2. Solução Numérica de Equações

3.1 Introdução

Nas diversas áreas científicas, frequentemente, deparamo-nos com problemas reais envolvendo a resolução de equações, isto é, dada a equação f(x)=0 desejamos determinar a solução (ou soluções) real $\bar{x}$ tal que f($\bar{x}$)=0. Por exemplo, consideremos a equação $f(x) = \mathrm{sen}(x) - \ln(x) + 2 = 0$, desejamos determinar a solução real $\bar{x}$, tal que $f(\bar{x}) = \mathrm{sen}(\bar{x}) - \ln(\bar{x}) + 2 = 0$

Métodos iterativos são desenvolvidos para determinar aproximadamente essa solução real $\bar{x}$, embora tenhamos métodos iterativos específicos para determinar a solução $\bar{x}$, quando esta é um número complexo.

Métodos iterativos são apresentados para determinar a solução $\bar{x}$, quando esta é um valor real e, para isso, necessitamos de uma solução aproximada inicial x_0 que a partir desta geramos uma sequência $\{x_n\}$, $n = 1, 2 \ldots$ de soluções aproximadas, que sob determinadas condições teóricas, convergem para a solução desejada $\bar{x}$.

A solução inicial x_0, pode ser obtida através de recursos gráficos, no qual localizamos uma vizinhança ou um intervalo [a, b] em que encontra-se a solução $\bar{x}$, conforme exibimos na Figura 3.1:

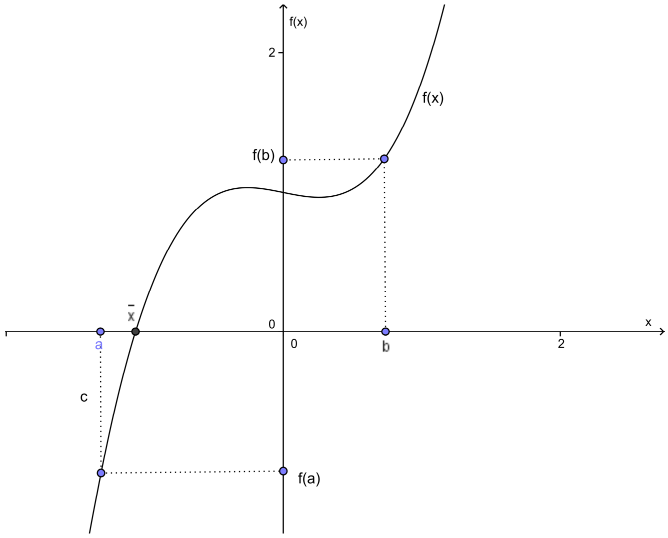

Figura 3.1

Observando a Figura 3.1, vemos que a solução $\bar{x}$ tal que $f(\bar{x})=0$ encontra-se onde a função f(x) corta o eixo das abscissas, isto é, no intervalo em que a função possui sinais opostos.

Podemos então, tomar uma solução inicial x_0 nas vizinhanças dessa raiz, isto é, no intervalo [a, b], para inicializar a sequência de soluções aproximadas durante aplicação dos métodos iterativos que serão apresentados posteriormente.

Para ilustrar a solução numérica de equações, considere o problema de nível de oxigênio em um rio, conforme Figura 3.2

Figura 3.2: Disponível em: <www.naturaeco.nireblog.com>

Sabendo-se que para calcular o nível de oxigênio N (mg/L) em um rio a jusante de uma carga de esgoto, podemos usar a seguinte equação:

$$N(x) = 10 - 20(e^{-0.15x} - e^{-0.5x})$$

Em que, x é a distância a jusante em quilômetros, conforme Figura 3.3:

