Capítulo 2

Resolução numérica de equações não lineares

- Separação das raízes.
- Método das bissecções sucessivas.
- Método da iteração simples (ou do ponto fixo).
- Método de Newton e variantes.

Resolução numérica de equações não lineares por métodos iterativos

Seja X uma raiz da equação $F(x) = 0$.

- Resolver numericamente o problema de encontrar a raiz X de $F(x) = 0$ consiste em encontrar um valor aproximado x de X com erro absoluto

  $$|X - x| \leq \varepsilon,$$

  com ε fixado à priori.
- Um método iterativo é um método de resolução numérica que, a partir de um valor x_0 (aproximação inicial de X), permite construir uma sucessão numérica $(x_n)_n$ tal que

  $$\lim_{n\to\infty} x_n = X$$

  e dar para valor aproximado de X o primeiro termo da sucessão, x_k, tal que $|X - x_k| \leq \varepsilon$

Resolução numérica de equações não lineares por métodos iterativos

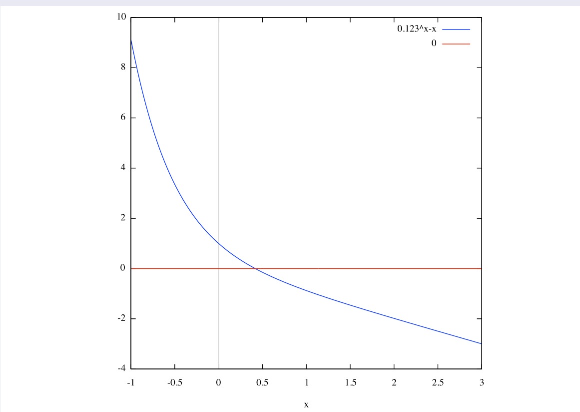
- Temos de garantir que:
  - a sucessão gerada pelo método é convergente
  - a sucessão é convergente para a raiz X
  - seja possível controlar o erro em cada iteração, isto é, calcular um majorante (ou uma estimativa) do erro absoluto de x_n, $|X - x_n| \ \ \forall n$
- É habitual, mas não necessário (como veremos), começar por separar as raízes de $F(x) = 0$, isto é, determinar tantos intervalos disjuntos quantas as raízes distintas, de tal forma que em cada um dos intervalos exista uma e uma só raiz.
- Exemplo: Consideremos a equação $F(x) = 0 \Leftrightarrow 0.123^x - x = 0$

Separação das raízes: método gráfico

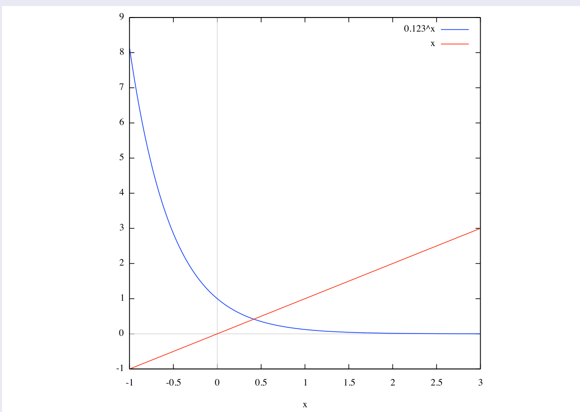
- Determinar os pontos de interseção do gráfico de $F(x)$ com o eixo $y = 0$

  ou
- escrever $F(x) = 0$ numa forma equivalente $f1(x) = f2(x)$ e determinar os pontos de interseção dos gráficos de $f1(x)$ e de $f2(x)$

$0.123^x - x = 0$ $\qquad$ $X \in [0, 1]$



$x = 0.123^x$ $\qquad$ $X \in [0, 1]$



Separação das raízes: método dos números de Rolle

Seja $F(x)$ contínua e tal que admite derivada contínua em $D \subseteq \mathbb{R}$.

O conjunto dos **números de Rolle** é o conjunto constituído pelos pontos fronteira de D e pelos zeros de $F'(x)$. Ordenando por ordem crescente de grandeza estes números, sabe-se que entre dois números consecutivos há quando muito um zero de $F(x)$: há um zero se o sinal de F for contrário nos dois números e não há zero se o sinal for o mesmo.

Exemplo: Separar as raízes de $e^x - 3x = 0, \quad x \in \mathbb{R}$

$F(x) = e^x - 3x, \quad F'(x) = e^x - 3, \quad F'(x) = 0 \Leftrightarrow x = \ln 3$

O conjunto dos números de Rolle é $\{-\infty, \; \ln 3, \; +\infty\}$.

Como $\lim\limits_{x\to-\infty} F(x) = +\infty, \quad \lim\limits_{x\to+\infty} F(x) = +\infty$ e $F(\ln 3) < 0$ temos:

numeros de Rolle	$-\infty$	$\ln 3$	$+\infty$
sinal de F	$+$	$-$	$+$

$\Longrightarrow$ a equação dada tem duas raízes reais $X_1 \in]-\infty, \ln 3[$ e $X_2 \in]\ln 3, +\infty[$

Método das bissecções sucessivas

$$\left.\begin{array}{l} F(x) \text{ é contínua em } [a,b] \\ F(a)\times F(b) < 0 \end{array}\right\} \Longrightarrow \text{existe uma raiz } X \text{ de } F(x)=0 \text{ em } [a,b]$$

- $\forall x_0 \in [a,b] \quad |X - x_0| \leq |b-a|$

Seja, por exemplo, $x_0 = a$ ou $x_0 = b$ a aproximação inicial de X. Então

$$|\Delta x_0| \leq |b-a| = |b_{inicial} - a_{inicial}|$$

- Calcular o ponto médio do intervalo $m = \dfrac{a+b}{2}$
  1. se $F(m) = 0$ então $X = m$ e parar o processo
  2. se $F(m)\times F(a) < 0$ então $X \in [a,m]$ e fazer $b = m$
  3. se $F(m)\times F(a) > 0$ então $X \in [m,b]$ e fazer $a = m$

Obtemos $x_1 = m, \quad |\Delta x_1| \leq |\frac{\Delta x_0}{2}| \leq |\frac{b_{inicial}-a_{inicial}}{2}|$ e repetimos o processo.

