Matemática Computacional
MEBiol, MEBiom e MEFT
Aula 6 - Resolução numérica de equações não lineares

Ana Leonor Silvestre

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

Sumário da Aula 6

Cap.2 - Resolução numérica de equações não lineares
Método de Newton: interpretação geométrica, algoritmo, convergência e estimativas de erro.
Método da secante: breve referência.

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).

Métodos com convergência mais rápida?
O método de Newton, por exemplo.

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 $[a,b]$.

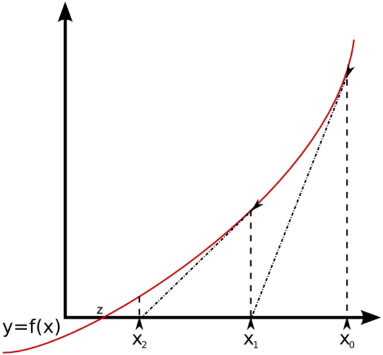

Figura: Interpretação geométrica do método de Newton

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

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

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

Método de Newton - Algoritmo

Fixar $\varepsilon > 0$ pequeno e escolher uma iterada inicial x_0 suficientemente próxima de z. Para cada $n \in \mathbb{N}_0$, calculamos x_{n+1} do seguinte modo:

- $x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$;
- se $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$ então o algoritmo termina;
- se $f(x_{n+1}) = 0$ então $z = x_{n+1}$ e o algoritmo termina;
- senão passa-se de n para $n + 1$ e repete-se as instruções acima.

Exemplo: aplicação à equação 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	30	241.951
1	26.23541209	16.3071
2	25.94389177	0.0829865
3	25.94239302	2.09368×10^{-6}

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

Comparação com a solução obtida com o MATLAB

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 $= 25.9424$

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

ans $= 25.9424$

Outra aplicação do método de Newton

$$f(x) := \sin(x) - \exp(-x) = 0, \quad z \in [0.5, 0.7]$$

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

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 $z \in [x_1, 0.6]$. Como $f' > 0$ e decrescente em $[x_1, 0.6]$, tem-se

$$|z - x_3| \leq \frac{|f(x_3)|}{\min_{x \in [x_1, 0.6]} |f'(x)|} = \frac{|f(x_3)|}{f'(0.6)}$$

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

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

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

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 é 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, obtemos que $\ell := \lim_{n\to\infty} x_n$ satisfaz

$$\ell = \ell - \frac{f(\ell)}{f'(\ell)} \iff f(\ell) = 0.$$

Pela unicidade do zero de f, conclui-se que

$$\ell = z.$$

Método de Newton - Condições suficientes de convergência

Teorema

Sejam $f \in C^2([a,b])$ 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) $\left|\dfrac{f(a)}{f'(a)}\right| \leq b-a, \qquad \left|\dfrac{f(b)}{f'(b)}\right| \leq b-a.$

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

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

converge para z, qualquer que seja a iterada inicial $x_0 \in [a,b]$.

Aplicação do resultado teórico

$$\sin(x) - \exp(-x) = 0, \qquad z \in [0.5, 0.7] =: I$$

Será que o método de Newton com $x_0 = 0.5$ é convergente para z?

$f(x) := \sin(x) - \exp(-x)$

Tem-se $f \in C^2(I)$ satisfazendo as seguintes condições:

(i) $f(0.5)f(0.7) < 0$ porque $f(0.5) < 0$ e $f(0.7) > 0$;

(ii) $f'(x) = \cos(x) + \exp(-x) > 0$, $\forall x \in I$;

(iii) $f''(x) = -\sin(x) - \exp(-x) < 0$, $\forall x \in I$;

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

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in I$ e o método de Newton com $\underline{x_0 = 0.5}$ converge monotonamente para z.

Aplicação do método de Newton

$$f(x) := \sin(x) - \exp(-x) = 0, \quad z \in [0.5, 0.7]$$

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

Com iterada inicial $x_0 = 0.5$ e apresentando os resultados com 10 dígitos decimais:

n	x_n
0	0.5
1	0.5856438170
2	0.5885294126
3	0.5885327440
4	0.5885327440

Aplicação do segundo resultado teórico

$$\sin(x) - \exp(-x) = 0, \qquad z \in [0.5, 0.7] =: I$$

Será que o método de Newton com outras iteradas iniciais, diferentes de $x_0 = 0.5$, é convergente para z?

