Computação Científica II
(EEL7031)

Resolução de Equações Não-lineares

(polinômios e equações transcendentais)

Objetivo Geral

- **Objetivo**
  - Estudar o problema de determinar as raízes de polinômios e de equações transcendentais
- **Tópicos principais**
  - Introdução
  - O método da bissecção
  - O método da secante
  - O método da posição falsa
  - O método de Newton
  - Análise de erros e aceleração da convergência
  - O método de Müller
  - Análise dos métodos e de software

Introdução

- Problema de interesse
  - Dada uma função $f : \Re \to \Re$, determinar a existência e o valor de

$$x \ \text{ tal que } f(x) = 0$$

- Histórico
  - Primeiros estudos são do Século IX, realizados por árabes que difundiram a utilização do sistema decimal e do zero na escrita de números
  - Em 1746, D'Alembert enunciou o Teorema Fundamental da Álgebra, demonstrado por Gauss em 1799: "toda a equação polinomial de grau n possui exatamente n raízes"
  - Niels Abel, em 1824, provou que as equações de quinto grau ou superior não podem ser resolvidas por radicais e combinações de coeficientes
  - A partir destes resultados, o cálculo das n raízes de um polinômio de grau n é baseado em métodos iterativos

Introdução

Características dos métodos iterativos

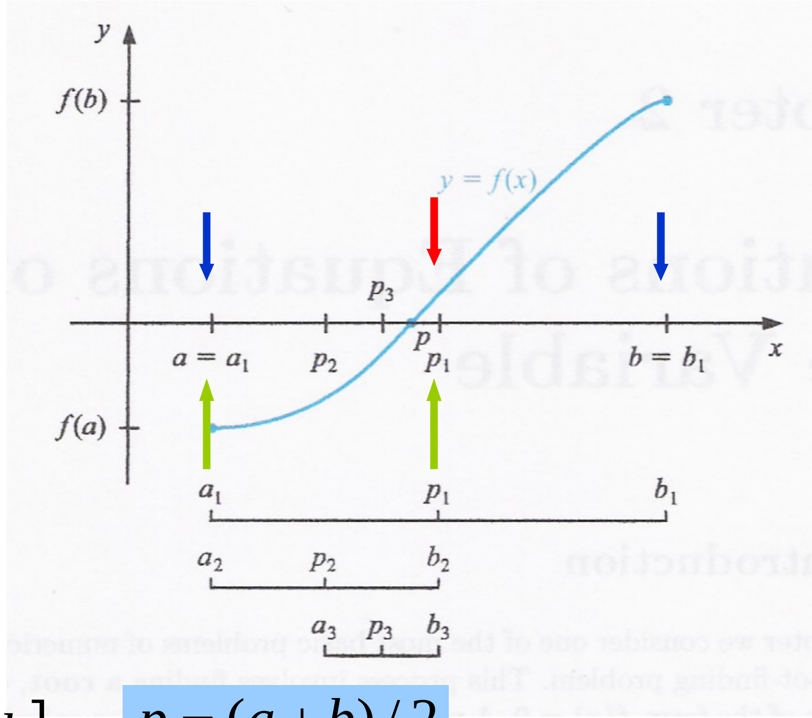
- Os métodos iterativos são constituídos por quatro partes principais
  - **Estimativa inicial:** uma ou mais aproximações para a raiz desejada
  - **Atualização:** uma fórmula que atualize a solução aproximada
  - **Critério de parada:** uma forma de estabelecer quando parar o processo iterativo em qualquer caso
  - **Estimador de exatidão:** associado ao critério de parada e provê uma estimativa do erro cometido

Introdução

- Critérios de parada
  - Possibilidades
    - **Tolerância relativa na variável:** $\dfrac{|x_i - x_{i-1}|}{x_i} < \varepsilon_1$
    - **Tolerância absoluta na função:** $|f(x_i)| < \varepsilon_2$
    - **Número máximo de iterações:** $n_{\max}$
  - Comentário
    - ✓ O segundo critério é, sempre que possível, preferido em relação ao primeiro por ser mais confiável

O método da bissecção

- **Elementos básicos**
  - Usado para determinar uma solução para $f(x)=0$ no intervalo $[a,b]$ supondo
    - ✓ $f(x)$ uma função contínua
    - ✓ $f(a)\cdot f(b)<0$
    - ✓ $f(x)$ corta o eixo x em pelo menos um ponto no intervalo $[a,b]$

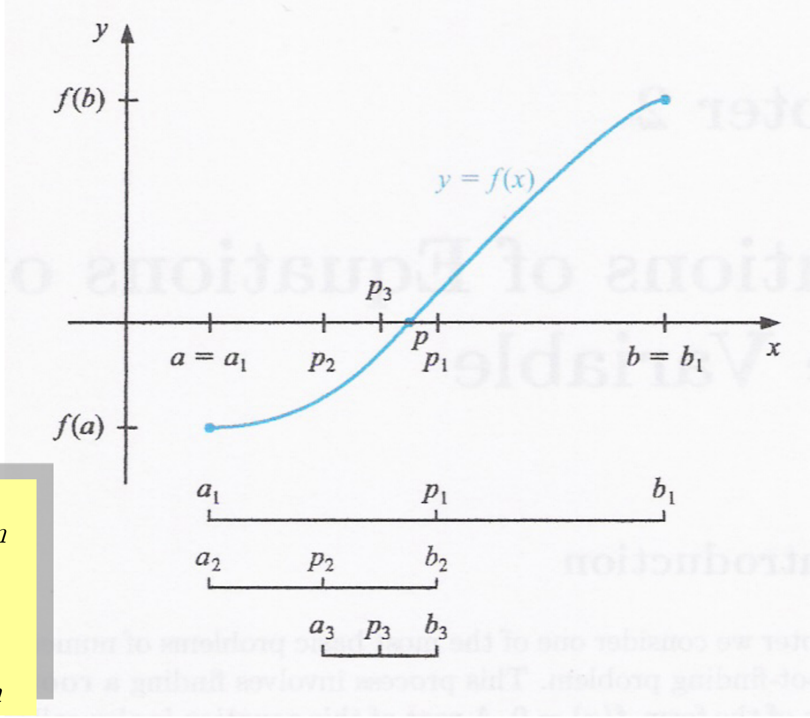


- **Algoritmo geral**
  - Calcular $f(x)$ no ponto médio de $[a,b]$: $p=(a+b)/2$
  - Se $f(x_p)\neq 0$ escolhe-se um novo intervalo de modo que $f(x)$ tenha sinais opostos nas extremidades $f(a)\cdot f(x_p)<0$ ou $f(b)\cdot f(x_p)<0$
  - Repetir os passos anteriores até atingir a precisão desejada

O método da bissecção

- Algoritmo geral
  - Um intervalo $[a_{n+1}, b_{n+1}]$ contendo uma aproximação para a raiz de $f(x) = 0$ é construído de um intervalo $[a_n, b_n]$ contendo a raiz, como segue
  - Calcule:

$$p_n = a_n + \frac{b_n - a_n}{2}, \quad n = 1, 2, \ldots$$



  - Então, faça

$$\text{se} \quad f(a_n) \cdot f(p_n) < 0, \; a_{n+1} = a_n \quad \text{e} \quad b_{n+1} = p_n$$

e

$$\text{se} \quad f(a_n) \cdot f(p_n) > 0, \; a_{n+1} = p_n \quad \text{e} \quad b_{n+1} = b_n$$

O método da bissecção

Algoritmo

1. Dados: $a, b, f(x), \varepsilon_1, \varepsilon_2, n_{\max}, f(a)\cdot f(b) < 0$
2. Faça $a_1 \leftarrow a, \quad b_1 \leftarrow b, \quad i \leftarrow 1$
3. Faça $f_a \leftarrow f(a_1), \; f_b \leftarrow f(b_1)$ e $f_a \cdot f_b$
4. Se $f_a \cdot f_b > 0$, saída

   "intervalo $[a, b]$ inadequado", vá p/ Fim.
5. Enquanto $|f_a| > \varepsilon_2$ e $|f_b| > \varepsilon_2$ e $i < n_{\max}$

   5.1 $Se\,|a_i - b_i| < \varepsilon_1 \cdot a_i$

   saída $\{a_i, b_i\}$, vá p/ fim.