Método das bissecções sucessivas

Ao fim de cada iteração dispomos de um novo intervalo que contém a raiz e que tem amplitude metade da amplitude do intervalo anterior.

$$\begin{array}{ll} x_0, & |\Delta x_0| \leq |X - x_0| \leq |b_{inicial} - a_{inicial}| \\ x_1, & |\Delta x_1| \leq |\frac{\Delta x_0}{2}| \\ & \vdots \\ x_n, & |\Delta x_n| \leq |\frac{\Delta x_0}{2^n}| \\ & \vdots \end{array}$$

Para calcular um valor aproximado de X com erro absoluto menor ou igual a ε temos de efetuar n iterações, onde

$$n: \quad |\Delta x_n| \leq \varepsilon \quad \text{, e portanto } n: \quad |\Delta x_n| \leq |\frac{b_{inicial} - a_{inicial}}{2^n}| \leq \varepsilon$$

Método das bissecções sucessivas - algoritmo

Algoritmo

1. Dados $F(x), \; a, \; b, \; \varepsilon$
2. $m = a$
3. $vfa = F(a)$
4. $erroiter = abs(b - a)$
5. enquanto $erroiter > \varepsilon$ faça {
    1. $m = (a + b)/2$
    2. se $F(m) = 0$ então $erroiter = 0$
    3. se $F(m) * vfa < 0$ então $b = m$ senão $a = m$
    4. $erroiter = erroiter/2$ }
6. Escrever $m, \; erroiter$

Método das bissecções sucessivas

Exercício: Determinar a raiz $X \in [0,1]$ de $F(x) = 0.123^x - x = 0$ com erro absoluto $\varepsilon = 5 \times 10^{-4}$ usando bissecções sucessivas.

Usar $x_0 = 0$, $|\Delta x_0| \leq |1-0| = 1$

n	x_n	$\lvert\Delta x_n\rvert$	
1	0.5	0.5	
2	0.25	0.25	
3	0.375	0.125	
4	0.4375	0.0625	
5	0.40625	0.03125	
6	0.421875	0.015625	
7	0.4140625	0.0078125	
8	0.41796875	0.00390625	
9	0.4160156250	0.001953125	
10	0.4169921875	0.0009765625	
11	$\underline{0.41748}04683$	$\underbrace{0.00048828125}_{\leq\varepsilon}$	$\Longrightarrow X = 0.41748 \pm 5 \times 10^{-4}$

Comparar com a solução exata 0.4171816066:

$$|0.4171816066 - 0.41748| \leq 0.00032 \leq 5 \times 10^{-4}$$

Método iterativo simples ou do ponto fixo

- No método iterativo simples começamos por escrever a equação dada numa forma equivalente
$$F(x) = 0 \Longleftrightarrow x = f(x)$$
o que pode ser feito de uma infinidade de maneiras, por exemplo, dado $\theta \in \mathbb{R}$, $\theta \neq 0$, $x = \theta F(x) + x$, isto é, $f(x) = \theta F(x) + x$.

- Este método constrói, a partir de um valor inicial x_0, uma sucessão $(x_n)_n$ definida pela relação de recorrência:
$$\begin{cases} x_{n+1} = f(x_n), & n \geq 0 \\ x_0 \ \text{dado} \end{cases}$$

- Se f for contínua e $(x_n)_n$ convergente para q então
$$\lim_{n\to\infty}(x_{n+1}) = f(\lim_{n\to\infty}(x_n))$$
isto é $q = f(q)$ e portanto q é uma raíz da equação dada.

Método iterativo simples

- Assim se $F(x) = 0$ tiver uma e uma só raiz X num intervalo $[a, b]$, a determinação de X reduz-se à determinação de um ponto fixo de $f(x)$, isto é, um ponto da intersecção da curva $y = f(x)$ com $y = x$.
- A sucessão gerada pode ou não convergir dependendo da escolha da função $f(x)$ e do valor inicial x_0.
- Interpretação gráfica
  - caso 1:
$$F(x) \equiv e^x - 3x = 0.$$
Esta equação tem duas raízes $X_1 \in [0, 1]$ e $X_2 \in]1, 2]$.
$$F(x) = 0 \Longleftrightarrow x = \frac{e^x}{3} \quad \longrightarrow f(x) = \frac{e^x}{3}$$
e a sucessão de recorrência é
$$x_{n+1} = \frac{e^{x_n}}{3}, \quad n \geq 0, \quad x_0 \text{ dado}$$
Ver o que acontece para $x_0 = 0.25$ e para $x_0 = 2$

Método iterativo simples

- $x_0 = 0.25$

n	x_n
0	0.25
1	0.428008472229
2	0.511399693
3	0.555874574468
4	0.581155036089
5	0.596034187146
6	0.60496897605
7	0.610398465697
8	0.613721631229
9	0.615764522353
10	0.617023748023
⋮	⋮

a sucessão obtida parece convergir!
(de uma forma monónona)

- $x_0 = 2.$

n	x_n
0	2.
1	2.46301869964
2	3.91339941148
3	16.6896225622
4	5903230.3354
5	inf
6	inf
7	inf
8	inf
9	inf
10	inf
⋮	⋮

a sucessão obtida diverge!

Método iterativo simples

- caso 2

$$e^{-x} - x = 0 \iff x = e^{-x}$$

$$\longrightarrow f(x) = e^{-x}$$

Esta equação tem uma raiz:

$$X \in [0.1, 1]$$

Ver o que acontece para $x_0 = 0.25$

- $x_0 = 0.25$

n	x_n
0	0.25
1	0.778800783071
2	0.458956069308
3	0.631943005983
4	0.53155797664
5	0.587688650873
6	0.555610010463
7	0.573722177899
8	0.563424365121
9	0.569256380712
10	0.565946130722
$\vdots$	$\vdots$

