Métodos Numéricos
Zeros de equações não lineares

Teresa Monteiro

Departamento de Produção e Sistemas

Escola de Engenharia

Universidade do Minho

tm@dps.uminho.pt

Sumário

O objetivo é determinar os valores de $x \in \mathbb{R}$ que anulam f:

$$f(x) = 0$$

- Métodos gráficos
- Métodos iterativos
- Método da Secante
- Método de Newton
- Exercícios de aplicação

Neste capítulo vão estudar-se métodos para obter as soluções de equações algébricas não lineares. O objectivo é determinar os valores de $x \in \mathbb{R}$ que anulam a função f, *i.e.*, resolver a equação

$$f(x) = 0$$

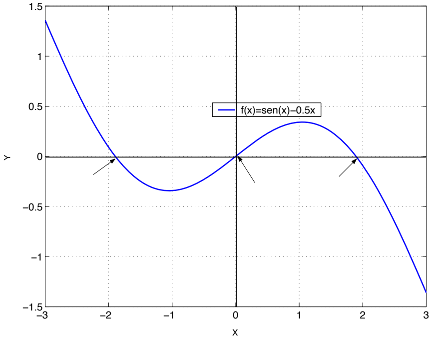
Exemplo

$$e^x - sen(\frac{x}{2}) - 3x^2 + ln(\frac{x}{5}) = 0.$$

A solução deste tipo de problema é obtida graças a métodos numéricos de natureza iterativa.

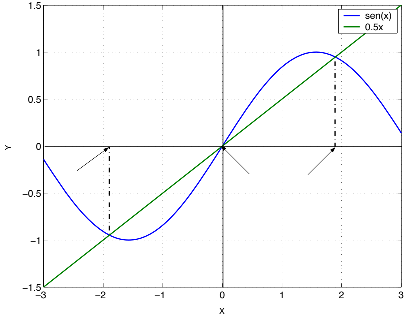
Métodos gráficos

A função $f(x)$ pode ser representada no plano $XY-$ veja-se o exemplo $f(x) = sen(x) - 0.5x$.



Como se pode observar na figura, a função tem 3 raízes próximas de $-2, 0$ e $2,$ respetivamente.

A função $f(x) = sen(x) - 0.5x$ pode ser posta como a diferença entre duas funções mais simples: $f(x) = h(x) - g(x)$ em que $h(x) = sen(x)$ e $g(x) = 0.5x$.



Neste caso, a solução ($f(x) = 0$) coincide com os pontos de interseção de $h(x)$ com $g(x)$ ($h(x) = g(x)$).

Métodos gráficos

- O tipo de gráfico a analisar depende da função - se for mais fácil colocar a função $f(x)$ como uma diferença de duas funções $h(x)$ e $g(x)$, deverá ser feito o gráfico com as duas funções, caso contrário, localizam-se as raízes através do gráfico de $f(x)$.
- Os métodos gráficos servem para fornecer aproximações ”grosseiras” a outros métodos mais precisos - a ideia chave desta secção é a de que os métodos gráficos funcionam como métodos auxiliares, fornecendo aproximações à solução mais ou menos precisas. Estas irão ser melhoradas através de métodos numéricos de natureza iterativa.

Métodos iterativos

Nestes métodos, a solução x^* só é encontrada após um número infinito de iterações

$$\lim_{k \to \infty} x_k = x^*$$

sendo x_k a aproximação na iteração k.

O erro na iteração k é $e_k = |x^* - x_k|$ e para haver convergência é necessário que $\lim_{k \to \infty} e_k = 0$.
Utiliza-se uma ou mais aproximações iniciais à solução do problema, dependendo das caraterísticas do método. As aproximações podem ser fornecidas ou obtidas, por exemplo, por métodos gráficos.

Critério de paragem (CP)

Nos processos iterativos a solução exata só é encontrada após um número infinito de iterações.
Assim, urge interromper o processo e apresentar uma aproximação à solução com a precisão pretendida.

O critério de paragem envolve a verificação de duas condições simultaneamente:

Critério de Paragem (CP)

$$\frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_{k+1}|} \leq \varepsilon_1 \qquad \text{e} \qquad |f(x_{k+1})| \leq \varepsilon_2$$

ε_1 e ε_2 são quantidades pequenas e positivas

Critério de paragem (CP)

A primeira exige que a estimativa do erro relativo na iteração k ($\frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_{k+1}|} \approx \frac{|x^* - x_k|}{|x^*|}$) seja inferior a uma tolerância.

