Matemática Computacional

Cap. 2 Resolução numérica de equações não-lineares

Começamos por recordar um exemplo que ilustra a modelação de um problema real através de uma equação não-linear.

Exemplo 1. Equação do foguete de Tsiolkovsky
A velocidade de um projétil é dada em cada instante t por

$$v(t) = u \ln\left(\frac{m_0}{m_0 - qt}\right) - gt,$$

onde u é a velocidade de expulsão dos gases resultantes da combustão (em relação ao projétil), m_0 é a sua massa inicial, q é o coeficiente de consumo do combustível e $g = 9.8$ m/s^2 é a aceleração da gravidade.

Problema: Determinar em que instante t a velocidade atinge o valor $v = 1000$ m/s, quando $u = 2200$ m/s, $m_0 = 16 \times 10^4$ kg e $q = 2680$ Kg/s.

Equação não linear: $2200 \ln\left(\frac{16\times10^4}{16\times10^4-2680t}\right) - 9.8t = 1000$

Classificação, localização e separação de raízes

É válido o seguinte resultado para estabelecer a existência e unicidade de solução de uma equação $f(x) = 0$:

Teorema 1. *Seja f uma função contínua em $[a, b]$ e diferenciável em $]a, b[$. Se*

- $f(a)f(b) < 0$
- *f' não se anula em $]a, b[$*

então existe um e um só $z \in]a, b[$ tal que $f(z) = 0$, ou seja, no intervalo $]a, b[$, a equação $f(x) = 0$ uma e uma só solução.

Nas condições do Teorema 1, como $f(z) = 0$ e $f'(z) \neq 0$, z diz-se um *zero simples* de f ou um zero com multiplicidade 1. Mais concretamente,

Definição 1. *Um zero z da função f tem* multiplicidade m *se, para $x \in D_f \setminus \{z\}$, se puder escrever $f(x) = (x-z)^m h(x)$ onde $\lim_{x \to z} h(x) \neq 0$.*

Uma função $f \in C^m([a,b])$ tem um zero de multiplicidade m (> 1) no ponto $z \in]a,b[$ se

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

Exemplo 2. *Como aplicação do resultado de existência e unicidade* (1)*, consideramos a equação $x^5 - 5x + 1 = 0$. Seja $f(x) = x^5 - 5x + 1$. Tem-se*

$$f(-2) < 0,\ f(-1) > 0,\ f(0) > 0,\ f(1) < 0,\ f(2) > 0$$

$$f'(x) = 0 \Leftrightarrow 5x^4 - 5 = 0 \Leftrightarrow x^4 = 1 \Leftrightarrow x = 1 \text{ ou } x = -1.$$

É fácil concluir que $f'(x) > 0$ para $|x| > 1$ e $f'(x) < 0$ se $x \in]-1, 1[$. Assim, a

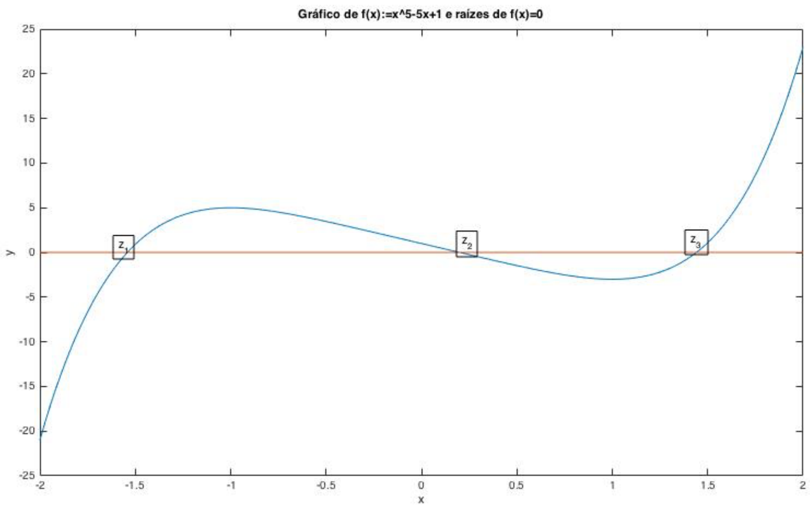

Figura 1: Localização gráfica das raízes

equação $x^5 - 5x + 1 = 0$ tem exatamente três raízes reais: $z_1 \in [-2, -1]$, $z_2 \in [0, 1]$ e $z_3 \in [1, 2]$.

Exemplo 3. *Voltando ao Exemplo 1, consideramos a equação*

$$2200 \ln \left(\frac{16 \times 10^4}{16 \times 10^4 - 2680t} \right) - 9.8t - 1000 = 0.$$

Pondo $f(t) := 2200 \ln\left(\frac{16\times10^4}{16\times10^4-2680t}\right) - 9.8t - 1000$, *tem-se*

$$f(10) = -694.691,\ f(20) = -298.47,\ f(30) = 241.951.$$

Além disso,

$$f'(t) = -9.8 + \frac{589600}{16000-268t}, \quad f''(t) = \frac{9875800}{(4000-67t)^2}.$$

Como $f \in C^1([20,30])$, *com* $f'(x) \geq f'(20) > 0$, *para todo* $x \in [20,30]$, *e* $f(20)f(30) < 0$, *conclui-se que a equação tem em* $]20,30[$ *uma e uma só solução.*

Exemplo 4. *Vamos ver como podemos usar o* Mathematica *e o* Matlab *para resolver a equação do Exemplo 1.*

- *Solução obtida com o* Mathematica

```
In[1]:= FindRoot[2200Log[16*10^4/(16*10^4-2680t)]-9.8t-1000,{t,20}]
Out[1]:={t->25.9424}

In[2]:= FindRoot[2200Log[16*10^4/(16*10^4-2680t)]-9.8t-1000,{t,30}]
Out[2]:={t->25.9424}

In[3]:= FindRoot[2200Log [16*10^4/(16*10^4-2680t)]-9.8t-1000,{t,20,30}]
Out[3]= {t->25.9424}
```

Uma questão que surge naturalmente ao usar o comando `FindRoot` *é:*

Como foi implementada esta rotina? Por que razão temos de fornecer outros dados como input para além da função que define a equação a resolver?

Procurando informação obtemos:

'`FindRoot` *uses a damped* **Newton's method**, *the* **secant method**, *and Brent's method.'*

- *Solução obtida com o* Matlab

```
>> fzero(@(t)2200*log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000,[20,30])
ans = 25.9424

>> fzero(@(t)2200*log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000, 20)
ans = 25.9424

>> fzero(@(t)2200*log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000, 30)
ans = 25.9424
```

Ao procurar informação sobre o comando `fzero`*, encontramos:*

'The `fzero` *command is a function file. The algorithm, created by T. Dekker, uses a combination of* **bisection**, **secant**, *and inverse quadratic interpolation methods.'*

Ao longo deste capítulo, vamos explicar em que consistem os métodos da bisseção, de Newton, da secante e do ponto fixo. São deduzidos os algoritmos, é estudada a convergência dos métodos e são obtidas fórmulas que permitem estimar os erros das aproximações calculadas.

Métodos iterativos e majorações de erros

Definição 2. *Um* método iterativo *para o cálculo da solução z de uma equação (não linear) de variável real é um processo que gera, a partir de iteradas iniciais $x_{-k}, ..., x_0$, uma sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ de números reais, que devem ser facilmente calculáveis, e a qual, em certas condições, será convergente para z.*

Uma vez demonstrada a convergência do método iterativo, uma iterada x_n, com n suficientemente grande, poderá ser usada como aproximação da solução exata z.

Também se usa a expressão *raiz da equação* com o mesmo significado que *solução da equação.* Note-se que qualquer equação se pode escrever na forma

$$f(x) = 0\,. \tag{1}$$

Com base na formulação (1), iremos estudar o *método da bisseção*, o *método de Newton* e o *método da secante.*

Ao considerarmos uma aproximação $\tilde{z}$ para um zero z de uma função f (por exemplo, um termo x_n da sucessão gerada por um método iterativo), podemos majorar o erro $z - \tilde{z}$ usando o seguinte resultado elementar.

Teorema 2. *Seja $f \in C^1([a,b])$ e sejam $z, \tilde{z} \in [a,b]$. Se $f(z) = 0$ e f' não se anula em $[a,b]$ então*

$$|z - \tilde{z}| \leq \frac{|f(\tilde{z})|}{\min_{x\in[a,b]} |f'(x)|}.$$

Demonstração. Pelo Teorema de Lagrange, existe $c \in]a,b[$ tal que

$$f(z) - f(\tilde{z}) = f'(c)(z - \tilde{z}).$$

Como $f(z) = 0$ e f' não se anula em $[a,b]$, tem-se

$$|z - \tilde{z}| = \frac{|f(\tilde{z})|}{|f'(c)|} \leq \frac{|f(\tilde{z})|}{\min_{x\in[a,b]} |f'(x)|}.$$

□

Observamos ainda que qualquer equação se pode escrever na forma

$$x = g(x). \tag{2}$$

Neste caso, diz-se que uma solução de (2) é *ponto fixo de g*. O método iterativo definido pela sucessão

$$x_{n+1} = g(x_n),\ n = 0, 1, 2, ...$$

designa-se por *método de ponto fixo* com *função iteradora g*. São métodos a um passo, cuja implementação computacional é muito fácil desde que seja fácil definir e implementar a função g.

As noções de ordem e fator assintótico de convergência permitem comparar a rapidez de convergência com que diferentes métodos iterativos convergem e escolher, para cada problema, o método mais rápido.

Definição 3. *Diz-se que uma sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ convergente para z possui*

- *convergência de ordem 1 (convergência linear) com coeficiente assintótico de convergência $K_\infty \in (0, 1)$ se*

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|} = K_\infty;$$

- *convergência de ordem $p > 1$, (convergência supralinear) com coeficiente assintótico de convergência $K_\infty > 0$ se*

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|^p} = K_\infty.$$

  No caso $p = 2$ diz-se que há convergência quadrática.

Método da bisseção

Seja $f \in C([a, b])$ tal que $f(a)f(b) < 0$, pelo que f tem pelo menos um zero z no intervalo $[a, b]$. Suponhamos que é o único zero de f em $[a, b]$.