a sucessão obtida parece convergir de uma forma oscilatória

Método iterativo simples

- caso 3

$$e^{-x} - x = 0 \iff x = e^{-x}$$

$$\iff -x = \ln x \iff x = -\ln x$$

$$\longrightarrow f(x) = -\ln x$$

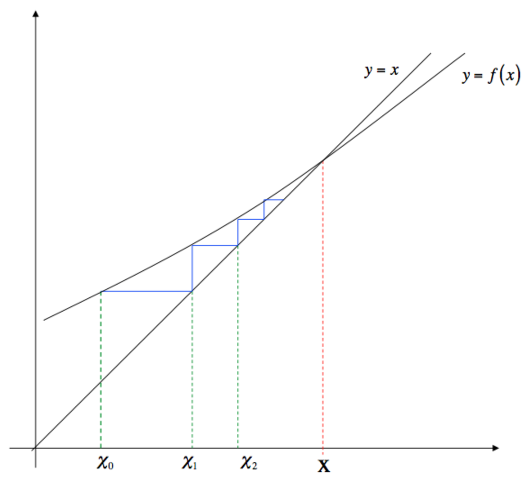
Ver o que acontece para $x_0 = 0.25$

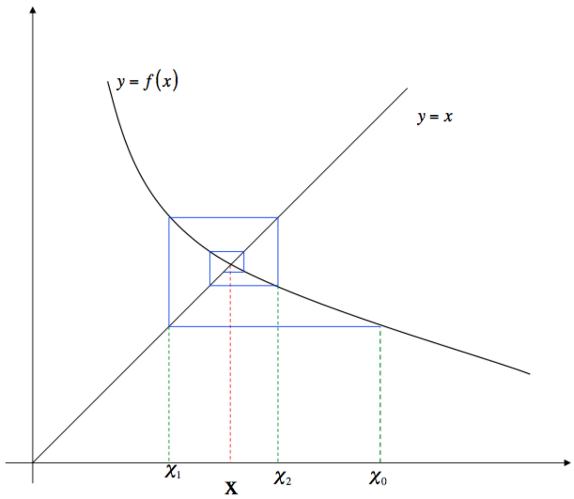
- $x_0 = 0.25$

n	x_n
0	0.25
1	1.38629436112
2	-0.326634259978
3	nan
4	nan
5	nan
6	nan
7	nan
8	nan
9	nan
10	nan
$\vdots$	$\vdots$

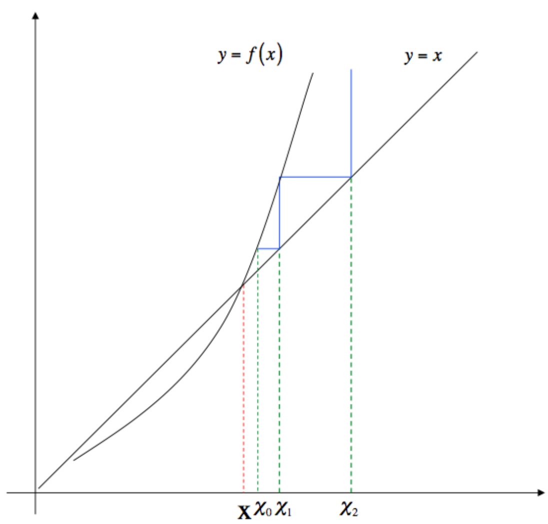
a sucessão obtida diverge!

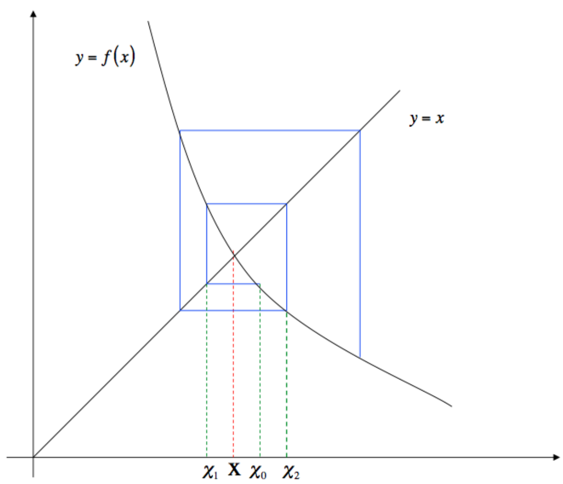
Método iterativo simples - casos de convergência





Método iterativo simples - casos de divergência





Método iterativo simples: aplicabilidade do método. Condições suficientes para a convergência da sucessão gerada

Teorema

Dada uma equação $x = f(x)$ com f tal que:

1. f é contínua em $[a, b]$
2. $f(x) \in [a, b] \ \ \forall x \in [a, b]$, isto é, $f([a, b]) \subseteq [a, b]$
3. $|f(x_1) - f(x_2)| \leq L|x_1 - x_2| \ \ \forall x_1, x_2 \in [a, b], \ \ 0 < L < 1$

então
$\forall x_0 \in [a, b]$ a sucessão $(x_n)_n$ gerada por $x_{n+1} = f(x_n), \ \ n \geq 0$, converge para a única raiz daquela equação no intervalo $[a, b]$.

Geralmente a condição 3. é substituída na prática por

$$|f'(x)| \leq L < 1 \quad \forall x \in]a, b[$$

condição que implica que 3. se verifique.

Método iterativo simples

Demonstração do teorema:

- Existência e unicidade de raiz naquele intervalo $[a, b]$:
  $g(x) = x - f(x), \ \ a \leq x \leq b \Longrightarrow g$ é contínua por 1.
  $f(a) \geq a$ e $f(b) \leq b \Longleftrightarrow g(a) \leq 0$ e $g(b) \geq 0$
  Então $g(x)$, por ser contínua, toma todos os valores entre $g(a)$ e $g(b)$. Em particular $\exists X \in [a, b] : g(X) = 0$. Então há uma raíz da equação $X = f(X)$.

  A unicidade é demonstrada por redução ao absurdo:
  Sejam X_1 e $X_2 \in [a, b]$ duas raízes de $x = f(x)$.

$$X_1 = f(X_1), \ \ X_2 = f(X_2) \longrightarrow X_1 - X_2 = f(X_1) - f(X_2)$$

  Por 3. vem

$$|X_1 - X_2| = |f(X_1) - f(X_2)| \leq L|X_1 - X_2| \Longrightarrow L \geq 1$$

  em contradição com $L < 1$. Logo a raiz é única.

Método iterativo simples

- Convergência da sucessão:

  Seja X raíz de $x = f(x)$. O erro com que x_n representa a raiz é Δx_n, isto é , $X = x_n + \Delta x_n$.

  Para haver convergência a sucessão dos erros tem de convergir para zero e portanto tem de ser $|\Delta x_{n+1}| < |\Delta x_n|$.

$$X = f(X) \Longrightarrow \underbrace{x_{n+1} + \Delta x_{n+1}}_{X} = f(\underbrace{x_n + \Delta x_n}_{X})$$

  Como f é contínua em $[x_n, X]$ e derivável em $]x_n, X[$ então

$$\Delta x_{n+1} = f(x_n + \Delta x_n) - x_{n+1} = f(x_n) + f'(c_n)\Delta x_n - x_{n+1} = f'(c_n)\Delta x_n$$

$$\text{onde } c_n = x_n + \theta \Delta x_n, \ \ 0 < \theta < 1$$

  Como $|f'(c_n)| \leq L < 1$ fica

$$|\Delta x_{n+1}| \leq L|\Delta x_n| < |\Delta x_n|$$

Método iterativo simples

Exercício: Mostrar que é possível aplicar o método iterativo simples para calcular a raiz X de $F(x) = x - \mathrm{e}^{-x} = 0$, que pertence a [0,1].

$$F(x) = 0 \Longleftrightarrow x = \underbrace{\mathrm{e}^{-x}}_{f(x)}, \quad X \in [0,1] \equiv I$$

- f é função contínua em I (1. verifica-se)
- f é função monótona decrescente em I, pois $f'(x) = -\mathrm{e}^{-x}$.

