

RESOLUÇÃO DE EQUAÇÕES - Uma metodologia de estudo

Tiarajú Asmuz Diverio
Instituto de Informática PUC RS
Cx.P.1429 90620 P Alegre RS

Resumo:

Neste trabalho é proposto uma metodologia para o estudo de métodos de equações algébricas e transcendentais, através de fichas Instrucionais de Métodos, a qual conteria todas as informações necessárias sobre aplicabilidade, convergência, eficiência, descrição, casos patológicos e informações sobre implementações.

INTRODUÇÃO

Em muitos livros de cálculo numérico e análise numérica, encontram-se diversos métodos de resolução de equações. O tempo vem e vai e surgem novos livros de cálculo numérico, apresentando métodos "novos", sendo que alguns, na realidade estão sendo redescobertos. Vê-se, também, a falta de metodologia e de organização nesta área, pois não se tem catálogo, ou lista de métodos existentes, com uma quantidade significativa de informações sobre cada método.

Neste trabalho é proposta uma ficha Instrucional de caracterização dos métodos de resolução de equações algébricas e transcendentais, com a qual se pretende estabelecer uma abordagem, uma filosofia de estudo de métodos. É apresentado um exemplo de ficha instrucional para o método de Newton-Raphson.

A FICHA INSTRUCIONAL

A ficha instrucional é composta de vários itens que, no seu conjunto, constituem todas as informações necessárias para as pessoas que queiram utilizar os métodos de resolução de equações, quer com ênfase da análise numérica, ou com ênfase prática de utilização do método, ou queiram implementar alguns métodos, ou ainda, fazer considerações de caráter computacional.

Os itens que constituem a ficha instrucional de um método são: nome, classificação, objetivo, uma descrição, a interpretação geométrica, limitações e restrições do método, o erro no método, a ordem de convergência, os índices de eficiência, o algoritmo, implementações existentes, a listagem do programa, mensagens de erro, dados de entrada e saída, exemplos, bibliografias e observações.

Nome do método

O nome do método como é mais conhecido na bibliografia.

Classificação

Quanto a natureza, os métodos podem ser:

a) Métodos de Quebra, que são métodos onde a idéia básica consiste de, a partir de um intervalo fechado $I=[a,b]$, que contenha uma raiz da função $f(x)$ (contínua no intervalo), determinar um ponto x_i que "quebre" o intervalo, de modo que a raiz pertença a um dos subintervalos formados;

b) Métodos Iterativos, eles envolvem o conceito de iteração (aproximação sucessiva), que é um dos conceitos mais importantes usados em métodos numéricos para resolução de diversos problemas matemáticos. Em um método iterativo partimos de um valor inicial x_0 , e construímos uma seqüência de aproximações gradualmente precisas, até que se satisfaça algum critério de parada. Se existe convergência, existe limite de seqüência, que será a raiz da equação, no caso de resolução de equações. Um passo do método iterativo pode calcular novo valor para um ou mais pontos, reusando ou não informações anteriores, com o que se pode classificar os métodos iterativos em unipontuais ou multipontuais, podendo ambos ser com ou sem memória.

		(COM MEMÓRIA
	(UNIPONTUAL	(
	(	(SEM MEMÓRIA
	(	
MÉTODOS	(	
ITERATIVOS	(	
	(	(COM MEMÓRIA
	(MULTIPONTUAL	(
	(	(SEM MEMÓRIA

Fig. 1 Classificação dos métodos iterativos

c) Métodos intervalares são métodos que, em vez de determinar seqüência de números, determinam seqüência de intervalos que convergem para a solução. Para isso, tem-se que ter toda aritmética intervalar;

d) Métodos híbridos. Um método híbrido consiste em combinar mais de um método para a determinação de uma raiz. Eles podem ser combinados, ou aplicados isoladamente.

Objetivo

Uma descrição da utilidade do método; em que casos é aconselhável o uso, como o cálculo de raízes reais de um polinômio, ou cálculo de raízes complexas, ou para raízes múltiplas de um polinômio, ou ainda, para o cálculo de raízes reais de equações transcendentais. Isto serve para orientação de um usuário quanto a que método tem que usar para resolver o seu problema.

