frac{\partial b_3}{\partial \alpha} \\
\frac{\partial b_0}{\partial \alpha} &= b_1 + \alpha \frac{\partial b_1}{\partial \alpha} + \beta \frac{\partial b_2}{\partial \alpha}
\end{aligned}
$$

- Método de Bairstow
  - Repetindo o procedimento acima para calcular as derivadas parciais em relação a β, obtemos a seguinte relação:

$$\frac{\partial b_k}{\partial \alpha} = \frac{\partial b_{k-1}}{\partial \beta}, k = n, n-1, \ldots, 1.$$

- Método de Bairstow
  - Introduzindo a notação

$$c_{k+1} = \frac{\partial b_k}{\partial \alpha}, k = 0,1,\dots,n-1,$$

podemos obter as seguintes fórmulas de recorrência para c_k:

$$\begin{aligned}
c_n &= a_n \\
c_{n-1} &= b_{n-1} + \alpha c_n \\
c_k &= b_k + \alpha c_{k+1} + \beta c_{k+2}, k = n-2, n-3, \dots, 1
\end{aligned}$$

- Método de Bairstow
  - E, uma vez calculados os valores

$$c_1 = \frac{\partial b_0}{\partial \alpha}, c_2 = \frac{\partial b_1}{\partial \alpha} = \frac{\partial b_0}{\partial \beta}, c_3 = \frac{\partial b_1}{\partial \beta},$$

o sistema de equações lineares a ser resolvido em cada passo do método de Newton é

$$\begin{bmatrix} c_1 & c_2 \\ c_2 & c_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\alpha \\ \Delta\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -b_0 \\ -b_1 \end{bmatrix}$$

- Método de Bairstow
  - Dada uma estimativa inicial para a raiz, $r = a \pm bi$, uma tolerância $\delta \ll 1$ e um número máximo de iterações i_{max}, o método pode então ser expresso através do algoritmo mostrado a seguir:

• Método de Bairstow

1. Calcula $\alpha_0 = 2a$ e $\beta_0 = -(a^2 + b^2)$
2. Para $i = 0,1, \dots, i_{max}$, faça:
3. Calcula os coeficientes b_k e c_k, através das fórmulas de recorrência
4. Se $|b_0| < \delta$ e $|b_1| < \delta$ Então
5. Calcula as raízes da equação $z^2 - \alpha_i z - \beta_i = 0$
6. Termina as iterações
7. Senão
8. Resolve $\begin{bmatrix} c_1 & c_2 \\ c_2 & c_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\alpha \\ \Delta\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -b_0 \\ -b_1 \end{bmatrix}$, obtendo $\Delta\alpha$ e $\Delta\beta$
9. Calcula $\alpha_{i+1} = \alpha_i + \Delta\alpha$ e $\beta_{i+1} = \beta_i + \Delta\beta$
10. Fim
11. Fim