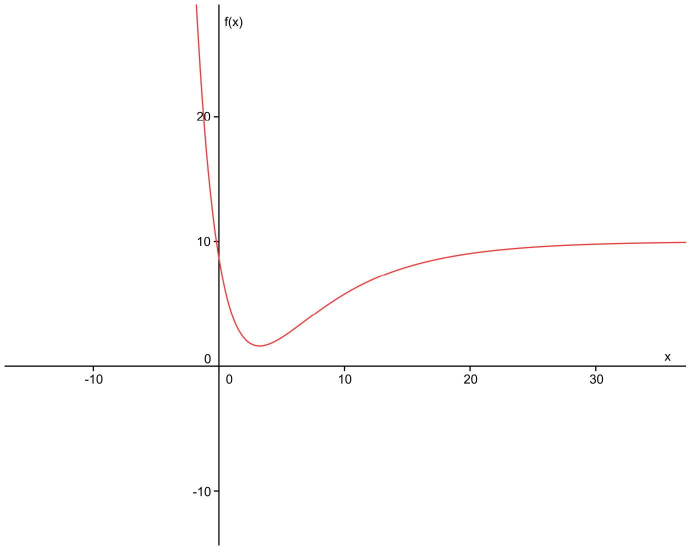

Figura 3.3

a) Deseja-se determinar a jusante em que o nível do oxigênio cai pela primeira vez até uma leitura de 5mg/L, observando-se que níveis de oxigênio abaixo de 5mg/L são prejudiciais aos peixes.

b) Deseja-se determinar a distância a jusante na qual o oxigênio está no valor mínimo. Qual a concentração de oxigênio nesta posição?

Definição 3.1

Dizemos que $\bar{x}$ é uma raiz, ou um zero, da função f(x) se $f(\bar{x}) = 0$.

Exemplo 3.1

Seja $f(x) = x^2 - 5 = 0$. Temos que as raízes da equação x^2-5=0 são: $\bar{x} = \pm\sqrt{5} \cong 2.236067977$ e, nesse caso $f(\bar{x}) \cong 0$.

3.2 Localização das Raízes: Método Gráfico

Para localizar uma vizinhança para a raiz de f(x), traçamos o gráfico de f(x) e, em que este corta o eixo das abscissas, temos a raiz (as raízes) de f(x).

Considere o exemplo anterior, $f(x) = x^2 - 5$, e temos as raízes $\bar{x} = \pm\sqrt{5}$, conforme gráfico ilustrado na Figura 3.4:

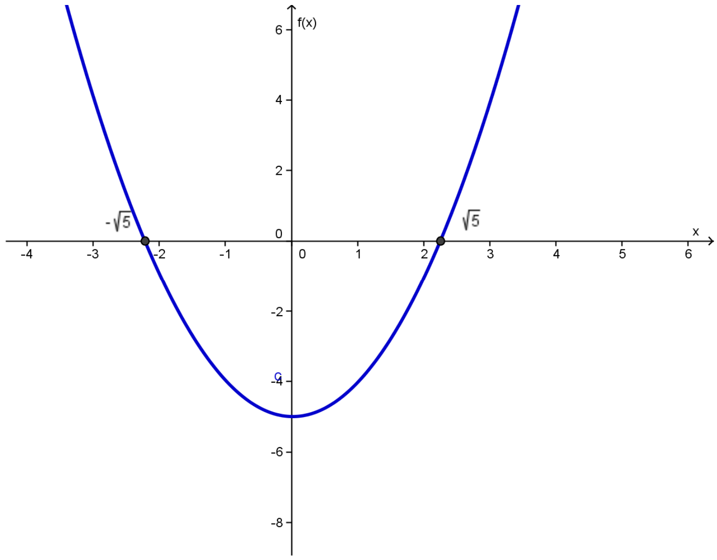

Figura 3.4

Observando a Figura 3.4, vemos que o gráfico de f(x) permite identificar onde estão aproximadamente as raízes de f(x). Nesse caso, temos as raízes $\bar{x} = \pm\sqrt{5} \cong 2.236067977$ e, $f(\bar{x}) \cong 0$.

Podemos ainda, transformar a equação $f(x) = 0$ na forma equivalente $f_1(x) = f_2(x)$. Os pontos de interseção dos gráficos $f_1(x)$ e $f_2(x)$ serão as raízes procuradas, conforme exemplo a seguir:

Exemplo 3.2

Considere a equação $f(x) = 4x - e^x = 0$.

