UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO

Instituto de Ciências Exatas e Biológicas

Departamento de Computação

José Álvaro Tadeu Ferreira

Cálculo Numérico – Notas de aulas

Resolução de Equações Não Lineares

Ouro Preto

2009

Resolução de equações não lineares

1 - Introdução

A necessidade de determinar valores $x = \xi$ que satisfaçam a uma equação da forma $f(x) = 0$ ocorre com bastante freqüência em uma grande variedade de problemas provenientes das Ciências e das Engenharias. Estes valores são chamados de raízes da equação $f(x) = 0$ ou os zeros da função $y = f(x)$. Geometricamente, conforme mostra a Figura 1.1, estes valores são os pontos de interseção do gráfico de $y = f(x)$ com o eixo Ox.

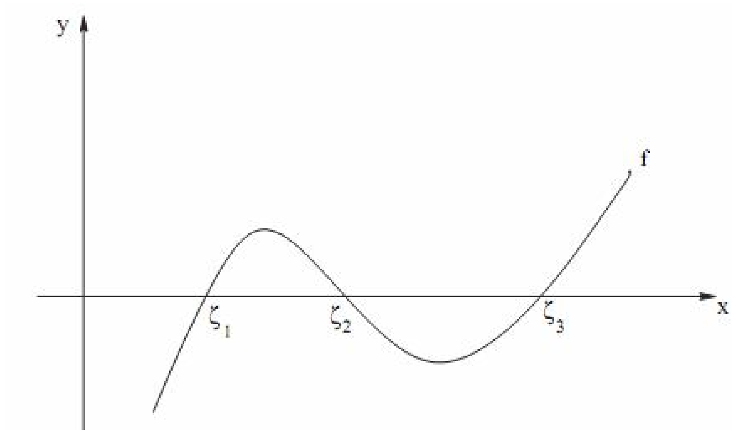

Figura 1.1: Raízes de uma equação

Se $y = f(x)$ é um polinômio quadrático, cúbico ou biquadrado, então os seus zeros podem ser determinados por meio de processos algébricos. Contudo, para polinômios de grau superior, estes processos não existem, é necessário, então, utilizar métodos numéricos. Também se faz necessária a utilização de métodos numéricos quando $y = f(x)$ é uma função transcendente, para as quais não existe método geral para obter os seus zeros. Por meio de métodos numéricos, é possível obter uma solução aproximada, em alguns casos, tão próxima da solução exata, quanto se deseje. Faz-se necessário, então definir o que é uma solução aproximada.

1.1 - Raiz aproximada

Sendo ε uma precisão desejada, diz-se que um valor x_k é uma aproximação para uma raiz ξ de uma equação $f(x) = 0$ se satisfizer as condições a seguir.

(i) $|f(x_k)| < \varepsilon$

(ii) $|x_k - \xi| < \varepsilon$

Conforme mostrado nas figuras 1.2.a e 1.2.b, estas duas condições não são equivalentes.

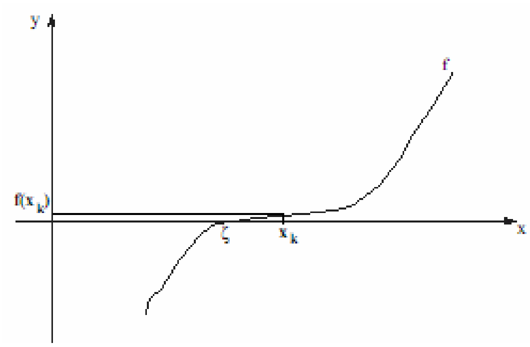

Figura 1.2.a

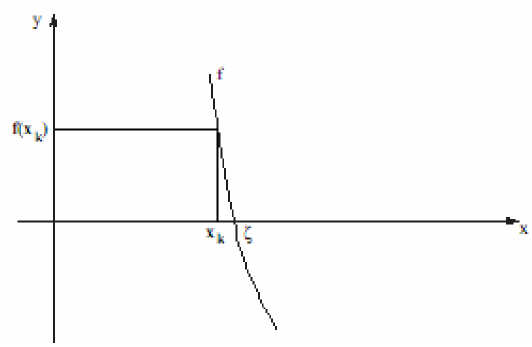

Figura 1.2.b

A figura 1.2.a apresenta a situação em que a condição (i) é satisfeita e a (ii) não. Na figura 2.1.b é mostrado o caso contrário.

1.2 - Raiz múltipla

Uma raiz, ξ, de uma equação $f(x) = 0$, tem multiplicidade m se:

$$f(\xi) = f\,'(\xi) = f\,''(\xi) = \ldots = f^{\,m-1}(\xi) = 0 \text{ e } f^{\,m}(\xi) \neq 0$$

Onde $f^{\,j}(\xi)$, j = 1, 2, ..., m; é a derivada de ordem j da função $y = f(x)$ calculada no ponto ξ.

Exemplo – 1.1

Sabendo-se que $\xi = 2$ é uma raiz da equação $f(x) = x^4 - 5.x^3 + 6.x^2 + 4.x - 8 = 0$, determine a sua multiplicidade.

Solução

$f(2) = 0$

$f\,'(x) = 4.x^3 - 15.x^2 + 12.x + 4 \Rightarrow f\,'(2) = 0$

$f\,''(x) = 12.x^2 - 30.x + 12 \Rightarrow f\,''(2) = 0$

$f\,'''(x) = 24.x - 30 \Rightarrow f\,'''(2) \neq 0$

Portanto, $\xi = 2$ é uma raiz com multiplicidade 3. A figura 1.3 ilustra o comportamento da função polinomial no intervalo [-1,5; 3].

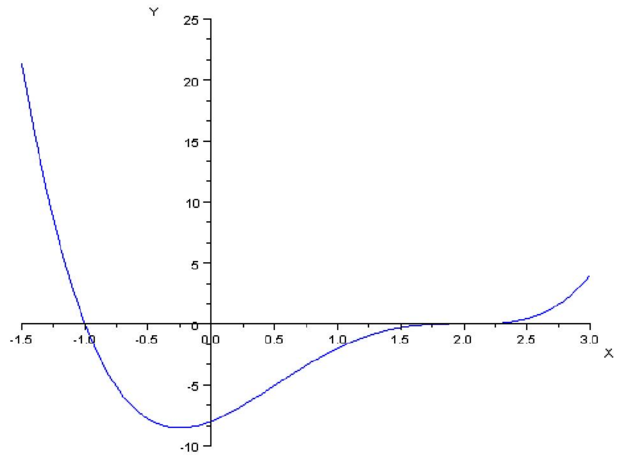

Figura 1.3: a função $f(x) = x^4 - 5.x^3 + 6.x^2 + 4.x - 8$

Exemplo – 1.2

Verifique qual é a multiplicidade da raiz $\xi = 0$ da equação

$$f(x) = sen^2(x) - x.sen(x) + 0,25.x^2 = 0$$

Solução

$f'(x) = 2.sen(x).cos(x) - sen(x) - x.cos(x) + 0,5.x \Rightarrow f'(0) = 0$

$f''(x) = -2.sen^2(x) + x.sen(x) + 2.cos^2(x) - 2.cos(x) + 0,5 \Rightarrow f''(0) = 0,5$

Portanto, $\xi = 0$ é uma raiz com multiplicidade 2. A figura 1.4 mostra o comportamento da função no intervalo [-4, 4].

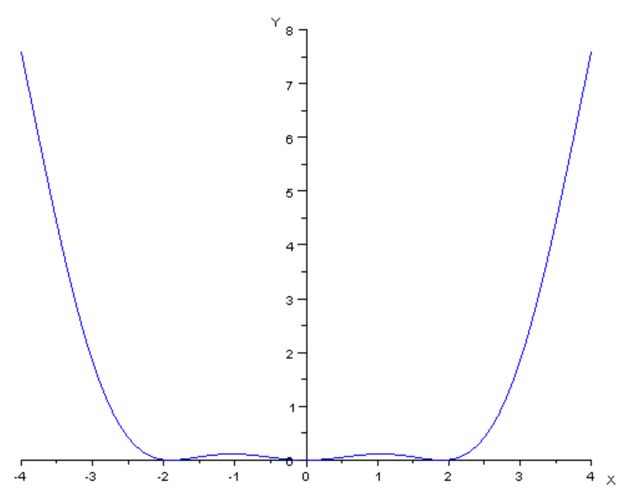

Figura 1.4: a função $f(x) = sen^2(x) - x.sen(x) + 0,25.x^2$

Observe-se que a equação possui outras duas raízes múltiplas cujos valores aproximados são 1,8954943 e -1,8954943.