  Logo $\forall x \in I \ \ f(x)$ toma valores em $[1/\mathrm{e}, 1] \subset I$ (2. verifica-se)
- $\max\limits_{x \in I} |f'(x)| = 1$. Logo não se verifica 3.

  No entanto podemos ultrapassar esta dificuldade localizando X num intervalo de menor amplitude.

  Vemos que $X \in [0.52, 0.62]$ e neste intervalo 1. e 2. são verificadas e agora $\max\limits_{x \in I} |f'(x)| \leq 0.6$ e, portanto, já se verifica 3. e devemos usar $L = 0.6$.

Método iterativo simples

- Podemos então aplicar o método iterativo simples para calcular aquela raiz da equação usando esta função de iteração $f(x) = \mathrm{e}^{-x}$.

  $\forall x_0 \in [0.52, 0.62]$ a sucessão gerada por $x_{n+1} = \mathrm{e}^{-x_n}, \quad n \geq 0$, converge para a única raiz X de $x = \mathrm{e}^{-x} \Leftrightarrow F(x) = 0$, no intervalo $[0.52, 0.62]$.
- Para $x_0 = 0.52$ construimos a sucessão:

$$\begin{aligned} x_1 &= \mathrm{e}^{-x_0} = 0.5945205480 \\ x_2 &= \mathrm{e}^{-x_1} = 0.5518270770 \\ x_3 &= \mathrm{e}^{-x_2} = 0.5758966411 \\ &\vdots \\ x_{19} &= \mathrm{e}^{-x_{18}} = 0.5671442905 \\ x_{20} &= \mathrm{e}^{-x_{19}} = 0.5671427232 \\ &\vdots \end{aligned}$$

  que converge para a solução $X \approx 0.5671432904$.

Para calcular um valor aproximado de X com erro absoluto menor ou igual a ε temos de majorar o erro cometido ao fim de n iterações.

Método iterativo simples: majoração do erro após um número finito de iterações

- Para que a sucessão $(x_n)_n$ seja convergente tem de ser:

$$|X - x_{n+1}| \leq L|X - x_n| \Longleftrightarrow \boxed{|\Delta x_{n+1}| \leq L|\Delta x_n|} \tag{1}$$

  onde $|f'(x)| \leq L < 1 \;\; \forall x \in [a, b]$
- Uma vez que $\exists c_n \in]x_{n-1}, x_n[$:
  $|x_{n+1} - x_n| = |f(x_n) - f(x_{n-1})| \leq |f'(c_n)||x_n - x_{n-1}| \leq L|x_n - x_{n-1}|$

$$|x_{n+1} - x_n| \leq L|x_n - x_{n-1}| \tag{2}$$

  Para $m > n$ fica:
  $|x_m - x_n| \leq |x_m - x_{m-1}| + \cdots + |x_{n+1} - x_n| \leq (L + L^2 + \cdots + L^{m-n})|x_n - x_{n-1}|$
  e fazendo $m \to \infty$, n fixo, como $L < 1$ obtemos

$$|X - x_n| \leq \frac{L}{1-L}|x_n - x_{n-1}| \Longleftrightarrow \boxed{|\Delta x_n| \leq \frac{L}{1-L}|x_n - x_{n-1}|} \tag{3}$$

Método iterativo simples: majoração do erro após um número finito de iterações

- De (1) resulta

$$\boxed{|\Delta x_n| \leq L^n |\Delta x_0|}$$

- De (2) e (3) resulta

$$\boxed{|\Delta x_n| \leq \frac{L^n}{1-L} |x_1 - x_0|}$$

- Estas relações permitem
  - majorar o erro absoluto cometido em cada iteração
  - determinar o número de iterações que é necessário efetuar para se ter um valor aproximado da raiz X com erro absoluto não superior a ε.

Método iterativo simples: majoração do erro após um número finito de iterações

Para a função de iteração $f(x) = e^{-x}$ no exercício, $\max\limits_{x \in I} |f'(x)| \leq 0.6 = L$ e temos:

$$\begin{array}{lll}
x_0 = 0.52 & |\Delta x_0| \leq 10^{-1} (= 0.62 - 0.52) & \\
x_1 = 0.5945205480 & |\Delta x_1| \leq L|\Delta x_0| \leq 6 \times 10^{-2} & \Rightarrow X = 0.595 \pm 6 \times 10^{-2} \\
x_2 = 0.5518270770 & |\Delta x_2| \leq L|\Delta x_1| \leq 3.6 \times 10^{-2} & \Rightarrow X = 0.552 \pm 3.6 \times 10^{-2} \\
x_3 = 0.5758966411 & |\Delta x_3| \leq L|\Delta x_2| \leq 2.1 \times 10^{-2} & \Rightarrow X = 0.576 \pm 2.2 \times 10^{-2} \\
\vdots & &
\end{array}$$

$\longrightarrow$ muito lentamente convergente! (L é grande)
Quantas iterações é necessário efetuar para se ter um valor aproximado da raiz X com erro absoluto não superior a 10^{-3}?
Queremos que $|\Delta x_n| \leq 10^{-3}$. Como $|\Delta x_n| \leq L^n |\Delta x_0| \approx 0.6^n \times 10^{-1}$ então temos de determinar o valor de n tal que

$$0.6^n \times 10^{-1} \leq 10^{-3} \longrightarrow n \geq ln(10^{-3}/10^{-1})/\ln(0.6) \longrightarrow n \geq 9.02$$

Logo temos de efetuar 10 iterações.

Critérios de paragem de um processo iterativo

Quantos termos da sucessão $(x_n)_n$ se devem calcular para se determinar um valor aproximado de X com erro absoluto (ou relativo) $\leq \varepsilon$?

- Podemos usar os majorantes do erro do método e calcular termos até que
$$|\Delta x_n| \leq \varepsilon \quad \text{ou} \quad \frac{|\Delta x_n|}{|x_n|} \leq \varepsilon$$
- Estimar o erro absoluto (estabilizar casas decimais) e parar quando
$$|x_{n+1} - x_n| \leq \varepsilon$$
Cuidado!
- Estimar o erro relativo (estabilizar algarismos significativos) e parar quando
$$\frac{|x_{n+1} - x_n|}{|x_{n+1}|} \leq \varepsilon$$
- Pode usar-se mais um critério em conjunto com um dos anteriores:
$$|F(x_n)| \leq \delta, \quad \delta \quad \text{fixado à priori}$$
- Deve ainda limitar-se o número de iterações para prevenir casos de divergência da sucessão ou casos de instabilidade numérica. Este número pode ser ajustado depois de analisados os resultados.