Podemos escrever a equação dada, na forma equivalente por: $4x = e^x$, isto é, $f_1(x) = f_2(x)$, com $f_1(x) = 4x$ e $f_2(x) = e^x$, conforme gráfico da Figura 3.5:

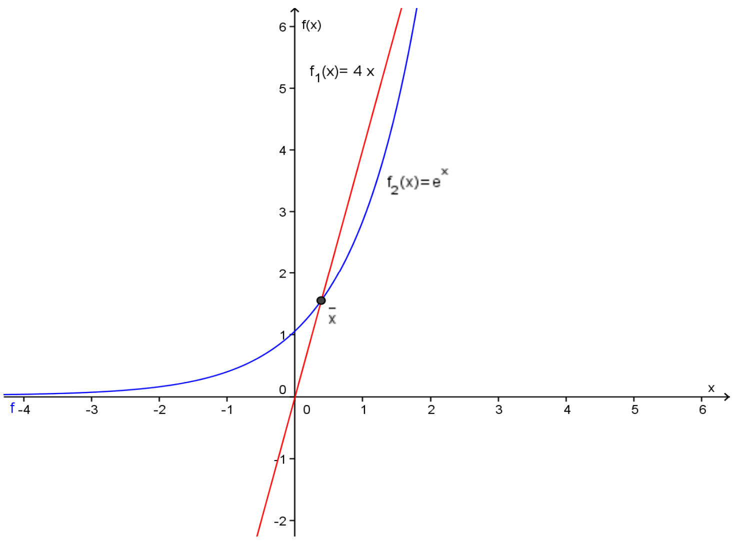

Figura 3.5

Observando a Figura 3.5, vemos que a raiz $\overline{x}$ encontra-se na intersecção dos gráficos $f_1(x)$ e $f_2(x)$.

3.3 Métodos numéricos para resolução de equações

Nesta unidade apresentaremos alguns dos principais métodos para resolver numericamente uma equação.

3.3.1 Método da Bisseção

Considere uma função $f : \Re \rightarrow \Re$ função contínua. Desejamos resolver a equação f(x)=0, isto é, determinar uma solução $\overline{x}$ real tal que $f(\overline{x}) = 0$.

O Método da Bisseção é baseado no Teorema do Valor Intermediário, o qual afirma que se uma função contínua no intervalo $[a, b]$, e satisfaz a condição $f(a)f(b) < 0$, (valores de $f(a)$ e $f(b)$ com sinais opostos), então existe $\overline{x} \in (a, b)$ tal que $f(\overline{x}) = 0$, isto é, existe ao menos uma raiz no intervalo $[a, b]$, conforme ilustrado na Figura 3.6.

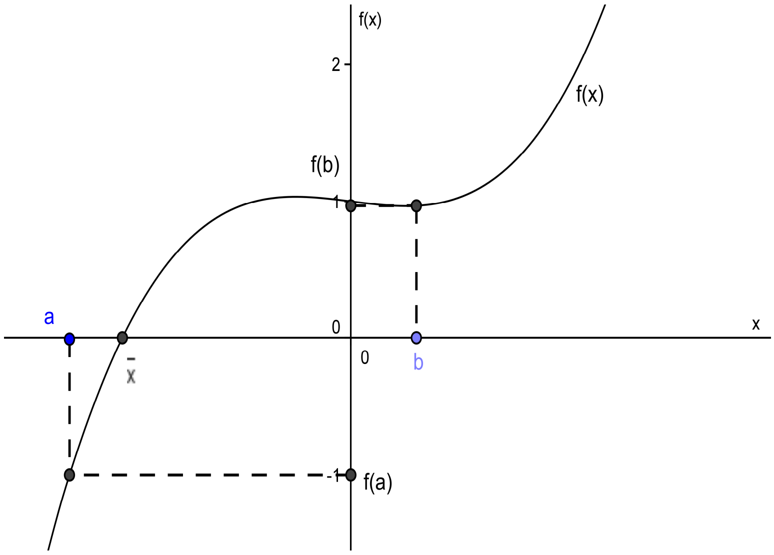

Figura 3.6

O Método da Bisseção consiste em localizar inicialmente um intervalo [a, b], em que se encontra a raiz $\bar{x}$, e determinar uma sequência de intervalos $[r_i, s_i]$ $i = 0,1,\ldots$ em que $r_0 = a$ e $s_0 = b$, de forma que a amplitude do intervalo numa iteração seja igual a metade da amplitude do intervalo anterior e que sempre contenha a raiz $\bar{x}$.

A sequência de intervalos será calculada até que a amplitude do intervalo seja menor do que uma tolerância ε preestabelecida.