2 - Fases na determinação de raízes

A determinação das raízes de uma equação envolve as fases descritas, de forma sucinta, a seguir.

Fase I – Isolamento das raízes

Nesta fase é feita a delimitação, a enumeração e a separação das raízes com o objetivo de determinar intervalos que contenham, cada um, uma única raiz.

Fase II - Refinamento

Uma vez que as raízes estão isoladas, nesta fase são utilizados métodos numéricos, com precisão pré-fixada, para calcular cada uma delas. O que diferencia os métodos é a forma como cada um efetua o refinamento. Todos eles pertencem à classe dos métodos iterativos.

2.1 – Fase I: Isolamento das raízes

Para atingir estes objetivos são utilizados procedimentos que se apóiam no seguinte teorema.

Teorema 2.1 (Cauchy-Bolzano)

Seja $y = f(x)$ uma função contínua em um intervalo $[a, b]$.

(i) Se $f(a) \times f(b) < 0$, então existe um número ímpar de raízes da equação $f(x) = 0$ no intervalo $[a, b]$. Além disso, se $f'(x)$ preservar o sinal em $[a, b]$ então a raiz ξ é única.

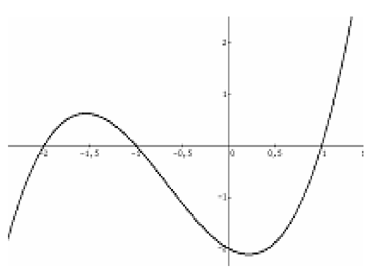

Figura 2.1.a: Número ímpar de raízes

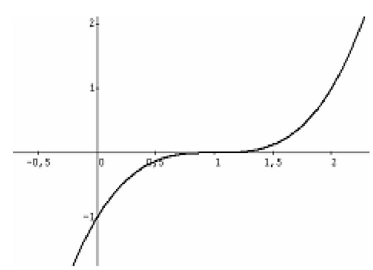

Figura 2.1.b: Raiz com multiplicidade ímpar

(ii) Se $f(a) \times f(b) > 0$ então existe um número par de raízes, ou nenhuma raiz, da equação $f(x) = 0$ no intervalo [a, b].

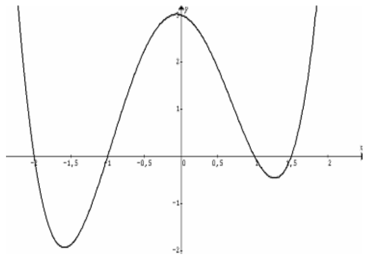

Figura 2.2.a: Número par de raízes

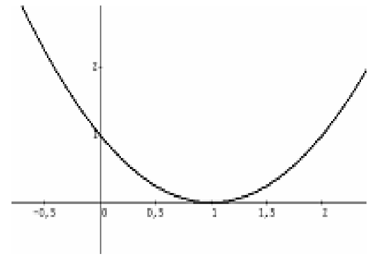

Figura 2.2.b: Raiz com multiplicidade par

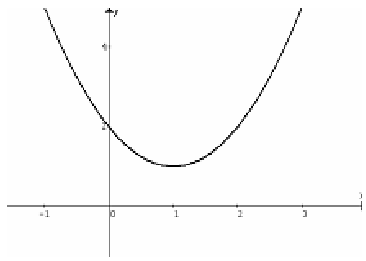

Figura 2.2.c: Não há raiz no intervalo

Com base neste resultado, pode-se concluir que uma forma de isolar as raízes é a geração de uma tabela de pontos $[x_i, f(x_i)]$, i = 1, 2, ..., n.

Exemplo – 2.1

Isole as raízes positivas da equação

$$f(x) = x^5 - 6.x^4 - 14.x^3 + 72.x^2 + 44.x - 180 = 0.$$

Sabendo-se que elas são em número de três e estão situadas no intervalo (0, 7)

Solução

Inicialmente, estabelece-se um passo h = 1 e gera-se uma tabela de pontos.

x	0	1	2	3	4	5	6	7
f(x)	-180	- 83	20	- 21	- 260	- 535	- 348	1255

Tendo em vista que $f(1) \times f(2) < 0$, $f(2) \times f(3) < 0$ e $f(6) \times f(7) < 0$ e considerando o Teorema 2.1, conclui-se que a equação dada tem uma raiz em cada um dos intervalos:

$$(1, 2), (2, 3) \text{ e } (6, 7).$$

Outra maneira de isolar as raízes de uma equação $f(x) = 0$ é fazer uma análise teórica e gráfica da função que dá origem a ela. Para a análise gráfica pode ser utilizado um dos procedimentos a seguir.

Procedimento I:

Esboçar o gráfico de y = f(x), com o objetivo de detectar intervalos que contenham, cada um, uma única raiz.

Exemplo – 2.2

Seja a equação $f(x) = x^3 - 9.x + 3 = 0$. Conforme mostra a figura 2.3, ela tem três raízes isoladas nos intervalos (-4, -3); (0, 1) e (2,3).

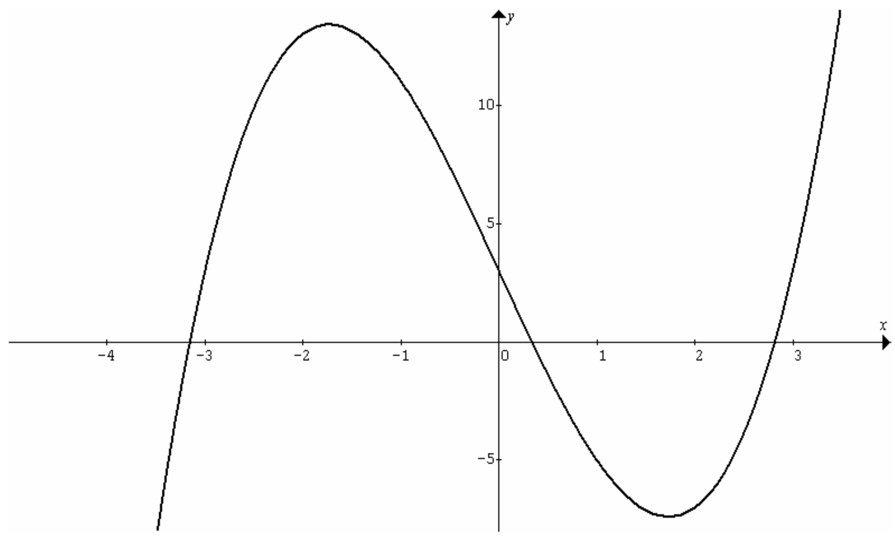

Figura 2.3: Isolamento das raízes da equação $f(x) = x^3 - 9.x + 3 = 0$

Procedimento II:

Decompor a função y = f(x), se possível, na forma equivalente f(x) = g(x) – h(x), onde os gráficos de y = g(x) e y = h(x) sejam conhecidos e mais simples. Neste caso, as abscissas dos pontos de interseção dos gráficos de y = g(x) e y = h(x) são as raízes de f(x) = 0.

Com efeito, sejam x_i os pontos de interseção dos gráficos de y = g(x) e y = h(x). Logo:

$g(x_i) = h(x_i) \Rightarrow g(x_i) - h(x_i) = 0$

Como $f(x) = (g - h)(x) = g(x) - h(x) \; \forall \; x$ então:

$g(x_i) - h(x_i) = f(x_i)$

Sendo $g(x_i) - h(x_i) = 0$ resulta que $f(x_i) = 0$, isto é, os valores x_i são as raízes de f(x) = 0.

Exemplo – 2.3

Seja a equação $f(x) = e^x + x^2 - 2 = 0$.