   5.2 $p_i \leftarrow 0.5 \cdot (a_i + b_i)$

   5.3 Se $f(p_i)\cdot f_a < 0$

   $a_{i+1} \leftarrow a_i, \; f_a \leftarrow f(a_{i+1})$

   $b_{i+1} \leftarrow p_i, \; f_b \leftarrow f(b_{i+1})$

   senão:

   $a_{i+1} \leftarrow p_i, \; f_a \leftarrow f(a_{i+1})$

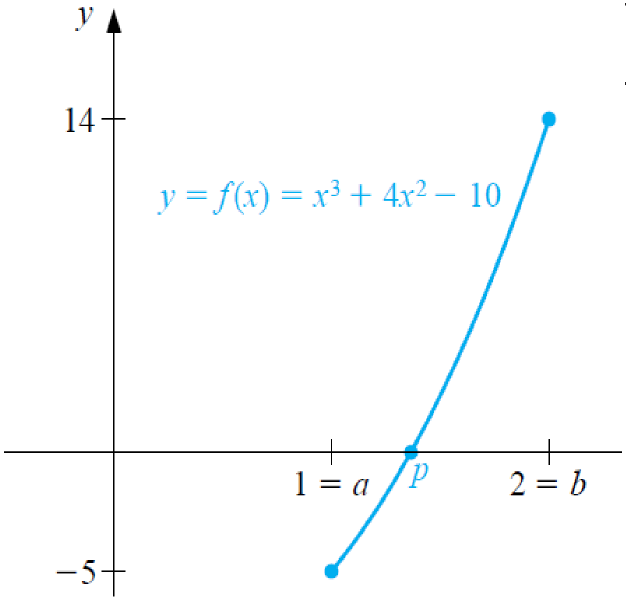
   $b_{i+1} \leftarrow b_i, \; f_b \leftarrow f(b_{i+1})$

   5.4 $i = i + 1$
6. Se $i > n_{\max}$, saída

   "Não atingiu a exatidão em $n_{\max}$ iterações
7. Se $|f_a| \le \varepsilon_2$, saída " $p = \{a_{i+1}\}$ ", vá p/ Fim
8. Se $|f_b| \le \varepsilon_2$, saída " $p = \{b_{i+1}\}$ "
7. Fim: Pare.

O método da bissecção

- Exemplo
  - Determine a raiz de $f(x) = x^3 + 4x^2 - 10 = 0$ no intervalo $[1,2]$



n	a_n	b_n	p_n	$f(p_n)$
1	1.0000000000	2.0000000000	1.5000000000	2.3750000000
2	1.0000000000	1.5000000000	1.2500000000	−1.7968750000
3	1.2500000000	1.5000000000	1.3750000000	0.1621093750
4	1.2500000000	1.3750000000	1.3125000000	−0.8483886719
5	1.3125000000	1.3750000000	1.3437500000	−0.3509826660
6	1.3437500000	1.3750000000	1.3593750000	−0.0964088440
7	1.3593750000	1.3750000000	1.3671875000	0.0323557854
8	1.3593750000	1.3671875000	1.3632812500	−0.0321499705
9	1.3632812500	1.3671875000	1.3652343750	0.0000720248
10	1.3632812500	1.3652343750	1.3642578125	−0.0160466908
11	1.3642578125	1.3652343750	1.3647460938	−0.0079892628

Análise da Convergência

- Para cada passo do método, o intervalo conhecido é divido por 2
- Então, pode-se escrever:

$$\left| p_n - p \right| \leq \frac{b-a}{2^n}$$

- Pode-se determinar um limite para o número de iterações que assegura uma tolerância TOL

$$\frac{b-a}{2^n} < TOL \Rightarrow \frac{b-a}{TOL} < 2^n \Rightarrow n > \log_2\left(\frac{b-a}{TOL}\right)$$

- Seja p a raiz de $f(x)$ e $E_j = \left| p - p_j \right|$ o erro na iteração j. Uma vez que

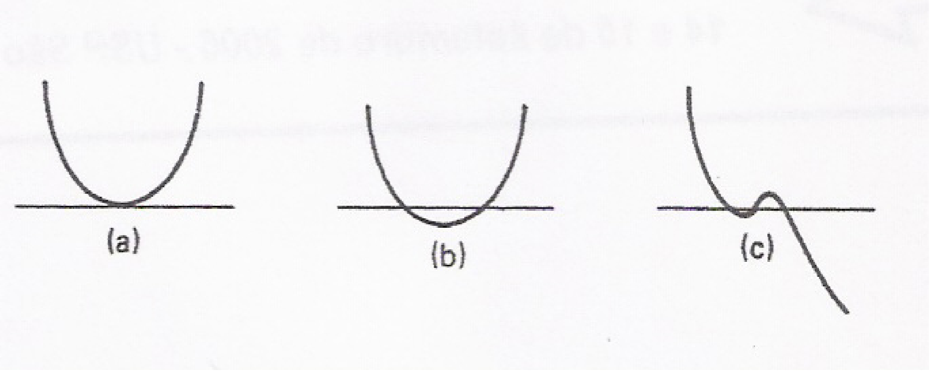
$$p_{j+1} = \frac{p_j + p_{j-1}}{2}, \ni f(p_j) * f(p_{j-1}) < 0 \Rightarrow E_{j+1} \leq \frac{E_j}{2} \Leftrightarrow \frac{E_{j+1}}{E_j} \leq \frac{1}{2}$$

- Logo: $\lim_{j \to \infty} \dfrac{E_{j+1}}{E_j} = \dfrac{1}{2}$ $\Rightarrow$ **O método da bissecção tem convergência linear**

O método da bissecção

Comentários

- Teoricamente, o método é seguro e converge em um número fixo de iterações, tanto menor quanto menor for o intervalo [a,b]. Contudo, poderão ocorrer dificuldades para
  - ✓ Identificar a existência de raízes em [a,b] qualquer, pois se ocorrer um erro de arredondamento no momento em que se avalia o sinal da função nos extremos ou no ponto médio de [a,b]
  - ✓ encontrar um intervalo inicial para funções que possuam raízes de multiplicidade par ou muito próximas, tais como aquelas ilustradas nas figuras abaixo.



Exercícios Sugeridos

Let $f(x) = (x+2)(x+1)x(x-1)^3(x-2)$. To which zero of f does the Bisection method converge for the following intervals?

(a) $[-3, 2.5]$

(b) $[-2.5, 3]$

(c) $[-1.75, 1.5]$

(d) $[-1.5, 1.75]$

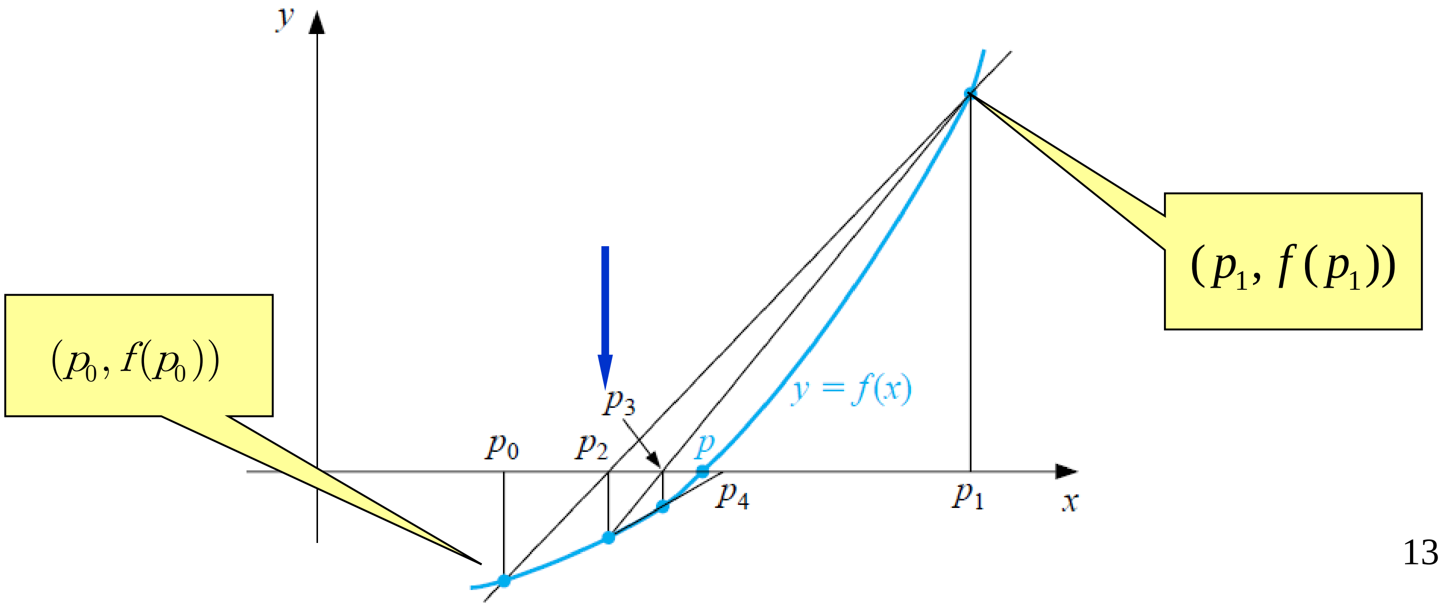
Utilize o método da bisseção para estimar um valor aproximado para $\sqrt{3}$ com tolerância de 10^{-4}.