As sequências r_i , s_i e x_i são construídas, a partir de um intervalo inicial $[r_0, s_0]$ tal que $f(r_0)f(s_0) < 0$, conforme Figura 3.7:

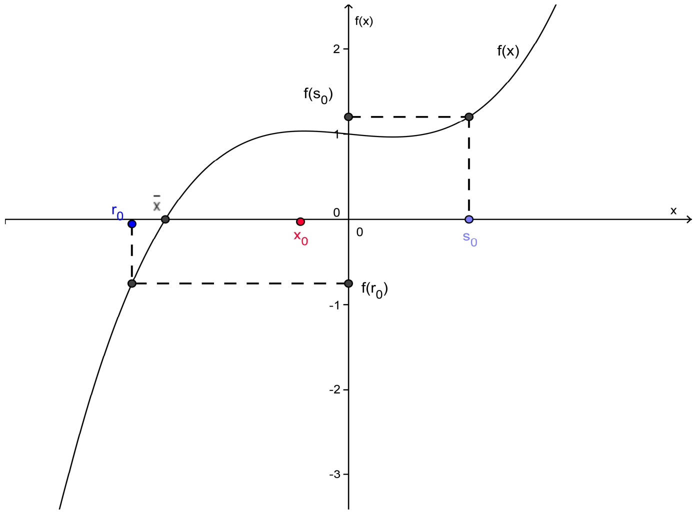

Figura 3.7

Determina-se o ponto médio do intervalo $[r_0, s_0]$, dado por:

$$x_0 = (r_0 + s_0)/2$$

A partir da solução aproximada obtida x_0, fazemos a seguinte verificação:

Se $f(x_0) = 0$, então x_0 é uma raiz de f(x)

Se $f(r_0)f(x_0) < 0$, então $r_1 = r_0$ e $s_1 = x_0$

Se $f(r_0)f(x_0) > 0$, então $r_1 = x_0$ e $s_1 = s_0$

Neste momento, temos o novo intervalo $[r_1, s_1]$, cuja amplitude é igual a metade da amplitude do intervalo $[r_0, s_0]$ e que contém a raiz desejada $\bar{x}$.

O procedimento é repetido novamente, isto é, calcula-se o ponto médio do intervalo $[r_1, s_1]$ dado por:

$$x_1 = (r_1 + s_1)/2$$

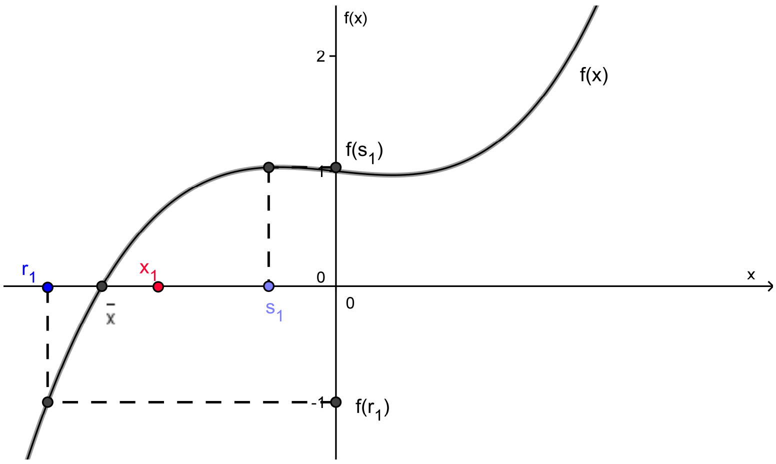

Figura 3.8

A partir da solução aproximada obtida x_1, fazemos a seguinte verificação:

Se $f(x_1) = 0$, então x_1 é uma raiz de f(x)

Se $f(r_1)f(x_1) < 0$, então $r_2 = r_1$ e $s_2 = x_1$

Se $f(r_1)f(x_1) > 0$, então $r_2 = x_1$ e $s_2 = s_1$

Assim sucessivamente, temos um intervalo genérico $[r_i, s_i]$, em que calcula-se o ponto médio deste intervalo, dado por:

$$x_i = (r_i + s_i)/2$$

Se $f(x_i) = 0$, então x_i é uma raiz de f(x)

Se $f(r_i)f(x_i) < 0$, então $r_{i+1} = r_i$ e $s_{i+1} = x_i$

Se $f(r_i)f(x_i) > 0$, então $r_{i+1} = x_i$ e $s_{i+1} = s_i$

Convergência

Podemos observar que no Método da Bisseção, determinamos uma raiz da equação, construindo sequências de intervalos r_i e s_i e uma sequência de soluções aproximadas x_i i = 0, 1,...

