Matemática Computacional

Soluções de Equações

Felipe Augusto Lima Reis
felipe.reis@ifmg.edu.br

INSTITUTO FEDERAL
Minas Gerais

Objetivos

- Nesta seção serão desenvolvidas aproximações numéricas para a solução de equações algébricas em uma única variável real;
- O principal objetivo é encontrar o zero de funções reais.
- Serão aprendidos os seguintes métodos:
    - Método da Bisseção;
    - Método de Newton;
    - Método da Secante.

Objetivos

- Os algoritmos utilizados nesta seção serão baseados no livro-texto da disciplina:
  - JUSTO, Dagoberto; SAUTER, Esequia; AZEVEDO, Fábio; GUIDI, Leonardo; KONZEN, Pedro. **Cálculo Numérico, Um Livro Colaborativo - Versão Python**. UFGRS - REAMAT. 2020.

Sumário

Conceitos e Teoremas

Raiz de uma função

- Definição: Um número real ξ é um **zero da função** $f(x)$ ou **raiz da equação** $f(x) = 0$ se $f(\xi) = 0$ [Ruggiero and Lopes, 2000].

Raiz de uma função

- Raízes de equações podem ser complexas ou reais
  - Nesta disciplina, nos interessaremos apenas pelos **zeros reais**.

Teorema Fundamental da Álgebra

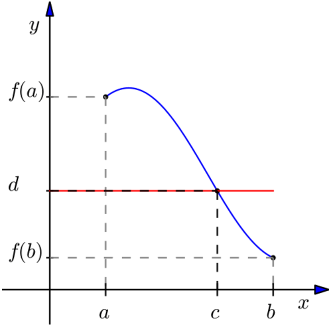
- Definição: Uma equação algébrica de grau n tem **exatamente** n raízes, reais ou complexas.

$$\boxed{P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + \ldots + a_0 = 0}$$

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

Teorema do Valor Intermediário[1]

- Seja f uma função real contínua no intervalo $[a, b]$. Se existe um valor d, tal que $f(a) \leq d \leq f(b)$, ou $f(b) \leq d \leq f(a)$, então existe um valor c tal que $f(c) = d$.

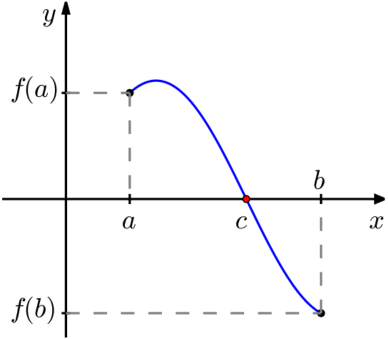


Fonte: [MATEMATICA.PT, 2020]

[1] Também chamado de Teorema de Bolzano.

Corolário do Teorema de Bolzano[2]

- Seja f uma função real no intervalo $[a, b]$. Se $y = f(x)$ é uma função contínua tal que $f(a) \times f(b) < 0$, então existe $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$.



Fonte: [MATEMATICA.PT, 2020]

[2] Denominado apenas "Teorema de Bolzano" em [Justo et al., 2020].

Proposição - Corolário do Teorema de Bolzano

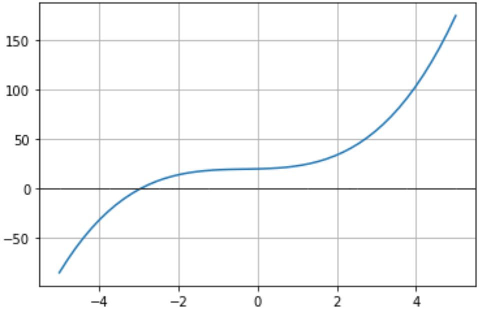
- Proposição a partir do Corolário do Teorema de Bolzano [Justo et al., 2020]
  - Seja f uma função real contínua no intervalo $[a, b]$. Se $y = f(x)$ é uma função diferenciável e existe $f(a) \times f(b) < 0$ e $f'(x) > 0$, ou $f'(x) < 0$, para todo $x \in (a, b)$, então existe um único $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$.