Solução

$f(x) = 0 \Rightarrow e^x + x^2 - 2 = 0 \Rightarrow e^x = 2 - x^2$

Assim tem-se que $g(x) = e^x$ e $h(x) = 2 - x^2$

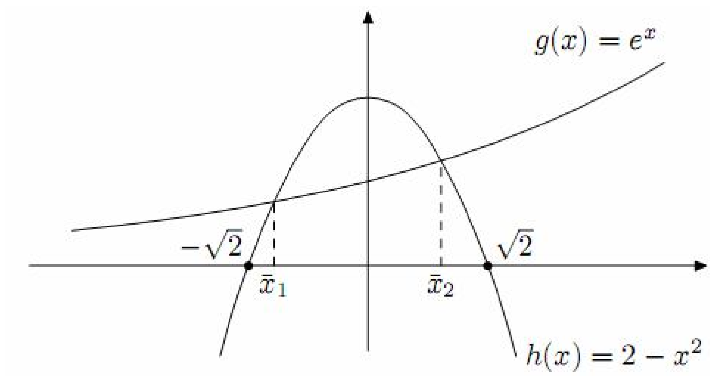

Figura 2.4: Isolamento das raízes da equação $f(x) = e^x + x^2 – 2 = 0$

Logo, conclui-se que a equação possui uma raiz em cada um dos intervalos:

$$(-\sqrt{2}, 0) \text{ e } (0, \sqrt{2})$$

É interessante considerar o fato de que existem equações transcendentes que não possuem um número finito de raízes. Este fato está ilustrado no exemplo 2.4.

Exemplo – 2.4

Seja a equação $f(x) = x.tg(x) – 1 = 0$

Solução

$f(x) = 0 \Rightarrow x.tg(x) – 1 = 0 \Rightarrow tg(x) = 1/x$

Assim, tem-se que $g(x) = tg(x)$ e $h(x) = 1/x$

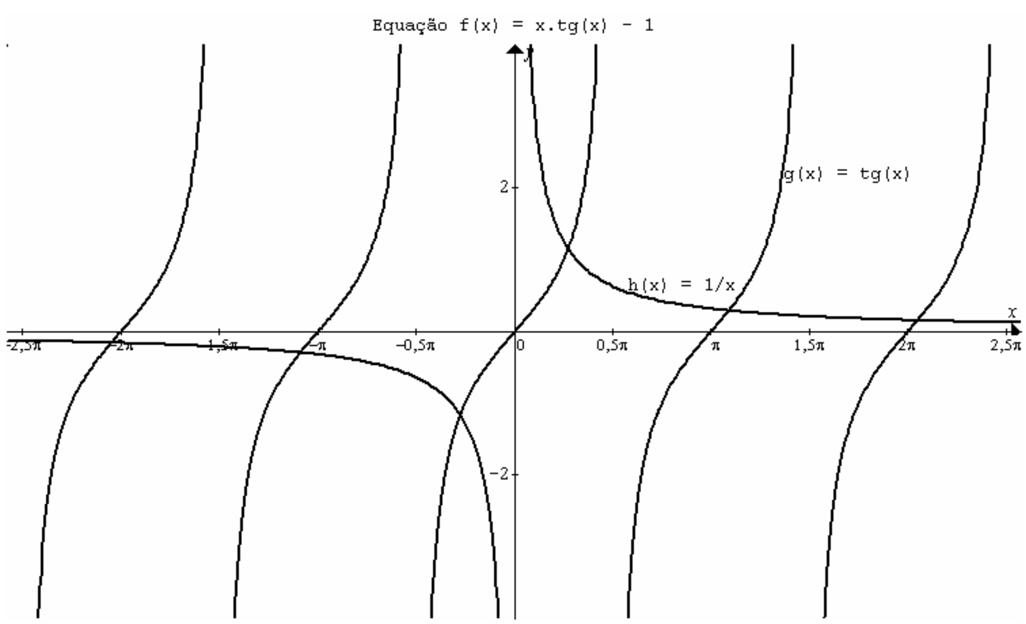

Figura 2.5: A equação possui um número infinito de raízes

Considerando a existência de vários teoremas da Álgebra que fornecem informações relevantes sobre as equações algébricas, será tratada, a seguir, de forma especial, a execução da Fase I para este tipo de equação. Posteriormente, serão apresentados métodos numéricos para o cálculo das raízes de uma equação qualquer, sendo que o objeto é o cálculo, somente, das raízes reais.

3 - Estudo Especial das Equações Polinomiais

Equações polinomiais são todas as equações que podem ser colocadas na forma:

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + ... + a_1 x + a_0 = 0(\qquad (3.1)$$

onde $a_i \in \Re \ \forall \ i = 0, 1, ... , n$.

Teorema 3.1

Uma equação polinomial de grau n tem exatamente n raízes, reais ou complexas, contando cada raiz de acordo com a sua multiplicidade.

Teorema 3.2

Se os coeficientes de uma equação polinomial forem reais, então as suas raízes complexas ocorrerão em pares conjugados.

Corolário 3.1

Uma equação polinomial de grau ímpar, com coeficientes reais, tem, no mínimo, uma raiz real.

Teorema 3.3

Toda equação polinomial de grau par, cujo termo independente é negativo, tem pelo menos uma raiz real positiva e outra negativa.

Teorema 3.4

Toda equação polinomial de grau ímpar, tem pelo menos uma raiz real com o sinal contrário ao do termo independente.

Valor numérico de um polinômio

Para avaliar um polinômio

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + ... + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 \qquad (3.2)$$

em um ponto $x = \propto$, usualmente, faz-se

$$f(\propto) = a_n\propto^n + a_{n-1}\propto^{n-1} + a_{n-2}\propto^{n-2} + ... + + a_2\propto^2 + a_1\propto + a_0$$

Desta forma, são necessárias $\frac{n.(n+1)}{2}$ multiplicações, considerando que as potenciações são feitas por meio de produtos, e n adições.

Uma forma mais eficiente de avaliar um polinômio é o **Método de Horner**, que consiste em reescrever 3.2 de modo que não sejam necessárias as potenciações, conforme é mostrado a seguir.

$$f(x) = (a_n x^{n-1} + a_{n-1}x^{n-2} + a_{n-2}x^{n-3} + ... + a_2 x + a_1).x + a_0$$
$$f(x) = ((a_n x^{n-2} + a_{n-1}x^{n-3} + a_{n-2}x^{n-4} + ... + a_2).x + a_1).x + a_0$$

Continuando com este procedimento, obtém-se

$$f(x) = \underbrace{(((...(}_{n-1}a_n.x + a_{n-1}).x + a_{n-2}).x + ... + a_2).x + a_1).x + a_0 \qquad (3.3)$$

Este método requer apenas n multiplicações e n adições para avaliar um polinômio em um dado ponto.

Exemplo 3.1

Seja avaliar o polinômio $f(x) = 3.x^5 - 2.x^4 + 5.x^3 + 7.x^2 - 3.x + 1$ no ponto x = 2 utilizando o Método de Horner.

Solução

$$f(x) = ((((3.x -2).x + 5).x + 7).x - 3).x + 1$$
$$f(2) = ((((3.2 -2).2 + 5).2 + 7).2 - 3).2 + 1 \Rightarrow f(2) = 127$$

3.1 – <u>Delimitação das raízes reais</u>

3.1.1 - Limite Superior das Raízes Positivas (LSRP)

Teorema 3.5 (Lagrange)

Seja $f(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + ... + a_1 x + a_0 = 0$ uma equação algébrica de grau n na qual $a_n > 0$ e $a_0 \neq 0$. Para limite superior das suas raízes positivas, caso existam, pode ser tomado o número:

$$L = 1 + \sqrt[n-k]{\frac{M}{a_n}} \qquad (3.4)$$

Onde k é o grau do primeiro termo negativo e M o módulo do menor coeficiente negativo.

Exemplo – 3.2

Determine o limite superior das raízes positivas da equação

$$f(x) = x^5 - 2x^4 -7x^3 + 9x^2 +8x - 6 = 0.$$

Solução

Tem-se que k = 4, M = 7. Sendo assim **L = 8**

3.1.2 - Limite Inferior das Raízes Negativas (LIRN)

(i) Toma-se a equação auxiliar $f_1(x) = f(-x) = 0$.

(ii) Aplica-se o teorema de Lagrange em $f_1(x) = 0$ para determinar L_1, que é o limite superior das suas raízes positivas.