Essa sequência de soluções aproximadas é convergente para a solução desejada, uma vez que os intervalos são divididos pelos pontos médios correspondentes e, são renomeados de forma que a raiz permaneça dentro do intervalo, ver mais detalhes em [1].

Estimativa do número de iterações

O número de iterações necessárias para se obter uma raiz $\bar{x}$ da equação f(x)=0, pelo Método da Bisseção com uma precisão $\varepsilon > 0$, previamente fixada, decorre do seguinte:

Supondo-se que $\bar{x}$ está entre x_n e s_n temos:

$$|x_n - \bar{x}| \leq (x_n - r_n) = \frac{(s_n - r_n)}{2} = \frac{(s_0 - r_0)}{2^{n+1}}$$

Impondo que $\frac{s_0 - r_0}{2^{n+1}} < \varepsilon$ para garantir que $|x_n - \bar{x}| < \varepsilon$, temos:

$$\log\left(\frac{s_0 - r_0}{2^{n+1}}\right) < \log(\varepsilon)$$

Ou

$$n > \frac{\log(s_0 - r_0) - \log(\varepsilon)}{\log 2} - 1$$

Logo, n é o número mínimo de iterações que devem ser realizadas para obter $\bar{x}$ com uma precisão ε.

Algoritmo 3.1

1. Dados ε > 0, o intervalo inicial $[r_0, s_0]$ que contenha a raiz, isto é, $f(r_0)f(s_0) < 0$. Faça Pare = Falso, i=0
2. Enquanto Pare = Falso faça:

   2.1 Determine $x_i = (r_i + s_i)/2$

   2.2 Se $|f(x_i)| \leq \varepsilon$, então Pare=Verdade

   Senão

   Se $f(r_i)f(x_i) < 0$, então $r_{i+1} = r_i$ e $s_{i+1} = x_i$

   Senão $r_{i+1} = x_i$ e $s_{i+1} = s_i$

   2.3 Se $\dfrac{|x_{i+1} - x_i|}{|x_{i+1}|} < \varepsilon$ então Pare = Verdade

   Senão i = i+1

Exemplo 3.3

Considere a seguinte função $f(x) = 4x - e^x$.

Usando o Método da Bisseção, podemos determinar $\bar{x}$ tal que f($\bar{x}$) = 0 com uma precisão ε = 0.01, conforme segue:

a) Inicialmente determinamos graficamente uma vizinhança para a raiz, consideramos a forma equivalente $4x = e^x$, ou seja, $f_1(x) = 4x$ e $f_2(x) = e^x$, conforme ilustrado anteriormente na Figura 3.5:

Observando a Figura 3.5, podemos concluir que a raiz $\bar{x}$, encontra-se na intersecção dos gráficos $f_1(x)$ e $f_2(x)$, e pertence ao intervalo [0, 1].

b) Considerando o intervalo inicial $r_0 = 0$ e $s_0 = 1$, temos f(0)f(1)<0, pois f(0)=-1 e f(1)=1.2817 e, portanto temos uma raiz no intervalo [0, 1]. Observe que a função $f(x) = 4x - e^x$ é contínua no intervalo dado.

c) Construindo a sequência de soluções aproximadas:

Temos que $x_0 = (r_0 + s_0)/2 = (0+1)/2 = 0.5000$ $\rightarrow$ solução inicial

Como $f(r_0)f(x_0) = (-1)(0.3513) < 0$, temos que o novo intervalo r_1 e s_1 será dado por:

$$\begin{cases} r_1 = r_0 = 0 \\ s_1 = x_0 = 0.5 \end{cases}$$

Calculamos a nova solução $x_1 = (r_1 + s_1)/2 = (0 + 0.5)/2 = 0.2500$

Novamente, verificamos o critério de parada: $\dfrac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 1 > \varepsilon$, e como este não está satisfeito, repetimos o processo para calcular as novas soluções aproximadas, como segue:

Como $f(r_1)f(x_1) = (-1)(-0.2840 > 0$, temos que o novo intervalo r_2 e s_2 será dado por:

$$\begin{cases} r_2 = x_1 = 0.25 \\ s_2 = s_1 = 0.5 \end{cases}$$

Calculamos o ponto médio:

$$x_2 = (r_2 + s_2)/2 = (0.25 + 0.5)/2 = 0.3750$$

E, verificamos novamente o critério de parada, dado por: $\frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.3000 > \varepsilon$, como este não está satisfeito, sucessivamente repetimos o processo de cálculo das novas soluções aproximadas, como segue:

$$x_3 = 0.3125 \;\rightarrow\; \frac{|x_3 - x_2|}{|x_3|} = 0.2000 > \varepsilon$$

$$x_4 = 0.3438 \;\rightarrow\; \frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} = 0.0900 > \varepsilon$$

$$x_5 = 0.3594 \;\rightarrow\; \frac{|x_5 - x_4|}{|x_5|} = 0.0400 > \varepsilon$$

$$x_6 = 0.3516 \;\rightarrow\; \frac{|x_6 - x_5|}{|x_6|} = 0.0200 > \varepsilon$$

$$x_7 = 0.3555 \;\rightarrow\; \frac{|x_7 - x_6|}{|x_7|} = 0.0100 > \varepsilon$$

$$x_8 = 0.3574 \;\rightarrow\; \frac{|x_8 - x_7|}{|x_8|} = 0.0055 < \varepsilon$$

Como o critério de parada está satisfeito, temos que a solução aproximada de f(x) = 0, é dada por $\bar{x} \cong x_8 = 0.3574$.

a) Podemos calcular do número mínimo de iterações, usando a expressão:

$$n > \frac{\log(s_0 - r_0) - \log(\varepsilon)}{\log 2} - 1 = 5.6439$$

Portanto $n > 5.6439$, isto é, devemos executar no mínimo 6 iterações, para obter a raiz $\bar{x}$ com a precisão ε desejada, o que pode ser comprovado no exemplo dado anteriormente com n = 7 iterações.

3.3.2 Método de Newton

Seja $f : \Re \rightarrow \Re$ uma função contínua e diferenciável, desejamos determinar a raiz ou raízes de f(x), ou seja, determinar $\bar{x}$ tal que $f(\bar{x}) = 0$.

O Método de Newton consiste em, a partir de uma solução aproximada inicial x_i dada inicialmente, determinar uma sequência de soluções aproximadas para a raiz de f(x) da seguinte forma:

Traçamos a reta tangente ao gráfico da função f(x) no ponto x_i, em que esta corta o eixo das abscissas temos a primeira solução aproximada x_{i+1} para a raiz $\bar{x}$.

Novamente no ponto x_{i+1} traçamos a reta tangente ao gráfico de f(x), em que esta corta o eixo das abscissas temos a segunda solução aproximada para a raiz e, assim sucessivamente até determinarmos com uma tolerância pré-fixada ε a raiz $\bar{x}$ desejada. Ilustramos graficamente, conforme Figura 3.9:

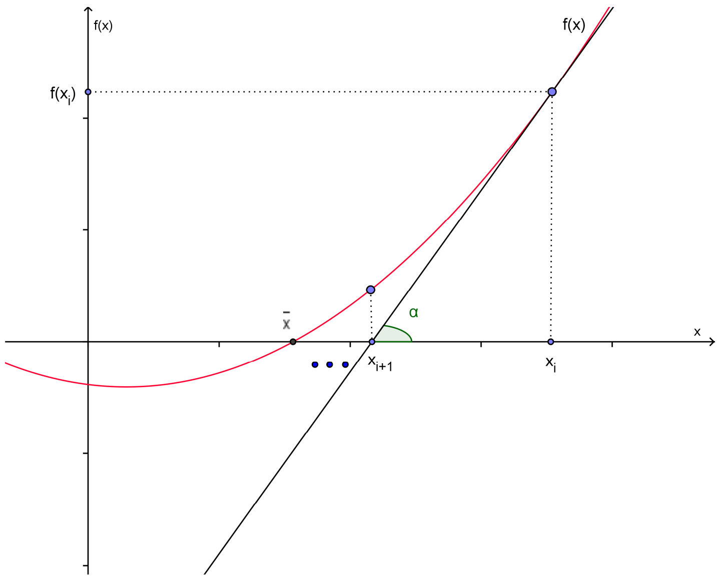

Figura 3.9

Definindo como α, o ângulo formado com o eixo das abscissas através da reta tangente ao gráfico da função f(x) no ponto x_i (Figura 3.9), temos:

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

Do Cálculo Diferencial Integral, sabemos que $tg(\alpha)$ é a derivada da função f(x) no ponto x_i, isto é, $tg(\alpha) = f'(x_i)$ e, assim podemos escrever:

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

Portanto, temos o processo iterativo chamado de Método de Newton, como segue:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f^{'}(x_i)} \quad i = 0,1,2\ldots$$

Observação

O Método de Newton é também conhecido como **Método das tangentes,** devido sua interpretação gráfica.