A segunda condição permite calcular uma estimativa da solução com uma determinada precisão (notar que o objectivo é encontrar x tal que $f(x) = 0$, mas ficar-se-á satisfeito se em x_{k+1} se tiver $|f(x_{k+1})|$ suficientemente pequeno).

Convergência

A convergência diz-se **local** se a aproximação inicial tiver de pertencer a uma vizinhança da solução, para garantir convergência para x^*.

Diz-se **global** se puder tomar qualquer valor, não estando a convergência comprometida.

Partindo do princípio que o método vai convergir, ou seja que a sequência $\{x_k\}$ de aproximações converge para x^*, interessa saber qual a sua razão de convergência (em linguagem natural - "qual a velocidade a que converge").

Convergência

Existem várias razões de convergência da sequência $\{x_k\}$, entre as quais:

- Linear

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|x^* - x_{k+1}|}{|x^* - x_k|} = L < 1$$

- Superlinear

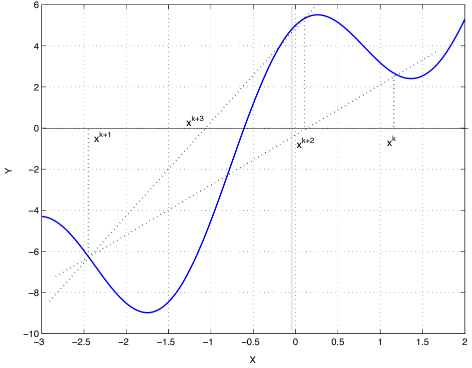
$$\lim_{k\to\infty} \frac{|x^* - x_{k+1}|}{|x^* - x_k|} = 0$$

- Quadrática

$$\lim_{k\to\infty} \frac{|x^* - x_{k+1}|}{|x^* - x_k|^2} = L$$

Das três razões de convergência apresentadas, a mais rápida é a quadrática, seguida da superlinear e por fim da linear.

O método da Secante necessita de dois valores iniciais e a ideia subjacente ao método é a aproximação de $f(x)$ por uma reta secante definida pelos dois pontos.



$$f(x) = sen(x) + 3x + 4cos(2x) + 1$$

Método da Secante

Equação iterativa do método da Secante

$$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k - x_{k-1})f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \qquad k = 2, 3, \ldots$$

Caraterísticas do método da Secante:

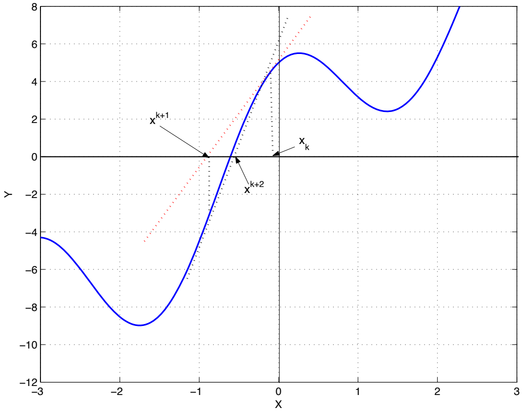
- aproxima o gráfico da função por uma reta - o ponto de interseção da reta com o eixo dos X's é a aproximação à solução;
- necessita de 2 pontos iniciais (x_1 e x_2);
- não utiliza derivadas;
- tem convergência local superlinear.

Algoritmo básico do método da Secante

1. $k = 2$; fornecer aproximações iniciais x_1 e x_2;
2. calcular x_{k+1};
3. verificar critério de paragem;
4. se verificado $x^* \approx x_{k+1}$ [FIM] senão $k \leftarrow k + 1$ e voltar ao passo 2.

Método de Newton

O método de Newton necessita de um valor inicial sendo a função $f(x)$ aproximada por uma reta tangente no ponto da iteração corrente.



$$f(x) = sen(x) + 3x + 4cos(2x) + 1$$

Equação iterativa do método de Newton

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 1, 2, \ldots$$

Características do método de Newton:

- aproxima o gráfico da função por uma reta tangente a $f(x)$ no ponto da iteração corrente;
- necessita de 1 ponto inicial (x_1);
- utiliza derivadas;
- tem convergência local quadrática;
- $f'(x^*) \neq 0$.