Método iterativo simples: algoritmo com estimativa do erro absoluto

$f(x)$ - função de iteração; $x0$ - valor inicial x_0; ε - erro pretendido; *nmax* - limitador do número de iterações

Algoritmo

1. Dados $f(x)$, $x0$, ε, $nmax$
2. $x1 = f(x0)$; $erroiter = abs(x1 - x0)$
3. $i = 1$
4. enquanto $erroiter > \varepsilon$ e $i \leq nmax$ faça {
    1. $x0 = x1$
    2. $x1 = f(x0)$
    3. $erroiter = abs(x1 - x0)$
    4. $i = i + 1$ }
5. se $i > nmax$ então { escrever "não foi possível ao fim de", *nmax*, "iterações encontrar a solução com o erro pretendido"}
senão { escrever x1, erroiter }

Ordem de convergência de uma sucessão

- $(x_n)_n$ converge para X com ordem de convergência $p > 0$ se

$$|X - x_{n+1}| \leq C|X - x_n|^p, \quad n \geq 0$$

para uma constante $C \geq 0$.
Esta expressão pode escrever-se:

$$\frac{|X - x_{n+1}|}{|X - x_n|^p} \leq C, \quad n \geq 0$$

  - se $p = 1$ diz-se convergência linear
  - se $p = 2$ diz-se convergência quadrática

- Para o método iterativo simples

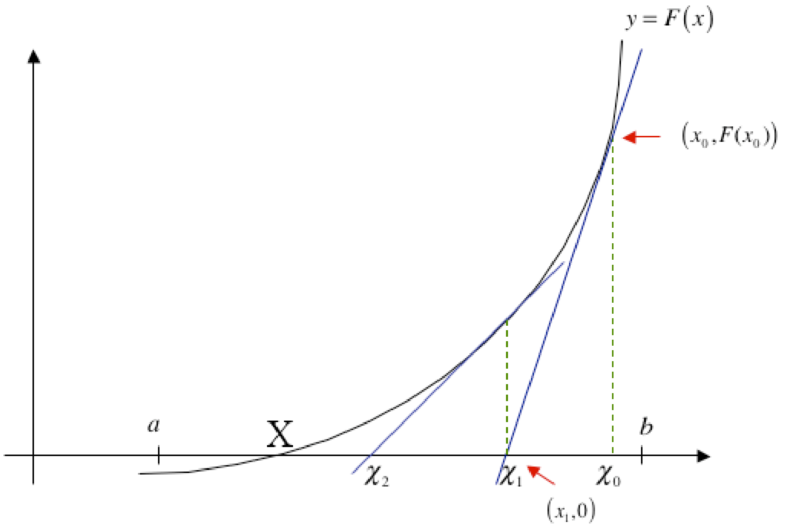
$$|X - x_{n+1}| \leq L|X - x_n|^1, \quad L \leq 1$$

e, portanto, diz-se que este método tem convergência linear (porque a sucessão criada tem convergência linear).

Método de Newton

Consideremos uma função $F(x)$ contínua e derivável num intervalo $[a, b]$ onde existe uma raiz X da equação $F(x) = 0$. Seja x_0 uma aproximação da raiz.

- Interpretação gráfica:



Método de Newton

- Dado x_0, x_1 é o ponto de intersecção da tangente à curva $y = F(x)$ no ponto $(x_0, F(x_0))$ com o eixo dos xx. Ora

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

Logo, se $F'(x_0) \neq 0$, temos

$$x_1 = x_0 - \frac{F(x_0)}{F'(x_0)}$$

e podemos continuar:

$$\begin{aligned} x_2 &= x_1 - \tfrac{F(x_1)}{F'(x_1)} \\ &\vdots \\ x_{n+1} &= x_n - \tfrac{F(x_n)}{F'(x_n)} \\ &\vdots \end{aligned}$$

Método de Newton

- O método de Newton constrói, a partir de um valor inicial x_0, uma sucessão $(x_n)_n$ definida pela relação de recorrência:

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n - \dfrac{F(x_n)}{F'(x_n)}, & n \geq 0 \\ x_0 \quad \text{dado} \end{cases}$$

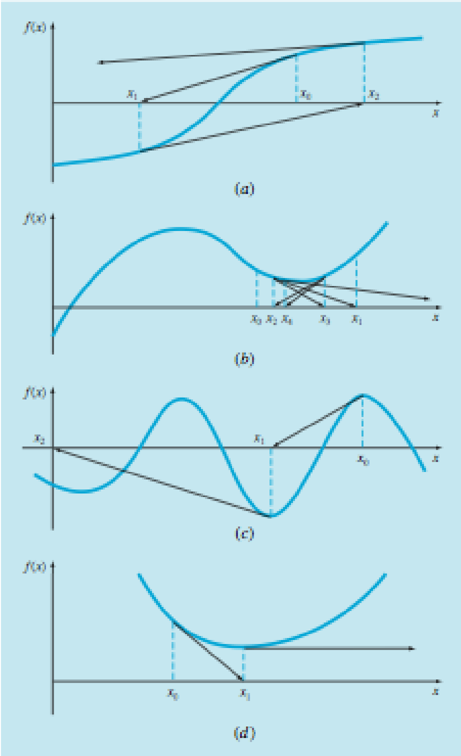
- Se $(x_n)_n$ convergente então o seu limite é uma raiz da equação $F(x) = 0$ pois:
  - seja $q = \lim_{n\to\infty}(x_n)$
  - admitindo que F, F' são contínuas em $[a, b]$ e que $F'(x) \neq 0 \;\; \forall x \in [a, b]$
  - fazendo $n \to \infty$ na relação de recorrência tem-se

$$q = q - \frac{F(q)}{F'(q)} \implies F(q) = 0$$

isto é, q é uma raiz de $F(x) = 0$.

- Pode não haver convergência!

Problemas na convergência do método de Newton



Condições suficientes para a convergência do método de Newton

Teorema

Seja $F(x)$ uma função definida em $[a, b]$ tal que:

1. F, F' e F'' existem e são contínuas em $[a, b]$
2. $F(a)F(b) < 0$
3. $F'(x) \neq 0 \ \ \forall x \in [a, b]$
4. $F''(x) \geq 0$ ou $F''(x) \leq 0 \ \ \forall x \in [a, b]$
5. $F(x_0)F''(x_0) > 0, \quad x_0 \in [a, b]$

então
a sucessão $(x_n)_n$ gerada pela relação de recorrência do método de Newton, a partir daquele valor de x_0,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{F(x_n)}{F'(x_n)}, \quad n \geq 0,$$

converge para a única raiz X de $F(x) = 0$ no intervalo $[a, b]$.