Convergência do Método de Newton

A convergência do Método de Newton pode ser tratada usando o Teorema de convergência do Método das Aproximações Sucessivas, o qual pode ser visto nas Referências Bibliográficas [1].

Definição 3.2 Convergência quadrática

Dizemos que um método iterativo possui convergência quadrática se $\lim\limits_{i \to \infty} \frac{e_{i+1}}{e_i^2} = k$, em que k é chamada constante assintótica de proporcionalidade, $e_i = |x_i - \bar{x}|$ e $e_{i+1} = |x_{i+1} - \bar{x}|$ são os erros cometidos nas iterações correspondentes.

Teorema 3.1

O Método de Newton possui convergência quadrática.

Prova: Referências Bibliográficas [1].

Para observar as boas propriedades de convergência do Método de Newton, exibimos o seguinte exemplo:

Exemplo 3.4

O cálculo do número $\sqrt{3}$, usando o Método de Newton, consiste na resolução da equação $x^2 - 3 = 0$ e, usando uma tolerância fixa com $\varepsilon = 10^{-4}$ temos:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = x_i - \frac{(x_i^2 - 3)}{(2x_i)}$$

A partir de uma solução x_0 inicial, geramos a sequência de soluções aproximadas:

$x_0 = 1.5000 \rightarrow$ solução inicial dada

$$x_1 = 1.7500 \rightarrow \frac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 0.1429 > \varepsilon$$

$$x_2 = 1.7321 \rightarrow \frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.0103 > \varepsilon$$

$$x_3 = 1.7321 \rightarrow \frac{|x_3 - x_2|}{|x_3|} = 0.0001 \leq \varepsilon$$

Como o critério de parada está satisfeito, podemos parar, e observar que esta sequência converge para $\bar{x} = 1.7321 \cong \sqrt{3}$.

Desta forma, podemos observar que na medida em que os valores de x_k aproximam da raiz $\bar{x}$, a convergência torna-se muito rápida, isto devido a propriedade da convergência quadrática do Método de Newton.

Algoritmo 3.2

1. Defina as funções f(x), $f^{'}(x)$ e ε>0 uma tolerância fixa.

2. Escolha x_0 uma solução inicial.

   Faça Pare=Falso e i=0

3. Enquanto Pare=Falso faça:

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

   3.2. Se $\frac{|x_{i+1} - x_i|}{|x_{i+1}|} < \varepsilon$, então Pare=Falso

   Senão i = i+1

Observação

O leitor pode incluir nesse algoritmo, uma modificação no critério de parada, considerando o valor da função no ponto x_i, isto é, $|f(x_i)| \leq \varepsilon$.

Exemplo 3.5

Usando o Método de Newton, resolvemos a equação cos(x)-x=0 com ε=0.001.

A partir do processo iterativo $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f^{'}(x_i)}$, geramos a sequência:

$x_0 = 0.7 \rightarrow$ solução inicial dada

$x_1 = 0.7394 \rightarrow \frac{|x_1 - x_0|}{|x_1|} = 0.0533 > \varepsilon$

$x_2 = 0.7394 \rightarrow \frac{|x_2 - x_1|}{|x_2|} = 0.0000 < \varepsilon$

Como o critério de parada está satisfeito, tomamos como solução aproximada para f(x) a solução $\overline{x} \cong x_2 = 0.7394$.

Observação

Podemos ainda, modificar o Método de Newton, da seguinte forma:

O valor calculado da derivada na 1.ª iteração, $f'(x_0) = k$, em que $k \in \Re$, é fixado e substituído no processo iterativo de Newton durante as iterações:

Assim, temos:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{k} \quad i = 0,1,\ldots.$$

O qual é conhecido como **Método Modificado de Newton.**