Vamos fazer a dedução do algoritmo do método da bisseção. Este método consiste em construir a partir do intervalo $I_0 := I$ uma sucessão de subintervalos

$$I_n = [a_n, b_n] \subset I, \quad n \in \mathbb{N},$$

e uma sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ cujos termos são os pontos médios desses intervalos.

Para cada $n \in \mathbb{N}_0$, calculamos uma nova iterada x_{n+1} e selecionamos o subintervalo $I_{n+1} = [a_{n+1}, b_{n+1}]$ de $I_n = [a_n, b_n]$ do seguinte modo:

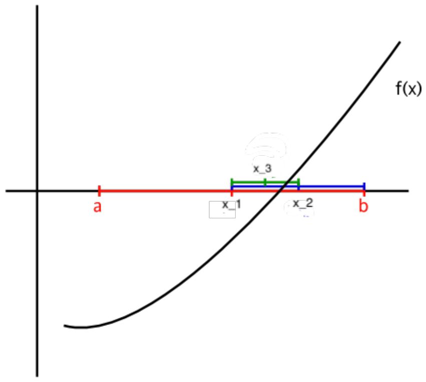

Figura 2: Ilustração do método da bisseção. Aqui, x_i é o ponto médio de cada subintervalo.

- $x_{n+1} = \dfrac{a_n + b_n}{2}$;
- se $f(x_{n+1}) = 0$ então $z = x_{n+1}$ e o algoritmo termina;
- se $f(a_n)f(x_{n+1}) < 0$ então $a_{n+1} = a_n$, $b_{n+1} = x_{n+1}$;
- se $f(b_n)f(x_{n+1}) < 0$ então $a_{n+1} = x_{n+1}$, $b_{n+1} = b_n$.

Em alternativa, e de forma equivalente, o método da bisseção pode descrever-se analiticamente pelas fórmulas:

$$x_1 = \frac{a+b}{2};\ x_{n+1} = x_n + \frac{b-a}{2^{n+1}}\text{sign}[f(a)f(x_n)],\ n \in \mathbb{N}.$$

Quanto à convergência deste processo iterativo e estimativas dos erros inerentes às aproximações $z \approx x_n$, tem-se:

Teorema 3. *Seja $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ uma função contínua tal que $f(a)f(b) < 0$ e seja z o único zero de f no intervalo $[a, b]$. Então a sucessão gerada pelo método da bisseção converge para z e são válidas as seguintes majorações dos erros*

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{b_n - a_n}{2} = |x_{n+1} - x_n|, \quad n = 1, 2, ... \tag{3}$$

$$|z - x_n| \leq \left(\frac{1}{2}\right)^n (b - a), \quad n = 1, 2, ... \tag{4}$$

Demonstração. É claro que $f \in C([a, b])$ e $f(a)f(b) < 0$ garantem a existência de um zero de f em $]a, b[$. Começamos por observar que a sucessão de intervalos $\{I_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ e a sucessão de números reais $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ geradas pelo método da bisseção satisfazem:

1. $z \in I_n$, $\forall n \in \mathbb{N}_0$,

2. $x_n, x_{n+1} \in I_n$, $\forall n \in \mathbb{N}$, e tem-se $x_n = a_n$ ou $x_n = b_n$,

3. $|I_n| := b_n - a_n = \dfrac{b-a}{2^n}$, $\forall n \in \mathbb{N}_0$.

Para cada $n \in \mathbb{N}_0$, como $z, x_{n+1} \in I_n$, tem-se

$$|z - x_{n+1}| \leq \begin{cases} x_{n+1} - a_n, \text{ se } z \in [a_n, x_{n+1}], \\ b_n - x_{n+1}, \text{ se } z \in [x_{n+1}, b_n], \end{cases} \tag{5}$$

e como $x_{n+1} = \frac{a_n+b_n}{2}$, tem-se ainda

$$x_{n+1} - a_n = b_n - x_{n+1} = \frac{b_n - a_n}{2}.$$

Assim,

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{b_n - a_n}{2}. \tag{6}$$

De (5) resulta também

$$|z - x_{n+1}| \leq \begin{cases} x_{n+1} - x_n = |x_{n+1} - x_n|, \text{ se } x_n = a_n, \\ x_n - x_{n+1} = |x_{n+1} - x_n|, \text{ se } x_n = b_n. \end{cases}$$

Finalmente, usando o facto de

$$b_n - a_n = (b-a)/2^n,$$

da desigualdade (6) obtém-se

$$|z - x_{n+1}| \leq (b-a)/2^{n+1}.$$

Quanto à convergência do método, como a sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ satisfaz

$$0 \leq |z - x_n| \leq \left(\frac{1}{2}\right)^n (b-a), \forall n \in \mathbb{N},$$

e $\lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{2}\right)^n = 0$, tem-se

$$\lim_{n\to\infty} |z - x_n| = 0$$

e portanto $\lim_{n\to\infty} x_n = z$. $\square$

A implementação computacional do método da bisseção pode ser feita em MATLAB através da seguinte função:

```
function [zero,res,niter] = Met_Bissecao(f,a,b,tol,nmax)
% Met_Bissecao tenta encontrar um zero da função f no intervalo [a,b]
%              usando o método da bisseção
% f : função que descreve a equação f(x)=0
% a,b : extremos do intervalo inicial
% nmax : número máximo de iterações (critério de paragem)
% tol : tolerância para o erro (critério de paragem)
% zero,res,niter : valor aproximado para o zero, f(zero), número de
%                  iterações no qual a aproximação para zero foi calculada
if  f(a) == 0
   zero=a; res=0; niter=0;
   fprintf('Foi encontrada a raiz.');
   return;
elseif  f(b) == 0
    zero=b; res=0; niter=0;
    fprintf('Foi encontrada a raiz.');
    return;
elseif  f(a) * f(b) > 0
     error('f(a) e f(b) têm o mesmo sinal');
end;
niter=1; d=(b-a)/2;
aux=[a, (a+b)/2, b];
while (d >= tol) && (niter < nmax)
    if f(aux(2)) == 0
       d=0;
       fprintf('Foi encontrada a raiz.');
    else
       if f(aux(1))*f(aux(2))<0
           aux(3) = aux(2);
       else
           aux(1) = aux(2);
       end;
       aux(2)= (aux(1)+aux(3))/2;d=d/2;
     end;
     niter=niter + 1;
end;
if niter == nmax
     fprintf('Foi atingido o número máximo de iterações.')
end;
zero=aux(2); res=f(zero);
end
```

Exemplo 5. *Recorrendo à função/programa anterior, obtemos para o Exemplo 1*

```
>> f=@(t)2200*log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000

f = @(t)2200*log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000

>> [z,r,n]=Met_Bissecao(f,20,30,10^(-8),100)

z = 25.9424
r =-4.9591e-07
n = 30
```

ou apenas

```
>> Met_Bissecao(@(t)2200*log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-
                                          9.8*t-1000,20,30,10^(-8),100)
ans =  25.9424
```

Em resumo:

- O método da bisseção é um método iterativo a um passo.
- É sempre convergente desde que $f(a)f(b) < 0$, mas a convergência pode ser muito lenta.
- Não se pode afirmar que o método tem convergência linear mas apenas que tem semelhanças com métodos com convergência linear. Com efeito, a sucessão dos majorantes dos erros $\{\varepsilon_n\}_{n\in\mathbb{N}}$, $\varepsilon_n = (b-a)/2^n$, converge linearmente com constante assintótica $K_\infty = \frac{1}{2}$.
- As estimativas "a posteriori" $|z - x_{n+1}| \leq \frac{b_n - a_n}{2}$ ou $|z - x_{n+1}| \leq |x_{n+1} - x_n|$ podem ser utilizadas como critério de paragem para o método, em particular na implementação computacional.
- É útil para a localização de raízes e para a inicialização de métodos mais rápidos cuja convergência só é garantida com uma boa aproximação inicial (p. ex., o método de Newton).

Método de Newton ou da tangente

Algoritmo: Partindo de uma aproximação inicial x_0 para a solução z da equação $f(x) = 0$, o método de Newton constrói recursivamente uma sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$, sendo a iterada x_{n+1} calculada a partir de x_n do seguinte modo: considera-se a reta

$$r(x) = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n),$$

tangente à curva $(x, f(x))$ no ponto $(x_n, f(x_n))$, e x_{n+1} é a abcissa do ponto de interseção desta reta com o eixo dos x

$$r(x_{n+1}) = 0 \Leftrightarrow f(x_n) + f'(x_n)(x_{n+1} - x_n) = 0$$

ou seja, calcula-se sucessivamente

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

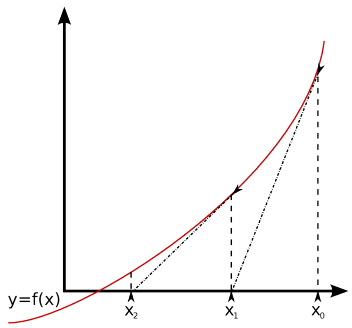

Figura 3: Interpretação geométrica do método de Newton

Vamos agora analisar a convergência deste processo iterativo. Convém reforçar que os resultados que se seguem descrevem *condições suficientes de convergência.*

Teorema 4. *Sejam $f \in C^2([a,b])$ e $x_0 \in [a,b]$ verificando as seguintes condições:*

(i) $f(a)f(b) < 0$;

(ii) $f'(x) \neq 0$, *para todo* $x \in [a,b]$;

(iii) $f''(x)f''(y) \geq 0$, *para todos* $x, y \in [a,b]$, *i.e.,* f'' *não muda de sinal em* $[a,b]$;

(iv) $f''(x)f(x_0) \geq 0$, *para todo* $x \in [a,b]$.

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in]a, b[$ e o método de Newton converge monotonamente para z.

Demonstração. As condições (i) e (ii) garantem a existência e unicidade de solução da equação $f(x) = 0$ no intervalo $[a, b]$.

Suponhamos que $f' < 0$ em $[a, b]$, $f'' \geq 0$ em $[a, b]$ (ou seja, f é convexa em $[a, b]$), e $f(x_0) \geq 0$. Os outros casos têm análise semelhante.