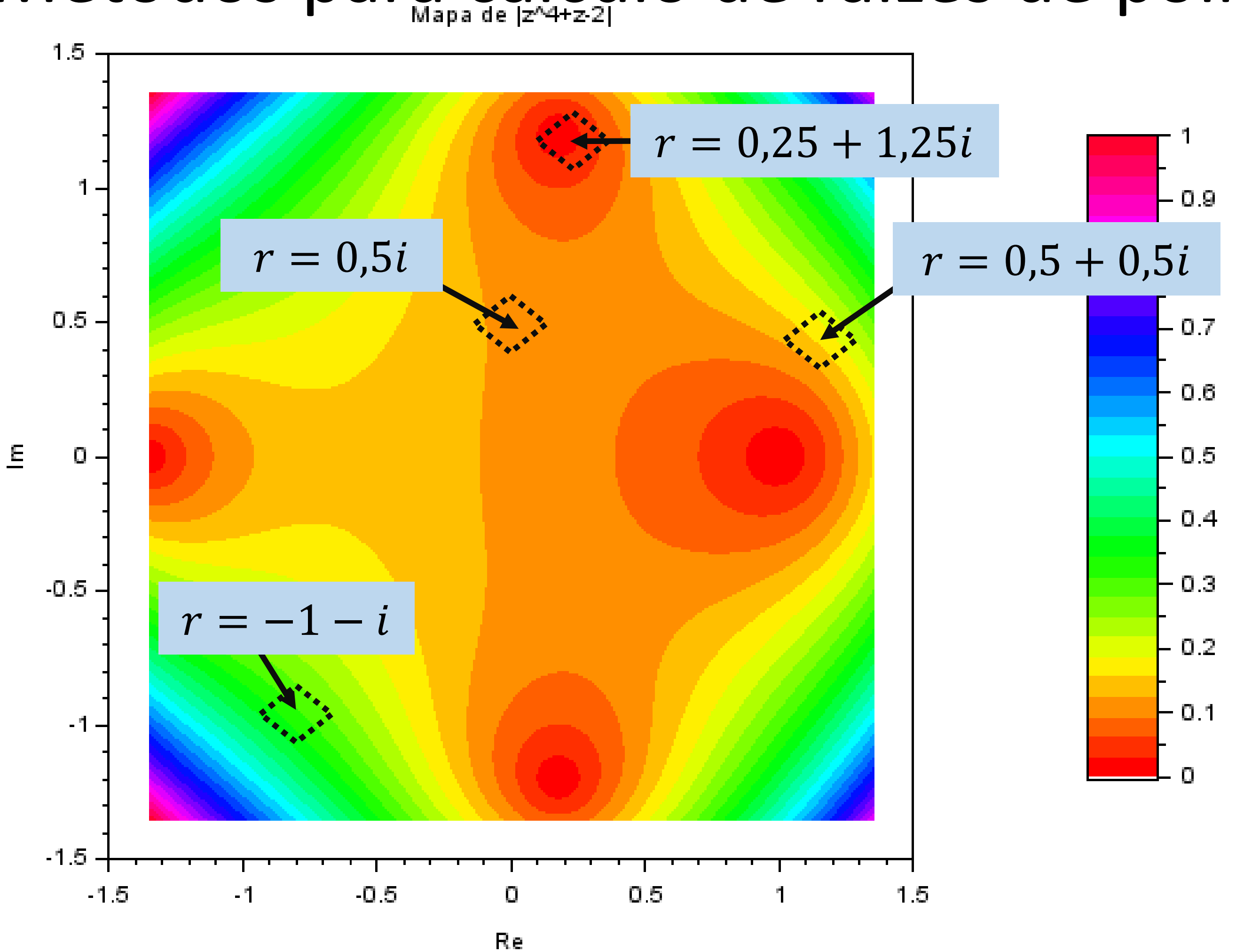
- Método de Bairstow
  - Evidentemente, o cálculo das raízes da equação quadrática $z^2 - \alpha_i z - \beta_i = 0$ deve ser feito com cuidado, de forma a evitar erros de ponto-flutuante.
  - É possível que essa equação não tenha raízes complexas; nesse caso, o método de Bairstow terá calculado duas das raízes reais de $p(z)$.

- Método de Bairstow
  - Exemplo: para $p(z) = z^4 + z - 2$, cujas raízes são:

$$1{,}0\ ;\ -1{,}353209965\ ;$$
$$0{,}1766049821 \pm 1{,}202820820i$$

usaremos o método de Bairstow, com uma tolerância $\delta = 10^{-6}$, para as estimativas iniciais mostradas no mapa de contornos da função $D(p(z))$:

• Métodos para cálculo de raízes de polinômios



Método de Bairstow

- O método de Bairstow calcula as seguintes raízes:

		raízes calculadas	
r	k^*	r_-	r_+
1+i	14	-1,353210	1,000000
0,5+0,5i	10	-1,353210	1,000000
0,25+1,25i	4	0,1766050-1,202821i	0,1766050+1,202821i
0,5i	10	-1,353210	1,000000

- *Observe que para duas das estimativas iniciais, foram obtidas as duas raízes reais do polinômio.*