Descrição

Neste ítem serão dadas as condições em que o método deverá ou poderá, com maior êxito, ser usado, contendo um resumo descritivo e as fórmulas utilizadas.

Interpretação geométrica

O gráfico que dá a interpretação do método, para que se tenha o entendimento de como funciona e quando converge o método.

Limitações e restrições

Neste ítem são dados casos de não convergência do método, bem como, situações que alteram o desempenho normal do método.

Erro no método

A determinação de erro, o cálculo do erro é algo da análise numérica, sendo muitas vezes um trabalho árduo. Neste ítem, não se tem por finalidade a sua determinação, ou como foi calculado, simplesmente se dará a fórmula do erro, que pode ser encontrado na bibliografia recomendada. Se dará o resultado da determinação do erro e onde pode ser encontrada.

Ordem de convergência

Seja $(X_i) := X_0, X_1, \dots$ uma seqüência de valores obtidos a partir de uma função de iteração $\phi(x)$, a qual converge para um valor a , tal que $f(a)=0$. Seja ainda, e_n o erro na iteração X_n , que é $e_n = |X_n - a|$.

Se existe uma constante $C \neq 0$, e um número p tal que:

$$e_{n+1} := C e_n^p \quad \text{e} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{e_{n+1}}{e_n^p} \right) = C$$

então p é chamado de ordem de convergência da seqüência (ou método) e C é a constante assintótica do erro.

Para $p = 1, 2$, ou 3 a convergência é dita linear, quadrática ou cúbica, respectivamente.

A ordem de convergência é uma medida que indica qual é o ganho em precisão em uma iteração. Supondo $C = 1$, e que X_n coincide com a solução exata em k dígitos, então X_{n+1} se aproxima de a em $p.k$ dígitos significativos.

Índice de eficiência

Para se estudar complexidade computacional de métodos, algumas medidas de eficiência de métodos iterativos são apresentadas, com as quais poderá se comparar os diferentes métodos iterativos.

Para melhor caracterização da função de iteração ϕ , e com a finalidade de determinar o custo de uma iteração, introduz-se os parâmetros: e - o número de funções avaliadas por iteração (isto é, $f, f', f'', \dots$); m - o número de valores reusados na iteração (isto é, $x_{i-1}, x_{i-2}, \dots$). Seja ainda, p a ordem de convergência vista no item anterior.

Os índices $E1$ e $E2$ são conhecidos como o índice de eficiência de TRAUB e o de OSTROWSKI e são dados pelas fórmulas:

$$E1 := p/e \quad , \quad E2 := p^{(1/e)}$$

como é visto em [TRA64].

Estes índices são medidas assintóticas, elas caracterizam um particular método iterativo quando o número de iterações tende ao infinito. Quanto maior o valor de $E1$, mais eficiente assintoticamente é o método iterativo. Estas medidas são aplicáveis somente na vizinhança da raiz α , o que resulta, que elas não são sempre adequadas para tratar com problemas práticos.

Uma medida eficiente ideal e para ser útil à comparação entre métodos deve ser definida em função do número de avaliações de funções e derivadas por iteração e o custo destas avaliações; do custo do cálculo da função, que é a combinação dos custos dos elementos da função de iteração; da ordem de convergência p ; e do tamanho da constante assintótica do erro.

Em função disto, FELDSTEIN e FIRESTONE, em [FEL69], sugeriram a medida:

$$E3 := p^{(1/H)} \quad , \quad \text{onde } H := e \cdot (1+A/B).$$

Sendo p e e a ordem de convergência e o número de funções avaliadas, como já definido. A é o número de operações aritméticas necessárias em uma iteração, sem incluir a avaliação da função ou derivadas. B é o número das operações requeridas para avaliar a função e derivadas.

Outra medida foi sugerida por PATERSON, em [PAT72], como:

$$E4 := (1/M)^{\log_2 p}$$

onde M é o número de divisões e multiplicações requeridas para o cálculo da função de iteração.