Proposição - Corolário do Teorema de Bolzano

- Proposição a partir do Corolário do Teorema de Bolzano
  - Para garantirmos que exista um único zero de uma dada função diferenciável em um intervalo, é suficiente que ela troque de sinal e seja monótona neste intervalo [Justo et al., 2020]
    - Uma função entre dois conjuntos ordenados é monótona quando ela preserva (função crescente) ou inverte (função decrescente) a relação de ordem.

Teorema de Cauchy-Bolzano

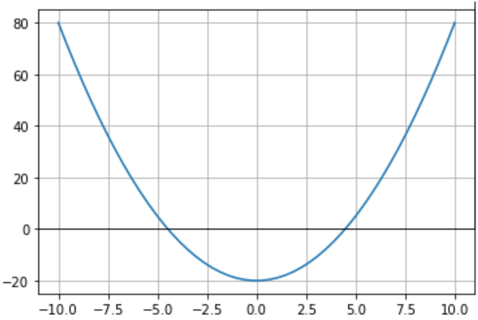
1. Seja f uma função real no intervalo $[a, b]$. Se $y = f(x)$ é uma função contínua e existe $f(a) \times f(b) < 0$, então a equação $f(x) = 0$ tem um número ímpar de raízes no intervalo (a, b). Se $f'(x)$ preservar o sinal em (a, b) então, neste intervalo, há uma única raiz. [Ferreira, 2013]



Fonte: Próprio autor

Teorema de Cauchy-Bolzano

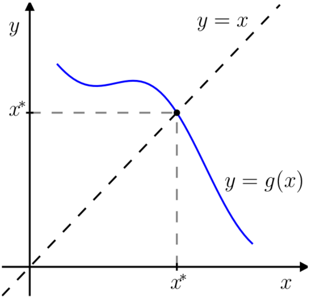
2. Seja f uma função real no intervalo $[a, b]$. Se $y = f(x)$ é uma função contínua e existe $f(a) \times f(b) > 0$, então a equação $f(x) = 0$ tem um número par de raízes, ou nenhuma raiz, no intervalo (a, b). [Ferreira, 2013]



Fonte: Próprio autor

Ponto Fixo

- Um ponto $x = x^*$ tal que $g(x^*) = x^*$ é chamado de **ponto fixo** da função $g(x)$ [Justo et al., 2020].
  - Geometricamente, um ponto fixo é um ponto de interseção entre a reta $y = x$ com o gráfico da função $g(x)$.

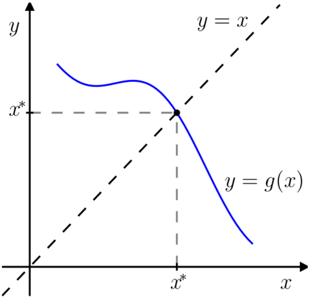


Fonte: [Justo et al., 2020]

Problema do ponto fixo é a reescrita de uma função $f(x)$ em uma equação equivalente na forma $g(x) = x$.

Iteração do Ponto Fixo

- Iteração do ponto fixo consiste em computar a sequência recursiva $x^{(n+1)} = g(x^{(n)})$, onde $n \geq 1$ e $x^{(0)}$ corresponde a uma aproximação inicial do ponto fixo.