O método da secante

Elementos básicos

- Definir um intervalo $[p_1, p_0]$ e os pontos $(p_0, f(p_0))$ e $(p_1, f(p_1))$
- Construir a linha reta definida pelos pontos acima - secante de *f*(*x*)
- Escolher como solução a interseção da reta com o eixo x
- Repetir o procedimento para os intervalos

$[p_2, p_1], [p_3, p_2], \ldots, [p_n, p_{n-1}]$



O método da secante

Formulação matemática

- A equação da linha secante através de $(p_0, f(p_0))$ e $(p_1, f(p_1))$ é

$$y = f(p_1) + \frac{f(p_1) - f(p_0)}{p_1 - p_0}(x - p_1)$$

- A intersecção com o eixo x em $(p_2,0)$ satisfaz

$$0 = f(p_1) + \frac{f(p_1) - f(p_0)}{p_1 - p_0}(p_2 - p_1) \quad \Rightarrow \quad p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)(p_1 - p_0)}{f(p_1) - f(p_0)}$$

- Generalizando:

$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)(p_n - p_{n-1})}{f(p_n) - f(p_{n-1})} \qquad n = 1, 2, \ldots$$

A interseção da secante com o eixo x poderá ocorrer fora do intervalo de interesse e, por isso, o método nem sempre converge

O método da secante

Critérios de parada

- Tolerância de convergência $|p_n - p_{n-1}| < TOL$
- Limite máximo de iterações $n \leq n_{\max}$

Advertência

- Embora algebricamente equivalente recomenda-se, para se evitar cancelamentos subtrativos, não substituir a equação de iteração

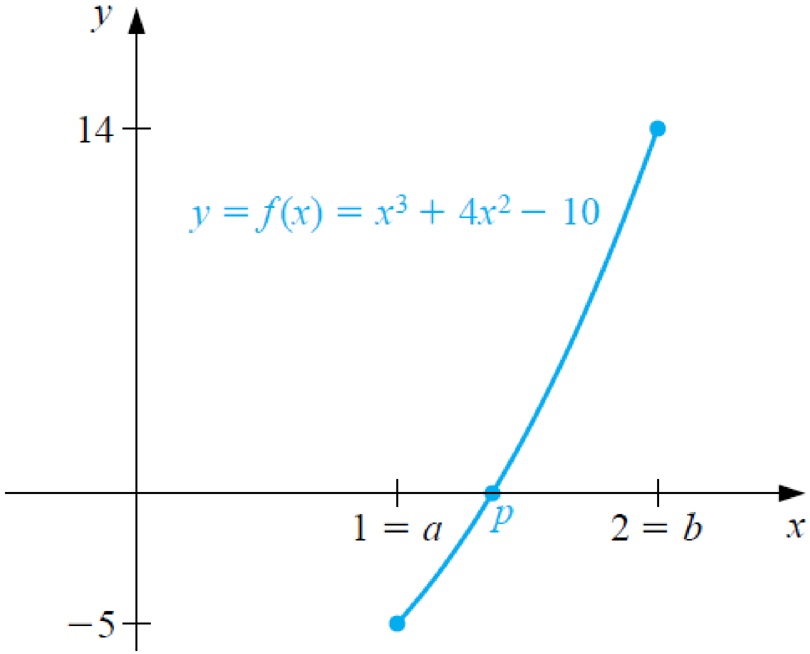
$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)(p_n - p_{n-1})}{f(p_n) - f(p_{n-1})}$$

por

$$p_{n+1} = \frac{f(p_{n-1})p_n - f(p_n)p_{n-1}}{f(p_{n-1}) - f(p_n)}$$

O método da secante

- **Exemplo**
  - Determine a raiz de $f(x) = x^3 + 4x^2 - 10 = 0$ no intervalo $[1,2]$



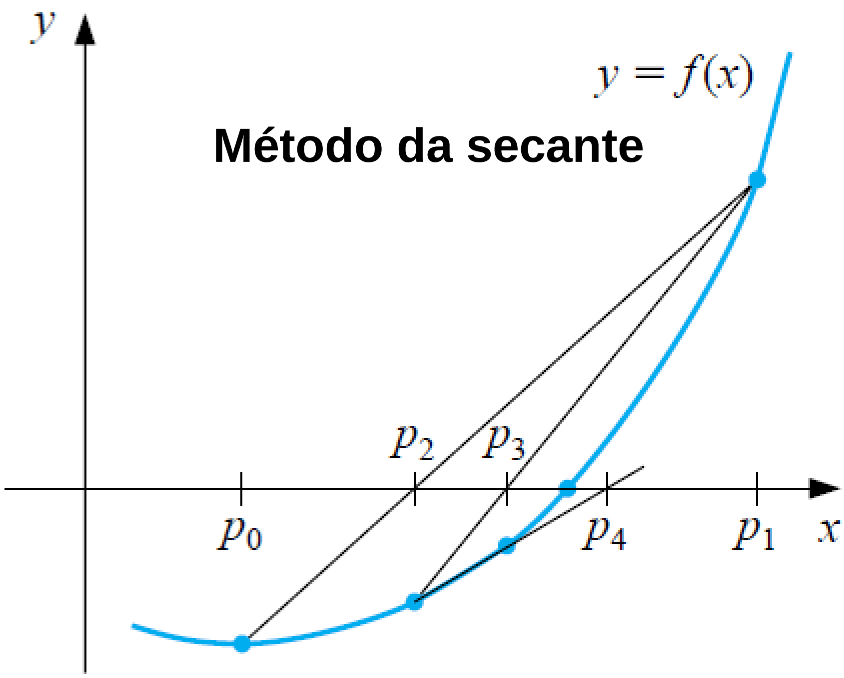
n	p_n	$f(p_n)$
2	1.2631578947	−1.6022743840
3	1.3388278388	−0.4303647480
4	1.3666163947	0.0229094308
5	1.3652119026	−0.0002990679
6	1.3652300011	−0.0000002032

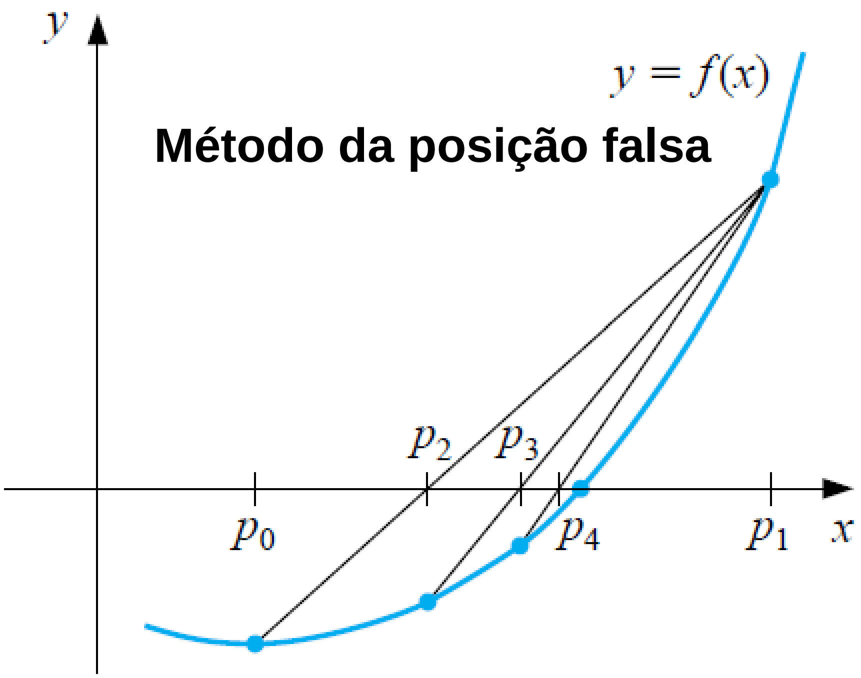
Note que o resultado final foi obtido com 6 iterações, aproximadamente a metade do número de iterações realizadas pelo método da bissecção