Já KUNG e TRAUB, em [KUN73], sugeriram a medida E5, como:

$$E_5 := \frac{\log p}{2 \sum_{i=1}^n n_i \cdot V(f^{(i)}) + c(\emptyset)^{(i)}}$$

onde, n_i é o número de avaliações de $f^{(i)}$ usados na função de iteração $\emptyset$; $V(f^{(i)})$ é o número de operações aritméticas requeridas para uma avaliação de $f^{(i)}$; $c(\emptyset)^{(i)}$ é o número de operações aritméticas requeridas para combinar $f^{(i)}$ para formar a função de iteração $\emptyset$.

Considerando que maior exatidão na solução implica em maior número de iterações, mais a idéia da convergência e a relação base produtividade por custo, levaram SCHÄFFER ([SCH86]), a sugerir um novo índice de eficiência:

$$E_6 := \frac{C \cdot p}{|f'(x_0)| \cdot (A+B) \cdot ASC}$$

onde: C é a constante de normalização conveniente; p a ordem de convergência; ASC o número de algarismos significativos corretos que se deseja obter; $|f'(x_0)|$ o valor absoluto da primeira derivada do método avaliada no ponto inicial x_0 ; A é o número de operações aritméticas necessárias em uma iteração, sem incluir a avaliação da função ou derivadas e B é o número de operações necessárias para avaliar a função e derivadas.

Existem outras medidas de eficiência, mas o estudo destas medidas foge ao objetivo deste trabalho, podendo entretanto, ser acrescentadas nas fichas instrucionais.

Algoritmo

Deve ser dado um algoritmo em uma linguagem lógica, ou seja, de descrição, caracterizando as etapas da resolução do problema pelo método em questão. Este algoritmo deve conter testes e verificações de convergência, de exatidão e se satisfaz os critérios de parada.

Implementações

Este item diz respeito a uma tabela de referência a implementações existentes, deste método, em equipamentos usuais, contendo o nome do programa, ou rotina e a linguagem de programação que foi implementado.

Listagem do programa

A listagem do programa (fonte) de alguma das implementações que estejam disponíveis nos equipamentos usuais.

Mensagem de erro

Deve ser dada a relação das mensagens de erro, que podem ocorrer neste método, caracterizando a gravidade e, se possível, como contornar.

Dados de entrada e saída

Todas as possíveis informações necessárias para que se utilize o programa, qual resultado e de que forma são emitidos.

Exemplos de utilização do programa

Exemplos que caracterizam a utilização do método, pelo programa da listagem, não só para ilustração e teste do programa, mas também para base de aprendizagem de usuários.

Bibliografia

Consta de uma relação de referências bibliográficas de livros de cálculo numérico, análise numérica e métodos computacionais, que contenham informações do método em questão.

Observações

Nas observações, devem ficar informações que não se encaixem nos itens anteriores, mas que se ache importante referir.

UM EXEMPLO DE FICHA INSTRUCIONAL

Será apresentado a seguir um exemplo de ficha instrucional para o método de resolução de equações algébricas e transcendentais, extraído do Manual Instrucional do Usuário do SINAI-16 ([DIV86a]).

S I N A I - 1 6
Ficha Instrucional do Método
Resolução de Equações Algébricas

1. MÉTODO: Newton-Raphson

2. CLASSIFICAÇÃO:

- | | |
|-----------------------|------------------------------|
| ... Método de Quebra | .X. Unipontual SEM memória |
| .X. Método Iterativo | ... Unipontual com memória |
| ... Método Intervalar | ... Multipontual sem memória |
| ... Método Híbrido | ... Multipontual com memória |

3. OBJETIVOS:

- .X. Cálculo de raízes reais de polinômios
- .X. Cálculo de raízes reais de equações transcendentais
- ... Cálculo de raízes complexas
- ... Cálculo de raízes múltiplas