Começamos por notar que, pelo Teorema de Taylor, tem-se, para $x, y \in [a, b]$,

$$f(y) = f(x) + f'(x)(y - x) + \frac{f''(\theta)}{2}(y - x)^2, \text{ com } \theta \text{ entre } x \text{ e } y,$$

e, por ser $f''(\theta) \geq 0$, é válida a seguinte condição

$$f(y) \geq f(x) + f'(x)(y - x), \forall x, y \in [a, b]. \tag{7}$$

Em termos geométricos, isto significa que o gráfico de f fica acima ou sobre todas as suas retas tangentes. Tem-se então

$$x_1 - x_0 = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \geq 0$$

e usando a condição (7),

$$z - x_1 = z - x_0 + \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = z - x_0 - \frac{f(z) - f(x_0)}{f'(x_0)} \geq z - x_0 - \frac{f'(x_0)(z - x_0)}{f'(x_0)} = 0,$$

pelo que $x_0 \leq x_1 \leq z$ e $f(x_1) \geq 0$. Repetindo o mesmo argumento com x_1 e sucessivamente com uma iterada genérica x_n satisfazendo $f(x_n) \geq 0$ e $f'(x_n) < 0$, obtém-se

$$a \leq x_0 \leq ... \leq x_n \leq x_{n+1} \leq z \leq b, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

Assim, a sucessão $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ gerada pelo método de Newton é monótona e limitada, logo convergente. Passando ao limite em ambos os lados da igualdade

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},$$

o que é possível dado que a função $x \mapsto x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ é contínua, e usando a unicidade da raiz de f, conclui-se que $\lim_{n\to\infty} x_n = z$. □

Exemplo 6. *Consideremos a equação $x^5 - 5x + 1 = 0$. O método de Newton com iterada inicial $x_0 = 0$ converge para a raiz situada em $[0, 1]$. De facto tem-se*

$$f(x) = x^5 - 5x + 1, \quad f'(x) = 5x^4 - 5, \quad f''(x) = 20x^3, \quad f \in C^\infty(\mathbb{R})$$

(i) $f(0)f(0.5) < 0$,

(ii) $f'(x) > 0$, $\forall x \in [0, 0.5]$,

(iii) $f''(x) > 0$, $\forall x \in [0, 0.5]$,

(iv) $f(0)f''(x) \geq 0$, $\forall x \in [0, 0.5]$.

As quatro primeiras iteradas são:

$$x_1 = 0.2,\ x_2 = 0.20006410256410256,$$

$$x_3 = 0.2000641026299754,\ x_4 = 0.2000641026299754$$

onde x_3 parece ter já 16 dígitos corretos. De facto, obtém-se $f(x_3) = 0$.

Teorema 5. *Seja $f \in C^2([a, b])$ verificando as seguintes condições:*

(i) $f(a)f(b) < 0$*;*

(ii) $f'(x) \neq 0$*, para todo* $x \in [a, b]$*;*

(iii) $f''(x)f''(y) \geq 0$*, para todos* $x, y \in [a, b]$*;*

(iv) $\left|\dfrac{f(a)}{f'(a)}\right| \leq b - a$ *e* $\left|\dfrac{f(b)}{f'(b)}\right| \leq b - a$.

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in]a, b[$ e o método de Newton converge para z, qualquer que seja a aproximação inicial $x_0 \in [a, b]$. A convergência é monótona, pelo menos, a partir de x_1.

Demonstração. Supomos que estamos nas condições da demonstração anterior: $f'' \geq 0$ em $[a, b]$ e $f' < 0$ em $[a, b]$. Basta mostrar que, se $f(x_0) < 0$ então $f(x_1) \geq 0$ e, a partir daí, aplica-se o teorema anterior com iterada inicial x_1. Como $f'(x_0) < 0$ e $f'' \geq 0$ em $[a, b]$, por (7) tem-se

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

e falta mostrar que $x_1 \geq a$. De (iv) e das propriedades de f resulta

$$\frac{f(b)}{f'(b)} = \left|\frac{f(b)}{f'(b)}\right| \leq b - a$$

e obtemos em primeiro lugar

$$a \leq b - \frac{f(b)}{f'(b)}.$$

Atendendo às propriedades de f', temos ainda

$$b - \frac{f(b)}{f'(b)} = b + \frac{f(x_0) - f(b) - f(x_0)}{f'(b)}$$
$$\leq b + \frac{f'(b)(x_0 - b) - f(x_0)}{f'(b)} = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(b)} \leq x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

e portanto $x_1 \geq a$. □

Exemplo 7. *Voltando à equação $x^5 - 5x + 1 = 0$, tem-se*

(i) $f(1.2)f(2) < 0$,

(ii) $f'(x) > 0$, $\forall x \in [1.2, 2]$,

(iii) $f''(x) > 0$, $\forall x \in [1.2, 2]$,

(iv) $\left|\frac{f(1.2)}{f'(1.2)}\right| = 0.467899 < 0.8 = 2 - 1.2$ *e* $\left|\frac{f(2)}{f'(2)}\right| = 0.306667 < 0.8$.

pelo que o método de Newton converge para a raiz situada em $[1, 2]$ qualquer que seja a iterada inicial em $[1.2, 2]$. Com $x_0 = 1.2$ obtém-se

$$x_1 = 1.667898658718331,\ x_2 = 1.5026432407382488,\ x_3 = 1.4466354738472695,$$

$$x_4 = 1.440567546039673`,\ x_5 = 1.4405004054943116,\ x_6 = 1.4405003973415602.$$

Recorrendo à fórmula dada pelo Teorema 2, como $z, x_6 \in [x_0, x_1]$ e f' é positiva e crescente neste intervalo, obtém-se a seguinte estimativa de erro para a iterada x_6

$$|z - x_6| \leq \frac{|f(x_6)|}{f'(x_0)} = 1.65458 \times 10^{-16} \leq 0.5 \times 10^{1-16}$$

o que indica 16 algarismos significativos em x_6.

Note-se que, neste caso, não se pode usar $x_0 = 1$ como iterada inicial para o método de Newton pois $f'(1) = 0$.

Exemplo 8. *O método de Newton pode também ser aplicado para aproximar a raiz da equação situada em $[-2, -1]$. Por exemplo, com $x_0 = -2$ obtém-se*

$$x_1 = -1.72,\ x_2 = -1.5792989495987024,\ x_3 = -1.5437399570936166,$$

$$x_4 = -1.5416585319893747,\ x_5 = -1.5416516841784458,\ x_6 = -1.5416516841045247.$$

Aplicando o Teorema 5 no intervalo $[-2, -1.3]$, fica garantida a convergência do método de Newton com qualquer iterada neste intervalo.

Os Teoremas anteriores apenas asseguram a convergência do método. Com a finalidade de estudar detalhadamente os erros inerentes à aplicação do método de Newton assim como a rapidez de convergência do método, vamos começar por supor que f é uma função de classe C^2 num certo intervalo I_n contendo z e uma iterada genérica x_n, e que $f'(x) \neq 0$, para todo $x \in I_n$. Pelo Teorema de Taylor, tem-se

$$0 = f(z) = f(x_n) + (z - x_n)f'(x_n) + \frac{(z - x_n)^2}{2} f''(\xi_n)$$

com ξ_n entre z e x_n. Como, por hipótese, $f'(x_n) \neq 0$, pode-se escrever

$$0 = \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} + z - x_n + \frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)}(z - x_n)^2.$$

Assim, nas condições referidas, é válida a relação

$$z - x_{n+1} = -\frac{f''(\xi_n)}{2f'(x_n)}(z - x_n)^2 \tag{8}$$

entre os erros de duas iteradas consecutivas do método de Newton. Esta relação sugere desde já a convergência quadrática do método de Newton. De (8) resultam as majorações para os erros

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{\max_{x \in I_n} |f''(x)|}{2|f'(x_n)|}|z - x_n|^2 \tag{9}$$

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{\max_{x \in I_n} |f''(x)|}{2\min_{x \in I_n} |f'(x)|}|z - x_n|^2. \tag{10}$$

Supondo que existe um intervalo I (independente de n) que contém todas as iteradas do método de Newton e tal que $f \in C^2(I)$ e $f' \neq 0$ em I, podemos definir

$$K := \frac{\max_{x \in I} |f''(x)|}{2\min_{x \in I} |f'(x)|},$$

que é uma constante independente de n, e (10) fica

$$|z - x_{n+1}| \leq K|z - x_n|^2, \forall n \in \mathbb{N}. \tag{11}$$

Daqui resulta a fórmula de majoração dos erros *a priori*

$$|z - x_n| \leq \frac{1}{K}(K|z - x_0|)^{2^n}, \forall n \in \mathbb{N}, \tag{12}$$

uma vez que se tem, sucessivamente,

$$\begin{aligned}
|z - x_n| &\leq K|z - x_{n-1}|^2 \\
&\leq K(K|z - x_{n-2}|^2)^2 = k^3|z - x_{n-2}|^4 \\
&\leq \ldots \\
&\leq K^{2^n-1}(K|z - x_0|)^{2^n}.
\end{aligned}$$

Note-se que (12) só é útil em situações práticas quando $K|z - x_0| < 1$.

As estimativas (11) e (12) permitem obter o seguinte resultado de convergência local para o método de Newton:

Teorema 6. *Seja f uma função de classe C^2 numa vizinhança de z, zero simples de f. Então existe $\epsilon > 0$ tal que se x_0 for escolhido em $\overline{V_\epsilon}(z) := [z - \epsilon, z + \epsilon]$, o método de Newton converge para z, pelo menos, quadraticamente.*

Demonstração. Existe $\epsilon_* > 0$ tal que $f \in C^2(\overline{V_{\epsilon_*}}(z))$ e $f'(x) \neq 0$ para todo $x \in \overline{V_{\epsilon_*}}(z)$. Para valores de $0 < \epsilon \leq \epsilon_*$, a constante

$$K(\epsilon) := \frac{\max_{x \in I(\epsilon)} |f''(x)|}{2 \min_{x \in \overline{V_\epsilon}(z)} |f'(x)|}$$

está bem definida.