$f(x) := \sin(x) - \exp(-x)$

Tem-se $f \in C^2(I)$ satisfazendo as seguintes condições:

(i) $f(0.5)f(0.7) < 0$ porque $f(0.5) < 0$ e $f(0.7) > 0$;

(ii) $f'(x) = \cos(x) + \exp(-x) > 0, \ \forall x \in I$;

(iii) $f''(x) = -\sin(x) - \exp(-x) < 0, \ \forall x \in I$;

(iv) $\left|\dfrac{f(0.5)}{f'(0.5)}\right| = 0.0856438 < 0.2$ e $\left|\dfrac{f(0.7)}{f'(0.7)}\right| = 0.117036 < 0.2$.

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in I$ e o método de Newton converge para z qualquer que seja a iterada inicial $x_0 \in [0.5, 0.7]$.

Método de Newton - Estimativas de erro

Suponhamos 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 $x \in I_n$. Tem-se

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

para algum ξ_n entre z e x_n. Como, por hipótese, $f'(x_n) \neq 0$, tem-se

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

Assim, nas condições referidas, é válida a relação

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

Método de Newton - Estimativas de erro

Da relação

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

entre os erros de duas iteradas consecutivas do método de Newton, resultam as majorações

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

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

Método de Newton - Estimativas de erro

Supondo que existe um intervalo I (independente de n) que contém z e 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 de

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

obtemos

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

Método de Newton - Estimativas de erro

Tem-se, sucessivamente:

$$\begin{aligned}
|z - x_n| &\leq K|z - x_{n-1}|^2 \\
&\leq K(K|z - x_{n-2}|^2)^2 = K^3|z - x_{n-2}|^4 \\
&\leq K^3|K|z - x_{n-3}|^2|^4 = K^7|z - x_{n-2}|^8 \leq \ldots \\
&\leq K^{2^n - 1}|z - x_0|^{2^n}.
\end{aligned}$$

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

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

Nota: Esta fórmula só é útil em situações práticas quando

$$K|z - x_0| < 1.$$

Aplicação das fórmulas de erro

Equação: $\sin(x) - \exp(-x) = 0$, $z \in [0.5, 0.7] =: I$

Sabemos que todas as iteradas calculadas a partir de $x_0 = 0.7$ ficam no intervalo I. Queremos calcular

$$K = \frac{\max_{x\in[0.5,0.7]}|f''(x)|}{2\min_{x\in[0.5,0.7]}|f'(x)|}$$

onde já sabemos que

$$f'(x) = \cos(x) + \exp(-x) > 0,$$

$$f''(x) = -\sin(x) - \exp(-x) < 0, \; \forall x \in I.$$

- Como $f' > 0$ e decrescente em $[0.5, 0.7]$, tem-se

$$\min_{x\in[0.5,0.7]} |f'(x)| = f'(0.7) = 1.26143$$

Aplicação das fórmulas de erro

- $f^{(3)}(x) = -\cos(x) + \exp(-x) < 0$, $\forall x \in [0.5, 0.7]$, porque:

$$0.496585 = \exp(-0.7) \leq \exp(-x) \leq \exp(-0.5) = 0.606531,$$

$$-0.877583 = -\cos(0.5) \leq -\cos(x) \leq -\cos(0.7) = -0.764842$$

logo $f^{(3)}(x) < 0$ para todo $x \in [0.5, 0.7]$. Consequentemente, f'' é decrescente em I.