Fonte: [Justo et al., 2020]

Iteração do Ponto Fixo - Contração

- Definição: Seja g uma função real no intervalo $[a, b]$. Uma contração corresponde a:

$$\boxed{|g(x) - g(y)| \leq \beta|x - y|, 0 \leq \beta \leq 1}$$

Teorema do Ponto Fixo

- Definição: Seja g uma função real no intervalo $[a, b]$. Se $y = g(x)$ é uma contração, então existe um único ponto $x^* \in [a, b]$ tal que $g(x^*) = x^*$, isto é, x^* é ponto fixo de $g(x)$. A sequência $\{x^{(n)}\}_{n \in N}$ dada pela expressão abaixo converge para x^* para qualquer $x^{(1)} \in [a, b]$. [Justo et al., 2020]

$$\boxed{x^{(n+1)} = g(x^{(n)})}$$

Unicidade do Ponto Fixo

- Seja g uma função real no intervalo $[a, b]$. Se $y = g(x)$ é uma contração, para todo $x \in [a, b]$, g terá um ponto fixo em $[a, b]$
  - Se $g'(x)$ existir em (a, b) e existir uma constante positiva $c < 1$ tal que $|g'(x)| \leq c$, para todo $x \in (a, b)$, então o ponto fixo em $[a, b]$ será único [Andretta, 2012].

Teste de convergência do Ponto Fixo

- Seja g uma função real no intervalo $[a, b]$. Se $y = g(x)$ é uma contração e $x^* \in [a, b]$, um ponto fixo de g, então, x^* é dito estável se existe uma região $(x^* - \delta, x^* + \delta)$ chamada bacia de atração tal que $x^{(n+1)} = g(x^{(n)})$ é convergente sempre que $x^{(0)} \in (x^* - \delta, x^* + \delta)$ [Justo et al., 2020].

Convergência do Ponto Fixo

- A partir do Teorema do Ponto Fixo, seu teste de convergência e sua condição de unicidade, temos as seguintes condições [Justo et al., 2020][3]:
  - Se $|g'(x^*)| < 1$, então, a distância de $x^{(n)}$ até o ponto fixo x^* está diminuindo a cada passo;
  - Se $|g'(x^*)| > 1$, então, a distância de $x^{(n)}$ até o ponto fixo x^* está aumentando a cada passo;
  - Se $|g'(x^*)| = 1$, então, nossa aproximação de primeira ordem não é suficiente para compreender o comportamento da sequência.

[3] Não serão demonstrados os cálculos que levam a essa conclusão. Ver [Justo et al., 2020], pág. 61-77.

Protocolo [Ruggiero]

Como encontrar raízes?

- Como encontrar raízes de uma função qualquer?
  - Funções de 2° grau possuem fórmulas explícitas, no entanto, polinômios de graus mais elevados não as possuem.
  - Para encontrar raízes de funções complexas de $grau > 2$, é necessário utilizar aproximações.

Qual o processo para encontrar raízes?

- Realizar uma aproximação inicial e, em seguida, refinar o método por um processo iterativo (aproximações sucessivas)[4] [Ruggiero and Lopes, 2000]
- Os métodos são constituídos de duas fases:
  - Fase 1: Localização ou isolamento de raízes;
  - Fase 2: Refinamento (aproximações sucessivas).

[4] Veja seção Aproximação Sucessiva, na aula de Introdução

Fase 1: Localização ou isolamento de raízes

- Busca determinar intervalos que contenham, cada um, uma única raiz [Ruggiero and Lopes, 2000] [Ferreira, 2013].
- Pode utilizar os seguintes métodos:
  - Análise Teórica;
  - Análise Gráfica.

Fase 2: Refinamento (aproximações sucessivas)

- Utiliza métodos numéricos, com precisão pré-fixada, para calcular cada uma das raízes;
- Escolhidas as aproximações iniciais (Fase 1), refina-se o método até obter uma aproximação, com precisão ϵ definida [Ruggiero and Lopes, 2000] [Ferreira, 2013].
- Pode utilizar os seguintes métodos:
  - Método da Bisseção;
  - Método de Newton;
  - Método da Secante;
  - Método do Ponto Fixo...

Fase 1: Isolamento de Raízes

Isolamento de Raízes

- Busca determinar intervalos que contenham, cada um, uma única raiz [Ruggiero and Lopes, 2000] [Ferreira, 2013].
- Tanto a análise teórica quanto a análise gráfica buscam determinar raízes por meios de aproximações.
  - Essas aproximações serão úteis na Fase 2: Refinamento das raízes.