O método da posição falsa (Regula Falsi)

Elementos básicos

- Sob as mesmas condições iniciais da bisseção, particionar [a,b] na interseção da reta que une os pontos definidos a seguir, com o eixo x.
- Pontos iniciais: $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$
- Define-se então a solução p_2 e um novo intervalo conforme a variação do sinal de $f(x)$





O método da posição falsa

Passos principais

- Com $a_1 = a$ e $b_1 = b$, a aproximação p_2 é dada por

$$p_2 = a_1 - \frac{f(a_1)(b_1 - a_1)}{f(b_1) - f(a_1)}$$

$$\text{Se } \ f(p_2) \cdot f(a_1) < 0,$$
$$\text{faça: } a_2 = a_1 \ \text{ e } \ b_2 = p_2$$

$$\text{Se } \ f(p_2) \cdot f(b_1) < 0,$$
$$\text{faça: } a_2 = p_2 \ \text{ e } \ b_2 = b_1$$

- Calcule:

$$p_3 = a_2 - \frac{f(a_2)(b_2 - a_2)}{f(b_2) - f(a_2)}$$

- Seguir o procedimento para $p_4, \ldots, p_n$

O método da posição falsa

Algoritmo geral

- Um intervalo $[a_{n+1}, b_{n+1}]$, para $n > 1$, contendo uma aproximação para a raiz de $f(x) = 0$, é encontrada em um intervalo $[a_n, b_n]$ por

$$p_{n+1} = a_n - \frac{f(a_n)(b_n - a_n)}{f(b_n) - f(a_n)}$$

- Então faça:

$$\text{se} \quad f(a_n) \cdot f(p_{n+1}) < 0, \ a_{n+1} = a_n \quad \text{e} \quad b_{n+1} = p_{n+1}$$

e

$$\text{se} \quad f(a_n) \cdot f(p_{n+1}) > 0, \ a_{n+1} = p_{n+1} \quad \text{e} \quad b_{n+1} = b_n$$

Embora aparentemente superior, o método da posição falsa converge mais lentamente que o método da secante

O método da posição falsa

- Exemplo
  - Determine a raiz de $f(x) = x^3 + 4x^2 - 10 = 0$ no intervalo $[1,2]$

n	a_n	b_n	p_{n+1}	$f(p_{n+1})$
1	1.00000000	2.00000000	1.26315789	−1.60227438
2	1.26315789	2.00000000	1.33882784	−0.43036475
3	1.33882784	2.00000000	1.35854634	−0.11000879
4	1.35854634	2.00000000	1.36354744	−0.02776209
5	1.36354744	2.00000000	1.36480703	−0.00698342
6	1.36480703	2.00000000	1.36512372	−0.00175521
7	1.36512372	2.00000000	1.36520330	−0.00044106

Exercícios Sugeridos

Let $f(x) = x^2 - 6$, $p_0 = 3$, and $p_1 = 2$. Find p_3 using each method.

(a) Secant method

(b) method of False Position

4. Use the Secant method to find solutions accurate to within 10^{-5} for the following problems.

   (a) $2x\cos 2x - (x-2)^2 = 0$ on $[2, 3]$ and on $[3, 4]$

   (b) $(x-2)^2 - \ln x = 0$ on $[1, 2]$ and on $[e, 4]$

Repeat Exercise 4 using the method of False Position.

The function $f(x) = \tan \pi x - 6$ has a zero at $(1/\pi) \arctan 6 \approx 0.447431543$. Let $p_0 = 0$ and $p_1 = 0.48$ and use 10 iterations of each of the following methods to approximate this root. Which method is most successful and why?

(a) Bisection method

(b) method of False Position

(c) Secant method

O método de Newton

Elementos básicos

- $f(x)$, $f'(x)$ e $f''(x)$ contínuas em [a,b] e p o único zero de $f(x)$ em [a,b]
- Escolher uma solução inicial p_o para p
- Fazer uma expansão em série de Taylor para $f(x) = f(p_0 + \Delta p_0) = 0$

$$f(p_0 + \Delta p_0) = f(p_0) + f'(p_0)\frac{\Delta p_0}{1!} + f''(p_0)\frac{(\Delta p_0)^2}{2!} + \ldots$$

- Tomando-se dois termos das série

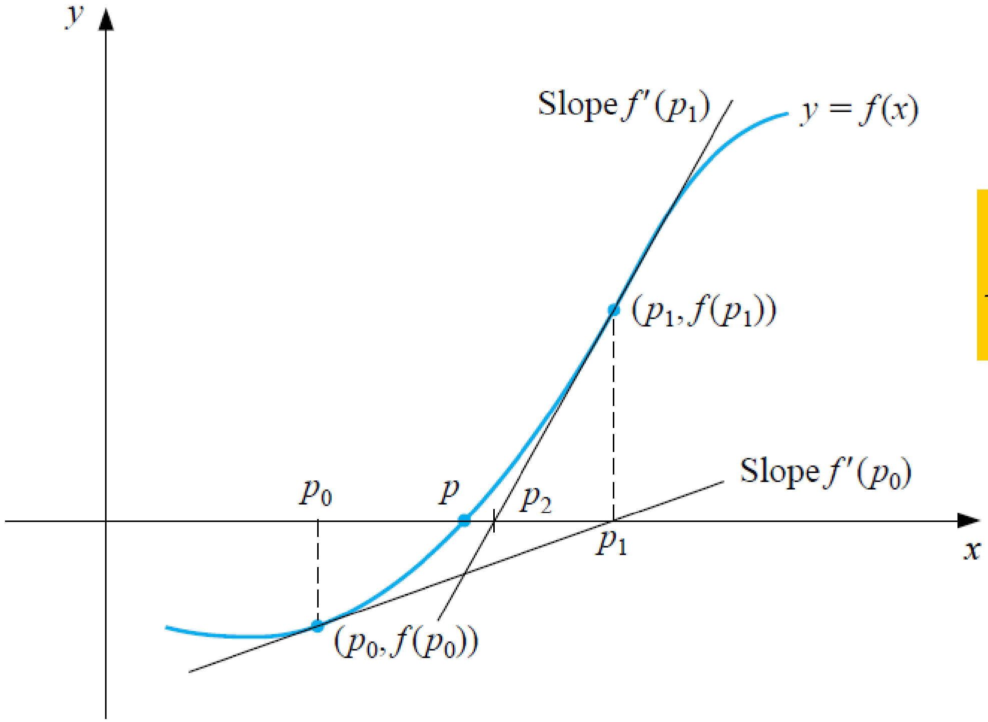
$$f(p_0 + \Delta p_0) = f(p_0) + f'(p_0) * \Delta p_0 \cong 0 \Rightarrow \Delta p_0 = -f(p_0) / f'(p_0)$$

- Obter $p_1 = p_0 + \Delta p_0 \Rightarrow p_1 = p_0 - f(p_0) / f'(p_0)$
- Obter aproximações subsequentes para p de modo similar

O método de Newton

Algoritmo geral

- A aproximação p_{n+1} para uma raiz de $f(x)=0$ é calculada da aproximação p_n usando-se a equação



$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)}{f'(p_n)}; \quad n = 1, 2, \ldots$$