Agora supomos que $x_0 \in \overline{V_\epsilon}(z)$ $(0 < \epsilon \leq \epsilon_*)$, ou seja $|z - x_0| \leq \epsilon$ e de (11) obtemos

$$|z - x_1| \leq K(\epsilon)|z - x_0|^2 \leq K(\epsilon)\epsilon^2.$$

Fixamos $0 < \delta < 1$ e se ϵ for tal que $K(\epsilon)\epsilon \leq \delta$, tem-se $|z - x_1| \leq \epsilon$, i.e, $x_1 \in \overline{V_\epsilon}(z)$. Em geral, mostramos que $x_n \in \overline{V_\epsilon}(z) \Rightarrow x_{n+1} \in \overline{V_\epsilon}(z)$ quando $K(\epsilon)\epsilon \leq \delta$. Usando (12) obtém-se

$$|z - x_n| \leq \frac{1}{K(\epsilon)}[K(\epsilon)|z - x_0|]^{2^n} \leq \frac{1}{K(\epsilon)}[K(\epsilon)\epsilon]^{2^n} \leq \frac{\delta^{2^n}}{K(\epsilon)}$$

e como $0 < \delta < 1$,

$$\lim_{n \to \infty} |z - x_n| \leq \lim_{n \to \infty} \frac{\delta^{2^n}}{K(\epsilon)} = 0.$$

Quanto à ordem de convergência, tem-se

$$\lim_{n \to \infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|^2} = \lim_{n \to \infty} \frac{|f''(\xi_n)|}{2|f'(x_n)|} = \frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|}$$

pelo que a convergência é quadrática quando $f''(z) \neq 0$ e de ordem superior a 2 se $f''(z) = 0$. □

Os Teoremas 4 e 5 dão *condições suficientes* para f ter um único zero num intervalo $[a, b]$ bem definido e haver convergência da sucessão gerada pelo método de Newton a partir de qualquer iterada inicial dentro desse intervalo. Se uma das condições desses teoremas não for válida em $[a, b]$, pode existir um subintervalo de $[a, b]$ onde as mesmas sejam válidas. Existindo um zero z de f pode ser possível provar convergência com condições mais fracas. Quando provamos a convergência local, não referimos um conjunto explicitamente definido para escolher iteradas iniciais que garantem a convergência do método iterativo, apenas mostramos que uma tal vizinhança de z existe. Ainda assim, o Teorema 6 é bastante importante, na medida em que assegura a convergência do método de Newton para calcular zeros simples, bastando que f seja de classe C^2 numa vizinhança de tais zeros e que as iteradas iniciais estejam suficientemente próximas de z.

Em resumo:

- O método de Newton é um método iterativo a um passo.
- É localmente convergente quando z é zero simples de uma função de classe C^2 numa vizinhança de z. Neste caso, a convergência é rápida, pelo menos quadrática.
- Não é garantido que o método de Newton convirja se tomarmos x_0 muito longe da solução que se pretende calcular. Por exemplo, a reta tangente que origina cada nova iterada pode ser paralela ou quase paralela ao eixo dos x.
- Havendo duas funções a avaliar com cada iteração (no cálculo de $f(x_k)$ e $f'(x_k)$), este método pode ter um custo computacional elevado.
- Se a representação funcional da derivada f' for computacionalmente simples, a implementação computacional do método de Newton é bastante simples. Mas nem sempre é possível um tratamento explícito e com custo computacional baixo das derivadas.

Mais à frente, veremos que a estimativa assintótica

$$|z - x_{n+1}| \leq |x_{n+1} - x_n|$$

pode ser utilizada como critério de paragem na implementação computacional do método de Newton.

Método da secante

Algoritmo: O método da secante parte de duas aproximações iniciais dadas, digamos x_{-1} e x_0, da solução z da equação $f(x) = 0$, e constrói a iterada genérica x_{n+1} a partir de x_{n-1} e x_n do seguinte modo: considera-se a reta secante à curva $(x, f(x))$ nos pontos $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$ e $(x_n, f(x_n))$, a qual é dada por

$$r(x) = f(x_n) + \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}(x - x_n),$$

e obtém-se x_{n+1} como sendo a abcissa do ponto de interseção desta reta com o eixo dos x

$$r(x_{n+1}) = 0 \Leftrightarrow f(x_n) + \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}(x_{n+1} - x_n) = 0$$

ou seja, calcula-se sucessivamente

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

É fácil ver que podemos também escrever

$$x_{n+1} = \frac{x_{n-1}f(x_n) - x_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \tag{13}$$

ou ainda

$$x_{n+1} = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Do ponto de vista computacional, deve-se evitar um algoritmo baseado em (13).

Quanto à convergência global do método da secante, são válidas condições suficientes de convergência semelhantes às do método de Newton.

Teorema 7. *Sejam $x_{-1}, x_0 \in [a, b]$ e $f \in C^2([a, b])$ verificando as seguintes condições:*

(i) $f(a)f(b) < 0$;

(ii) $f'(x) \neq 0$, *para todo* $x \in [a, b]$;

(iii) $f''(x)f''(y) \geq 0$, *para todos* $x, y \in [a, b]$;

(iv) $f(x_{-1})f''(x) \geq 0$ *e* $f(x_0)f''(x) \geq 0$ *para todo* $x \in [a, b]$.

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in]a, b[$ e o método da secante com iteradas iniciais x_{-1} x_0 converge para z.

Demonstração. Novamente, as condições (i) e (ii) garantem a existência e unicidade de solução da equação $f(x) = 0$ no intervalo $[a, b]$.

Suponhamos que $f' > 0$ em $[a, b]$ e f é convexa em $[a, b]$. Os outros casos têm análise semelhante. Por hipótese, $f(x_{-1}), f(x_0) \geq 0$ e podemos supor $x_{-1} > x_0$. Pela convexidade de f, $f(x_{-1}) \geq f(x_0) + f'(x_0)(x_{-1} - x_0)$, donde

$$0 < f'(x_0) \leq \frac{f(x_{-1}) - f(x_0)}{x_{-1} - x_0}.$$

Assim, o declive da reta secante nos pontos $(x_{-1}, f(x_{-1}))$ e $(x_0, f(x_0))$ é superior ou igual ao declive da reta tangente em $(x_0, f(x_0))$. Tem-se então

$$x_1 - x_0 = -\frac{f(x_0)(x_0 - x_{-1})}{f(x_0) - f(x_{-1})} = -\frac{f(x_0)}{\frac{f(x_{-1}) - f(x_0)}{x_{-1} - x_0}} \leq 0.$$

e

$$z \leq x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \leq x_0 - \frac{f(x_0)(x_{-1} - x_0)}{f(x_{-1}) - f(x_0)},$$

sendo a primeira desigualdade já conhecida para o método de Newton. Assim, $z \leq x_1 \leq x_0 \leq x_{-1}$ e $f(x_1) \geq 0$. Repetindo o mesmo argumento com x_0 e x_1 e sucessivamente com iteradas genéricas $x_{n-1} > x_n$, as quais satisfazem $f(x_{n-1}), f(x_n) \geq 0$ e $f'(x_n) > 0$, obtém-se

$$z \leq ... \leq x_{n+1} \leq x_n \leq ... \leq x_0 \leq x_{-1} \leq b, \quad \forall n \in \mathbb{N}.$$

A sucessão $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ é monótona e limitada, logo é convergente. Usando o Teorema de Lagrange, podemos escrever

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(\xi_n)}, \ \xi_n \in]x_n, x_{n-1}[.$$

Passando ao limite em ambos os lados da igualdade $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(\xi_n)}$ e usando a unicidade da raiz de f, conclui-se que $\lim_{n \to \infty} x_n = z$. □

Teorema 8. *Seja $f \in C^2([a, b])$ verificando as seguintes condições:*

(i) $f(a)f(b) < 0$;

(ii) $f'(x) \neq 0$, *para todo* $x \in [a, b]$;

(iii) $f''(x)f''(y) \geq 0$, *para todos* $x, y \in [a, b]$;

(iv) $\left|\frac{f(a)}{f'(a)}\right| \leq b - a$ *e* $\left|\frac{f(b)}{f'(b)}\right| \leq b - a$.

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in]a, b[$ e o método da secante converge para z, quaisquer que sejam as aproximações iniciais $x_{-1}, x_0 \in [a, b]$.

Vamos agora obter uma relação entre o erro de uma iterada e os erros das duas iteradas anteriores que lhe dão origem.

Teorema 9. *Seja f uma função de classe C^2 numa vizinhança I_n de x_{n-1}, x_n e z, e suponhamos que f não se anula nessa vizinhança. Então existem μ_n, $\nu_n \in I_n$ tais que*

$$z - x_{n+1} = -\frac{f''(\mu_n)}{2f'(\nu_n)}(z - x_n)(z - x_{n-1})$$

Demonstração. Tem-se

$$z - x_{n+1} = z - x_n + \frac{f(x_n)(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})} = z - x_n - \frac{f(x_n)[(z - x_n) - (z - x_{n-1})]}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Para simplificar a apresentação, seja $e_k := z - x_k$. Então

$$e_{n+1} = e_n - \frac{f(x_n)(e_n - e_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})} = -\frac{e_{n-1}f(x_n) - e_n f(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})} = -e_{n-1}e_n \frac{\frac{f(x_n)}{e_n} - \frac{f(x_{n-1})}{e_{n-1}}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Pondo $F(x) := f(x)/(z - x)$, podemos escrever

$$e_{n+1} = -e_{n-1}e_n \frac{F(x_n) - F(x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Note-se que a função F está definida e é diferenciável em z: de

$$F'(x) = \frac{f'(x)(x - z) - f(x)}{(x - z)^2}$$

e

$$0 = f(x) + f'(x)(x - z) + f''(\xi(x))\frac{(z - x)^2}{2}, \text{ com } \xi(x) \text{ entre } x \text{ e } z,$$

resulta

$$F'(x) = \frac{f''(\xi(x))}{2} \text{ e } \lim_{x \to z} F'(x) = \frac{f''(z)}{2}.$$

Então, existem ν_n entre x_n e x_{n-1} e μ_n num intervalo que contém x_n e x_{n-1} e z tais que

$$f(x_n) - f(x_{n-1}) = f'(\nu_n)(x_n - x_{n-1})$$

$$F(x_n) - F(x_{n-1}) = F'(\zeta_n)(x_n - x_{n-1}) = \frac{f''(\mu_n)}{2}(x_n - x_{n-1})$$

donde se conclui $e_{n+1} = -e_{n-1}e_n \dfrac{f''(\mu_n)}{2f'(\nu_n)}$. □

Do teorema anterior resulta a fórmula de majoração dos erros

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{\max_{x \in I_n} |f''(x)|}{2 \min_{x \in I_n} |f'(x)|} |z - x_n||z - x_{n-1}|. \tag{14}$$

Estamos em condições de estabelecer a convergência local do método da secante e indicar a sua ordem de convergência.