(iii) Sendo assim, $-L_1$ é o limite inferior das raízes negativas de f(x) = 0.

Para demonstrar que a afirmativa (iii) é verdadeira, seja

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + ... + a_1 x + a_0 = 0$$

uma equação com as raízes $r_1, r_2, r_3, ..., r_n$. Portanto, escrevendo-a na forma fatorada, tem-se que

$$f(x) = a_n.(x - r_1)(x - r_2)(x - r_3) ... (x - r_n) = 0$$

Substituindo x por –x vem

$$f(-x) = a_n.(-x - r_1)(-x - r_2)(-x - r_3) ... (-x - r_n) = 0$$

que tem as raízes $-r_1, -r_2, -r_3, ..., -r_n$. Sendo algum r_i, i = 1, 2, ..., n; a maior raiz positiva de f(-x) = 0, então $-r_i$ é a menor raiz negativa de f(x) = 0.O que prova a afirmativa (iii).

Exemplo – 3.3

Determine o limite inferior das raízes negativas da equação

$$f(x) = x^5 - 2x^4 -7x^3 + 9x^2 +8x - 6 = 0.$$

<u>Solução</u>

A equação auxiliar é

$$f_1(x) = f(-x) = (-x)^5 - 2(-x)^4 -7(-x)^3 + 9(-x)^2 +8(-x) - 6 = 0$$

Portanto

$$f_1(x) = -x^5 - 2x^4 + 7x^3 + 9x^2 - 8x - 6 = 0.$$

Observe-se que, quando se substitui x por –x, em uma equação polinomial, os termos de grau ímpar mudam de sinal e os de grau par não.

De acordo com o teorema de Lagrange a_5 deve ser maior que zero. Basta, então, multiplicar $f_1(x)$ por (- 1) para obter

$$f_1(x) = x^5 + 2x^4 - 7x^3 - 9x^2 + 8x + 6 = 0.$$

Tem-se, então, que k = 3, M = 9. Assim, $L_1 = 4 \Rightarrow$ **$- L_1 = - 4$**

3.2 – Enumeração das raízes reais

3.2.1 - Regra de Sinais de Descartes

O número de raízes positivas de uma equação polinomial é igual ao número de variações de sinal na seqüência dos seus coeficientes ou é menor por um inteiro par.

Para determinar o número de raízes negativas, basta trocar x por −x e calcular o número de raízes positivas de f(−x) = 0, o qual será o número de raízes negativas de f(x) = 0.

Exemplo – 3.4

Enumere as raízes reais da equação a seguir utilizando a regra dos sinais de Descartes.

$$f(x) = x^5 - 2x^4 -7x^3 + 9x^2 +8x – 6 = 0.$$

<u>Solução</u>

→ Raízes positivas: + 1, - 2, - 7, + 9, + 8, - 6 $\Rightarrow$ **3 ou 1**

→ Raízes negativas

Tomando $f_1(x) = - x^5 - 2x^4 + 7x^3 + 9x^2 - 8x – 6 = 0$ do exemplo 4.3 tem-se que a seqüência dos coeficientes é - 1, - 2, + 7, + 9, - 8, - 6. Portanto a equação tem **2 ou nenhuma raiz negativa**

3.2.2 – Regra dos sinais de Sturm

Seqüência de Sturm

Chama-se seqüência de Sturm de uma equação polinomial f(x) = 0, o conjunto de polinômios f(x), $f_1(x)$, $f_2(x)$, $f_3(x)$, ..., $f_k(x)$.

O primeiro termo é o polinômio que origina a equação, o segundo é a sua primeira derivada, ou seja, $f_1(x) = f\,'(x)$ e, de $f_2(x)$ em diante, cada termo é o resto, com o sinal trocado, da divisão dos dois termos anteriores. O processo se encerra quando se obtém um resto constante. A seguir são relacionadas três propriedades desta seqüência.

(i) Se f(x) = 0 tem raízes múltiplas, então o último termo da seqüência é uma constante nula.

(ii) Para nenhum valor de x dois termos consecutivos da seqüência podem se anular.

(iii) Se, para algum valor de x, um termo médio da seqüência se anula, então os termos vizinhos terão valores numéricos de sinais opostos.

Seja N(α) o número de variações de sinal apresentado pela seqüência de Sturm quando cada um dos seus termos é avaliado em x = α.

Teorema 3.6 (Sturm)

O número de raízes reais de uma equação polinomial, que não possua raízes múltiplas, em um intervalo (a, b), é igual a N(a) - N(b).

Exemplo – 3.5

Enumere as raízes reais da equação a seguir utilizando a regra dos sinais de Sturm.

$$f(x) = x^5 - 2x^4 - 7x^3 + 9x^2 + 8x - 6 = 0.$$

<u>Solução</u>

O quadro a seguir apresenta a seqüência de Sturm associada à equação assim como as variações de sinais.

x →	- 4	0	8
$f(x) = x^5 - 2x^4 - 7x^3 + 9x^2 + 8x - 6$	-	-	+
$f_1(x) = 5x^4 - 8x^3 - 21x^2 + 18x + 8$	+	+	+
$f_2(x) = 3{,}4x^3 - 3{,}7x^2 - 7{,}8x + 5{,}4$	-	+	+
$f_3(x) = 12{,}4x^2 - 4{,}3x - 12$	+	-	+
$f_4(x) = 5{,}4x - 2{,}9$	-	-	+
$f_5(x) = 10{,}7$	+	+	+
N(x) →	**5**	**3**	**0**

Número de raízes negativas → N(- 4) – N(0) = 5 - 3 = **2**

Número de raízes positivas → N(0) – N(8) = 3 – 0 = **3**

A exigência de que a equação não tenha raízes múltiplas não é tão restritiva, uma vez que, se esta condição não é satisfeita, e então a seqüência termina quando se obtém um resto nulo, o penúltimo termo origina uma equação que tem as raízes múltiplas. Dividindo-se a equação dada por este termo, o quociente será uma equação que possui somente raízes simples. A ela aplica-se o Teorema de Sturm.

Exemplo

A equação $f(x) = x^5 - 11x^4 + 34x^3 + 8x^2 -160x + 128 = 0$ tem as raízes -2, 1, 4, 4, 4. A seqüência de Sturm a ela associada é:

$$f(x) = x^5 - 11x^4 + 34x^3 + 8x^2 -160x + 128$$
$$f_1(x) = 5x^4 - 44x^3 + 102x^2 + 16x - 160$$
$$f_2(x) = 5{,}76x^3 – 49{,}68x^2 + 120{,}96x – 57{,}60$$
$$f_3(x) = 10{,}546875x^2 – 84{,}375x + 168{,}75$$
$$f_4(x) = 0$$

A equação $f_3(x) = 0$ tem as raízes 4 e 4. Dividindo a equação dada por ela, obtém-se a equação

$$f_5(x) = 0.0948148x^3 - 0.2844444x^2 - 0.5688889x + 0.7585185 = 0$$

que tem somente as raízes simples -2,1 e 4.

4 – Fase II: Refinamento - Métodos numéricos para o cálculo de raízes

4.1 - Método da Bisseção

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

A idéia do Método da Bisseção é reduzir o intervalo [a, b] que contém a raiz ξ dividindo-o, de forma sucessiva, ao meio.

Para verificar se a raiz está contida na primeira ou na segunda metade do intervalo inicial, é utilizado o teorema de Bolzano. Em seguida, o processo é repetido para aquela metade que contém a raiz de $f(x) = 0$, ou seja, aquela em que a função, $y = f(x)$, tem valores numéricos com sinais opostos nos seus extremos. A figura 4.1 ilustra o processo.

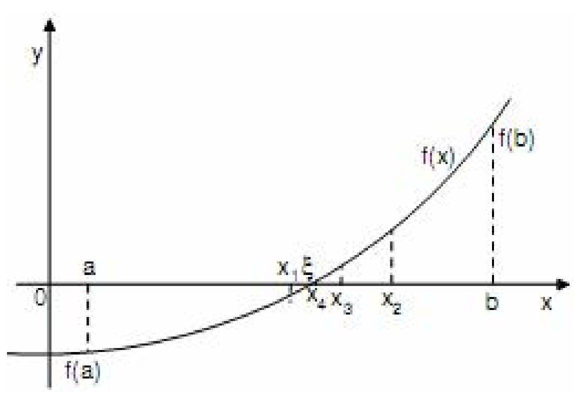

Figura 4.1: Método da Bisseção

4.1.1 - Critério de parada

O processo iterativo é finalizado quando se obtém um intervalo cujo tamanho é menor ou igual a uma precisão pré-estabelecida e, então, qualquer ponto nele contido pode ser tomado como uma estimativa para a raiz; ou quando for atingido um número máximo de iterações previamente estabelecido.