O método de Newton

- Exemplo
  - Considerando p_0 = 1, determine a raiz de $f(x) = x^3 + 4x^2 - 10 = 0$

$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)}{f'(p_n)}$$

n	p_n	$f(p_n)$
1	1.4545454545	1.5401953418
2	1.3689004011	0.0607196886
3	1.3652366002	0.0001087706
4	1.3652300134	0.0000000004

O método de Newton

Análise de convergência

- Considere p ser uma solução para $f(x)=0$ e que f'' existe em um intervalo contendo p e a aproximação p_n. Expandindo f em série de Taylor para p_n e calculando para $x = p$, resulta:

$$0 = f(p) = f(p_n) + f'(p_n)(p - p_n) + \frac{f''(\xi)}{2}(p - p_n)^2$$

ξ está entre p_n e p

- Consequentemente, se $f'(p_n) \neq 0$, obtém-se

$$(p - p_n) + \frac{f(p_n)}{f'(p_n)} = -\frac{f''(\xi)}{2f'(p_n)}(p - p_n)^2$$

- Substituindo-se $p_{n+1} = p_n - \dfrac{f(p_n)}{f'(p_n)}$ na equação acima, resulta

$$(p - p_{n+1}) = -\frac{f''(\xi)}{2f'(p_n)}(p - p_n)^2$$

O método de Newton

- Análise de convergência (cont.)
  - Se existir uma constante positiva M tal que $|f''(x)| \le M$ em um intervalo em torno de p, e se p_n estiver neste intervalo, pode-se reescrever

$$(p - p_{n+1}) = -\frac{f''(\xi)}{2f'(p_n)}(p - p_n)^2$$

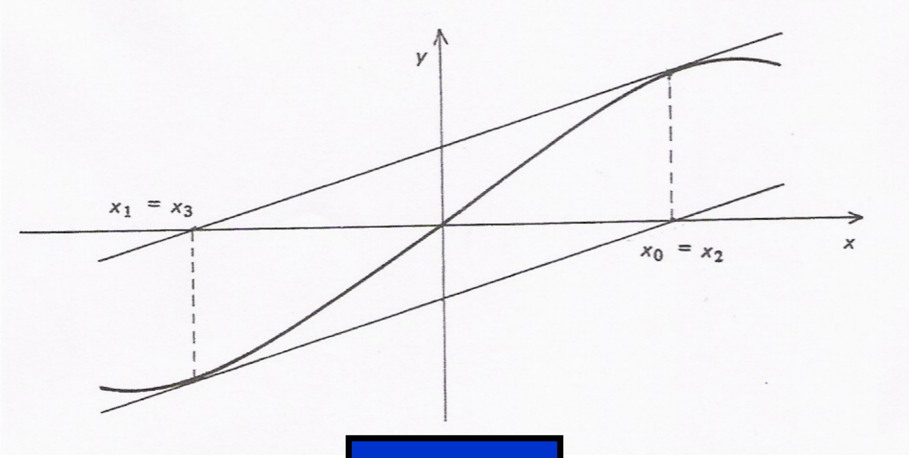
  - Como:

$$|p - p_{n+1}| \le \frac{M}{2|f'(p_n)|}|p - p_n|^2$$

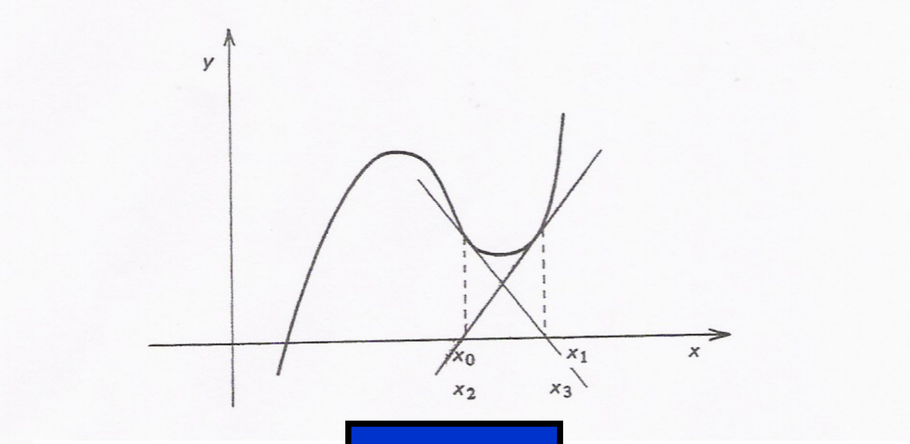
- Comentários
  - ✓ O erro $|p - p_{n+1}|$ da $(n+1)^{\text{ésima}}$ aproximação é limitado por aproximadamente o quadrado do erro da $(n)^{\text{ésima}}$ aproximação $|p - p_n|$
  - ✓ O método de Newton converge quadraticamente se $f'(p_n) \neq 0$ e se p_0 é suficientemente próximo de p.

O método de Newton

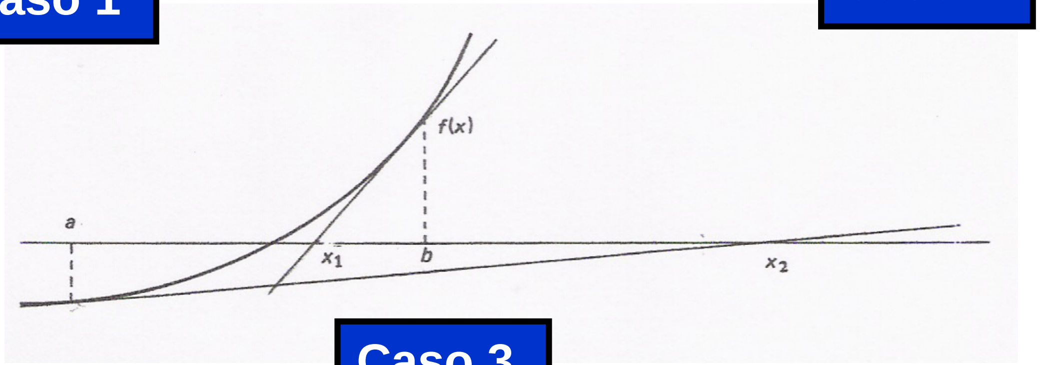
- Situações de dificuldades para o método de Newton
  - Os gráficos abaixo ilustram situações em que ocorrem dificuldades para a convergência do método de Newton



Caso 1



Caso 2



Caso 3

Exercícios Sugeridos

Let $f(x) = -x^3 - \cos x$ and $p_0 = -1$. Use Newton's method to find p_2. Could $p_0 = 0$ be used for this problem?

Use Newton's method to approximate the solutions of the following equations to within 10^{-5} in the given intervals. In these problems the convergence will be slower than normal since the roots are not simple roots.

(a) $x^2 - 2xe^{-x} + e^{-2x} = 0, \quad \text{on} \quad [0, 1]$

(b) $\cos(x + \sqrt{2}) + x\left(x/2 + \sqrt{2}\right) = 0, \quad \text{on} \quad [-2, -1]$

(c) $x^3 - 3x^2(2^{-x}) + 3x(4^{-x}) + 8^{-x} = 0, \quad \text{on} \quad [0, 1]$

(d) $e^{6x} + 3(\ln 2)^2 e^{2x} - (\ln 8)e^{4x} - (\ln 2)^3, \quad \text{on} \quad [-1, 0]$

Aplique o método de Newton para resolver o último exercício do Slide 21. Considere dois pontos iniciais diferentes (0 e 0.48). Realize uma análise comparativa com todos os resultados obtidos.