Teorema 10. *Seja f uma função de classe C^2 numa vizinhança de z, zero simples de f. Então existe $\epsilon > 0$ tal que se x_{-1} e x_0 forem escolhidos em $\overline{V_\epsilon}(z) := [z - \epsilon, z + \epsilon]$, o método da secante converge para z. Se $f''(z) \neq 0$, a ordem de convergência é $p = (1 + \sqrt{5})/2 \approx 1.6180$. Se $f''(z) = 0$, a convergência é de ordem superior a $p = (1 + \sqrt{5})/2$.*

Demonstração. Existe $\epsilon_* > 0$ tal que $f \in C^2(\overline{V_{\epsilon_*}}(z))$ e $f'(x) \neq 0$ para todo $x \in \overline{V_{\epsilon_*}}(z)$. Para valores de $0 < \epsilon \leq \epsilon_*$

$$K(\epsilon) := \frac{\max_{x \in \overline{V_\epsilon}(z)} |f''(x)|}{2 \min_{x \in \overline{V_\epsilon}(z)} |f'(x)|}$$

está bem definido.

Agora supomos que $x_{-1}, x_0 \in \overline{V_\epsilon}(z)$, ou seja $|z - x_{-1}|, |z - x_0| \leq \epsilon$ e de (14) obtemos

$$|z - x_1| \leq K(\epsilon)|z - x_0||z - x_{-1}| \leq K(\epsilon)\epsilon^2.$$

Fixamos $0 < \delta < 1$ e se ϵ for tal que $K(\epsilon)\epsilon \leq \delta < 1$, tem-se

$$|z - x_1| \leq \epsilon \Leftrightarrow x_1 \in \overline{V_\epsilon}(z).$$

Em geral, mostramos que $x_{n-1}, x_n \in \overline{V_\epsilon}(z) \Rightarrow x_{n+1} \in \overline{V_\epsilon}(z)$ quando $K(\epsilon)\epsilon \leq \delta$. Usando (14) obtém-se sucessivamente

$$|e_1| \leq K(\epsilon)|e_0||e_{-1}| = \frac{1}{K(\epsilon)}(K(\epsilon)|e_{-1}|)(K(\epsilon)|e_0|)$$

$$|e_2| \leq K(\epsilon)|e_1||e_0| \leq K(\epsilon)^2|e_{-1}||e_0|^2 = \frac{1}{K(\epsilon)}(K(\epsilon)|e_{-1}|)(K(\epsilon)|e_0|)^2$$

$$|e_3| \leq K(\epsilon)|e_2||e_1| \leq K(\epsilon)^4|e_{-1}|^2|e_0|^3 = \frac{1}{K(\epsilon)}(K(\epsilon)|e_{-1}|)^2(K(\epsilon)|e_0|)^3$$

e pode-se mostrar, por indução, que

$$|e_n| \leq \frac{1}{K(\epsilon)}(K(\epsilon)|e_{-1}|)^{\phi_{n-2}}(K(\epsilon)|e_0|)^{\phi_{n-1}},$$

onde $\{\phi_n\}$ é a sucessão de Fibonacci, definida por

$$\phi_{-1} = \phi_0 = 1;\ \phi_n = \phi_{n-1} + \phi_{n-2},\ n = 1, 2, ...$$

De

$$\begin{aligned}
|e_n| &\leq \frac{1}{K(\epsilon)}(\max\{K(\epsilon)|e_{-1}|, K(\epsilon)|e_0|\})^{\phi_{n-2}}(\max\{K(\epsilon)|e_{-1}|, K(\epsilon)|e_0|\})^{\phi_{n-1}} \\
&= \frac{1}{K(\epsilon)}(\max\{K(\epsilon)|e_{-1}|, K(\epsilon)|e_0|\})^{\phi_n} \\
&\leq \frac{1}{K(\epsilon)}(K(\epsilon)\max\{|e_{-1}|, |e_0|\})^{\phi_n} \leq \frac{1}{K(\epsilon)}\delta^{\phi_n}
\end{aligned}$$

onde $0 < \delta < 1$, resulta $\lim\limits_{n\to\infty} |z - x_n| \leq \lim\limits_{n\to\infty} \dfrac{\delta^{\phi_n}}{K(\epsilon)} = 0$, pois $\lim_{n\to\infty} \phi_n = +\infty$.

Quanto à ordem de convergência, supondo que $x_n \to z$, começamos por notar que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n||z - x_{n-1}|} = \lim_{n\to\infty} \frac{|f''(\mu_n)|}{2|f'(\nu_n)|} = \frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|}.$$

Este limite é positivo se $f''(z) \neq 0$. Nestas condições, vamos determinar $p \geq 1$ e $K_\infty > 0$ tais que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|^p} = K_\infty.$$

Para tal, escrevemos:

$$\frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|} = \lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n||e_{n-1}|} = \lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^p} \frac{|e_n|^{p-1}}{|e_{n-1}|^{p^2-p}} |e_{n-1}|^{p^2-p-1}$$

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^p} \left(\frac{|e_n|}{|e_{n-1}|^p}\right)^{p-1} |e_{n-1}|^{p^2-p-1} = \left(\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^p}\right)^p \lim_{n\to\infty} |e_{n-1}|^{p^2-p-1}$$

Como $\frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|} \neq 0$ e pretendemos $K_\infty > 0$, devemos ter $p^2 - p - 1 = 0$ e $p \geq 1$, ou seja, a ordem de convergência é $p = (1 + \sqrt{5})/2$. Assim,

$$\left(\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^p}\right)^p = \frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|}$$

e conclui-se que $K_\infty = \left(\frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|}\right)^{\frac{1}{p}} = \left(\frac{|f''(z)|}{2|f'(z)|}\right)^{p-1}$. $\square$

Em resumo:

- O método da secante é um método iterativo a dois passos.
- É localmente convergente quando z é zero simples de uma função de classe C^2 numa vizinhança de z. A convergência é supralinear, mais rápida do que no método da bisseção.
- Não requer o uso da derivada da função, a qual nem sempre está disponível nas aplicações. Assim, o método da secante requer apenas a avaliação de uma função por iteração, em comparação com o método de Newton, que exige duas.
- Tal como no método de Newton, não é garantido que o método da secante convirja se tomarmos x_0 muito longe da solução exata.

A seguir, veremos que a estimativa assintótica "a posteriori" $|z - x_{n+1}| \leq |x_{n+1} - x_n|$ pode ser utilizada como critério de paragem na implementação computacional do método da secante.

Sobre a implementação computacional dos métodos de Newton e da secante

Já observámos que as estimativas "a posteriori"

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{b_n - a_n}{2}$$

ou

$$|z - x_{n+1}| \leq |x_{n+1} - x_n| \tag{15}$$

dão boa indicação de quando terminar o cálculo as iterações do método da bisseção.

Vamos ver que (15) pode também ser utilizada como critério de paragem na implementação dos métodos de Newton e da secante. Suponhamos que $\{x_n\}$ é uma sucessão gerada por um destes métodos e que é convergente para z, zero simples de uma função f. Se f é de classe C^2 num intervalo que contém todas as iteradas x_n, recordando (11) e (14), tem-se

- $|e_{n+1}| \leq K|e_n|^2$, no caso do método de Newton,
- $|e_{n+1}| \leq K|e_n||e_{n-1}|$, no caso do método da secante,

onde, para simplificar, usámos a notação $e_k := z - x_k$. Como $\lim_{n\to\infty} |e_n| = 0$, existe $m \in \mathbb{N}$ tal que

$$K|e_n| \leq C \leq \frac{1}{2}, \text{ para } n \geq m.$$

Então,

$$|e_{n+1}| \leq C|e_n|, \text{ para } n \geq m$$

e

$$\begin{aligned} |e_{n+1}| &\leq C|e_n| = C|z - x_n| = C|z - x_{n+1} + x_{n+1} - x_n| \\ &\leq C|z - x_{n+1}| + C|x_{n+1} - x_n| = C|e_{n+1}| + C|x_{n+1} - x_n|, \text{ quando } n \geq m. \end{aligned}$$

Daqui resulta

$$(1 - C)|e_{n+1}| \leq C|x_{n+1} - x_n|$$

ou seja, tem-se

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{C}{1 - C}|x_{n+1} - x_n| \leq |x_{n+1} - x_n|, \text{ quando } n \geq m.$$

Assim, para n suficientemente grande, se $|x_{n+1} - x_n| \leq \varepsilon$ então $|z - x_{n+1}| \leq \varepsilon$, o que justifica implementar $|x_{n+1} - x_n| \leq \varepsilon$ como critério de paragem para os métodos de Newton e da secante. Mais precisamente, este critério de paragem é válido para qualquer método que possua convergência supralinear.

Métodos de ponto fixo

O método de Newton

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \; n = 0, 1, ...$$

pode escrever-se na forma

$$x_{n+1} = g(x_n), \; n = 0, 1, ...$$

com a função g definida por $g(x) = x - \dfrac{f(x)}{f'(x)}$. Se g for contínua num intervalo que contém todas as iteradas do método de Newton e este for convergente, tem-se

$$z = \lim_{n \to \infty} x_{n+1} = g(\lim_{n \to \infty} x_n) = g(z)$$

ou seja, a solução z da equação $f(x) = 0$ satisfaz $z = g(z)$.

Definição 4. *Seja $g : [a, b] \to \mathbb{R}$. Se $z \in [a, b]$ é tal que $z = g(z)$, então z diz-se um* ponto fixo *de g.*

Exemplo 9. *A equação* $x^5 - 5x + 1 = 0$ *tem três zeros reais* $z_1 \in [-2, -1]$*,* $z_2 \in [0, 1]$ *e* $z_3 \in [1, 2]$*. Tem-se*

$$x^5 - 5x + 1 = 0 \Leftrightarrow x = x^5 - 4x + 1 \Leftrightarrow x = g(x), \ \textit{para}\ g(x) := x^5 - 4x + 1$$

$$x^5 - 5x + 1 = 0 \Leftrightarrow 5x = x^5 + 1 \Leftrightarrow x = \frac{x^5 + 1}{5} \Leftrightarrow x = G(x), \ \textit{para}\ G(x) := \frac{x^5 + 1}{5}$$

$$x^5 - 5x + 1 = 0 \Leftrightarrow x^5 = 5x - 1 \Leftrightarrow x = \sqrt[5]{5x - 1} \Leftrightarrow x = \mathcal{G}(x), \ \textit{para}\ \mathcal{G}(x) := \sqrt[5]{5x - 1}$$

As raízes z_1*,* z_2 *e* z_3 *são pontos fixos de cada uma das funções* g*,* G *e* $\mathcal{G}$*.*

Definição 5. *Um método iterativo da forma*

$$x_{n+1} = g(x_n), \, n = 0, 1, ..$$

diz-se um método de ponto fixo. *A* g *chama-se* função iteradora *do método.*

Definição 6. *Dada uma equação* $f(x) = 0$*, se*

$$f(x) = 0 \iff g(x) = x$$

então o método do ponto fixo com função iteradora g

$$x_{n+1} = g(x_n), \, n = 0, 1, ..$$

diz-se consistente com a equação $f(x) = 0$.