Análise Teórica

- A análise teórica busca avaliar a existência de raízes, com base nos Teoremas da Álgebra;
- Teoremas:
  - Teorema de Bolzano;
  - Corolário do Teorema de Bolzano;
  - Teorema de Cauchy-Bolzano.

Análise Teórica

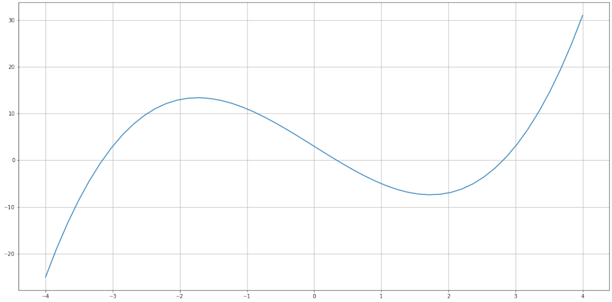
- Teorema de Bolzano - Tabelamento
  - Suponha a equação: $f(x) = x^3 - 9x + 3$
  - As raízes podem ser isoladas por meio de um simples tabelamento
    - Substituição de valores na equação, em busca de mudança de sinal em um determinado intervalo.
    - Nos intervalos [-5,-3], [0, 1] e [2, 3] há mudança de sinal, indicando que existência raízes no intervalo.

x	$-\infty$	-100	-10	-5	-3	-1	0	1	2	3	4	5
$f(x)$	$-$	$-$	$-$	$-$	$+$	$+$	$+$	$-$	$-$	$+$	$+$	$+$

Fonte: [da Silva, 2020]

Análise Gráfica

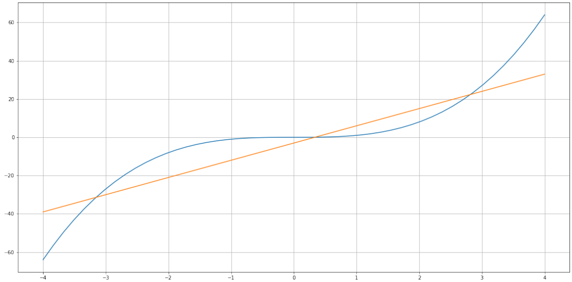
- Suponha a equação: $f(x) = x^3 - 9x + 3$
- Podemos ver o comportamento da equação no gráfico abaixo
  - Devemos localizar todos os pontos que cortam a curva $\vec{ox}$.



Fonte: Próprio autor

Análise Gráfica

- Suponha a equação: $f(x) = x^3 - 9x + 3$
- Uma segunda opção é obter a equivalência $g(x) = h(x)$, a partir de $f(x) = 0$.
  - Assim, temos que $g(x) = x^3$ e $h(x) = 9x - 3$;
  - Em seguida, plotamos as duas curvas para obter as interseções.



Fonte: Próprio autor

Fase 2: Refinamento de Raízes

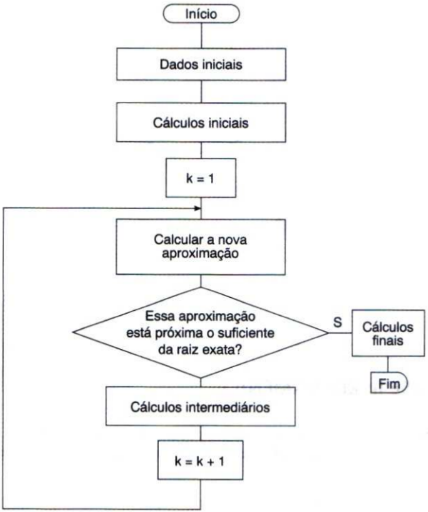
Refinamento de Raízes

- A Fase 1, determina um ou mais intervalos $[a, b]$, em que existe um valor ξ_n, correspondente as n raízes da equação;
- A Fase 2, irá determinar os valores de ξ_n, nos intervalos retornados pela Fase 1.
  - Para solução, são utilizados métodos iterativos.