4.1.2 - Critério de convergência

Se $y = f(x)$ for contínua em $[a, b]$ e $f(a).f(b) < 0$, então o método da Bisseção gera uma seqüência que converge para uma raiz de $f(x) = 0$.

4.1.3 - Estimativa do número de iterações

O método da Bisseção permite que seja estimado, a *priori*, o número mínimo de iterações para calcular uma raiz ξ com uma precisão ε a partir de um intervalo $[a, b]$.
As iterações geram uma seqüência de intervalos encaixados da forma

$$\{[a, b], [a_1, b_1], [a_2, b_2], [a_3, b_3], ..., [a_k, b_k]\}$$

Considerando que cada intervalo gerado, tem amplitude igual à metade da do intervalo anterior, tem-se que:

$$b_1 - a_1 = \frac{b - a}{2^1}\ ,\ b_2 - a_2 = \frac{b_1 - a_1}{2}\ , \text{ logo } b_2 - a_2 = \frac{b - a}{2^2}$$

$$b_3 - a_3 = \frac{b_2 - a_2}{2}, \text{ então } b_3 - a_3 = \frac{b - a}{2^3}$$

Tendo em vista estes resultados, chega-se a $b_k - a_k = \frac{b - a}{2^k}$. Como se deseja obter k tal que $b_k - a_k \leq \varepsilon$, então:

$$\frac{b - a}{2^k} \leq \varepsilon \Rightarrow k \geq \frac{\log(b - a) - \log(\varepsilon)}{\log(2)} \qquad (4.1)$$

Portanto, se k satisfaz a relação (4.1), ao final da iteração k, será obtido um intervalo $[a, b]$, que contém a raiz ξ, tal que $\forall\ x \in [a, b] \Rightarrow |x - \xi| \leq b - a \leq \varepsilon$.

Exemplo 4.1

Dada a equação $f(x) = x^5 - 2x^4 - 7x^3 + 9x^2 + 8x - 6 = 0$, pede-se:

(a) Isole as suas raízes reais.

(b) Considere o intervalo que contém a menor raiz positiva e estime o número de iterações, k, necessário para calculá-la utilizando o método da bisseção com precisão 0,040.

(c) Utilizando o método da bisseção, calcule a sua menor raiz positiva com precisão 0,040 e um máximo de (k + 1) iterações.

Solução

No exemplo 3.2 foi determinado que todas as possíveis raízes positivas desta equação estão no intervalo (0, 8). No exemplo 3.3 foi constatado que as possíveis raízes negativas estão no intervalo (- 4, 0). No exemplo 3.5 foi verificado que esta equação tem duas raízes negativas e três positivas.

a) Isolamento das raízes reais

Raízes negativas

x	- 4	- 3	- 2	- 1	0
f(x)	- 982	- 165	6	- 1	- 6

Raízes positivas

x	0	1	2	3	4	5	6	7	8
f(x)	- 6	3	- 10	- 9	234	1.259	4.038	10.095	21.626

Verifica-se, então, que cada intervalo, a seguir, contém uma raiz: (-3, -2), (-2, -1), (0, 1), (1, 2) e (3, 4).

b) Estimativa do número de iterações necessário para calcular a menor raiz positiva utilizando o método da Bisseção com precisão 0,040.

$$k \geq \frac{\log(1-0) - \log(0{,}040)}{\log(2)} \Rightarrow K \geq 4{,}6 \Rightarrow \mathbf{k = 5}$$

c) Cálculo da menor raiz positiva

i	x_i	$f(x_i)$	b - a	
	0,000	- 6,000	------------	
	1,000	3,000	1,000	
01	0,500	- 0,719	0,500	⇒ a raiz está no intervalo [0,5; 1]
02	0,750	1,714	O,250	⇒ a raiz está no intervalo [0,5; 0,75]
03	0,625	0,597	0,125	⇒ a raiz está no intervalo [0,5; 0,625]
04	0,563	- 0,042	0,062	⇒ a raiz está no intervalo [0,563; 0,625]
05	0,594	0,283	0,031	⇒ a raiz está no intervalo [0,563; 0,594]

Para a precisão estabelecida, qualquer ponto do intervalo [0,563; 0,594] pode ser tomado como a menor raiz positiva da equação.

Exemplo 4.2

A figura a 4.2.a mostra um recipiente na forma de um cilindro circular reto que deve ser construído para conter $1000cm^3$. O fundo e a tampa, conforme é mostrado na figura 4.2.a, devem ter um raio 0,25cm maior que o raio do cilindro, de modo que o excesso possa ser utilizado para formar um lacre com a lateral. A chapa do material usado para confeccionar a lateral do recipiente, como apresentado na figura 4.2.b, deve ser, também, 0,25cm maior para que o lacre possa ser formado.

Utilize o método da Bisseção, com precisão 0.040 e um máximo de 10 iterações, para determinar a quantidade mínima de material a ser utilizada para construir o recipiente.

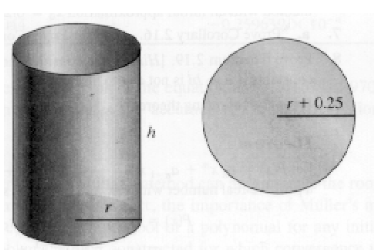

Figura 4.2.a

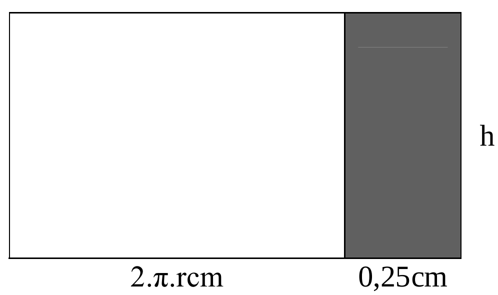

Figura 4.2.b

<u>Modelagem da resolução</u>

Sabe-se que o volume de um cilindro é dado por $V = \pi r^2 h$, no caso deste problema tem-se, então, que

$$V = \pi.r^2.h = 1000 \Rightarrow h = \frac{1000}{\pi.r^2} \tag{4.2}$$

A área total do recipiente é dada pela soma da área lateral com as da tampa e fundo, sendo assim

$$A_{total} = 2\pi.r.h + 0{,}25h + 2\pi(r + 0.25)^2 \tag{4.3}$$

Substituindo (4.2) em (4.3)

$$A_{total} = (2\pi.r + 0,25).\left(\frac{1000}{\pi.r^2}\right) + 2\pi.r^2 + \pi.r + 0.125\pi \qquad (4.4)$$

Desenvolvendo (4.4) tem-se

$$A_{total} = \frac{2000}{r} + \frac{250}{\pi.r^2} + 2\pi.r^2 + \pi.r + 0.125\pi = f(r) \qquad (4.5)$$

Para determinar a quantidade mínima de material a ser utilizada, basta calcular o valor de r para o qual a área total é mínima. Derivando (4.5), em relação a r, tem-se:

$$f'(r) = -\frac{2000}{r^2} - \frac{500}{\pi.r^3} + 4\pi.r + \pi \qquad (4.6)$$

Multiplicando 4.6 por r^3 (uma vez que $r \neq 0$) e igualando a zero, é obtida a equação polinomial:

$$f'(r) = 4\pi.r^4 + \pi.r^3 - 2000.r - \frac{500}{\pi} = 0 \qquad (4.7)$$

Que resolvida dá o valor de r para o qual a área é mínima.

