Matemática Computacional
MEBiol, MEBiom e MEFT
Aula 5 - Resolução numérica de equações não lineares

Ana Leonor Silvestre

Instituto Superior Técnico, $1^{\underline{o}}$ *Semestre, 2020/2021*

Sumário da Aula 5

Cap.2 - Resolução numérica de equações não lineares

Equações não lineares escalares. Localização de raízes.
Métodos iterativos, convergência, majorações dos erros.
Método da bisseção: interpretação geométrica, algoritmo, convergência e estimativas de erro.
Exercício.
Implementação computacional em Matlab.

Resolução numérica de equações não lineares
Exemplo: 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.

Resolução numérica de equações não lineares
Exemplo: equação do foguete de Tsiolkovsky

Problema

Determinar o instante t em que 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.

Pretende-se determinar t $(t > 0)$ tal que

$$v(t) = 1000$$

Equação não linear

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

Localização gráfica das soluções de $v(t) = 1000$

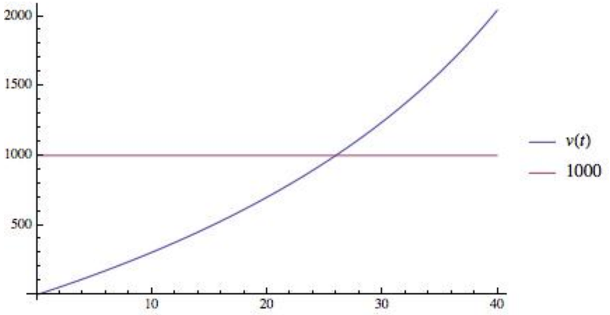


Figura: Localização da solução através de esboço gráfico

Será que a equação tem solução? Haverá apenas uma solução?

Localização e separação de raízes

Resultado importante para assegurar **existência e unicidade de solução para uma equação** $f(x) = 0$:

Teorema

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**.

Aplicação do resultado de existência e unicidade

Voltando à equação do foguete de Tsiolkovsky, consideramos a equação não linear na variável t

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

e a função

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

definida para t em $[0, 59.7]$.
Tem-se

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

Aplicação do resultado de existência e unicidade

Recordamos a função

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

Vamos tomar $[a, b] = [20, 30]$. Tem-se $f \in C^2([20, 30])$ com

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

Como

$$f''(t) > 0, \forall t \in [20, 30]$$

a função f' é monótona crescente em $[20, 30]$ e uma vez que

$$f'(20) > 0$$

tem-se $f'(t) > 0$ em $[20, 30]$.

Aplicação do resultado de existência e unicidade

Recordamos a equação

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

Como $f \in C^1([20, 30])$ e

- $f(20) f(30) < 0$
- f' não se anula em $]20, 30[$ (mostrámos que $f' > 0$ em $[20, 30]$)

conclui-se que a equação $f(t) = 0$ tem em $]20, 30[$ uma e uma só solução.
Assim,

$$\boxed{\exists^1 z \in]20, 30[: \; v(z) = 1000}$$

Como calcular a solução?

Solução obtida com o software MATLAB

$$\text{fzero}(@(t)2200*\log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000, 20)$$

$$\text{ans} = 25.9424$$

$$\text{fzero}(@(t)2200*\log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000, 30)$$

$$\text{ans} = 25.9424$$

$$\text{fzero}(@(t)2200*\log(16*10^4/(16*10^4-2680*t))-9.8*t-1000, [20, 30])$$

$$\text{ans} = 25.9424$$

Nota: *The fzero command is a function file. The algorithm, created by T. Dekker, uses a combination of* **bisection**, **secant** *and inverse quadratic interpolation methods.*

Métodos iterativos, convergência, majorações dos erros

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 $x_{-n_0}, \dots, x_0$, uma sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ de números reais, com iteradas x_n facilmente calculáveis, e a qual, em certas condições, é convergente para z. Exemplo: método da bisseção, método de Newton, método da secante,...

Sendo $\tilde{z}$ uma aproximação 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

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

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

e

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

Em que consiste o método da bisseção e quais as suas propriedades?

Método da bisseção - Descrição geométrica

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 z é o único zero de f em $[a,b]$.