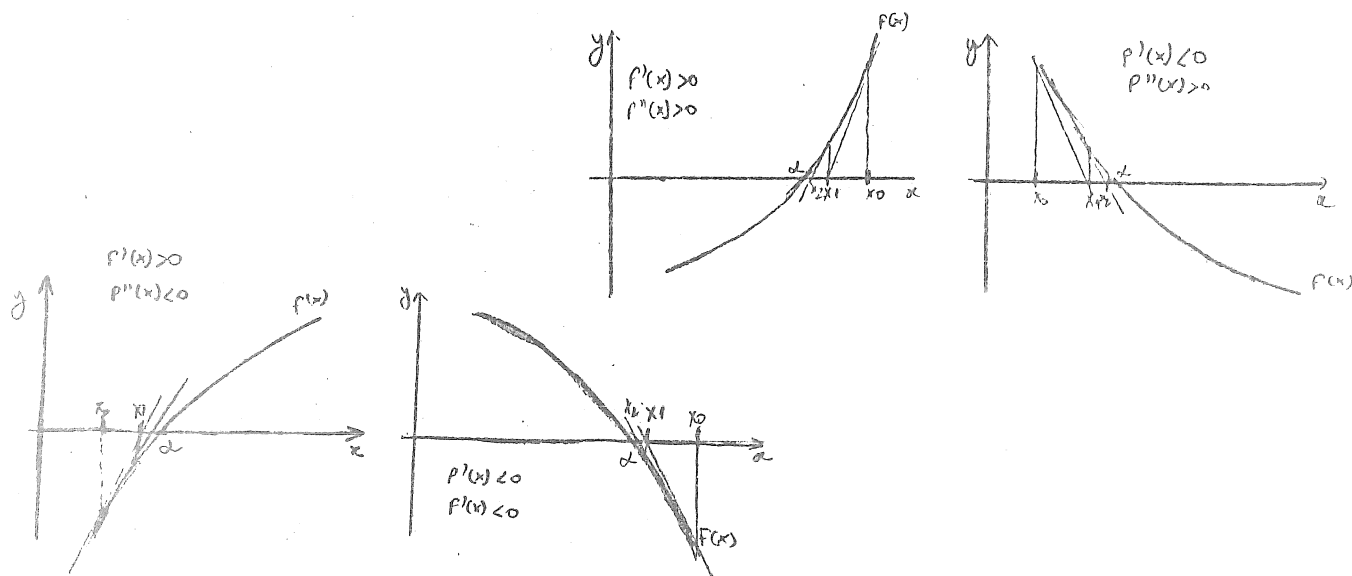
4. DESCRIÇÃO:

O método de Newton-Raphson é essencialmente um método iterativo, onde a função de iteração do método $\phi(x)$ é dada pela fórmula:

$$\phi(x_n) := x_{n+1} := x_n - f(x_n)/f'(x_n), \text{ com } f'(x_n) \neq 0$$

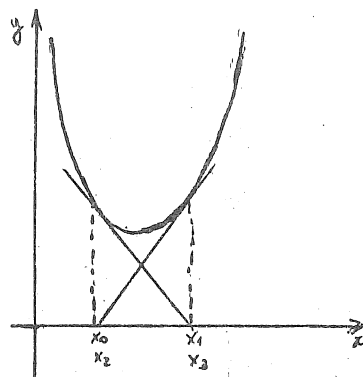
O método de Newton necessita uma estimativa inicial x_0 . Em cada iteração são avaliadas a função e a derivada. É bom lembrar que a derivada é a declividade da reta tangente no ponto, e portanto, a intersecção do eixo x , com a reta tangente no ponto x_n , determina o ponto x_{n+1} .