<u>Solução</u>

Considerando 3 casas decimais, tem-se, a partir de 4.7, a seguinte equação a resolver:

$$f'(r) = 12,566.r^4 + 3,142.r^3 - 2000.r - 159,160 = 0 \qquad (4.8)$$

<u>Limite superior positivo</u>

Seja, então, a determinação do limite superior positivo utilizando o Teorema de Lagrange.

$$L = 1 + \sqrt[n-k]{\frac{M}{a_n}}$$

Tem-se que n = 4, a_4 = 12,566, k = 1, M = 2000. Portanto L = 6,4. Toma-se, então, **L = 7**

<u>Enumeração das raízes positivas</u>

Utilizando a regra dos sinais de Descartes, verifica-se que 4.8 possui somente uma raiz positiva, o que era de se esperar tendo em vista a natureza do problema.

Utilizando o Teorema de Cauchy-Bolzano, verifica-se, por meio da tabela de pontos a seguir, que a raiz está no intervalo (5; 6).

r	0	1	2	3	4	5	6
f(r)	-159,16	-2.143,45	-3.932,92	-5.056,21	- 4.740,28	-1.910,41	4.809,8

<u>Cálculo da raiz</u>

i	x_i	$f(x_i)$	b - a	
	5,000	-1.910,410		
	6,000	4.809,800	1,000	
1	5,500	862,266	0,500	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [5; 5,5]
2	5,250	- 658,221	0,250	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [5,25; 5,5]
3	5,375	67,193	0,125	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [5,25; 5,375]
4	5,313	- 304,,022	0,062	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [5,313; 5,375]
5	5,344	- 227,228	0.031	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [5,344; 5,375]

Para a precisão estabelecida, qualquer ponto do intervalo [5,344; 5.375] pode ser tomado como uma estimativa para a raiz.

Tomando r = 5,375cm obtém-se $\mathbf{A_{total} = 573{,}651cm^2}$. Observe-se que r = 5,375cm é abscissa de ponto de mínimo de 4.5, uma vez que

$$f''(r) = 50{,}264.r^3 + 9{,}426.r^2 - 2000$$

é maior que zero no intervalo [5,344; 5.375].

Exemplo 4.3

A concentração, c, de uma bactéria poluente em um lago é descrita por

$$c = 70.e^{-1{,}5.t} + 2{,}5.e^{-0{,}075.t}$$

Utilize o Método da Bisseção, com precisão 0,050 e um máximo de 5 iterações, para estimar o tempo t, em segundos, para que esta concentração seja reduzida para 9.

<u>Solução</u>

O problema consiste em determinar o tempo, t, para o qual

$$c = 70.e^{-1{,}5.t} + 2{,}5.e^{-0{,}075.t} = 9$$

Para isto deve ser resolvida a equação

$$f(t) = 70.e^{-1,5.t} + 2,5.e^{-0,075.t} - 9 = 0 \qquad (4.9)$$

A figura 4.3 apresenta o gráfico da função que dá origem à equação 4.9. Como pode ser observado há uma única raiz situada no intervalo (1,5; 2) segundos.

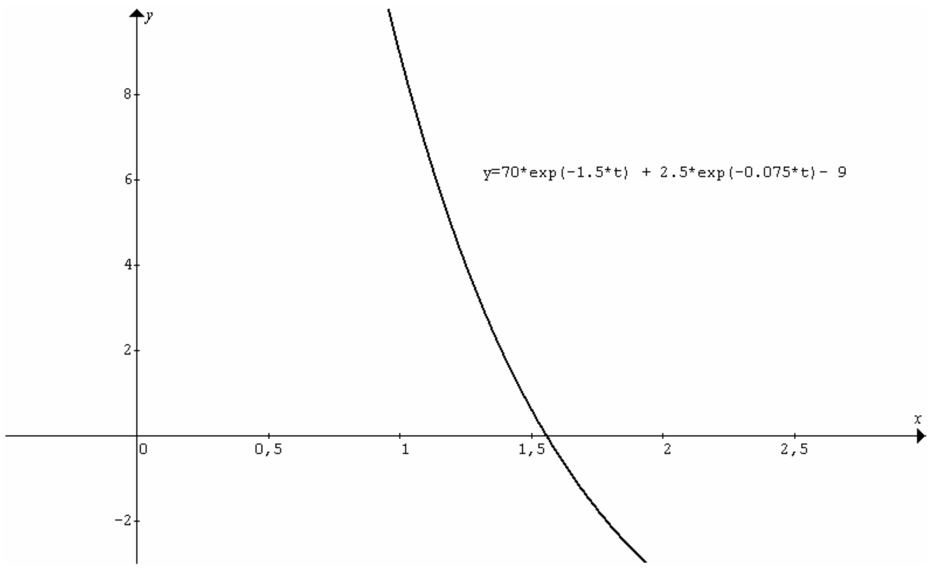

Figura 4.3: Gráfico da função que origina 4.2.8

Aplicando o método da Bisseção são obtidos os resultados apresentados a seguir.

i	x_i	$f(x_i)$	b - a	
	1,500	0,612		
	2,000	-3,363	0,500	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [5; 5,5]
1	1,750	-1,737	0,250	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [1,5; 1,75]
2	1,625	-0,670	0,125	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [1,5; 1,625]
3	1,563	-0,059	0,063	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [1,5; 1,563]
4	1,531	0,269	0,032	$\Rightarrow$ a raiz está no intervalo [1,531; 1,563]

Para a precisão estabelecida, qualquer valor do intervalo [1.531 1.563] pode ser tomado como uma estimativa para o tempo.

4.1.4 - Considerações finais

(i) O método exige pouco esforço computacional.

(ii) O método sempre gera uma sequência convergente.

(iii) A convergência é lenta. Notadamente se o intervalo inicial tiver um tamanho, b – a, muito maior que uma precisão, ε. Neste caso, um número de iterações tende ser muito grande. Como exemplo, considere-se que:

$$b - a = 2,\ \varepsilon = 10^{-6} \Rightarrow k = 20{,}9 \Rightarrow k = 21$$

4.2 - <u>Método da Falsa Posição</u>

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

O Método da Falsa Posição consiste em dividir, de forma sucessiva, o intervalo [a, b] no ponto em que a reta que passa por [a, f(a),] e [b, f(b)] intercepta o eixo das abscissas. A figura 4.4 ilustra o processo.

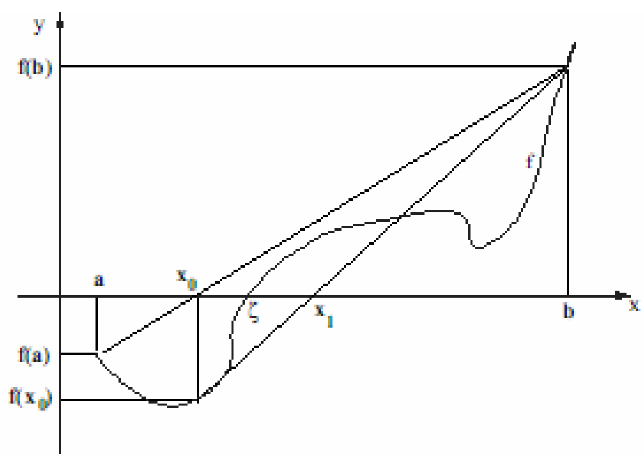

Figura 4.4: Método da Falsa Posição

Em cada iteração é utilizado o Teorema de Bolzano para localizar o intervalo que contém a raiz.

4.2.1 - Critério de parada

O processo iterativo é finalizado quando se obtém x_i, i = 0, 1, 2, ...; tal que $|f(x_i)|$ seja menor ou igual a uma precisão pré-estabelecida e, então, x_i é tomado como uma estimativa para a raiz; ou quando for atingido um número máximo de iterações previamente estabelecido.

4.2.2 - Critério de convergência

Se y = f(x) for contínua em [a, b] e f(a).f(b) < 0, então o método da Falsa Posição gera uma seqüência que converge para a raiz.