O Método da Iteração Linear - MIL

Elementos gerais

- Seja $f(x)$ uma função contínua em $[a,b]$, intervalo que contém uma raiz de $f(x)=0$. O MIL consiste em:
  - ✓ transformar $f(x)=0$ em $x=\phi(x)$
  - ✓ tomar um valor inicial para $x=x_0$
  - ✓ gerar uma sequência $\{x_k\}$ de aproximações para ξ pela relação $x_{k+1}=\phi(x_k)$, pois a função $\phi(x)$ é tal que $f(\xi)=0$ se e somente se $\phi(\xi)=\xi$
- Uma função $\phi(x)$ que satisfaz a condição acima é chamada de ***função de iteração*** para a equação $f(x)=0$.
- A técnica descrita transforma o problema de resolver $f(x)=0$ no problema de encontrar um ponto fixo de $\phi(x)$
- Exemplo

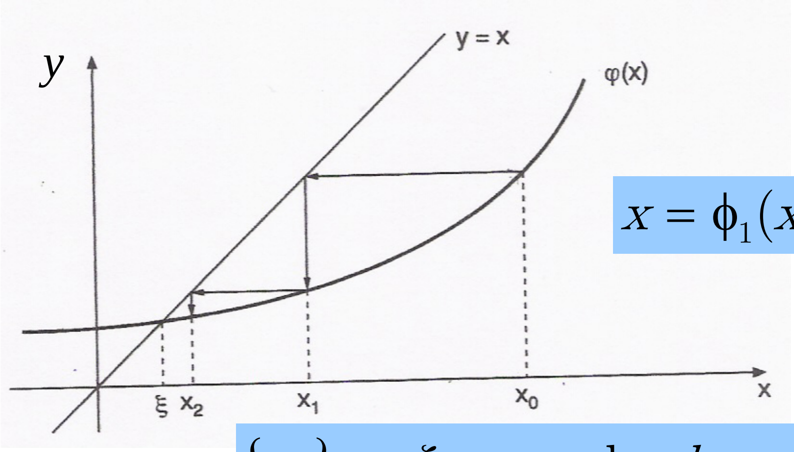
$$f(x)=x^2+x-6=0 \quad \Rightarrow \quad x=\phi(x)=6-x^2$$

O Método da Iteração Linear - MIL

- Análise Ilustrativa da convergência
  - Considere uma equação qualquer:

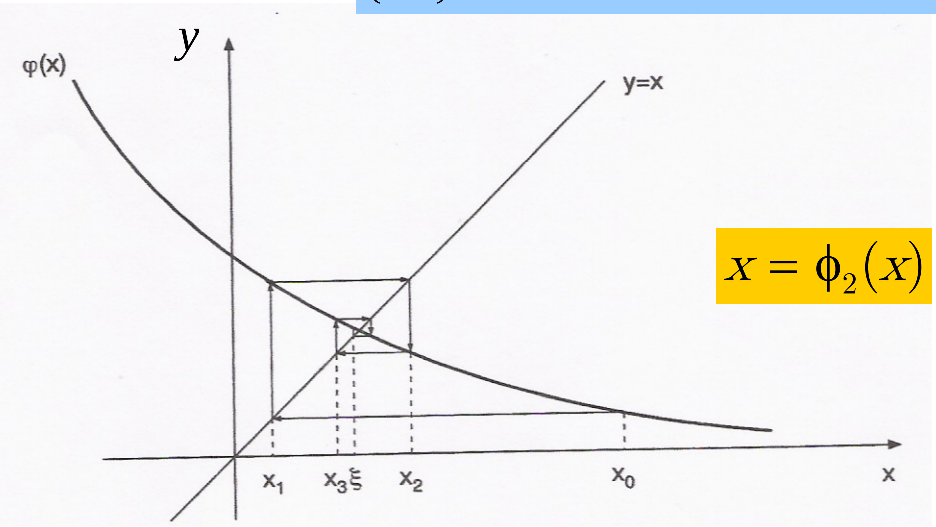
$$f(x) = 0$$

  - Em geral podem ser definidas várias funções de iteração:
  - **Opção 1:** $x = \phi_1(x)$
  - **Opção 2:** $x = \phi_2(x)$



$$x = \phi_1(x)$$

$$\{x_k\} \rightarrow \xi \quad \text{quando} \quad k \rightarrow \infty$$

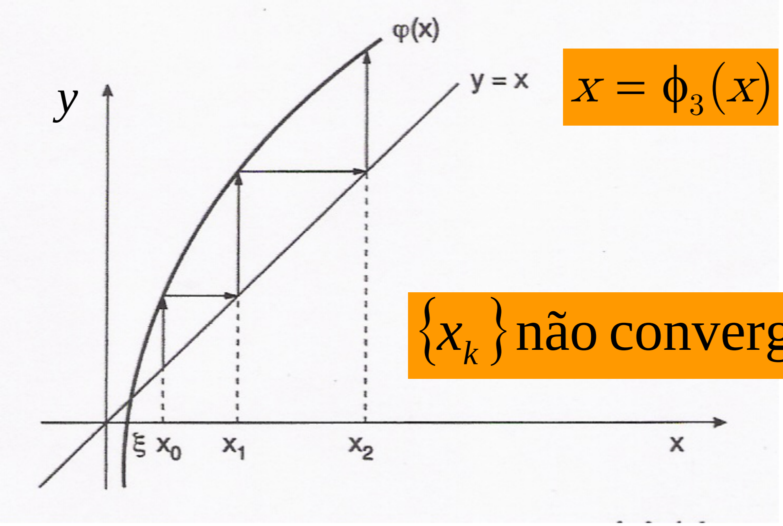


$$x = \phi_2(x)$$

$$\{x_k\} \rightarrow \xi \quad \text{quando} \quad k \rightarrow \infty$$

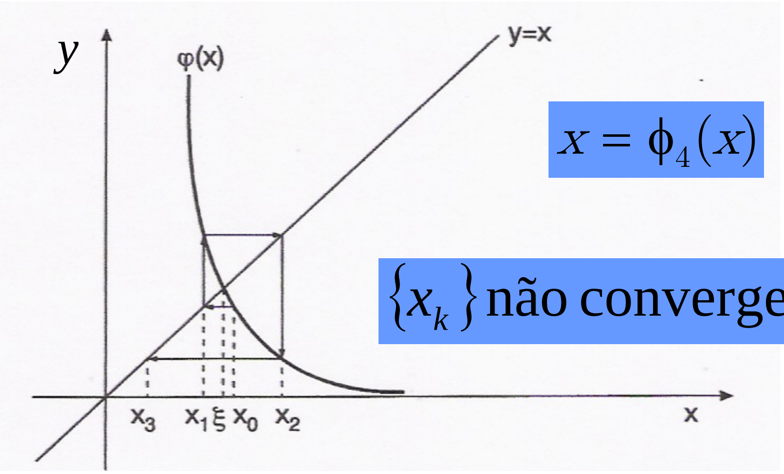
O Método da Iteração Linear - MIL

- Análise Ilustrativa da convergência (cont.)
  - Equação: $f(x) = 0$
  - **Opção 3:** $x = \phi_3(x)$
  - **Opção 4:** $x = \phi_4(x)$



$x = \phi_3(x)$

$\{x_k\}$ não converge para ξ



$x = \phi_4(x)$

$\{x_k\}$ não converge para ξ

Note que nem todas as funções de iteração geram seqüências convergentes para a raiz de $f(x)$=0

O Método da Iteração Linear - MIL

- Análise formal de convergência
  - Seja ξ uma raiz da equação $f(x)=0$, isolada num intervalo [a,b], centrado em ξ.
  - Seja $\phi(x)$ uma função de iteração para $f(x)=0$
  - **Se:**
    - ✓ $\phi(x)$ e $\phi'(x)$ são contínuas em [a,b];
    - ✓ $|\phi'(x)| \le M < 1, \forall x \in [a,b]$ e;
    - ✓ $x_0 \in [a,b]$.

  então a sequência $\{x_k\}$ **gerada pelo processo iterativo** $x_{k+1} = \phi(x_k)$ **converge para** ξ **.**

O Método da Iteração Linear - MIL

- Exemplo numérico 1:
  - Considere a equação $f(x) = x^2 + x - 6 = 0$, $\xi_1 = -3$ e $\xi_2 = 2$
  - Aplicar o método MIL com $\phi(x) = 6 - x^2$ e $x_0 = 1.5$

$$x_1 = \phi(x_0) = 6 - 1.5^2 = 3.75$$

$$x_2 = \phi(x_1) = 6 - 3.75^2 = -8.0625$$

$$x_3 = \phi(x_2) = 6 - (-8.0625)^2 = -59.003906$$

$$x_4 = \phi(x_3) = 6 - (-59.003906)^2 = -3475.4609$$

  - **Análise das condições de convergência**

$\varphi(x) = 6 - x^2$ e $\phi'(x) = -2x$

$\phi(x)$ e $\phi'(x)$ são contínuas em $\Re$

$$|\phi'(x)| < 1 \Leftrightarrow |2x| < 1 \Leftrightarrow -\frac{1}{2} < x < \frac{1}{2}$$

