Cap. 3.- Equações algébricas e Transcendentais

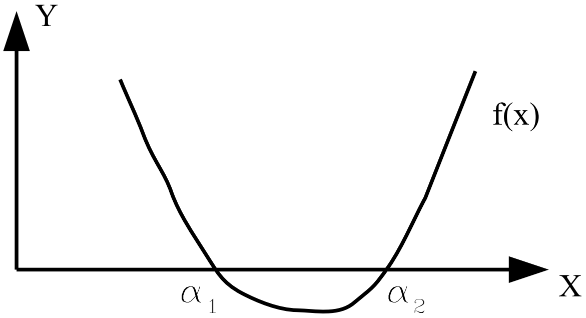
3.1. Definição

Muitos problemas podem ser escritos na forma:

Encontre os valores de x onde f(x)=0

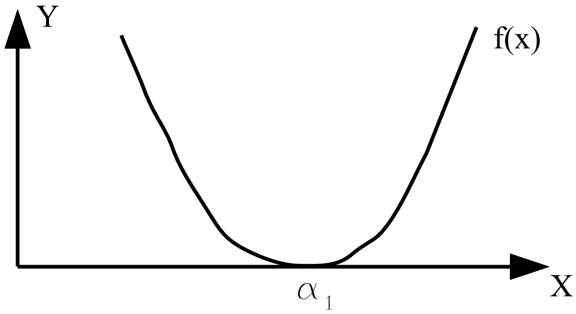
Representação Gráfica

Duas raízes!



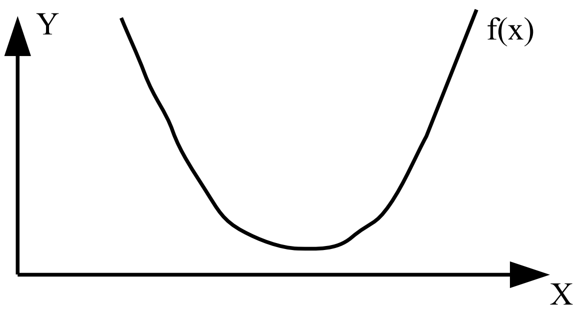
$f(\alpha_1)=f(\alpha_2)=0$

Uma raiz!



$f(\alpha_1) = 0$

Nenhuma raiz!



$f(x) \neq 0 \ \forall \ x$

Tipos de Função

Algébricas

Equações aonde a variável independente pode ser posta em evidência ou fatorada.

$$x^2 - 2x = 0$$

$$x^2 - 2x - 1 = 0$$

Transcendentais

Equações aonde a variável independente não pode ser posta em evidência.

Volume molar $\cancel{V}$ na Equação de Van der Waals (gases não ideais)

$$\left(P+\frac{a}{\cancel{V}^2}\right)(\cancel{V}-b)=RT$$

3.2. Método de Solução

Algébrico

A solução exata é encontrada tornando explícita a variável independente. No caso de polinômios a solução é encontrada como uso de fórmulas fechadas (até o terceiro grau).

Numérico

A solução numérica envolve duas fases:

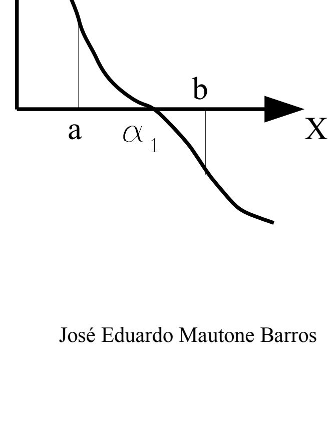
A) Definição do intervalo de busca de raízes;

B) Busca da raiz em um dos intervalos.

Etapa A

O intervalo onde se encontra uma raiz é definido através dos seguintes métodos:

- Busca sistemática
- Experiência passada
- Solução simplificada
- Solução anteriormente encontrada



Uma solução está localizada no intervalo onde há troca de sinal da função.

Se $f(a) > 0$ e $f(b) < 0$ então $a < \alpha_1 < b$

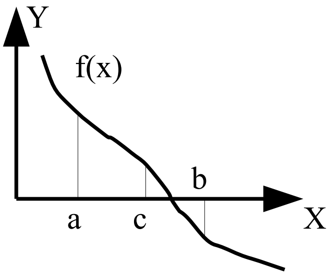
3.2. Método de Solução (cont.)

Etapa B

Busca da raiz usando uma técnica numérica:

- Bisseção
- Newton-Raphson
- Secante

3.2.1. Método da Bisseção



1) A partir de estimativas, $f(a_1) < 0$ e $f(b_1) > 0$, acha-se a próxima estimativa por:

$$c_1 = (a_i + b_i) / 2$$

2) Os novos limites de posição da raiz são:

se $f(c_i) > 0$ então $a_{i+1} = a_i$ e $b_{i+1}=c_i$

se $f(c_i) < 0$ então $a_{i+1} = c_i$ e $b_{i+1}=b_i$

3) Repete-se o cálculo de c_i até que $f(c_i) \leq \varepsilon$ ou $| c_i - c_{i+1} | \leq \varepsilon$

sendo ε o erro admitido para a raiz.

No Excel ou BROffice:

i	a	f(a)	b	f(b)	c	f(c)
1	A	= ...	B	= ...	C=(A+B)/2	D = ...
2	SE(D<0;C;A)	= ...	SE(D>0;C;B)	= ...	C=(A+B)/2	D= ...