4.2.3 – Função de iteração

Para determinar a função de iteração, basta considerar que a equação da reta que passa pelos pontos [a, f(a)] e [b, f(b)] é obtida resolvendo-se o seguinte determinante:

$$\begin{vmatrix} x & f(x) & 1 \\ a & f(a) & 1 \\ b & f(b) & 1 \end{vmatrix} = 0$$

Cujo resultado é:

$$x.f(a) + b.f(x) + a.f(b) - b.f(a) - a.f(x) - x.f(b) = 0 \tag{4.10}$$

Em cada iteração é gerado um ponto $[x_i, f(x_i)]$, i = 1, 2, ...; que pertence a (4.10), tal que $f(x_i) = 0$. Sendo assim, de (4.10) vem:

$$x_i.f(a) + b.f(x_i) + a.f(b) - b.f(a) - a.f(x_i) - x_i.f(b) = 0$$
$$x_i.f(a) + a.f(b) - b.f(a) - x_i.f(b) = 0$$
$$x_i.[- f(b) + f(a)] + a.f(b) - b.f(a) = 0$$

Sendo assim:

$$x_i = \frac{- a.f(b) + b.f(a)}{- f(b) + f(a)}$$

Multiplicando o numerador e o denominador por (- 1) obtém-se a função de iteração do método:

$$x_i = \frac{a.f(b) - b.f(a)}{f(b) - f(a)} \quad , i = 1, 2, ... \tag{4.11}$$

Observe-se que o Método da Falsa Posição procura gerar, em cada iteração, uma aproximação, x_i, i = 0, 1, ...; para a raiz ξ cuja imagem seja a menor possível, isto é, uma aproximação tal que $|f(x_i)| \leq \varepsilon$, sem se preocupar com a diminuição da amplitude, (b − a), do intervalo [a, b] que contém a raiz.

No caso do Método da Bisseção, em cada iteração é feita a média aritmética dos extremos *a* e *b*. Por outro lado, o Método da Falsa Posição parte do princípio de que a raiz deve estar mais próxima do ponto que apresenta o menor valor da função, sendo assim, ao invés de fazer a média aritmética entre *a* e *b*, faz a média aritmética ponderada entre ambos, conforme pode ser observado em (4.11).

Exemplo 4.3

Calcule uma raiz da equação $f(x) = x^4 - 14x^2 + 24x - 10 = 0$ usando o método da falsa posição com precisão 0,006 e um máximo de 5 iterações.

a) Limites das raízes reais (Teorema de Lagrange)

a.1) Limite superior positivo → k = 2, M = 14 → L = 4,7 $\Rightarrow$ L = 5

a.2) Limite inferior negativo → k = 2, M = 24 → $L_1 = 5,9$ $\Rightarrow$ $-L_1 = -6$

b) Enumeração das raízes reais

b.1) Regra dos sinais de Descartes

→ Raízes positivas: + 1, - 14, + 24, - 10 $\Rightarrow$ **3 ou 1**

→ Raízes negativas: + 1, - 14, - 24, - 10 $\Rightarrow$ **1 raiz**

b.2) Teorema de Sturm – Enumeração das raízes positivas

x →	0	5
$f(x) = x^4 - 14x^2 + 24x - 10$	-	+
$f_1(x) = 4x^3 - 28x + 24$	+	+
$f_2(x) = 7x^2 - 18x + 10$	+	+
$f_3(x) = 7,2x - 9,3$	-	+
$f_4(x) = 1,5$	+	+
N(x) →	**3**	**0**

Número de raízes positivas → N(0) – N(5) = 3 – 0 = **3**

c) Separação das raízes positivas

x	f(x)
0	- 10
0,5	- 1,438
1	1
1,5	- 0,438
2	- 2
2,5	1,563
3	17

Há uma raiz em cada um dos seguintes intervalos:

(0,5; 1); (1; 1,5) e (2; 2,5)

d) Cálculo da maior raiz positiva

i	a	b	f(a)	f(b)	x_i	$f(x_i)$
01	2	2,5	- 2	1,563	2,281	- 1,029
02	2,281	2,5	- 1,029	1,563	2,368	- 0,231
03	2,368	2,5	- 0,231	1,563	2,385	- 0,041
04	2,385	2,5	- 0,041	1,563	2,388	- 0,005

Para a precisão estabelecida, $x_4 = 2,388$ é uma estimativa para a maior raiz positiva da equação.

4.2.3 - Considerações finais

A grande vantagem do Método da Falsa Posição é que ele é uma técnica robusta, que converge independentemente da forma do gráfico de y = f(x) no intervalo [a, b].

Entretanto, quando a convergência para a raiz só se faz a partir de um extremo do intervalo [a, b] e a imagem desse ponto fixo tem um valor muito elevado, a convergência é lenta. Este fato pode ser verificado analisando-se mais cuidadosamente a expressão (4.11).

Admita-se que o ponto fixo seja b. Para mostrar a parcela de acréscimo dado ao extremo esquerdo a, que nesta situação é variável, adicione-se e subtraia-se a parcela a × f(a) no numerador da expressão (4.11), donde vem que:

$$x = \frac{a.f(b) - b.f(a) - a.f(a) + a.f(a)}{f(b) - f(a)} = \frac{a.[f(b) - f(a)] - (b - a).f(a)}{f(b) - f(a)}$$

Assim:

$$x = a - \frac{f(a)}{f(b) - f(a)}(b - a) \qquad (4.12)$$

Sendo, por hipótese, b fixo e f(b) elevado, a expressão $-\frac{f(a)}{f(b) - f(a)}(b - a)$, que representa o acréscimo, terá um valor pequeno, acarretando convergência tão mais lenta quanto maior for o valor de f(b).

Quando se considera a como ponto fixo tem-se

$$x = b - \frac{f(b)}{f(b) - f(a)}(b - a) \qquad (4.13)$$

Que é obtido somando e subtraindo a parcela b x f(b) no numerador de (4.11).

Uma forma de evitar que um extremo fique fixo durante o processo iterativo (situação que ocorre quando $f(x_k) \times f(x_{k-1}) > 0$), é substituir a reta que passa pelos pontos [a, f(a)] e [b, f(b)] por uma de inclinação menor. Por exemplo, se em duas iterações consecutivas o extremo b ficar fixo, substitui-se f(b) por f(b)/2.

4.3 - Método de Newton-Raphson

Seja y = f(x) uma função contínua em um intervalo [a, b] tal que:

(i) a equação f(x) = 0 tem uma, e só uma, raiz em [a, b],portanto $f(a) \times f(b) < 0$;

(ii) f ´(x) e f ´´(x) preservam o sinal e não se anulam em [a, b]

O Método de Newton-Raphson consiste em:

(a) atribuir uma estimativa inicial x_0 □ [a, b] para uma raiz de f(x) = 0;

(b) gerar uma sequência de estimativas, $x_1, x_2, ..., x_{k-1}, x_k, ...$; onde cada ponto é determinado como sendo a interseção da reta tangente a y = f(x), em $[x_{k-1}, f(x_{k-1})]$, com o eixo das abscissas.A figura (4.5) ilustra o procedimento.

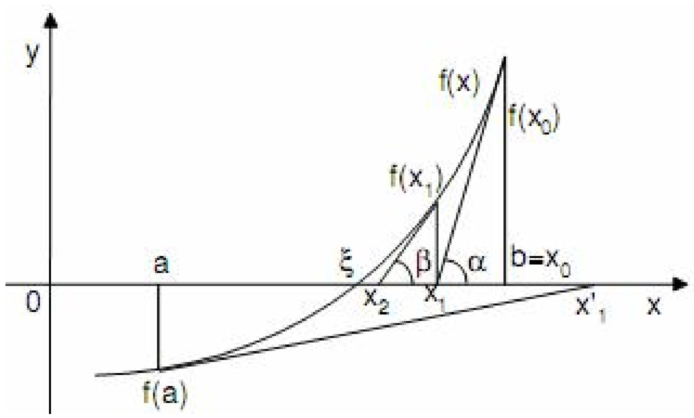

Figura 4.5: Método de Newton-Raphson

Da figura 4.5 obtém-se que

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

De onde resulta

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

Logo, tem-se que

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} \quad \forall\ k = 1, 2, 3, ... \tag{4.14}$$

4.3.1 - Critério de parada

O processo iterativo é finalizado quando é obtido x_k, k = 1, 2, ...; tal que $|x_k - x_{k-1}|$ ou $|f(x_k)|$ é menor ou igual a uma precisão estabelecida e, então, x_k é tomado como uma estimativa para a raiz; ou quando for atingido um número máximo de iterações estabelecido.