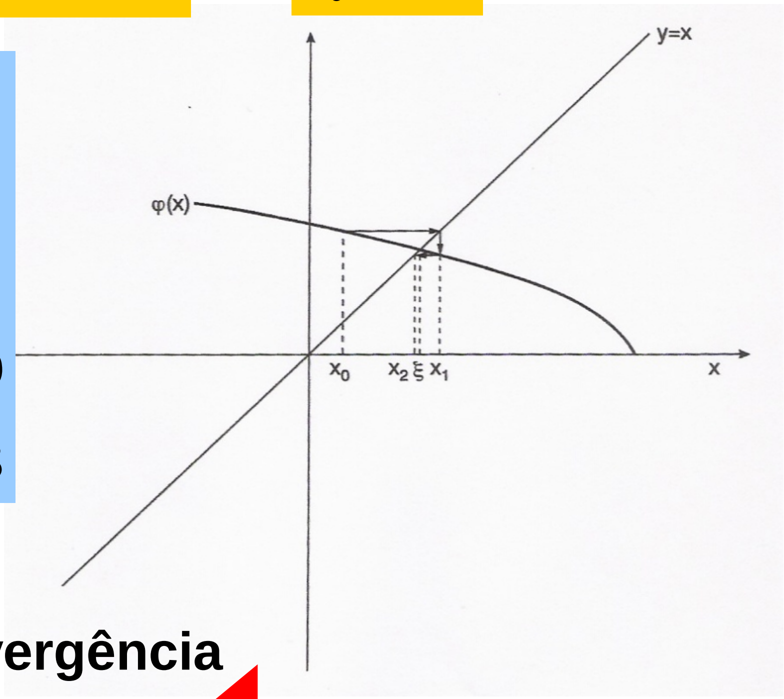
Não existe um intervalo [a,b] centrado em ξ = 2, tal que $|\phi'(x)| < 1, \forall x \in [a, b]$

O Método da Iteração Linear - MIL

Exemplo numérico 2:

- Considere a equação $f(x) = x^2 + x - 6 = 0$, $\xi_1 = -3$ e $\xi_2 = 2$
- Aplicar o método MIL com $\phi(x) = \sqrt{6-x}$ e $x_0 = 1.5$

$$x_1 = \phi(x_0) = \sqrt{6-1.5} = 2.12132$$
$$x_2 = \phi(x_1) = \sqrt{6-2.12132} = 1.96944$$
$$x_3 = \phi(x_2) = \sqrt{6-1.96944} = 2.00763$$
$$x_4 = \phi(x_3) = \sqrt{6-2.00763} = 1.99809$$
$$x_5 = \phi(x_4) = \sqrt{6-1.99809} = 2.00048$$



- **Análise das condições de convergência**

$$|\phi'(x)| < 1 \Leftrightarrow \left|\frac{1}{2\sqrt{6-x}}\right| < 1 \Leftrightarrow x < 5.75$$

Atendidas as condições do teorema

O Método de Müller

Aspectos gerais

- Em alguns problemas os métodos da secante, posição falsa e Newton não apresentam resultados satisfatórios
- Estes métodos não podem ser usados para o cálculo de raízes complexas, a menos que a aproximação inicial seja um número complexo com parte imaginária não-nula
- O método de Müller (1956) é uma generalização do método da secante, ao substituir a reta que passa por duas aproximações prévias, por uma parábola que passa por três aproximações prévias
- Por suas características, o método de Müller também fornece raízes complexas de polinômios

O Método de Müller

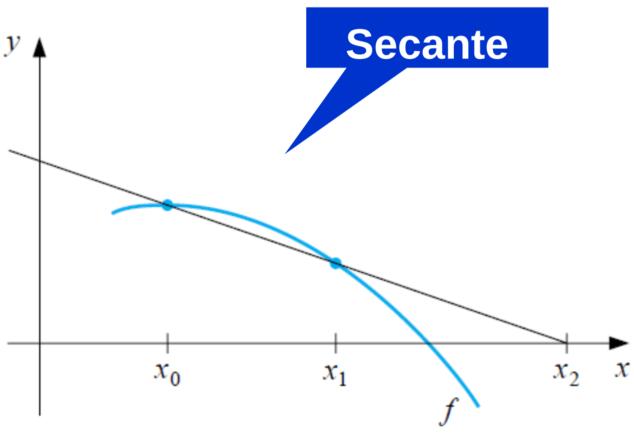
Elementos principais

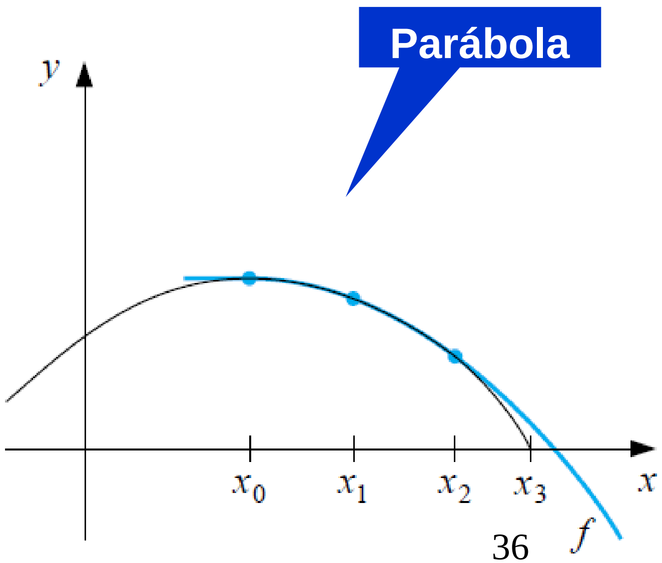
- O método utiliza o zero de uma parábola, formada usando três aproximações prévias, para determinar a próxima aproximação
- Considere o polinômio quadrático que passa por $(p_0, f(p_0)), (p_1, f(p_1))$ e $(p_2, f(p_2))$

$$P(x) = a(x-p_2)^2 + b(x-p_2) + c$$

- As constantes a, b e c são determinadas a partir da seguintes condições

$$f(p_0) = a(p_0-p_2)^2 + b(p_0-p_2) + c$$
$$f(p_1) = a(p_1-p_2)^2 + b(p_1-p_2) + c$$
$$f(p_2) = a(p_2-p_2)^2 + b(p_2-p_2) + c$$





O Método de Müller

Determinação da intersecção

- A raiz de $P(x) = a(x - p_2)^2 + b(x - p_2) + c = 0$ é determinada pela equação abaixo, em vez da tradicional “fórmula de Bahskara”, visando diminuir os erros de arredondamento

$$p_3 - p_2 = \frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

- O sinal do radical é definido em conformidade com a opção de maior magnitude do denominador, visando evitar a subtração de números de magnitudes próximas, sendo p_3 selecionado como a raiz de $P(x)$ mais próxima de p_2 .