Algoritmo básico do método de Newton

1. $k = 1$; fornecer aproximação inicial x_1;
2. calcular $f'(x_k)$;
3. calcular x_{k+1};
4. verificar critério de paragem;
5. se verificado $x^* \approx x_{k+1}$ [FIM] senão $k \leftarrow k + 1$ e voltar ao passo 2.

Não convergência do método de Newton

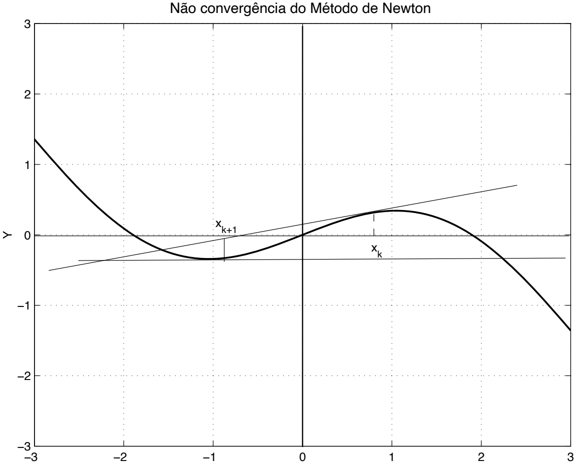
Um dos problemas do método de Newton é o facto da sequência iterativa convergir para um ponto onde o valor da derivada se anula, comprometendo a convergência.

A equação iterativa

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \qquad k = 1, 2, \ldots$$

tem em denominador o valor de $f'(x_k)$ - se esse valor for próximo de zero (a reta tangente é quase horizontal) o valor da fracção $\dfrac{f(x_k)}{f'(x_k)}$ será grande e x_{k+1} estará muito distante de x_k, podendo o método divergir.

Não convergência do método de Newton



Convergência quadrática do método de Newton

Se o erro na iteração k for representado por $\epsilon_k = x^* - x_k$ o erro na iteração $k+1$ é:

$$\epsilon_{k+1} = -\frac{1}{2}\frac{f''(\xi)}{f'(x_k)}\epsilon_k^2.$$

A principal vantagem deste método relaciona-se com a razão de **convergência quadrática** - de facto se houver convergência ela é muito rápida!

Se na iteração k, ϵ_k for da ordem de 10^{-3}, na iteração $k+1$ será $\left(10^{-3}\right)^2 = 10^{-6}$ (muito menor!).

Exercício do Método da Secante

Exercício 1:
Baseado num trabalho de Frank-Kamenetski, em 1955, a temperatura no interior de um material, quando envolvido por uma fonte de calor, pode ser determinada se resolvermos a seguinte equação não linear em x:

$$\frac{e^{-0.5x}}{cosh(e^{0.5x})} = \sqrt{0.5L}$$

Para $L = 0.088$, calcule a raiz da equação, usando um método que não recorra a derivadas.
Tome como aproximação inicial o intervalo $[-1, 0]$ e pare o processo iterativo quando o critério de paragem for verificado para $\varepsilon_1 = 0.5$ e $\varepsilon_2 = 0.1$, ou ao fim de 2 iterações.

Resolução

0 Colocação da função na forma $f(x) = 0$:

1. $k=2$; fornecer aproximações iniciais x_1 e x_2;
2. calcular x_{k+1};
3. verificar critério de paragem;
4. se verificado $x^* \approx x_{k+1}$ [FIM] senão $k \leftarrow k+1$ e voltar ao passo 2.

$$\frac{e^{-0.5x}}{cosh(e^{0.5x})} - \sqrt{0.5 \times 0.088} = 0$$

Equação iterativa do método da Secante

$$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k - x_{k-1})f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \qquad k = 2, 3, \ldots$$

1ª iteração $k = 2$ na fórmula

$$x_{k+1} = x_k - \frac{(x_k - x_{k-1})f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}, \qquad k = 2, 3, \ldots$$

$$f(x) = \frac{e^{-0.5x}}{cosh(e^{0.5x})} - \sqrt{0.5 \times 0.088}, \quad x_1 = -1,\ x_2 = 0:$$