Refinamento de Raízes

- Para determinar as raízes da equação, devemos fazer o refinamento
  - Parte-se de um valor inicial $x_0 \in [a, b]$;
  - Gera-se uma sequência $\{x_0, x_1, x_2, ..., x_k, ...\}$;
  - A sequência deve convergir para a raiz exata ξ de $f(x) = 0$.

Refinamento de Raízes

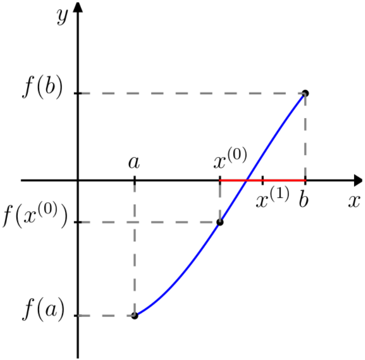


Fonte: [Ruggiero and Lopes, 2000]

Método da Bisseção

Método da Bisseção

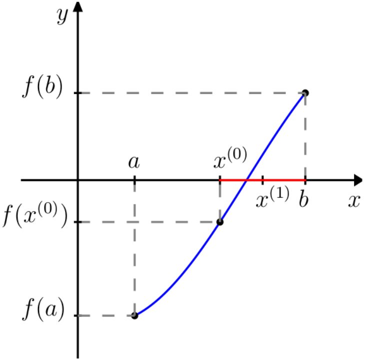
- Seja $y = f(x)$ uma função contínua em um intervalo $[a, b]$ que contém uma, e só uma, raiz da equação $f(x) = 0$.



Fonte: [Justo et al., 2020]

Método da Bisseção

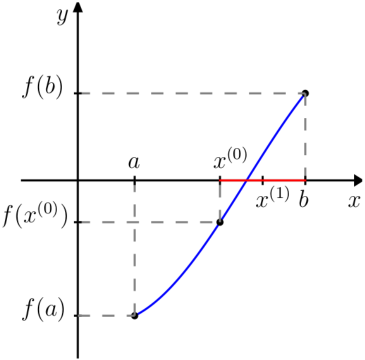
- O método consiste em dividir o intervalo $[a, b]$, de forma iterativa, ao meio.



Fonte: [Justo et al., 2020]

Método da Bisseção

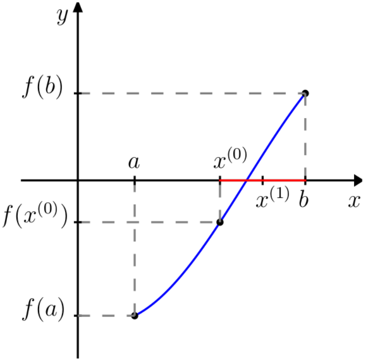
- O Teorema de Bolzano é utilizado para verificar se a raiz está na primeira ou na segunda metade do intervalo inicial [Ferreira, 2013].



Fonte: [Justo et al., 2020]

Método da Bisseção

- O processo é repetido para aquela metade que contém a raiz (o intervalo possui valores numéricos com sinais opostos).



Fonte: [Justo et al., 2020]

Função de Iteração

- A função de iteração do método de bisseção é dada por:

$$\boxed{x_k = \frac{a+b}{2} \quad \text{, onde } k = 1, 2, 3 \ldots}$$

- Na função, os pontos a e b são atualizados constantemente, subdividindo os intervalos [Ferreira, 2013].

Critério de Parada

- A função executará até que uma precisão requerida ϵ seja atingida, cujo valor é dado por [Ruggiero and Lopes, 2000]:

$$\boxed{(b - a) < \epsilon}$$

- O critério de parada também pode ser definido como um valor de tolerância [Justo et al., 2020]:

$$\boxed{\frac{|b^n - a^n|}{2} < TOL}$$

- Outro critério de parada seria a definição de um número máximo de iterações [Ferreira, 2013].