5. INTERPRETAÇÃO GEOMÉTRICA:

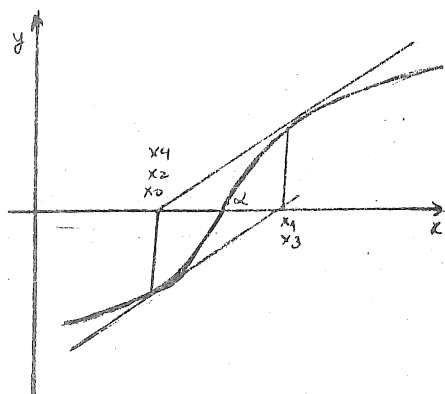


6. LIMITAÇÕES E RESTRIÇÕES:

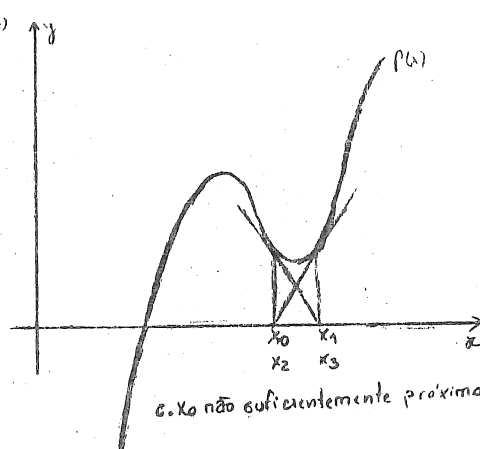
Algumas vezes o método de Newton não converge, isto não ocorre somente quando $f'(x)=0$; mas o método não converge e fica oscilando indefinidamente. Estes casos são quando não há raiz real, ou quando há simetria de $f(x)$ em torno da raiz α , que implica em multiplicidade ímpar, maior ou igual a três; ou ainda, a estimativa inicial x_0 estiver tão distante da raiz, que certa parte da função "prenda" a iteração, (devido a existência de mínimo local positivo ou máximo local negativo), como mostrado nas figuras abaixo:



a. nenhuma raiz real



b. Derivada segunda $f''(\bar{x})=0$. raiz múltipla.



c. x_0 não suficientemente próximo.

Para que haja convergência, tem-se ainda que, $f''(x)$ não se torne excessivamente grande e que $f'(x)$ muito pequena, próximo de zero.

7. ERRO DO MÉTODO:

$$e_{n+1} = \frac{f''(c)}{2 \cdot f'(x_n)} \cdot e_n^2, \text{ onde } c \text{ está entre } x_n \text{ e } x_{n+1}$$

8. ORDEM DE CONVERGÊNCIA:

O método de Newton é de convergência quadrática, ou seja $p=2$ para raízes simples, perdendo este desempenho para raízes múltiplas. (Isto dentro de certa proximidade da raiz).

9. ÍNDICE DE EFICIÊNCIA:

Índice de	valor
TRAUB E1	1.000
OSTROWSKI E2	1.414
FELDSTEIN E3	1.414
PATERSON E4	$1/2 \cdot n$
KUNG-TRAUB E5	$1/4 \cdot n$
SCHÄFFER E6	

10. ALGORITMO:

INICIO

$K := 0$ (k - Número de iterações)
 LEIA(x_0 , L, D) (x_0 - valor inicial,
 L - limite de iterações,
 D - dígitos corretos desejados)
 ENQUANTO ($ASC < D$ ou $K \neq L$ ou $FLK < \min$) ($\min = 10^{-(D+1)}$)

FAÇA INICIO

$K := K + 1$;
 $FK := f(x_k)$;
 $FLK := f'(x_k)$;
 SE $FLK \neq 0$
 ENTÃO $x_{k+1} := x_k - FK/FLK$
 ASC;

FIM;

SE $FLK < \min$ ($f'(x_k) = 0$)
 ENTÃO ESCREVA (x_k , FK, "derivada é zero")
 ESCREVA ("não dá para usar Newton com este valor");

 SENÃO SE $ASC < D$
 ENTÃO ESCREVA (x_{k+1} , ASC, K, "não convergiu a", D)
 SENÃO ESCREVA (x_{k+1} , ASV, K);

FIM.

11. IMPLEMENTAÇÕES:

Equipamento	Nome do Programa	Linguagem
HP85	TIAPOLI	BASIC
LAB08037	LMCREAT	PASCAL
MAXXI	NEWTON	BASIC
I7000PCxt	SINAI-16	BASIC

12. LISTAGEM DO PROGRAMA:

Veja no Manual de Manutenção do Programa do SINAI-16, nas linhas de 18350 a 20100.