Condições suficientes para a convergência do método de Newton

- Se no teorema substituirmos a condição 5. por

  5^*. $\left|\dfrac{F(c)}{F'(c)}\right| < b-a$, onde c designa o extremo de $[a,b]$ onde $|F'(x)|$ assume o menor valor

  fica garantida a convergência da sucessão $(x_n)_n$ para a raiz X qualquer que seja a aproximação inicial $x_0 \in [a,b]$.

- 1. e 2. $\Longrightarrow$ existe raiz de $F(x)=0$ em $[a,b]$.
- 3. $\Longrightarrow$ a raiz é única.
- 4. e 5. $\Longrightarrow$ convergência da sucessão para o x_0 dado.
- 4. e 5^*. $\Longrightarrow$ convergência da sucessão $\forall x_0 \in [a,b]$.

Demonstração da convergência da sucessão do método de Newton

Há 4 casos possíveis:

caso 1	$F(a)<0$	$F(b)>0$	$F''(x)\le 0$
caso 2	$F(a)>0$	$F(b)<0$	$F''(x)\le 0$
caso 3	$F(a)<0$	$F(b)>0$	$F''(x)\ge 0$
caso 4	$F(a)>0$	$F(b)<0$	$F''(x)\ge 0$

Vamos ver o caso 1 (nos outros a demonstração é análoga)

- F, F' e F'' são contínuas em $[a,b]$
- $F(a)<0$, $F(b)>0$, $F''(x)\le 0 \Longrightarrow F'(x)>0 \;\; \forall x \in [a,b]$

  uma vez que como $F'(x)\neq 0 \;\; \forall x \in [a,b]$ então F' não muda de sinal em $[a,b]$, e como $F(a)<0$ e $F(b)>0$, F é crescente em $[a,b]$ e então $F'>0$.

- por 5. devemos usar $x_0 = a \quad \Longrightarrow \quad \boxed{x_0 \le X}$
- como $F(x_0)<0$ e $F'(x_0)>0$ temos $x_1 = x_0 - \dfrac{F(x_0)}{F'(x_0)} \ge x_0 \Longrightarrow \boxed{x_1 \ge x_0}$

Demonstração da convergência da sucessão do método de Newton

Mostrar, por indução sobre n, que $\boxed{x_n \leq X}$ e $\boxed{x_{n+1} \geq x_n}$ $\forall n$

- para $n = 0$ já vimos que estas desigualdades são verificadas
- supor que são válidas para n, e ver se o são para $n+1$, isto é, se

$$x_{n+1} \leq X \text{ e } x_{n+2} \geq x_{n+1}$$

- $x_n \leq X \implies \exists c \in]x_n, X[: \underbrace{F(X)}_{0} - F(x_n) = (X - x_n)F'(c) \qquad (*)$
- $F''(x) \leq 0 \implies F'$ é não crescente em $[a,b] \implies F'(c) \leq F'(x_n)$
  substituindo em $(*)$ fica

$$-F(x_n) \leq (X - x_n)F'(x_n) \Leftrightarrow -\frac{F(x_n)}{F'(x_n)} \leq (X - x_n) \Leftrightarrow x_n - \frac{F(x_n)}{F'(x_n)} \leq x_n + X - x_n$$

  isto é

$$\boxed{x_{n+1} \leq X}$$

Demonstração da convergência da sucessão do método de Newton

- E como $F(x_{n+1}) \leq 0$ pois $x_{n+1} \in]a, X[$ e $F'(x_{n+1}) > 0$ vem

$$x_{n+2} = x_{n+1} - \frac{F(x_{n+1})}{F'(x_{n+1})} \geq x_{n+1}$$

  isto é

$$\boxed{x_{n+2} \geq x_{n+1}}$$

- Assim, a sucessão $(x_n)_n$ é

$$\left.\begin{array}{l}\text{monótona não decrescente} \\ \text{limitada superiormente por } X\end{array}\right\} \text{logo é convergente.}$$

Método de Newton: outra forma de deduzir a relação de convergência

- Dada $F(x) = 0$, seja $X \in [a, b]$ raíz de $F(x) = 0$ e seja $x_0 \in [a, b]$ a aproximação inicial de X.
- Supor que $F'(x)$ e $F''(x)$ existem e são contínuas em $]a, b[$
- $X = x_0 + \Delta x_0, \quad F(X) = 0$

  $$\Longrightarrow \underbrace{F(x_0 + \Delta x_0)}_{=0} = F(x_0) + F'(x_0)\Delta x_0 + \underbrace{\frac{F''(c)}{2!}\Delta x_0^{\,2}}_{R_2}, \quad c \in]x_0, X[$$

  e se $F'(x) \neq 0$, Δx_0 for suficientemente pequeno e $F''(x)$ satisfizer condições de regularidade tais que R_2 é menosprezável

  $$\Longrightarrow \Delta x_0 \approx -\frac{F(x_0)}{F'(x_0)}$$
- construir nova aproximação $x_1 = x_0 - \dfrac{F(x_0)}{F'(x_0)}$
- e da mesma forma construir $x_{n+1} = x_n - \dfrac{F(x_n)}{F'(x_n)}, \quad n \geq 0$

Majoração do erro após um número finito de iterações

- Δx_n, Δx_{n+1} erros com que x_n, x_{n+1} representam X

  $X = x_n + \Delta x_n = x_{n+1} + \Delta x_{n+1}, \quad n \geq 0$

  A relação de recorrência do método de Newton pode escrever-se

  $$\underbrace{X - \Delta x_{n+1}}_{x_{n+1}} = \underbrace{X - \Delta x_n}_{x_n} - \frac{F(x_n)}{F'(x_n)} \qquad (*)$$
- $0 = F(X) = F(x_n + \Delta x_n) = F(x_n) + F'(x_n)\Delta x_n + \dfrac{F''(c_n)}{2!}\Delta x_n^{\,2}, \quad c_n \in]x_n, X[$

  $$\Longrightarrow \Delta x_n = -\frac{F(x_n)}{F'(x_n)} - \frac{1}{2}\frac{F''(c_n)}{F'(x_n)}\Delta x_n^{\,2}$$
- substituindo em $(*)$ fica

  $$\Delta x_{n+1} = -\frac{1}{2}\frac{F''(c_n)}{F'(x_n)}\Delta x_n^{\,2}$$

Majoração do erro após um número finito de iterações

- e podemos calcular um majorante do erro

$$\boxed{|\Delta x_{n+1}| \leq M\ \Delta x_n{}^2, \quad n \geq 0}$$

onde $M = \dfrac{1}{2} \dfrac{\max_{a \leq x \leq b} |F''(x)|}{\min_{a \leq x \leq b} |F'(x)|}$