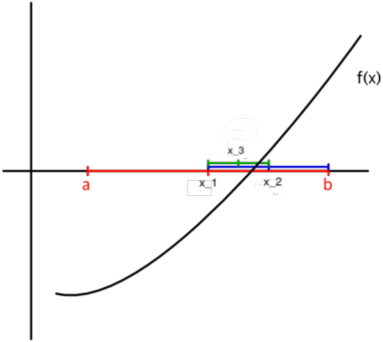


Figura: Algumas iterações do método da bisseção (aqui x_i designam pontos médios de intervalos que contêm z)

Método da bisseção

O método da bisseção consiste em construir, a partir do intervalo $I_0 := [a, b]$,

- uma **sucessão de intervalos** $\{I_n\}_{n\in\mathbb{N}_0}$

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

- uma **sucessão de pontos médios** $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ desses intervalos,

de modo que z, solução da equação $f(x) = 0$, vai sendo sucessivamente confinado a intervalos cada vez mais pequenos.

Método da bisseção - Algoritmo

Para cada $n \in \mathbb{N}_0$, calculamos 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:

- $x_{n+1} = \dfrac{a_n + b_n}{2}$;
- 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 $a_{n+1} = x_{n+1}$, $b_{n+1} = b_n$;
- se um certo **critério de paragem** for satisfeito, passa-se de n para $n+1$ e repete-se as instruções acima.

Questão: Critério de paragem eficaz?

Método da bisseção - Algoritmo alternativo

Em alternativa, o método da bisseção pode descrever-se analiticamente pela fórmula (Exercício):

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

Será que a sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ gerada pelo método da bisseção converge para z?

Exemplo: aplicação do método da bisseção à equação do foguete de Tsiolkovsky

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

n	a_{n-1}	$f(a_{n-1})$	b_{n-1}	$f(b_{n-1})$	x_n	$f(x_n)$
1	20	<0	30	>0	25	-51.3365
2	25	<0	30	>0	27.5	88.6573
3	25	<0	27.5	>0	26.25	17.1234
4	25	<0	26.25	>0	25.625	-17.4767
5	25.625	<0	26.25	>0	25.9375	-0.27089
6	25.9375	<0	26.25	>0	26.0938	8.40524
7	25.9375	<0	26.0938	>0	26.0157	4.06403
8	25.9375	<0	26.0157	>0	25.9766	1.89509
9	25.9375	<0	25.9766	>0	25.9571	0.814501
10	25.9375	<0	25.9571	>0	25.9473	0.271713

Método da bisseção - Convergência e estimativas de erro

Teorema

Seja $f \in C([a,b])$ tal que $f(a)f(b) < 0$ e suponhamos que a equação $f(x) = 0$ tem apenas uma raiz z em $[a,b]$.
Então o método da bisseção converge para z e são válidas as seguintes majorações dos erros:

(i) $|z - x_n| \leq \dfrac{b-a}{2^n}$, $n \in \mathbb{N}$;

(Estimativa *a priori*)

(ii) $|z - x_{n+1}| \leq |x_{n+1} - x_n| = \dfrac{b_n - a_n}{2}$, $n \in \mathbb{N}$.

(Estimativas *a posteriori*)

Método da bisseção - Convergência e estimativas de erro

Demonstração:

- $f \in C([a,b])$ e $f(a)f(b) < 0$ garantem a existência de um zero de f em $]a,b[$.
- 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. $z \in I_n = [a_n, b_n]$, $\forall n \in \mathbb{N}_0$,
  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. $|I_n| := b_n - a_n = \dfrac{b-a}{2^n}$, $\forall n \in \mathbb{N}_0$.

Método da bisseção - Estimativas de erro

Demonstração (cont.):

Estimativas a posteriori

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

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

e

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

Assim,

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

Método da bisseção - Estimativas de erro

Demonstração (cont.):

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

Estimativa a priori

- Usando o facto de

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

da desigualdade (2) obtém-se

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

Método da bisseção - Convergência

Demonstração (cont.):

- Convergência

  Como
  $$0 \leq |z - x_n| \leq \left(\frac{1}{2}\right)^n (b-a), \; \forall n \in \mathbb{N},$$
  e
  $$\lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{2}\right)^n = 0,$$
  tem-se
  $$\lim_{n\to\infty} |z - x_n| = 0$$
  e portanto $\lim_{n\to\infty} x_n = z$.