Critério de Convergência

- Seja f uma função real no intervalo $[a, b]$. Se $y = f(x)$ é uma função contínua tal que $f(a) \times f(b) < 0$ e c é o único zero de $f(x)$ no intervalo (a, b), então a sequência $\{x^n\}_{n \geq 0}$ do método da bisseção satisfaz:

$$\boxed{|x^n - c| < \frac{b-a}{2^{n+1}} \quad, \forall n \geq 0}$$ [5]

[5] Em particular, $x^n \to c$ quando $n \to \infty$ [Justo et al., 2020]

Estimativa de Iterações

- O método de bisseção pode ter seu número de iteração estimados a priori;
- Para isso, consideremos uma raiz ξ e uma precisão ϵ no intervalo $[a, b]$;
- Em cada iteração, é possível obter a raiz ξ ou uma sequência infinita intervalos

$$\{[a_1, b_1], [a_2, b_2], ..., [a_n, b_n]\} \quad , \text{onde } f(a) \times f(b) < 0$$

- Na k-ésima iteração, temos:

$$\boxed{b_k - a_k = \frac{b - a}{2^k}}$$

Estimativa de Iterações

- Quantas k iterações são necessárias até atingir o critério da parada?

$$\boxed{(b_k - a_k) \leq \epsilon} \implies \boxed{\frac{(b-a)}{2^k} \leq \epsilon} \implies \boxed{2^k \geq \frac{(b-a)}{\epsilon}}$$

$$\implies \boxed{log_2 2^k \geq log_2 \frac{(b-a)}{\epsilon}} \implies \boxed{k \;\, log_2 2 \geq log_2 \frac{(b-a)}{\epsilon}}$$

$$\implies \boxed{k \geq log_2 \frac{(b-a)}{\epsilon}}$$

Mais informações sobre logaritmos: `https://www.todamateria.com.br/propriedades-dos-logaritmos/`

Comentários Finais

- O método de bisseção tem convergência lenta, portanto é pouco eficiente;
- O método nem sempre decresce monotonicamente;
- O número de iterações tende a ser maior quanto menor for o valor de ϵ;
- O método da bisseção pode ser usado junto a outros métodos de convergência mais rápida.

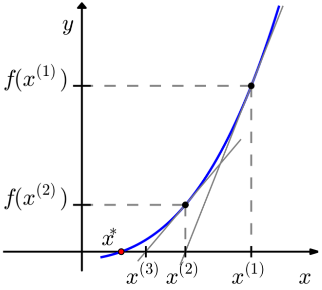
Método de Newton-Raphson

Método de Newton-Raphson

- Seja f uma função real contínua no intervalo $[a, b]$, que contém uma, e só uma, raiz da equação $f(x) = 0$ e suas derivadas $f'(x)$ e $f''(x)$ não se anulam e preservam o sinal [Ferreira, 2013].

Método de Newton-Raphson (Análise Tangente)

- Protocolo (Análise da Tangente):
  - Atribuir estimativa inicial $x_0 \in [a, b]$ para $f(x) = 0$ (raiz);
  - Gerar uma sequência de estimativas, $\{x_{k+1}\}$, onde cada ponto é a interseção da reta tangente a $y = f(x)$, em $[x_k, f(x_k)]$, com o eixo das abscissas.

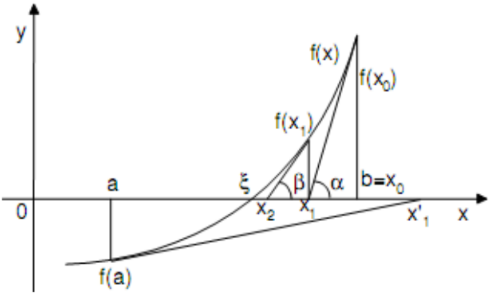


Fonte: [Justo et al., 2020]

Método de Newton-Raphson (Análise Tangente)