- $|\Delta x_1| \leq M\ \Delta x_0{}^2$
$|\Delta x_2| \leq M\ \Delta x_1{}^2\ \leq\ M^{\,3}\ \Delta x_0{}^4\ ,\ \ldots$

$$\boxed{|\Delta x_n| \leq M^{\,2^n - 1}\ |\Delta x_0|^{2^n}, \quad n \geq 1}$$

- Quantas iterações é necessário efetuar para se ter um valor aproximado da raiz X com erro absoluto não superior a ε?
Temos de determinar o valor de n tal que

$$|\Delta x_n| \leq M^{\,2^n - 1}\ |\Delta x_0|^{2^n} \leq \varepsilon \quad \Longrightarrow \quad n \geq \frac{\ln \alpha}{\ln 2}, \quad \alpha = \frac{\ln \varepsilon + \ln M}{\ln M + \ln |\Delta x_0|}$$

Ordem de convergência do método de Newton

- A expressão do erro

$$|\Delta x_{n+1}| \leq M\ \Delta x_n{}^2, \quad n \geq 0$$

mostra que, se $F'(X) \neq 0$, o método de Newton é de segunda ordem pois a sucessão gerada $(x_n)_n$ é tal que

$$\frac{|X - x_{n+1}|}{|X - x_n|^2} \leq M$$

Método de Newton - exemplo

- Exercício: Mostrar que é possível aplicar o método de Newton para calcular a raiz X de $0.123^x - x = 0$, que pertence a [0,1] e calcular X com erro absoluto menor que $\varepsilon = 5 \times 10^{-4}$, usando uma estimativa do erro.

$F(x) = 0.123^x - x$, $F'(x) = \ln(0.123)0.123^x - 1$, $F''(x) = \ln(0.123)^2 0.123^x$

  - F, F' e F'' são contínuas em $[0,1]$
  - $F(0)F(1) < 0$, pois $F(0) = 1 > 0$ e $F(1) = -0.877... < 0$
  - $F'(x) < 0 \ \forall x \in [0,1]$ (pois $\ln(0.123) < 0$), logo $F'(x) \neq 0 \ \forall x \in [0,1]$
  - $F''(x) > 0 \ \forall x \in [0,1]$
  - $x_0 = 0$

n	x_n	$\lvert x_n - x_{n-1} \rvert$
0	0	
1	0.3230421866	0.3230421866
2	0.4126928168	0.0896506302
3	0.4171717404	0.0044789236
4	0.4171816065	0.0000098661 $\Longrightarrow X = 0.41718(\pm 5 \times 10^{-4})$

- E calculando um majorante do erro?... Neste caso temos de localizar X num intervalo de amplitude menor. Fica como exercício.

Método de Newton: uma forma de iteração simples

- O método de Newton pode aparecer como uma forma iterativa simples, rápidamente convergente. Podemos escrever
- $F(x) = 0 \Longleftrightarrow x = f(x)$, onde $f(x) = x + \theta F(x), \theta \in \mathbb{R}, \theta \neq 0$
- Se escolhermos $f(x)$ tal que $f'(x) \approx 0, f'(x) \neq 0$ então o processo iterativo é rápidamente convergente.
- Ora $f'(x) = 1 + \theta F'(x)$ e se tomarmos $\theta \approx -\dfrac{1}{F'(x)}$, $(F'(x) \neq 0)$ então

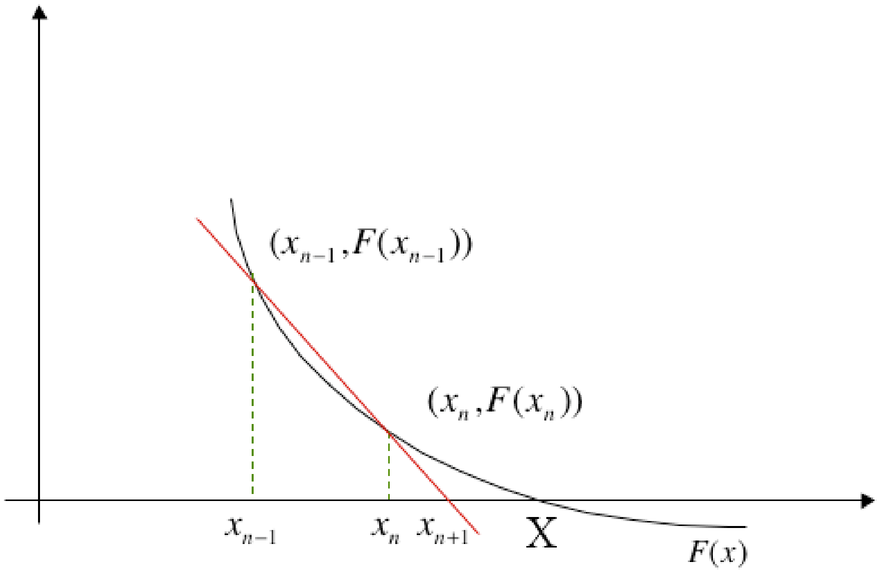
$$f(x) = x - \frac{F(x)}{F'(x)}$$

e o processo iterativo

$$x_{n+1} = f(x_n)$$

conduz à relação de recorrência do método de Newton.

Variantes do método de Newton - método da secante



Variantes do método de Newton - método da secante

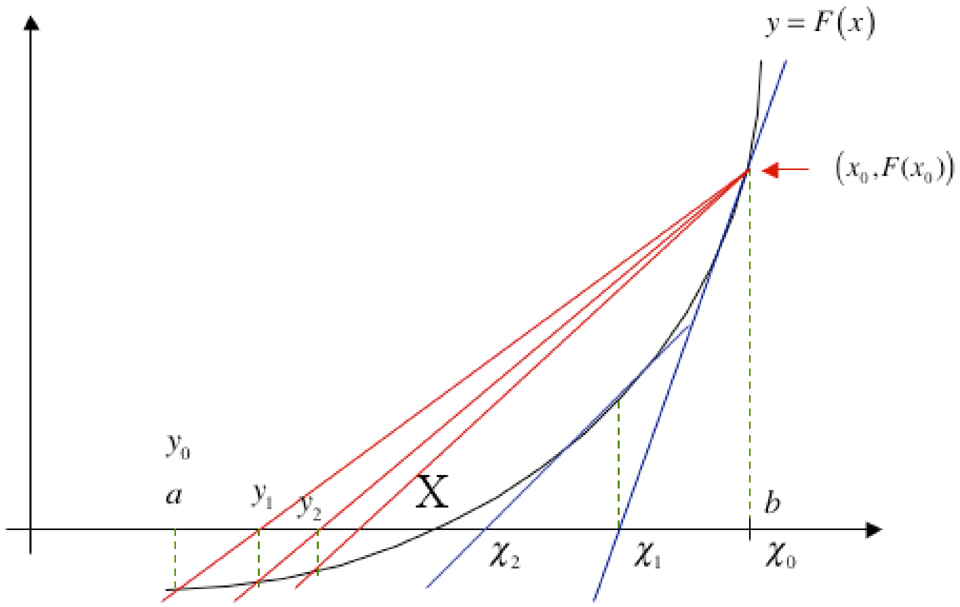
- A sucessão $(x_n)_n$ do método da secante é definida pela relação de recorrência