Exemplo: aplicação do método da bisseção à equação do foguete de Tsiolkovsky

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

Por aplicação do método da bisseção, obtivémos:

$$a_9 = 25.9375, \qquad b_9 = 25.9571, \qquad x_{10} = 25.9473$$

Majoração do erro de x_{10}:

$$|z - x_{10}| \leq (b_9 - a_9)/2 \approx 0.0098$$

ou

$$|z - x_{10}| \leq \frac{|f(x_{10})|}{\min_{x \in [a_9, b_9]} |f'(x)|} = \frac{|f(x_{10})|}{|f'(a_9)|} = \frac{0.271713}{55.3582} \approx 0.0050$$

Método da bisseção - Algoritmo

Fixar $\varepsilon > 0$ pequeno. Para cada $n \in \mathbb{N}_0$, calculamos 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:

- $x_{n+1} = \dfrac{a_n + b_n}{2}$;
- se $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$ (ou $\frac{b_n - a_n}{2} < \varepsilon$) então o algoritmo termina;
- se $|x_{n+1} - x_n| \geq \varepsilon$ (ou $\frac{b_n - a_n}{2} \geq \varepsilon$) então
  - 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 $a_{n+1} = x_{n+1}$, $b_{n+1} = b_n$;
- passa-se de n para $n + 1$ e repete-se as instruções acima.

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 fator assintótico $K_\infty = \frac{1}{2}$.
- A estimativa *a posteriori* $|z - x_{n+1}| \leq \frac{b_n - a_n}{2}$ pode ser facilmente utilizada como critério de paragem para o método, em particular na sua 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).

Exercício

Considere a equação $\sin(x) - e^{-x} = 0$.

(a) Verifique que a equação tem um número infinito de soluções em $\mathbb{R}$.

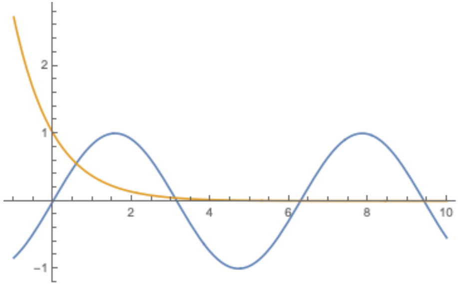
(b) Prove que, no intervalo $[0.5, 0.7]$, a equação tem uma e uma só raiz, a qual será designada por z.

(c) Partindo de $I_0 = [0.5, 0.7]$, calcule a terceira iterada do método da bisseção para aproximar z e um majorante do erro dessa aproximação.

(d) Determine o número m de iterações necessárias para garantir $|z - x_m| < 10^{-6}$.

Resolução

(a) $\sin(x) - e^{-x} = 0 \iff \sin(x) = e^{-x}$



A equação tem um número infinito de soluções, todas positivas.

(b) $I := [0.5, 0.7]$, $\qquad f(x) := \sin(x) - e^{-x}$,

- $f(0.5) = -0.127105,\ f(0.7) = 0.147632 \Longrightarrow f(0.5)f(0.7) < 0$
- $f'(x) := \cos(x) + e^{-x}$

$\cos(x) > 0,\ \forall x \in I, \quad e^{-x} > 0,\ \forall x \in \mathbb{R} \Longrightarrow f'(x) > 0,\ \forall x \in I$

Resolução

(c) Os intervalos resultantes do método da bisseção e os correspondentes pontos médios são:

n	a_{n-1}	$f(a_{n-1})$	b_{n-1}	$f(b_{n-1})$	x_n	$f(x_n)$
1	0.5	<0	0.7	>0	0.6	0.0158308
2	0.5	<0	0.6	>0	0.55	-0.0542626
3	0.55	<0	0.6	>0	0.575	

A estimativa de erro é:

$$|z - x_3| \leq (0.6 - 0.55)/2 = (0.7 - 0.5)/2^3 = 0.025$$

Alternativa:

$f(0.575) = -0.0188701,\ f(0.6) > 0 \Rightarrow z \in [0.575, 0.6]$

Como $f' > 0$ e decrescente em $[0.575, 0.6]$, tem-se

$$|z - x_3| \leq \frac{|f(0.575)|}{\min_{x\in[0.575,0.6]} |f'(x)|} = \frac{|f(0.575)|}{f'(0.6)}$$

$$= \frac{0.0188701}{1.37415} = 0.0137322$$

Resolução

(d) Sabemos que

$$|z - x_m| \leq \frac{0.7 - 0.5}{2^m}.$$

Se $(0.7 - 0.5)/2^m < 10^{-6}$ então $|z - x_m| < 10^{-6}$.