13. MENSAGENS DE ERRO:

Xk, FK, "derivada é zero"; "não dá para usar Newton com este valor"; A derivada primeira é nula, e portanto o método não pode ser aplicado, por ocasionar divisão por zero. Se isto ocorreu com valor inicial, tem-se que entrar com outro valor inicial, mas se ocorreu durante o processo, terá que ser utilizado outro método.

Xk+1, ASC, K "não convergiu a ", D; O método não conseguiu produzir a solução com a exatidão de D algarismos significativos corretos em K iterações. É dada a melhor aproximação obtida, com sua respectiva exatidão.

14. DADOS DE ENTRADA E SAÍDA:

ENTRADA: x0 - valor inicial
L - Limite de iteração
D - Dígitos corretos desejados

SAÍDA: Raiz procurada Xk+1
Algarismos Significativos Corretos no resultado ASC
Número de iterações calculadas

Saída Opcional:

Uma tabela contendo os principais valores parciais, para uma boa compreensão do método, contendo o número de iterações, a aproximação Xk, o valor da função na aproximação f(xk), o valor da derivada na aproximação f'(Xk) e o valor do ASC, algarismos significativos corretos.

15. EXEMPLOS DE EXECUÇÃO:

Calcular a raiz do polinômio $P_n(x) = x^4 + 2x^3 - 7.5x^2 - 20x - 11$ com o valor inicial $x_0 = -0.5$, com no mínimo 5 algarismos significativos corretos (ASC>5), e com $x_0 = 3.0$ e ASC>5.

No início do programa:

DEFINIÇÃO DA FUNÇÃO

3 (alterar função)

Entre com o grau do Polinômio (1 a 20):? 4

Entre com os coeficientes an....a0

a4 : ? 1
a3 : ? 2
a2 : ? -7.5
a1 : ? -20
a0 : ? -11

Definição da função

Função atual 1.0000000 x4
 2.0000000 x3
 -7.5000000 x2
 -20.0000000 x1
 -11.0000000 x0

1. Função Correta
2. Alterar Coeficientes
3. Alterar função

1 (Função Correta)

Resolução de Equações Polinômiais

1. Definição da função
2. Gráfico da função
3. Cálculos das Cotas
4. Cálculo das raízes reais
5. Cálculo das raízes complexas
6. Deflacionar raízes
7. Voltar a tela-chave de primeiro nível

4 (Cálculo das raízes reais)

Cálculo das raízes reais

- A. Método da Bissecção
- B. Método de Newton
- C. Método da Secante
- D. Método de Newton para raízes múltiplas
- E. Método Híbrido C
- F. Método MIDREM
- G. Voltar a tela-chave de segundo nível

B (Método de Newton)

Método de Newton

Mostrar os resultados parciais (S/N) ? S

Entre x0 e ASC ? -0.5,5

< resultado >

I	X	F(X)	F'(X)	ASC
0	-0.5000000	-3.0625000	-11.5000000	0.0
1	-0.7663043	-0.6332331	-6.7820646	0.0
2	-0.8596731	-0.0738070	-5.2119997	1.5
3	-0.8738341	-0.0016451	-4.9799620	3.1
4	-0.8741645	-0.0000001	-4.9745705	7.3

Fazer outro calculo (S/N) ? S

Mostrar os resultados parciais (S/N) ? N

Entre x0, ASC ? 3.0,5

<resultado>

aproximação inicial: 3

Numero de iterações: 3

Raiz: 3.03524499

ASC: 6.743843

Fazer outro calculo (S/N) ? N

<volta a tela-chave de terceiro nível>

0 <voltar a tela-chave de segundo nível>

7 <voltar a tela-chave de primeiro nível>

C < fim >

16. BIBLIOGRAFIA:

[STA79] [BAR83] [RAL65] [FOR77] [DOR79] [SHO84] [TRA64]
[MAR82] [CLA83] [KRO79] [VAN78] [DEW83] [JOH82] [CON72]

17. OBSERVAÇÕES:

COMENTÁRIOS FINAIS

As fichas Instrucionais dos métodos contem um conjunto completo de informações sobre o mesmo, e o conjunto delas propiciam a sua catalogação, constituindo uma forma racional, útil e inteligente para catalogação dos métodos existentes.