$$\begin{cases} x_{n+1} = x_n - \dfrac{F(x_n)}{F(x_n) - F(x_{n-1})}(x_n - x_{n-1}), \quad n \geq 1 \\ x_0 \quad \text{dado} \\ x_1 \quad \text{dado} \end{cases}$$

- Neste método evita-se o cálculo da derivada de $F(x)$ fazendo a aproximação

$$F'(x_n) \approx \frac{F(x_n) - F(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$$

- Graficamente substitui-se a tangente ao gráfico de $F(x)$ no ponto $(x_n, F(x_n))$ pela secante ao gráfico de $F(x)$ nos pontos $(x_{n-1}, F(x_{n-1}))$, $(x_n, F(x_n))$.



- Seja $(x_n)_n$ a sucessão definida pelo método de Newton, onde x_0 é tal que $F(x_0)F''(x_0) > 0$
- A sucessão $(y_n)_n$ do método da falsa posição é definida pela relação de recorrência

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n - \dfrac{F(y_n)}{F(y_n) - F(x_0)}(y_n - x_0), \quad n \geq 0 \\ x_0, \quad \text{extremo do intervalo } [a,b] \text{ para arranque do método de Newton} \\ y_0, \quad \text{extremo do intervalo } [a,b] \text{ que não é } x_0 \end{cases}$$

- As sucessões $(x_n)_n$ e $(y_n)_n$ enquadram a raíz X em cada iteração simultânea dos dois métodos e, portanto,

$$X = \frac{x_n + y_n}{2} \pm \frac{|x_n - y_n|}{2}$$

Comportamento do método de Newton no cálculo de zeros múltiplos

- A raíz α de $F(x) = 0$ diz-se um zero de multiplicidade m se

$$F(x) = (x-\alpha)^m h(x)$$

onde $h(\alpha) \neq 0$, m inteiro positivo.

- Se F é suficientemente derivável então uma definição equivalente é

$$F(\alpha) = F'(\alpha) = F''(\alpha) = \cdots = F^{(m-1)}(\alpha) = 0, \quad F^{(m)}(\alpha) \neq 0$$

Exemplos:

- $F(x) = (x-1)^2(x+2)$ tem duas raízes, $\alpha = 1$ com multiplicidade 2 e $\alpha = -2$ com multiplicidade 1.
- $F(x) = x^3 - 3x^2 + 3x - 1$ tem uma raíz $\alpha = 1$ com multiplicidade 3, pois $F(1) = F'(1) = F''(1) = 0$ e $F'''(1) = 6 \neq 0$

Comportamento do método de Newton no cálculo de zeros múltiplos

- Usar o método de Newton para calcular um valor aproximado do zero $\alpha = 1.1$ de

$$\begin{aligned} F(x) &= 2.7951 - 8.954x + 10.56x^2 - 5.4x^3 + x^4 \\ &= 2.7951 + x(-8.954 + x(10.56 + x(-5.4 + x))) \\ &= (x-1.1)^3(x-2.1) \end{aligned}$$

- $x_0 = 0.8, \qquad x_{n+1} = x_n - \dfrac{F(x_n)}{F'(x_n)}, \quad n \geq 0, \qquad |\alpha - x_n| \leq M|\alpha - x_{n-1}|^2, \quad n \geq 1$

n	x_n	$\lvert\alpha - x_n\rvert$	$\lvert\alpha - x_n\rvert / \lvert\alpha - x_{n-1}\rvert^2$
0	0.8	0.3	
1	0.892857143	0.207142857	2.301587301
2	0.958168977	0.141831023	3.305455481
3	1.003566327	0.096433673	4.793869809
4	1.034795332	0.065204668	7.011666813
5	1.056095602	0.043904398	10.32644059
6	1.070528068	0.029471932	15.28947429
7	1.080259184	0.019740816	22.72730225
8	1.086797266	0.013202734	33.87924102
	$\downarrow$		$\Downarrow$
	1.1		??? M

Comportamento do método de Newton no cálculo de zeros múltiplos

- Mas se analisarmos o comportamento de $|\alpha - x_n|/|\alpha - x_{n-1}|$:

n	$\lvert\alpha - x_n\rvert/\lvert\alpha - x_{n-1}\rvert$
1	0.6904761903
2	0.6847014924
3	0.6799194611
4	0.6761607846
5	0.6733321301
6	0.6712751647
7	0.6698175064
8	0.6688038630

temos que

$$|\alpha - x_n|/|\alpha - x_{n-1}| \approx \frac{2}{3} \Longrightarrow |\alpha - x_n| \approx \frac{2}{3}|\alpha - x_{n-1}|^1$$

isto é, a sucessão $(x_n)_n$ apresenta convergência linear em vez de apresentar convergência quadrática, que seria de esperar no método de Newton.

Comportamento do método de Newton no cálculo de zeros múltiplos

- É possível mostrar que quando numa sucessão do método de Newton se verifica experimentalmente que

$$\frac{|\alpha - x_n|}{|\alpha - x_{n-1}|} \approx \frac{m-1}{m}$$

então a raíz α para a qual a sucessão converge tem multiplicidade m.
- No caso anterior $\alpha = 1.1$ terá multiplicidade $m = 3$, como se esperava.
- Quando não é conhecida a raíz podemos estimar os erros por:

$$\frac{|\alpha - x_n|}{|\alpha - x_{n-1}|} \approx \frac{|x_n - x_{n-1}|}{|x_{n-1} - x_{n-2}|}$$

- Como calcular a raíz múltipla, conhecida a sua multiplicidade, de uma forma eficiente?
$\longrightarrow$ se α é raíz de $F(x) = 0$ com multiplicidade m então é raíz simples de

$$G(x) = F^{(m-1)}(x)$$

$\longrightarrow$ aplicar o método de Newton ao cálculo da raíz de $G(x) = 0$.