Determinamos m a partir de $(0.7 - 0.5)/2^m < 10^{-6}$.
Obtém-se

$$(0.7 - 0.5)/2^m < 10^{-6} \iff 2^m > 0.2 \times 10^6$$

$$\iff m > \log_2(0.2 \times 10^6) = 17.6096.$$

Devemos efetuar 18 iterações.

Métodos com convergência mais rápida?

Método de Newton ou da tangente

Seja $f \in C^1([a,b])$ tal que $f(a)f(b) < 0$ e f' não se anula em $[a,b]$. Seja z a solução da equação

$$f(x) = 0$$

no intervalo $[a,b]$.

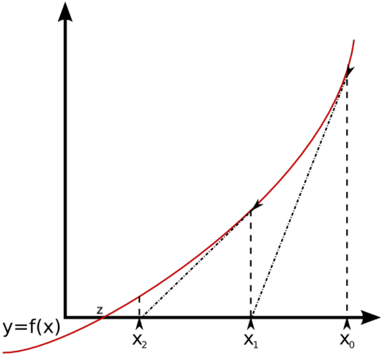


Figura: Interpretação geométrica do método de Newton

Método de Newton - Algoritmo

Partindo de uma aproximação inicial x_0 de z, para cada $n \in \mathbb{N}_0$, calculamos a iterada genérica x_{n+1} a partir de x_n do seguinte modo:

- considera-se a reta tangente à curva $(x, f(x))$ no ponto $(x_n, f(x_n))$, a qual é dada por

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

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

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

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

Exemplo: aplicação do método de Newton à equação do foguete de Tsiolkovsky

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

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \; n = 0, 1, 2, \ldots$$

n	x_n	$f(x_n)$
0	20	-298.47
1	26.54344995	33.632
2	25.94870856	0.349717
3	25.94239368	0.0000386363

Outra aplicação do método de Newton

$$f(x) := \sin(x) - e^{-x} = 0, \quad z \in [0.5, 0.7]$$

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \; n = 0, 1, 2, \ldots$$

n	x_n	$f(x_n)$
0	0.7	0.147632
1	0.5829640352	-0.00774043
2	0.5885203977	-0.0000171231
3	0.5885327439	-1.13533×10^{-10}

Sabemos que $z \in [0.575, 0.6]$. Como $f' > 0$ e decrescente em $[0.575, 0.6]$, tem-se

$$|z - x_3| \leq \frac{|f(x_3)|}{\min_{x \in [0.575, 0.6]} |f'(x)|} = \frac{|f(x_3)|}{f'(0.6)}$$

$$= \frac{1.13533 \times 10^{-10}}{1.37415} = 0.826205 \times 10^{-10}$$

Método de Newton - Condições suficientes de convergência

Teorema

Sejam $f \in C^2([a,b])$ e $x_0 \in [a,b]$ satisfazendo as seguintes condições:

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

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

(iii) f'' não muda de sinal em $[a,b]$;

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

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in]a,b[$ e o método de Newton com iterada inicial x_0 converge monotonamente para z.

Demonstração:

Suponhamos que $f' < 0$ em $[a, b]$, $f'' \geq 0$ em $[a, b]$ e $f(x_0) \geq 0$. Os outros casos têm análise semelhante. Tem-se então

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

$$0 = f(z) = f(x_0) + f'(x_0)(z - x_0) + \frac{f''(\xi_0)}{2}(z - x_0)^2$$

$$z - x_1 = z - x_0 + \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = -\frac{f''(\xi_0)}{2f'(x_0)}(z - x_0)^2 \geq 0$$

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

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

Demonstração (cont.):

Portanto, a sucessão $\{x_n\}_{n\in\mathbb{N}}$ 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 raíz de f, conclui-se que

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