As fichas instrucionais podem, também, ser úteis ao desenvolvimento de métodos híbridos, que pela combinação de um ou mais métodos, pode-se conseguir melhores resultados em termos de ordem de convergência e de índice de eficiência.

As fichas Instrucionais são um instrumento dinâmico, necessitando testes e atualizações periódicas, a medida que surgem novas informações, como por exemplo: novo índice de eficiência, que a elas podem ser acrescentadas.

Estas Fichas constituem uma proposta para a definição de uma metodologia no estudos de métodos computacionais de resolução de equações.

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

- [BAR83] BARROSO, L.C. et alli. Cálculo numérico. São Paulo, Harper & Row, 1983.
- [CLA83] CLAUDIO, D.M. & ROYO DOS SANTOS, J.A. Microcomputadores e minicalculadoras programáveis, seu uso em ciências e engenharia. São Paulo, Edgar Blücher, 1983.
- [CON72] CONTE, S.D. & DE BOOR, C. Elementary numerical analysis on algorithmic approach. New York, McGraw Hill, 1972.
- [DEW83] DEW, P.M. & JAMES, K.R. Introduction to numerical computation in PASCAL. Hong Kong, Macmillan Press, 1983.
- [DIV86] DIVERIO, T.A. Software numérico aplicativo e instrucional. Porto Alegre, CPGCC da UFRGS, 1986. (dissertação de mestrado)
- [DIV86a] DIVERIO, T.A. SINAI-16 = Manual Instrucional do Usuário. Porto Alegre, CPGCC da UFRGS, 1986.
- [DIV86b] DIVERIO, T.A. SINAI-16 = Manual de Manutenção do Programa. Porto Alegre, CPGCC da UFRGS, 1986.
- [DOR79] DORN, W.S. & McCracken, D.D. Cálculo numérico com estudos de casos em EORIRAN IV. Rio de Janeiro, Campus, 1979.
- [FEL69] FELDSTEIN, A. & FIRESTONE, R.M. A study of Ostrowski efficiency for composite iteration algorithms. Proceedings, 1969.

- [FOR77] FORSYTHE, G.E et alli. Computer methods for mathematical computations. Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1977.
- [JOH82] JOHNSTON, R.L. Numerical methods a software approach. New York, John Wiley & Sons, 1982.
- [KRO79] KRONSTJO, L. Algorithms their complexity and efficiency. Chichester, John Wiley & Sons, 1979.
- [KUN73] KUNG, H.T & TRAUB, J.F. Optimal order of one-point and multi-point iteration. Journal of ACM, New York, 21(4): 643-51, oct. 1974.
- [MAR82] MARINS, J.M. Métodos computacionais para o cálculo de raízes de equações polinomiais. Porto Alegre, CPGCC da UFRGS, 1982. (dissertação de mestrado).
- [PAT72] PATERSON, M.S. Efficient iterations for algebraic numbers in complexity of computer computations. London, Plenum Press, 1972.
- [RAL65] RALSTON, A. A first course in numerical analysis. New York, McGraw Hill, 1965.
- [SCH86] SCHAFFER, M.I. Análise computacional de métodos iterativos pontuais e multipontuais na resolução de equações. Porto Alegre, CPGCC da UFRGS, 1986. (dissertação de mestrado).
- [SHO84] SHOUP, T.E. Applied numerical methods for the microcomputer. Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1984.
- [STA79] STARK, P.A. Introdução aos métodos numéricos. Rio de Janeiro, Interciência, 1979.
- [TRA64] TRAUB, J.F. Interactive methods for the solution of equations. Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1964.
- [VAN78] VANDERGRAFF, J. Introduction to numerical computation. New York, Academic Press, 1978.