Exemplo 10. *Seja* $z \in [a, b]$ *um zero de* $f \in C[a, b]$*. Tem-se*

$$f(x) = 0 \iff \omega(x) f(x) = 0 \iff x = x + \omega(x) f(x)$$

onde $\omega \in C[a, b]$ *é uma função que não se anula em* $[a, b]$*. Supondo que* f' *não se anula em* $[a, b]$ *e escolhendo* $\omega(x) := -1/f'(x)$*, obtém-se a equação equivalente*

$$x = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$

que conduz ao método de ponto fixo

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \, n = 0, 1, ...$$

para resolver $f(x) = 0$*, ou seja, o* método de Newton.

Exemplo 11. *Recordamos a equação* $x^5 - 5x + 1 = 0$*, a qual tem três raízes reais,* $z_1 \in [-2, -1]$*,* $z_2 \in [0, 1]$ *e* $z_3 \in [1, 2]$*. As relações de equivalência*

$$x^5 - 5x + 1 = 0 \Leftrightarrow x = x^5 - 4x + 1$$

$$x^5 - 5x + 1 = 0 \Leftrightarrow 5x = x^5 + 1 \Leftrightarrow x = \frac{x^5 + 1}{5}$$

$$x^5 - 5x + 1 = 0 \Leftrightarrow x^5 = 5x - 1 \Leftrightarrow x = \sqrt[5]{5x - 1}$$

fornecem os seguintes métodos de ponto fixo consistentes com a equação

$$x_{n+1} = x_n^5 - 4x_n + 1,\ n = 0, 1, ...$$

$$x_{n+1} = \frac{x_n^5 + 1}{5},\ n = 0, 1, ...$$

$$x_{n+1} = \sqrt[5]{5x_n - 1},\ n = 0, 1, ...$$

Surgem então várias questões:

Como escolher um método de ponto fixo apropriado para cada uma das raízes?

Algum destes é convergente para uma raiz específica? E outros, podem ser excluídos? Note-se que o facto de um método iterativo ser consistente com uma dada equação não significa que o mesmo seja convergente para alguma raiz dessa equação.

Como escolher as iteradas iniciais?

Definição 7. *Uma função* $g : [a, b] \to \mathbb{R}$ *diz-se Lipschitziana ou Lipschitz contínua em* $[a, b]$ *se*

$$\exists L \geq 0 : |g(x) - g(y)| \leq L|x - y|,\ \forall x, y \in [a, b].$$

A L *chama-se constante de Lipschitz. Se* $L < 1$ *a função* g *diz-se* contrativa *em* $[a, b]$*.*

Se uma função é Lipschitziana em $[a, b]$ então ela é uniformemente contínua nesse intervalo. Mas existem funções uniformemente contínuas que não são contínuas à Lipschitz, por exemplo, $f(x) := \sqrt{x}$ no intervalo $[0, 1]$.

Para funções de classe C^1, tem-se o seguinte critério prático:

Proposição 1. *Se* $g \in C^1[a, b]$ *e existe* $0 \leq L < 1$ *tal que*

$$|g'(x)| \leq L,\ \forall x \in [a, b]$$

então g *é contrativa em* $[a, b]$*.*

Estamos agora em condições de enunciar e demonstrar o Teorema do ponto fixo num intervalo limitado, o qual fornece condições suficientes de convergência global de um método de ponto fixo. Este teorema, bem como algumas generalizações que referiremos mais tarde, são de fundamental importância em Análise Numérica e Matemática Aplicada. Fornece (i) existência e unicidade de ponto fixo para funções contrativas, (ii) um algoritmo para o cálculo aproximado desse ponto fixo, o chamado método do ponto fixo (iii) majorações *a priori* e *a posteriori* para os erros das aproximações geradas pelo método do ponto fixo.

Teorema 11. *Se $g : [a, b] \to \mathbb{R}$ é tal que*

(i) $g([a, b]) \subseteq [a, b]$*;*

(ii) *g é uma contração em $[a, b]$*

então

1. *g tem um e um só ponto fixo, $z = g(z)$, no intervalo $[a, b]$, ;*

2. *O método do ponto fixo $x_{n+1} = g(x_n)$, $n \in \mathbb{N}_0$, converge para z, qualquer que seja $x_0 \in [a, b]$;*

3. *São válidas as majorações para os erros*

$$|z - x_n| \leq L^n |z - x_0|,$$

$$|z - x_n| \leq \frac{L^n}{1 - L} |x_1 - x_0|, \; n \in \mathbb{N}$$

$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{L}{1 - L} |x_{n+1} - x_n|, \; n \in \mathbb{N}_0,$$

onde $0 \leq L < 1$ é a constante de contratividade de g em $[a, b]$.

Demonstração. Para mostrar a existência de ponto fixo, seja $f(x) := g(x) - x$. Tem-se $f \in C([a, b])$ e

$$f(a) = g(a) - a \geq 0, \; f(b) = g(b) - b \leq 0.$$

Pelo Teorema de Bolzano, existe $z \in [a, b]$ tal que $f(z) = 0$, ou seja, $g(z) = z$. Quanto à unicidade de ponto fixo, suponhamos que existiam dois pontos fixos de g, $z, \zeta \in [a, b]$. Então

$$|z - \zeta| = |g(z) - g(\zeta)| \leq L|z - \zeta|$$

obtendo-se

$$(1 - L)|z - \zeta| \leq 0.$$

Como $1 - L > 0$, conclui-se que $|z - \zeta| \leq 0$, e portanto $z = \zeta$.

Consideremos agora uma sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ definida por

$$\begin{cases} x_0 \in [a,b], \\ x_{n+1} = g(x_n),\ n \in \mathbb{N}_0 \end{cases}$$

onde x_0 é arbitrário. A hipótese $g([a,b]) \subseteq [a,b]$ permite concluir que $x_n \in [a,b]$, para todo $n \in \mathbb{N}_0$, quando $x_0 \in [a,b]$.

Como g é uma contração em $[a,b]$, tem-se:

$$|x_{n+1} - z| = |g(x_n) - g(z)| \leq L|x_n - z|, \quad \forall n \in \mathbb{N}_0.$$

Esta relação permite mostrar, por indução, que

$$|x_n - z| \leq L^n|z - x_0|, \quad \forall n \in \mathbb{N}. \tag{16}$$

Uma vez que $0 \leq L < 1$, tem-se

$$0 \leq \lim_{n\to\infty} |x_n - z| \leq |z - x_0| \lim_{n\to\infty} L^n = 0,$$

e a sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ é convergente para z.

Quanto às restantes fórmulas de majoração dos erros das aproximações, começamos por ver que

$$\begin{aligned} |z - x_0| &= |z - x_1 + x_1 - x_0| \leq |z - x_1| + |x_1 - x_0| \\ &= |g(z) - g(x_0)| + |x_1 - x_0| \leq L|z - x_0| + |x_1 - x_0| \end{aligned}$$

ou seja,

$$|z - x_0| \leq L|z - x_0| + |x_1 - x_0|.$$

Daqui resulta

$$|z - x_0| \leq \frac{|x_1 - x_0|}{1 - L}$$

e combinando com (16), resulta em

$$|z - x_n| \leq \frac{L^n}{1 - L}|x_1 - x_0|,\ n \in \mathbb{N}.$$

Para obter a fórmula de majoração a posteriori:

$$\begin{aligned} |z - x_{n+1}| &= |g(z) - g(x_n)| \leq L|z - x_n| = L|z - x_{n+1} + x_{n+1} - x_n| \\ &\leq L|z - x_{n+1}| + L|x_{n+1} - x_n| \end{aligned}$$

e basta notar que

$$|z - x_{n+1}| \leq L|z - x_{n+1}| + L|x_{n+1} - x_n| \Leftrightarrow |z - x_{n+1}| \leq \frac{L}{1 - L}|x_{n+1} - x_n|.$$

$\square$

Proposição 2. *Seja $g \in C^1([a,b])$ nas condições do Teorema do Ponto Fixo.*

1. *Se $0 \leq g'(x) < 1$, para todo $x \in [a,b]$, então a convergência do método do ponto fixo $x_{n+1} = g(x_n)$ é monótona;*

2. *Se $-1 < g'(x) \leq 0$, para todo $x \in [a,b]$, então a convergência é alternada (em torno de z) e tem-se*
$$|z - x_{n+1}| \leq \frac{1}{2}|x_{n+1} - x_n|.$$

Demonstração. Pelo Teorema de Lagrange, tem-se

$$z - x_{n+1} = g'(\theta_n)(z - x_n), \text{ com } \theta_n \text{ entre } z \text{ e } x_n,$$

e
$$\text{sign}(z - x_{n+1}) = \text{sign}(g'(\theta_n))\text{sign}(z - x_n).$$

É claro que
$$|z - x_{n+1}| \leq |z - x_n|, \forall n \in \mathbb{N}_0. \tag{17}$$

Se $0 \leq g'(x) < 1$, para todo $x \in [a,b]$, tem-se então

$$z \geq x_{n+1}, \text{ se } z \geq x_n, \text{ e } z \leq x_{n+1}, \text{ se } z \leq x_n.$$

Portanto,
$$z \leq ... \leq x_{n+1} \leq x_n \leq ... \leq x_0, \text{ se } x_0 \geq z,$$
$$x_0 \leq ... \leq x_n \leq x_{n+1} \leq ... \leq z, \text{ se } x_0 \leq z.$$

Se $-1 < g'(x) \leq 0$, para todo $x \in [a,b]$, tem-se

$$x_{n+1} \leq z, \text{ se } x_n \geq z, \text{ e } x_{n+1} \geq z, \text{ se } x_n \leq z,$$

pelo que z fica entre x_n e x_{n+1}, mas mais perto de z, dado que (17). Daqui resulta a fórmula de majoração dos erros enunciada. □

Referimo-nos ao Teorema 11 como sendo um resultado de convergência global do método de ponto fixo, uma vez que o intervalo onde se analisa a convergência está bem definido e fixado *a priori*. Em seguida, tal como fizémos para os métodos de Newton e da secante, estudaremos a convergência local, baseada em condições menos fortes, supondo desde logo a existência de um ponto fixo. Veremos também condições que nos permitem excluir certos métodos de ponto fixo na resolução numérica de uma equação.