O Método de Müller

Algoritmo

- Dadas as aproximações iniciais p_0, p_1 e p_2 , determine

$$p_3 - p_2 = -\frac{2c}{b + sign(b)\sqrt{b^2 - 4ac}}$$

onde:

$$c = f(p_2)$$

$$b = \frac{(p_0 - p_2)^2[f(p_1) - f(p_2)] - (p_1 - p_2)^2[f(p_0) - f(p_2)]}{(p_0 - p_2)(p_1 - p_2)(p_0 - p_1)}$$

$$a = \frac{(p_1 - p_2)[f(p_0) - f(p_2)] - (p_0 - p_2)[f(p_1) - f(p_2)]}{(p_0 - p_2)(p_1 - p_2)(p_0 - p_1)}$$

- Então, continue o processo iterativo com p_1, p_2 e p_3 substituindo p_0, p_1 e p_2
- O método calcula aproximações para raízes complexas, desde que seja usado aritmética complexa, quando o radical $b^2 - 4ac < 0$

O Método de Müller

Exemplo

- Considere o polinômio $f(x) = 16x^4 - 40x^3 + 5x^2 + 20x + 6$.
- Use o método de Müller e determine raízes deste polinômio para três diferentes condições iniciais para p_0, p_1 e p_2, com tolerância de precisão de 10^{-5}
- **Caso 1:** $p_0 = 0.5,\ p_1 = -0.5,\ p_2 = 0$

n	p_n	$f(p_n)$
3	$-0.555556 + 0.598352i$	$-29.4007 - 3.89872i$
4	$-0.435450 + 0.102101i$	$1.33223 - 1.19309i$
5	$-0.390631 + 0.141852i$	$0.375057 - 0.670164i$
6	$-0.357699 + 0.169926i$	$-0.146746 - 0.00744629i$
7	$-0.356051 + 0.162856i$	$-0.183868 \times 10^{-2} + 0.539780 \times 10^{-3}i$
8	$-0.356062 + 0.162758i$	$0.286102 \times 10^{-5} + 0.953674 \times 10^{-6}i$

p_1^*

O Método de Müller

- Exemplo (cont.)
  - **Caso 2**

$$p_0 = 0.5,\ p_1 = 1.0,\ p_2 = 1.5$$

n	p_n	$f(p_n)$
3	1.28785	-1.37624
4	1.23746	0.126941
5	1.24160	0.219440×10^{-2}
6	1.24168	0.257492×10^{-4}
7	1.24168	0.257492×10^{-4}

p_2^*

  - **Caso 3**

$$p_0 = 2.5,\ p_1 = 2.0,\ p_2 = 2.25$$

n	p_n	$f(p_n)$
3	1.96059	-0.611255
4	1.97056	0.748825×10^{-2}
5	1.97044	-0.295639×10^{-4}
6	1.97044	-0.295639×10^{-4}

p_3^*

  - **Portanto:** as raízes do polinômio são

$$p_1^* = -0.356062 \pm 0.162758i$$

$$p_2^* = 1.24168$$

$$p_3^* = 1.97044$$

O Método de Müller

Comentários finais

- O método pode ser utilizado para determinar as raízes de polinômios com uma variedade de condições iniciais
- A técnica geralmente converge para qualquer escolha de condição inicial
- Pacotes computacionais que empregam o método exigem somente uma aproximação inicial por raiz ou, opcionalmente, podem gerar esta aproximação inicial
- O método é mais eficiente que o método da secante, mas não tão eficiente quanto o método de Newton. Contudo, a facilidade de implementação e a maior segurança de que a raiz será encontrada quando se utiliza o método de Müller podem ser mais relevantes
- Qualquer um dos métodos, secante, Newton e Müller, convergem rapidamente, uma vez que uma razoável aproximação inicial seja especificada. Tal condição poderá ser determinada usando-se os métodos da bissecção ou posição falsa

Exercícios Sugeridos

$P(x) = 10x^3 - 8.3x^2 + 2.295x - 0.21141 = 0$ has a root at $x = 0.29$.

(a) Use Newton's method with $p_0 = 0.28$ to attempt to find this root.

(b) Use Müller's method with $p_0 = 0.275$, $p_1 = 0.28$, and $p_2 = 0.285$ to attempt to find this root.

(c) Explain any discrepancies in parts (a) and (b).

Find approximations to within 10^{-5} to all the zeros of each of the following polynomials by first finding the real zeros using Newton's method and then reducing to polynomials of lower degree to determine any complex zeros.

(a) $P(x) = x^4 + 5x^3 - 9x^2 - 85x - 136$

(b) $P(x) = x^4 - 2x^3 - 12x^2 + 16x - 40$

(c) $P(x) = x^4 + x^3 + 3x^2 + 2x + 2$

(d) $P(x) = x^5 + 11x^4 - 21x^3 - 10x^2 - 21x - 5$

Repita o exercício anterior usando o método de Müller

Aplicação do MATLAB

Aspectos gerais

- A função ROOTS é usada para calcular todas as raízes, reais e complexas, de um polinômio
- Para um função qualquer, FZERO é usada para calcular uma raiz próxima a aproximação inicial especificada, dentro de uma tolerância especificada
- **Cálculo das raízes do polinômio:** $f(x) = 16x^4 - 40x^3 + 5x^2 + 20x + 6$

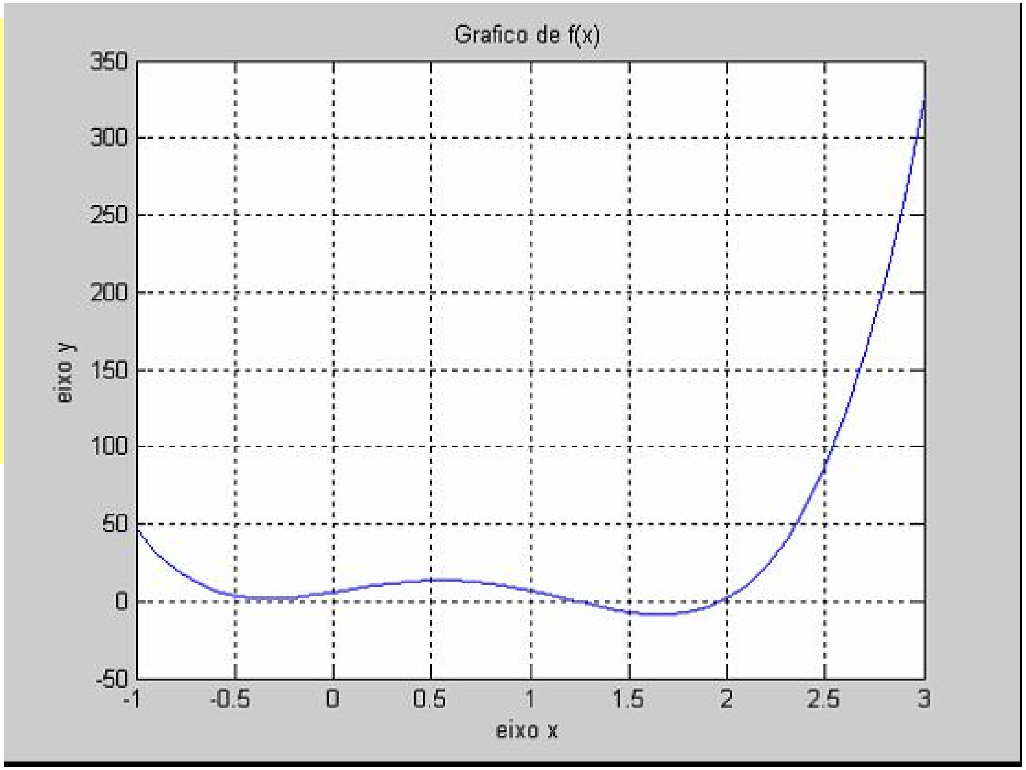
```
>> coef=[16 -40 5 20 6]
coef =
   16   -40     5    20     6
>> r=roots(coef)
r =
  1.9704
  1.2417
 -0.3561 + 0.1628i
 -0.3561 - 0.1628i
```

Aplicação do MATLAB

Aspectos gerais

- Representação gráfica de $f(x) = 16x^4 - 40x^3 + 5x^2 + 20x + 6$ na sequência do cálculo das raízes

```
>> x=-1:.1:3;
>> y=polyval(coef,x);
>> plot(x,y)
>> grid
>> title('Grafico de f(x)')
>> xlabel('eixo x')
>> ylabel('eixo y')
```



Conclusões

- Resolução da equação $f(x) = 0$, onde f é uma função contínua
  - Se em [a,b] f(a) e f(b) tem sinais opostos, então os métodos da bissecção e o método da posição falsa convergem. Contudo, a convergência destes métodos pode ser lenta
  - Convergência rápida pode ser obtida usando-se os métodos da secante e de Newton; porém, são necessárias condições iniciais relativamente próximas à raiz
  - Os métodos da bissecção e da posição falsa podem ser utilizados como métodos de partida para os métodos da secante e de Newton
  - O método de Müller apresenta convergência rápida sem restrições para a condição inicial; porém, não tão rápida quanto o método de Newton
  - O método de Müller apresenta a vantagem adicional de permitir o cálculo de raízes complexas, sendo comumente empregado em pacotes computacionais
  - Existem métodos de alta ordem para a determinação de raízes de polinômios, tais como Laguerre, Jenkins-Traub e Brent