- Como $f'' < 0$ e decrescente em $[0.5, 0.7]$, tem-se $|f''|$ crescente em I e

$$\max_{x \in [0.5, 0.7]} |f''(x)| = |f''(0.7)| = 1.1408$$

Aplicação das fórmulas de erro

$$K = \frac{\max_{x\in[0.5,0.7]}|f''(x)|}{2\min_{x\in[0.5,0.7]}|f'(x)|} = \frac{|f''(0.7)|}{2\times|f'(0.7)|} = \frac{1.1408}{2\times 1.26143} = 0.452185$$

iteradas do método de Newton
$x_0 = 0.7$
$x_1 = 0.5829640352$
$x_2 = 0.5885203977$
$x_3 = 0.5885327439$

majoração dos erros
$\lvert z-x_0\rvert \leq 0.7-0.5 = 0.2$
$\lvert z-x_1\rvert \leq K\lvert z-x_0\rvert^2 \leq 0.452185\times 0.2^2 = 0.0180874$
$\lvert z-x_2\rvert \leq K\lvert z-x_1\rvert^2 \leq 0.452185\times 0.0180874^2 = 0.000147934$
$\lvert z-x_3\rvert \leq K\lvert z-x_2\rvert^2 \leq 0.989583\times 10^{-8}$

Aplicação das fórmulas de erro

$$f(x_0)f(x_1) < 0 \Longrightarrow z \in [x_1, x_0]$$
$$\Longrightarrow |z - x_0| \leq |x_1 - x_0| = 0.7 - 0.5829640352 = 0.117036$$

majoração dos erros mais precisa
$\|z - x_0\| \leq \|x_1 - x_0\| = 0.117036$
$\|z - x_1\| \leq K\|z - x_0\|^2 \leq 0.452185 \times 0.117036^2 = 0.00619377$
$\|z - x_2\| \leq K\|z - x_1\|^2 \leq 0.452185 \times 0.00619377^2 = 0.173471 \times 10^{-4}$
$\|z - x_3\| \leq K\|z - x_2\|^2 \leq 0.136072 \times 10^{-9}$

Definição Seja $\tilde{x} = 0.d_1 \ldots d_n \times 10^t$, $d_1 \neq 0$, uma aproximação de $x \in \mathbb{R}$. O algarismo d_k é significativo se

$$|x - \tilde{x}| \leq 0.5 \times 10^{t-k}.$$

Conclusão: x_2 tem 4 algarismos significativos e x_3 tem 9 algarismos significativos

Método da secante

Método da secante - Algoritmo

Partindo de duas aproximações iniciais para z, x_{-1} e x_0, para cada $n \in \mathbb{N}_0$, calculamos a iterada genérica x_{n+1} a partir de x_{n-1} e de 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

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

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

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

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

Aplicação do método da secante

$$f(x) := \sin(x) - \exp(-x) = 0, \quad z \in [0.5, 0.6]$$

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

Com iteradas iniciais $x_{-1} = 0.5$ e $x_0 = 0.6$ e apresentando os resultados com 8 dígitos decimais:

n	x_n
-1	0.5
0	0.6
1	0.58892452
2	0.58853094
3	0.58853274

Método da secante - Condições suficientes de convergência

Teorema

Sejam $f \in C^2([a,b])$ e $x_{-1}, x_0 \in [a,b]$ 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) $f(x_0)f''(x) \geq 0, \ \forall x \in [a,b], \quad f(x_{-1})f''(x) \geq 0, \ \forall x \in [a,b]$.

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in]a,b[$ e o método da secante

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

com iteradas iniciais x_{-1}, x_0 converge para z.

Método da secante - Condições suficientes de convergência

Teorema

Sejam $f \in C^2([a,b])$ 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) $\left|\frac{f(a)}{f'(a)}\right| \leq b-a, \qquad \left|\frac{f(b)}{f'(b)}\right| \leq b-a.$

Então a equação $f(x) = 0$ tem uma e uma única solução $z \in]a,b[$ e o método da secante

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

converge para z, quaisquer que sejam as iteradas iniciais $x_{-1}, x_0 \in [a,b]$.

Método da secante - Estimativas de erro

Suponhamos que f é uma função de classe C^2 num certo intervalo I_n contendo z e as iteradas genéricas x_{n-1}, x_n, e que $f'(x) \neq 0$, para todo $x \in I_n$. Existem $\xi_n, \eta_n \in I_n$ tais que

$$\boxed{z - x_{n+1} = -\frac{f''(\xi_n)}{2f'(\eta_n)}(z - x_{n-1})(z - x_n).}$$