Exemplo 12. *Recordamos o problema do Exemplo 11*

$$x^5 - 5x + 1 = 0 \Leftrightarrow x^5 = 5x - 1 \Leftrightarrow x = \sqrt[5]{5x-1}$$

A função $\mathcal{G}(x) := \sqrt[5]{5x-1}$ *satisfaz as condições do Teorema do ponto fixo em* $[1,2]$, *com* $L = 0.329877$. *O método do ponto fixo* $x_{n+1} = \sqrt[5]{5x_n - 1}$ *com* $x_0 = 1$ *produz:*

$$x_1 = 1.3195079107728942, \qquad x_2 = 1.411235309924125,$$

$$x_3 = 1.4336386653903932, \qquad x_4 = 1.438903256341787,$$

$$x_5 = 1.4401292780715023, \qquad x_6 = 1.4404141964112571$$

Da estimativa de erro

$$|z - x_6| \leq \frac{L}{1-L}|x_6 - x_5| = 0.000140255 \leq 0.5 \cdot 10^{1-4}$$

conclui-se que x_6 *tem (apenas) 4 algarismos significativos.*

Classificação de pontos fixos e relação com a convergência do método do ponto fixo

Definição 8. *Seja* $g : D_g \to \mathbb{R}$ *e* $z \in D_g$ *um ponto fixo dessa função, i.e* $z = g(z)$. *Suponhamos que* g *é diferenciável em* z. *Então* z *diz-se*

- *ponto fixo atrator se* $|g'(z)| < 1$; *se* $g'(z) = 0$ z *é ponto fixo superatrator;*
- *ponto fixo neutro se* $|g'(z)| = 1$;
- *ponto fixo repulsor se* $|g'(z)| > 1$.

Vamos ver qual é a relação destas noções com a convergência do método do ponto fixo, começando pela convergência local e a noção de ponto fixo atrator. Neste caso, indicamos também como se pode determinar a ordem de convergência do método do ponto fixo.

Teorema 12. *Seja* z *um ponto fixo atrator da função* g. *Então o método do ponto fixo* $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, \dots$ *é* localmente convergente *para* z, *ou seja, existe* $\delta > 0$ *tal que a sucessão* $\{x_n\}_{n \in \mathbb{N}_0}$ *converge para* x, *qualquer que seja* $x_0 \in [z - \delta, z + \delta]$.

Se g *é de classe* C^1 *numa vizinhança de* z *com* $g'(z) \neq 0$ *então a convergência é linear, ou seja, de ordem* $p = 1$. *Se* g *é de classe* C^p, $p > 1$, *numa vizinhança de* z *e* $g'(z) = \dots = g^{(p-1)}(z) = 0$, $g^{(p)}(z) \neq 0$ *então a convergência é de ordem* p. *Em qualquer destes casos, tem-se*

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|^p} = \frac{|g^{(p)}(z)|}{p!} > 0.$$

Demonstração. Para $\varepsilon > 0$ tal que $L := |g'(z)| + \varepsilon < 1$, seja $\delta > 0$ tal que

$$|g(x) - g(z)| \leq L|x - z|, \quad \forall x \in [z - \delta, z + \delta] =: \overline{V_\delta}(z).$$

Tem-se $g(\overline{V_\delta}(z)) \subseteq \overline{V_\delta}(z)$, pois

$$|g(x) - z| = |g(x) - g(z)| \leq L|x - z| < |x - z| \leq \delta, \, \forall x \in \overline{V_\delta}(z).$$

Seja $x_0 \in \overline{V_\delta}(z)$. A partir deste x_0, obtém-se

$$|z - x_n| = |g(z) - g(x_{n-1})| \leq L|z - x_{n-1}| \leq ... \leq L^n|z - x_0|$$

donde resulta $\lim_{n\to\infty} x_n = z$.

Se g é de classe C^1 numa vizinhança de z com $g'(z) \neq 0$ e se tem $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, ...$ com $\lim_{n\to\infty} x_n = z$ então, pelo Teorema de Lagrange, existe uma sucessão $\{\theta_n\}$, com cada θ_n entre z e x_n, tal que

$$z - x_{n+1} = g(z) - g(x_n) = g'(\theta_n)(z - x_n).$$

Daqui resulta

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|} = \lim_{n\to\infty} |g'(\theta_n)| = |g'(z)|$$

e há convergência linear. Se g é de classe C^p, $p > 1$, numa vizinhança de z e $g'(z) = 0$, ..., $g^{(p-1)}(z) = 0$, $g^{(p)}(z) \neq 0$ então

$$\begin{aligned} z - x_{n+1} &= g(z) - g(x_n) \\ &= g'(z)(z - x_n) + ... + \frac{g^{(p-1)}(z)}{(p-1)!}(z - x_n)^{p-1} + \frac{g^{(p)}(\theta_n)}{p!}(z - x_n)^p \\ &= \frac{g^{(p)}(\theta_n)}{p!}(z - x_n)^p, \quad \text{com } \theta_n \text{ entre } z \text{ e } x_n, \end{aligned}$$

e portanto

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|z - x_{n+1}|}{|z - x_n|^p} = \frac{|g^{(p)}(z)|}{p!}.$$

□

Tem-se a seguinte relação entre um ponto fixo repulsor e a não convergência do método do ponto fixo.

Teorema 13. *Seja z um ponto fixo repulsor da função g. Então o método do ponto fixo $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, ...$* não pode convergir *para z, a menos que, para algum $k \in \mathbb{N}_0$, $x_0 = z$.*

Demonstração. Suponhamos que existia x_0 tal que a sucessão definida por $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, ...$, com $x_n \in D_g \setminus \{z\}$ para todo o $n \in \mathbb{N}_0$, satisfazia $x_n \to z$. Dado que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|g(x_n) - g(z)|}{|x_n - z|} = |g'(z)| > 1,$$

existiria $n_* \in \mathbb{N}_0$ tal que

$$|x_{n+1} - z| = |g(x_n) - g(z)| \geq |x_n - z|, \forall n \geq n_*.$$

Então seria $|x_n - z| \geq |x_{n_*} - z|$, para todo $n \geq n_*$, contradizendo a hipótese de convergência. $\square$

E o que acontece quando estamos na presença de um ponto fixo neutro? Vejamos alguns exemplos:

Exemplo 13. *Seja $g(x) := x - x^3$. Tem-se $g(0) = 0$, com $g'(0) = 1$.*

Se $x_0 \in]-1, 1[$ então a sucessão definida por $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, 2, ...$ converge para 0. De facto, tem-se

$$|x_{n+1}| = |x_n||1 - x_n^2|, \; n = 0, 1, 2, ...$$

e

1. *$x_n = 0$, para todo $n \in \mathbb{N}_0$, se $x_0 = 0$,*
2. *$|x_{n+1}| < |x_n|$, para todo $n \in \mathbb{N}_0$, se $0 < |x_0| < 1$.*

No útimo caso, a sucessão $\{|x_n|\}_{n\in\mathbb{N}_0}$ é limitada e monótona, logo é convergente. O seu limite $\ell = \lim_{n\to\infty} x_n$ verifica

$$\ell < 1, \; \ell = \ell(1 - \ell^2) \iff \ell = 0.$$

Exemplo 14. *Seja agora $g(x) := x + x^3$, a qual satisfaz $g(0) = 0$ e $g'(0) = 1$.*

Neste caso, a sucessão $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, 2, ...$ não converge para 0, a menos que $x_0 = 0$. Se $x_0 \neq 0$ tem-se $\lim_{n\to\infty} |x_n| = +\infty$. De facto,

$$|x_{n+1}| = |x_n||1 + x_n^2|, \; n = 0, 1, 2, ...$$

donde

1. *$x_n = 0$, para todo $n \in \mathbb{N}_0$, se $x_0 = 0$,*
2. *$|x_n| \geq |x_0|(1 + n|x_0|^2)$, para todo $n \in \mathbb{N}_0$, se $x_0 \neq 0$.*

Então, no segundo caso,

$$\lim_{n\to\infty} |x_n| = +\infty$$

Exemplo 15. *Sendo* $g(x) := e^x - 1$, *tem-se* $g(0) = 0$, $g'(0) = 1$.

A sucessão $x_{n+1} = g(x_n)$, $n = 0, 1, 2, ...$ *converge para* 0 *quando* $x_0 \in]-\infty, 0]$.

Se $x_0 \in]0, \infty[$ *tem-se* $\lim_{n\to\infty} x_n = +\infty$.

Destes exemplos, conclui-se que, quando $z = g(z)$ é ponto fixo neutro, consoante o valor de x_0, existem sucessões geradas por g que convergem para z e outras que não convergem (mesmo que x_0 esteja muito próximo de z).

Exemplo 16. *Voltando à equação* $x^5 - 5x + 1 = 0$, *com raízes reais* $z_1 \in [-1.7, -1.2]$, $z_2 \in [0, 0.5]$ *e* $z_3 \in [1.2, 1.7]$, *qual dos métodos de ponto fixo (todos eles consistentes com a equação dada)*

$$x_{n+1} = x_n^5 - 4x_n + 1,\ n = 0, 1, ...$$

$$x_{n+1} = \frac{x_n^5 + 1}{5},\ n = 0, 1, ...$$

$$x_{n+1} = \sqrt[5]{5x_n - 1},\ n = 0, 1, ...$$

pode ser utilizado para aproximar com boa precisão cada uma das raízes?