3.2.2. Método de Newton-Raphson

$f^1 = df/dx$
$f^2 = d^2f/dx^2$

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \ldots$$

$$sen\, x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \ldots$$

Uma dada função contínua f(x) pode ser expandida em uma Série de Taylor a partir do ponto x=a do seguinte modo:

$$f(x) = f(a) + f^1(a)(x-a) + \frac{1}{2!} f^2(a)(x-a)^2 + \ldots$$
$$+ \frac{1}{(n-1)!} f^{(n-1)}(a)(x-a)^{n-1} + R_n$$

Se f(x) = 0 pode-se expandir $f(x_{i+1})$ a partir do ponto x_i do seguinte modo:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f^1(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2!} f^2(x_i)(x_{i+1} - x_i)^2 + \ldots$$
$$+ \frac{1}{(n-1)!} f^{(n-1)}(x_i)(x_{i+1} - x_i)^{n-1} + R_n$$

3.2.2. Método de Newton-Raphson (cont.)

Considerando que x_{i+1} é uma aproximação de uma raiz e tomando somente os dois primeiros termos da série, temos,

$$f(x_{i+1})=f(x_i)+f^1(x_i)(x_{i+1}-x_i)=0$$

O método exige o cálculo da derivada da função!

Assim,

$$x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{f^1(x_i)}$$

A sequência de cálculo é atribuir um valor para x_0 e calcular x_1 usando a relação acima. A partir de x_1 o novo valor da estimativa é obtido e assim por diante, até que $|x_{i+1}-x_i| \leq \varepsilon$

No Excel ou BROffice:

i	$\mathbf{x_i}$	$\mathbf{f(x_i)}$	$\mathbf{f^1(x_i)}$	ε
1	A	B	C	
2	D=A-B/C	= ...	= ...	ABS(D-A)

3.2.3. Método da Secante

Quando a derivada da função não puder ser calculada por não se ter a expressão analítica ou o seu cálculo for muito custoso computacionalmente, pode-se usar uma aproximação da derivada. Esta estimativa $g^1(x_i)$ pode ser calculada considerando dois pontos x_{i-1} e x_i

$$g^1(x_i)=\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{(x_i-x_{i-1})}$$

A nova estimativa da raiz é dada por:

$$x_{i+1}=x_i-\frac{f(x_i)}{g^1(x_i)}$$

O procedimento é o mesmo do método de Newton-Raphson, sendo que dois valores são necessários para se iniciar os cálculos.

No Excel ou BROffice:

i	$\mathbf{x_i}$	$\mathbf{f(x_i)}$	$\mathbf{g^1(x_i)}$	ε
1	A	B		
2	C	D	E=(D-B)/(C-A)	
3	F=C-D/E	= ...	= ...	ABS(F-C)

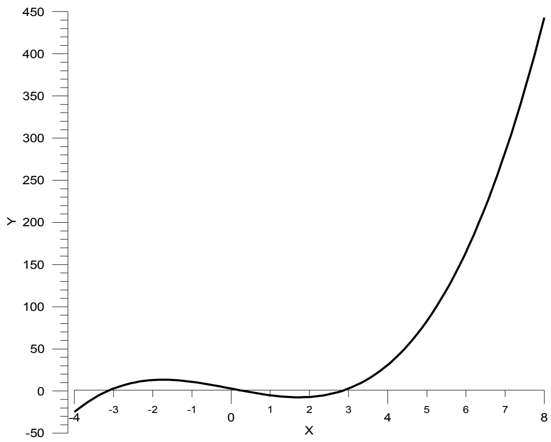
3.2. Método de Solução (cont.)

No SciLab

```
function y=f(x), y=sin(x),  endfunction
x = fsolve(%pi,f)
```

a = matriz de coeficientes do polinômio

```
a=[3 -9 0 1]
p = poly(a,"x","coeff")
roots(p)
```



Exemplo

Achar as raízes da seguinte equação polinomial, com erro menor que 10^{-3},

Busca de Raízes Intervalo de 0 a 1

$$f(x)=x^3-9x+3=0$$

Por Bisseção

I	Xi1	Yi2	Xi2	Yi2	Xi3	Yi3
1	0,000	3,0000	1,000	-5,0000	0,500	-1,3750
2	0,000	3,0000	0,500	-1,3750	0,250	0,7656
3	0,250	0,7656	0,500	-1,3750	0,375	-0,3223
4	0,250	0,7656	0,375	-0,3223	0,313	0,2180
5	0,313	0,2180	0,375	-0,3223	0,344	-0,0531
6	0,313	0,2180	0,344	-0,0531	0,328	0,0822
7	0,328	0,0822	0,344	-0,0531	0,336	0,0145
8	0,336	0,0145	0,344	-0,0531	0,340	-0,0193
9	0,336	0,0145	0,340	-0,0193	0,338	-0,0024
10	0,336	0,0145	0,338	-0,0024	0,337	0,0060
11	0,337	0,0060	0,338	-0,0024	0,337	0,0018
12	0,337	0,0018	0,338	-0,0024	0,338	-0,0003

Por Newton-Raphson

$$\frac{df(x)}{dx}=3x^2-9$$

I	Xi	Yi	Y'i
1	0,000	3,00000	-9,00
2	0,333	0,03704	-8,67
3	0,338	0,00002	-8,66
4	0,338	0,00000	-8,66

Pelo Método da Secante

I	Xi	Yi	G'i
0	-0,010	3,09000	
1	0,000	3,00000	-9,00
2	0,333	0,03700	-8,89
3	0,338	0,00094	-8,66
4	0,338	0,00000	-8,66