- Método de Newton-Raphson:

$$\boxed{tan(\alpha) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} = f'(x_0)} \implies \boxed{x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}}$$

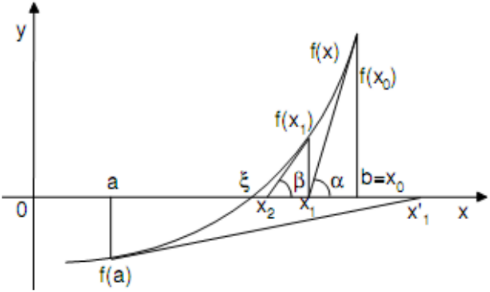


Fonte: [Ferreira, 2013]

Método de Newton-Raphson (Análise Tangente)

- Método de Newton-Raphson:

$$\boxed{tan(\beta) = \frac{f(x_1)}{x_1 - x_2} = f'(x_1)} \implies \boxed{x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}}$$

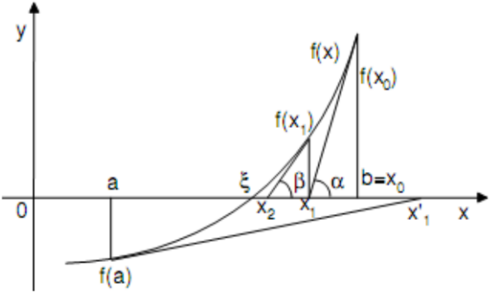


Fonte: [Ferreira, 2013]

Método de Newton-Raphson (Análise Tangente)

- Método de Newton-Raphson:

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



Fonte: [Ferreira, 2013]

Método de Newton-Raphson (Análise TPF)

- Método de Newton-Raphson (pelo Teorema Ponto Fixo) [Justo et al., 2020] [Ruggiero and Lopes, 2000]:
  - Consideremos x^* ponto fixo da função $g(x)$, onde $\alpha(x) \neq 0$ e $\alpha(x)$ é uma função arbitrária

$$\boxed{g(x) = x + \alpha(x) f(x)}$$

  - A taxa de convergência é dada em função do valor absoluto da derivada de $g(x)$, resultando em

$$\boxed{g'(x) = 1 + \alpha(x) f'(x) + \alpha'(x) f(x)}$$

Método de Newton-Raphson (Análise TPF)

- Método de Newton-Raphson (pelo Teorema Ponto Fixo):
  - No ponto $x = x^*$, temos

$$\boxed{g'(x^*) = 1 + \alpha(x^*)f'(x^*) + \alpha'(x^*)f(x^*)}$$

  - Como $f(x^*) = 0$, temos

$$\boxed{g'(x^*) = 1 + \alpha(x^*)f'(x^*)}$$

Método de Newton-Raphson (Análise TPF)

- Método de Newton-Raphson (pelo Teorema Ponto Fixo):
  - Como a convergência é mais rápida quanto menor for $|g'(x)|$, escolhemos $g'(x^*) = 0$, resultando em

$$\boxed{\alpha(x^*) = -\frac{1}{f'(x)}}$$

  - Considerando uma função de iteração

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

Método de Newton-Raphson (Análise TPF)

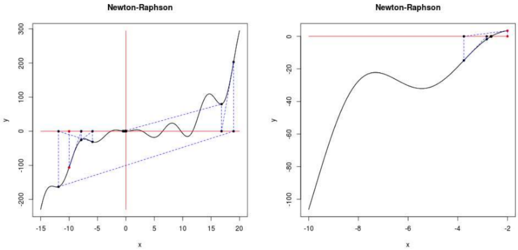
- Método de Newton-Raphson (pelo Teorema Ponto Fixo):
    - Escolhendo um valor x_0 na sequência $\{x_k\}$ temos a fórmula de Newton definida, para $k = 1, 2, 3, \ldots$ como:

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

Convergência do Método de Newton-Raphson

- O Método de Newton somente converge se x_0 escolhido for "suficientemente próximo" da raiz [Ferreira, 2013]
  - Logo, os pontos iniciais devem ser escolhidos cuidadosamente na Fase 1 do Protocolo.