No que se segue, iremos usar a seguinte notação:

$g(x) := x^5 - 4x + 1$, *que tem derivada* $g'(x) = 5x^4 - 4$

$G(x) := \frac{x^5+1}{5}$, *com derivada* $G'(x) = x^4$

$\mathcal{G}(x) := \sqrt[5]{5x - 1}$, *com* $\mathcal{G}'(x) = (5x - 1)^{-4/5}$

1. *Comecemos por considerar a raiz* $z \in [0, 0.5]$.

   Tomemos, por exemplo, $x_0 = 0$ *e calculemos algumas iteradas do método*

   $$x_{n+1} = G(x_n) = \frac{x_n^5 + 1}{5},\ n = 0, 1, ...$$

   Obtemos sucessivamente

   $$x_1 = 0.2, 0.20006400000000002,\ x_2 = 0.200064102465557,$$
   $$x_3 = 0.200064102629712,\ x_4 = 0.20006410262997498,$$
   $$x_5 = 0.2000641026299754,\ x_6 = 0.2000641026299754, ...$$

   o que parece indicar a convergência da sucessão para z. *De facto, tem-se*

   $$|G'(z)| = z^4 < 1,$$

pelo que z é ponto fixo atrator de G e, consequentemente, o método

$$x_{n+1} = \frac{x_n^5 + 1}{5},\ n = 0, 1, ... \tag{18}$$

converge localmente para z (existem iteradas iniciais "próximas"de z com as quais o método é convergente). Confirmemos que $x_0 = 0$ é uma iterada com a qual há convergência. Como

$$0.2 = G(0) \leq G(x) \leq G(0.5) = 0.20625, \forall x \in [0, 0.5],$$

e

$$\max_{x \in [0,0.5]} |G'(x)| = \max_{x \in [0,0.5]} x^4 = 0.5^4 = 0.0625 < 1,$$

tem-se $G([0, 0.5]) \subseteq [0, 0.5]$ e a função G é contrativa em $[0, 0.5]$. Então o Teorema do ponto fixo assegura a convergência global do método iterativo (18) no intervalo $[0, 0.5]$, em particular com $x_0 = 0$.

Ainda para $z \in [0, 0.5]$ tem-se

$$|g'(z)| = 4 - 5z^4 > 4 - 5 \cdot (0.5)^4 = 3.6875 > 1$$

ou seja, z é ponto fixo repulsor de g. De acordo com cálculos anteriores, tem-se $z \approx 0.2000641$. Calculemos alguns termos da sucessão

$$x_{n+1} = g(x_n) = x_n^5 - 4x_n + 1,\ n = 0, 1, ...$$

partindo de $x_0 = 0.2000641$ (iterada inicial muito próxima de z):

$$\begin{aligned}
&x_1 = 0.20006411312881023,\ x_2 = 0.2000640607187345,\\
&x_3 = 0.2000642699392191,\ x_4 = 0.20006343473319355,\\
&x_5 = 0.20006676886711072,\ x_6 = 0.200053,\ x_7 = 0.200107,\\
&x_8 = 0.199894,\ x_9 = 0.200741,\ x_{10} = 0.197361,\ x_{11} = 0.210855,\\
&x_{12} = 0.156997,\ x_{13} = 0.372107,\ x_{14} = -0.481293, 2.89935,\\
&x_{15} = 194.283,\ x_{16} = 2.76804 \cdot 10^{11},\ x_{17} = 1.62502 \cdot 10^{57}\\
&x_{18} = 1.13316 \cdot 10^{286},\ x_{19} = 1.868335973567226 \cdot 10^{1430}, ...
\end{aligned}$$

o que indica a divergência da sucessão. Como $z \in [0, 0.5]$, tem-se

$$|\mathcal{G}'(z)| = \frac{1}{(5z-1)^{4/5}} = \frac{1}{z^4} > 1$$

pelo que z é ponto fixo repulsor de $\mathcal{G}$. Se calcularmos alguns termos da sucessão

$$x_{n+1} = \mathcal{G}(x_n) = \sqrt[5]{5x_n - 1},\ n = 0, 1, ...$$

partindo de $x_0 = 0.200064$*, obtemos*

$x_1 = 0.200062$, $x_2 = 0.199029$, $x_3 = -0.344558$, $x_4 = -1.22181$, $x_5 = -1.48034$, $x_6 = -1.53064$, $x_7 = -1.5397$, $x_8 = -1.54131$, $x_9 = -1.54159$, $x_{10} = -1.54164$, $x_{11} = -1.54165$, $x_{12} = -1.54165, ...$

e há convergência, mas para a raiz situada no intervalo $[-1.7, -1.2]$*!!!*

2. *Consideremos então a raiz* $z \in [-1.7, -1.2]$*. Tem-se*

$$\begin{array}{l} |g'(z)| > 1, \ z \text{ é ponto fixo repulsor de } g, \\ |G'(z)| > 1, \ z \text{ é ponto fixo repulsor de } G, \\ |\mathcal{G}'(z)| < 1, \ z \text{ é ponto fixo atrator de } \mathcal{G}. \end{array}$$

O método do ponto fixo

$$x_{n+1} = \mathcal{G}(x_n) = \sqrt[5]{5x_n - 1}, \ n = 0, 1, ...$$

converge localmente para z*.*

3. *Para terminar, relativamente à raiz* $z \in [1.2, 1.7]$*, tem-se*

$$\begin{array}{l} |g'(z)| > 1, \ z \text{ é ponto fixo repulsor de } g, \\ |G'(z)| > 1, \ z \text{ é ponto fixo repulsor de} G, \\ |\mathcal{G}'(z)| \leq \frac{1}{(5 \cdot 1.2 - 1)^{4/5}} < 1, \ z \text{ é ponto fixo atrator de } \mathcal{G}. \end{array}$$

O método do ponto fixo

$$x_{n+1} = \mathcal{G}(x_n) = \sqrt[5]{5x_n - 1}, \ n = 0, 1, ...$$

converge localmente para z*. Iterando*

$$x_{n+1} = \mathcal{G}(x_n) = \sqrt[5]{5x_n - 1}, \ n = 0, 1, ...$$

a partir de $x_0 = 1.2$*, obtém-se:*

$x_1 = 1.379729661461215$, $x_2 = 1.4261017100103357$,
$x_3 = 1.4371407385895818$, , $x_4 = 1.439719286564709$,
$x_5 = 1.4403189425197516$, $x_6 = 1.4404582528910546$,
$x_7 = 1.4404906093684402$, $x_8 = 1.440498124126058$,
$x_9 = 1.4404998693981204$, , $x_{10} = 1.4405002747292877$

de acordo com a convergência local para $z \in [1.2, 1.7]$*.*

4. Em resumo:

• *As soluções reais da equação $x^5 - 5x + 1 = 0$ podem ser estudadas como pontos fixos de várias funções, tendo a seguinte classificação nos casos apresentados:*

	$g(x) = x^5 - 4x + 1$ $g'(x) = 5x^4 - 4$	$G(x) = \frac{x^5+1}{5}$ $G'(x) = x^4$	$\mathcal{G}(x) = \sqrt[5]{5x-1}$ $\mathcal{G}'(x) = (5x-1)^{-4/5}$
$z_1 \in [-1.7, -1.2]$	*repulsor*	*repulsor*	**atrator**
$z_2 \in [0, 0.5]$	*repulsor*	**atrator**	*repulsor*
$z_3 \in [1.2, 1.7]$	*repulsor*	*repulsor*	**atrator**

• *No caso de um ponto fixo atrator, a correspondente função pode ser usada para iteradora de um método (localmente) convergente.*

• *Se um ponto fixo é repulsor, a correspondente função não deve ser usada para construir um método iterativo, pois tal método não pode (em geral) convergir para o ponto fixo em causa.*

Observação 1. *Sejam z, $w \in [a, b]$ dois pontos fixos consecutivos de $g \in C^1([a, b])$. Se $|g'(z)| < 1$ então $|g'(w)| \geq 1$ (ver, por exemplo, [1]).*

E quando um ponto fixo é superatrator, o que acontece? Recordemos que o método de Newton para aproximar a solução z de $f(x) = 0$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},\ n = 0, 1, ...$$

é da forma $x_{n+1} = g(x_n)$ com $g(x) := x - f(x)/f'(x)$. Se z é zero simples e f é duas vezes diferenciável em z, tem-se

$$g'(z) = 1 - \frac{f'(z)^2 - f(z)f''(z)}{f'(z)^2} = 0.$$

A convergência (local) está assegurada e é, pelo menos, quadrática.

Sobre a implementação computacional dos métodos de ponto fixo

Em condições apropriadas de regularidade de g e de convergência do método do ponto fixo, partindo de

$$z - x_{n+1} = g(z) - g(x_n) = g'(\theta_n)(z - x_n),\ \theta_n \text{ entre } z \text{ e } x_n,$$

podemos escrever

$$z - x_n = z - x_{n+1} + x_{n+1} - x_n = g'(\theta_n)(z - x_n) + (x_{n+1} - x_n)$$

e ainda

$$z - x_n = \frac{1}{1 - g'(\theta_n)}(x_{n+1} - x_n) \approx \frac{1}{1 - g'(z)}(x_{n+1} - x_n)$$

para n grande.

Agora, observamos que, no caso do método de Newton, como $g'(z) = 0$, obtemos o critério de paragem

$$z - x_n \approx x_{n+1} - x_n.$$

semelhante ao já conhecido. Em geral, usando a aproximação

$$g'(z) \approx \frac{g(x_n) - g(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} = \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}}$$

obtemos o critério de paragem baseado nas aproximações

$$z - x_n \simeq \frac{1}{1 - g'(z)}(x_{n+1} - x_n) \simeq \frac{d_n}{1 - d_n/d_{n-1}} \text{ com } d_n := x_{n+1} - x_n.$$

Referências

[1] C. Alves, Fundamentos de Análise Numérica, 2001.

[2] M. Atteia e M. Pradel, Elements d'Analyse Numérique, Cepadues-Editions, 1990.

[3] R. Kress, Numerical Analysis, Springer-Verlag, 1998.

[4] L. Loura, Tópicos de Análise Numérica, Instituto Superior Técnico, 1990.

[5] A. Quarteroni, R. Sacco e F. Saleri, Cálculo Científico com Matlab e Octave, Springer-Verlag, 2007 (traduzido por Adélia Sequeira).

[6] F. Romeiras, Matemática Computacional, Apontamentos das aulas, 2008.

[7] Wikimedia Commons (figuras)
(https://commons.wikimedia.org/wiki/)