4.3.2 - Critério de convergência

Se $f(a) \times f(b) < 0$, $f'(x)$ e $f''(x)$ são não nulas e preservam o sinal em [a, b] e $x_0 \in [a, b]$ é tal que $f(x_0) \times f''(x_0) > 0$, então o Método de Newton-Raphson, gera uma seqüência de aproximações x_k, k = 1, 2, ...; que converge para uma raiz de f(x) = 0.

Em geral, afirma-se que o método gera uma série convergente desde que x_0 seja escolhido "suficientemente próximo" da raiz. Para tanto, é necessário que o intervalo [a, b] considerado seja suficientemente pequeno, o que contribui para diminuir a possibilidade de variação de sinal de f '(x) e f ''(x).

Exemplo 4.5

Um objeto de massa m é solto de uma altura S_0, em relação ao solo. Após t segundos a sua altura é dada pela expressão

$$S(t) = S_0 - \frac{m.g}{k}.t + \frac{m^2.g}{k^2}\left(1 - e^{-k.t/m}\right) \tag{4.15}$$

Onde k é o coeficiente de resistência do ar e g a aceleração da gravidade.

Sendo m = 1kg, S_0 = 30m, k = 0,5kg/s e g = 9,8m/s^2, estime o tempo que o objeto leva para chegar ao solo utilizando o método de Newton-Raphson, com precisão 0,001 e um máximo de 5 iterações.

<u>Solução</u>

Resolver este problema consiste em determinar o tempo **t** para o qual **S(t) = 0**.

Efetuando as substituições em (4.15) tem-se a equação

$$S(t) = 30 - \frac{9,8}{0,5}.t + \frac{9,8}{0,5^2}\left(1 - e^{-0,5.t}\right) \tag{4.16}$$

Simplificando (4.16) é obtida a equação que deve ser resolvida

$$S(t) = 69,2 - 19,6t - 39,2e^{-0,5.t} = 0 \tag{4.17}$$

Sejam as funções

$$g(t) = 69,2 - 19,6.t \text{ e } h(t) = 39,2.e^{-0,5.t}$$

A figura 4.6 apresenta os gráficos destas duas funções. Como pode ser observado, a equação 4.17 possui duas raízes, sendo que, para o problema, a raiz negativa não tem sentido.

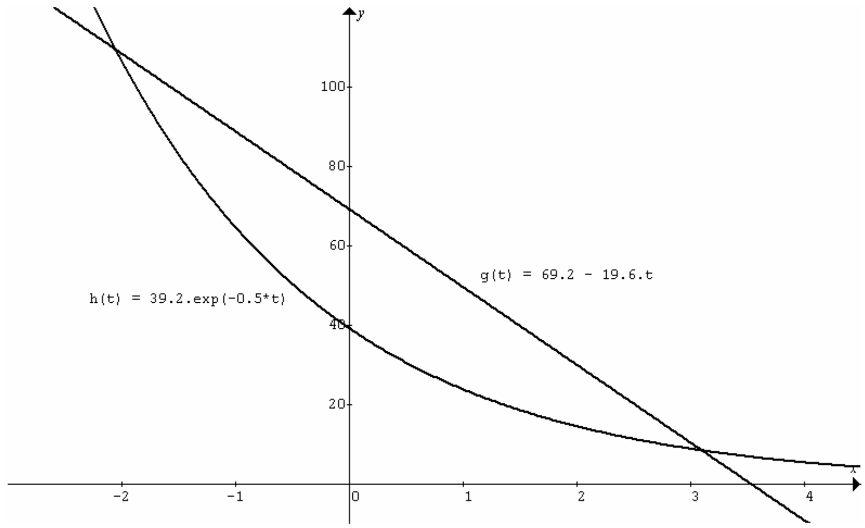

Figura 4.6: As funções y = g(x) e y = h(x)

Observando a figura 4.6, verifica-se que a raiz que interessa está intervalo (3, 4). De fato,

$$S(3) = 1{,}653 \text{ e } S(4) = -14{,}505.$$

Para este problema, o método de Newton-Raphson assume a forma:

$$t_i = t_{i-1} - \frac{S(t_{i-1})}{S'(t_{i-1})} \tag{4.10}$$

Sendo

$$S'(t) = 19{,}6.(e^{-0{,}5.t} - 1) \tag{4.11}$$

e

$$S''(t) = -9{,}8.e^{-0{,}5.t} \tag{4.12}$$

Verifica-se que 4.12 é menor que zero qualquer que seja o valor de t, então, considerando o critério de convergência, toma-se $t_0 = 4$. Os resultados obtidos estão apresentados no quadro a seguir.

i	t_i	$S(t_i)$	$S'(t_i)$	$\lvert t_i - t_{i-1} \rvert$
0	4,000	- 14,505	- 16,947	--------
1	3,144	- 0,561	- 15,530	0,856
2	3,108	- 0,004	- 15,457	0,036
3	3,108			0,000

Para a precisão estabelecida, **t ≅ 3,108s** é uma estimativa para o tempo que o objeto leva para chegar ao solo.

Exemplo 4.6

Utilize o método de Newton – Raphson, com precisão 0,001 e um máximo de 5 iterações, para calcular a raiz negativa da equação $f(x) = x^4 - 14.x^2 + 24.x - 10 = 0$.

<u>Solução</u>

No exemplo (4.4) foi determinado que a única raiz negativa desta equação está no intervalo (- 6, 0).

<u>Aplicação do método da Bisseção para diminuir o tamanho do intervalo</u>

i	x_i	$f(x_i)$	b - a
	- 6	638	
	0	- 10	6
1	- 3	- 127	3 ⇒ a raiz está no intervalo [- 6; -3]
2	- 4,5	8,563	1,5 ⇒ a raiz está no intervalo [- 4,5; - 3]
3	- 3,375	- 99,121	0,75 ⇒ a raiz está no intervalo [- 4,5; - 3,75]

Seja , então o intervalo [- 4,5; - 3,75].

<u>Escolha de x_0</u>

Tem-se que:

$$f'(x) = 4.x^3 - 28.x + 24.$$

$$f''(x) = 12.x^2 - 28 > 0 \;\; \forall x \in [-4,5; -3,75]$$

Portanto, considerando o critério de convergência, $x_0 = -4,5$.

Uma desvantagem do método de Newton – Raphson é a necessidade de se obter a primeira derivada da função que dá origem à equação, bem como calcular o seu valor numérico em um ponto a cada iteração.

Uma das maneiras de modificar o método, de modo a eliminar esta necessidade, consiste em substituir a derivada pela aproximação:

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

O método de Newton – Raphson, quando modificado desta maneira, é conhecido como **Método das Secantes**. Para isto, é necessário atribuir um valor pequeno para h. Seja, então, $h = 10^{-6}$.

Note-se que:

$$f(x + h) = (x + h)^4 - 14.(x + h)^2 + 24.(x + h) - 10$$

$$f(x + 10^{-6}) = (x + 10^{-6})^4 - 14.(x + 10^{-6})^2 + 24.(x + 10^{-6}) - 10$$

Os resultados obtidos estão sumarizados no quadro a seguir.

k	x_i	$f(x_i)$	$f\,'(x_i)$	$\lvert x_i - x_{i-1}\rvert$
0	- 4,5	8,563	- 214,500	------------
1	- 4,460	0,153	- 205,986	0,040
2	- 4,459	------------	------------	0,001

Para a precisão estabelecida, x_2 = - 4,459 é uma estimativa para a raiz.

4.3.3 – Considerações finais

O Método de Newton-Raphson tem convergência muito boa (quadrática) o que, por conseqüência, proporciona um número pequeno de iterações. Entretanto, apresenta as seguintes desvantagens:

(i) Exige a análise do sinal de $f\,'(x)$ e $f\,''(x)$.

(ii) Exige o cálculo do valor da primeira derivada em cada iteração.

(iii) Se $f\,'(x_{k-1})$ for muito elevado a convergência será lenta

(iv) Se $f\,'(x_{k-1})$ for próximo de zero pode ocorrer overflow

Para contornar o item (i), que é necessário para a escolha da estimativa inicial, é comum calcular somente o valor da função e o da sua segunda derivada nos extremos a e b, tomando como x_0 o aquele que satisfizer a condição $f(x_0) \times f\,''(x_0) > 0$.