Exemplo: $\boxed{f(x) = 0.05x^3 - 0.4x^2 + 3\sin(x)x}$, com raíz $\xi \in \left[-10, -2\right]$



$x_0 = -10 \Rightarrow \bar{x} \approx 0 \notin \left[-10, -2\right]$ $\quad$ $x_0 = -2 \Rightarrow \bar{x} \approx -2.65 \in \left[-10, -2\right]$

Fonte: [da Silva, 2020]

Método da Secante

Método da Secante

- O Método de Newton-Raphson tem como desvantagem a necessidade de se obter $f'(x)$ e calcular seu valor a cada iteração [Ruggiero and Lopes, 2000]
- O Método da Secante busca substituir, de forma aproximada, a derivada pelo quociente das diferenças:

$$\boxed{f'(x_k) \cong \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}}$$

Método da Secante

- A função de iteração do Método da Secante[6], após substituição, é dada por:

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

[6] Na função de iteração são necessárias duas aproximações iniciais.

Considerações sobre os Métodos

Considerações sobre os Métodos

- Segundo [Ruggiero and Lopes, 2000], podemos considerar:
  - O Método da Bisseção tem sua convergência garantida desde que $f(a) \times f(b) < 0$;
  - Os métodos de Newton-Raphson e da Secante são mais restritivos quanto a convergência
    - No entanto, são consideravelmente mais rápidos;
  - Considerando que condições de convergência estejam seguras, o método de Newton-Raphson é o mais recomendado;
  - Se o objetivo for reduzir o intervalo que contém a raiz, não são recomendados os métodos de Newton e da Secante.

Considerações sobre os Métodos

- Resumo dos métodos [Justo et al., 2020][7]

Método	Convergência	Erro	Critério de parada
Bisseção	Linear ($p = 1$)	$\epsilon_{n+1} = \frac{1}{2}\epsilon$	$\frac{b_n - a_n}{2} < \text{erro}$
Newton	Quadrática ($p = 2$)	$\epsilon_{n+1} \approx \frac{1}{2}\left\lvert\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\right\rvert \varepsilon_n^2$	$\lvert\Delta_n\rvert < \text{erro}$
Secante	$p = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1{,}618$	$\varepsilon_{n+1} \approx \left\lvert\frac{f''(x^*)}{f'(x^*)}\right\rvert \varepsilon_n \varepsilon_{n-1} \approx M\varepsilon_n^{\phi}$	$\lvert\Delta_n\rvert < \text{erro}$

Fonte: Adaptado de [Justo et al., 2020]

[7] O erro corresponde ao erro absoluto esperado [Justo et al., 2020]

Referências I

Andretta, M. (2012).
Determinaçãao de raízes de funções: Método do ponto fixo.
https://sites.icmc.usp.br/andretta/ensino/aulas/sme0500-1-12/pontofixo.pdf.

da Silva, D. M. (2020).
Cálculo Numérico - Slides de Aula.
IFMG - Instituto Federal de Minas Gerais, Campus Formiga.

Ferreira, J. Á. T. (2013).
Cálculo numérico - notas de aulas.
http://www.decom.ufop.br/bcc760/material_de_apoio/notas_de_aulas/notas_raizes.pdf.

Justo, D., Sauter, E., Azevedo, F., Guidi, L., and Konzen, P. H. (2020).
Cálculo Numérico, Um Livro Colaborativo - Versão Python.
UFRGS - Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
https://www.ufrgs.br/reamat/CalculoNumerico/livro-py/livro-py.pdf.

MATEMATICA.PT (2020).
Como é que utilizo o Teorema de Bolzano?
[Online]; acessado em 18 de Agosto de 2020.

Ruggiero, M. A. G. and Lopes, V. L. d. R. (2000).
Cálculo Numérico - Aspectos Teóricos e Computacionais.
Editora Makron, 2 edition.