1

2

$$x_3 = x_2 - \frac{(x_2 - x_1)f(x_2)}{f(x_2) - f(x_1)}$$

$$x_3 = 0 - \frac{(0-(-1)) \times 0.438293}{(0.438293 - 1.176128)} = 0.594025$$

Resolução

3

Verificação do critério de paragem:
as duas condições têm de ser verificadas, no entanto analisa-se a segunda condição primeiro, uma vez que o valor de $f(x_{k+1})$ poderá ser eventualmente necessário na iteração seguinte:

$$|f(x_3)| \leq \varepsilon_2 \text{ ? } |f(x_3)| = 0.152544 \leq 0.1 \text{ (falso)}$$ 4

Resolução

4 **2^a iteração** ($k = 3$ na fórmula do método da secante)

2
$$\begin{aligned} x_4 &= x_3 - \frac{(x_3 - x_2) f(x_3)}{f(x_3) - f(x_2)} \\ x_4 &= 0.594025 - \frac{(0.594025 - 0) \times 0.152544}{(0.152544 - 0.438293)} = 0.911138 \end{aligned}$$

3 Verificação do critério de paragem:

$$|f(x_4)| \leq \varepsilon_2 \text{ ? } |f(x_4)| = 0.041495 \leq 0.1$$

Falta analisar a outra condição do CP.

$$\frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} \leq \varepsilon_1 ?$$

4 $\frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} = 0.348041 \leq 0.5$ logo, como ambas as condições do CP são verificadas o processo iterativo pára.

$$x^* \approx 0.911138 \qquad f(x^*) \approx 0.041495$$

Exercício 2:
A concentração de uma bactéria $c(t)$ num depósito decresce de acordo com a seguinte expressão

$$c(t) = 70e^{-1.5t} + 25e^{-0.075t}.$$

Utilize um método iterativo que recorre ao cálculo da derivada para determinar o tempo necessário até a concentração da bactéria ficar reduzida a 9. Use a seguinte aproximação inicial $t_1 = 5$. Para a paragem do processo iterativo use $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.05$ ou $n_{\max} = 3$.

Resolução

Mudança de variável (por comodidade): $t \to x$ e $c \to f$
Colocação da função na forma $f(x) = 0$:

$$f(x) = 9 \quad \Leftrightarrow \underbrace{f(x) - 9 = 0}_{f(x)=0}$$

1^a iteração ($k = 1$ na fórmula de Newton),
$f(x) = 70e^{-1.5x} + 25e^{-0.075x} - 9$ e $f'(x)$ a respectiva derivada):

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} \\ x_2 &= 5 - \frac{8.220948}{-1.346741} = 11.104326 \end{aligned}$$

Verificação do critério de paragem (CP):

$|f(x_2)| \leq \varepsilon_2?$ $|f(x_2)| = 1.87049 \leq 0.05$ (falso)

2^a iteração ($k = 2$)

$$\begin{aligned} x_3 &= x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} \\ x_3 &= 11.104326 - \frac{1.87049}{-0.815293} = 13.398582 \end{aligned}$$

Verificação do critério de paragem:

$|f(x_3)| \leq \varepsilon_2?$ $|f(x_3)| = 0.15209 \leq 0.05$ (falso)

3^a iteração ($k = 3$)

$$\begin{aligned} x_4 &= x_3 - \frac{f(x_3)}{f'(x_3)} \\ x_4 &= 13.398582 - \frac{0.152089}{-0.686407} = 13.620155 \end{aligned}$$

Resolução

Verificação do critério de paragem:

$$|f(x_4)| \leq \varepsilon_2 \text{ ?}$$

$|f(x_4)| = 0.0012567 \leq 0.05$ é verdadeiro logo tem de analisar-se a outra condição do CP:

$$\frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} \leq \varepsilon_1 \text{?}$$

$\frac{|x_4 - x_3|}{|x_4|} = 0.016268 \leq 0.05$ logo, como ambas as condições do CP são verificadas o processo iterativo pára.

$$x^* \approx 13.620155 \qquad f(x^*) \approx 0.0012567$$

O instante de tempo em que a concentração atinge o valor 9 é aproximadamente 13.620155.