

Capítulo 2

Solução numérica de equações e sistemas não lineares

2.1 Breve referência histórica

A origem dos métodos numéricos para a resolução de equações não lineares é bastante antiga. Os matemáticos gregos tinham já notado a importância do conhecimento da relação entre a corda de uma circunferência e o arco que ela define. Hiparco de Niceia, no século II a.C., foi provavelmente o primeiro a introduzir a função corda

$$\text{cor}(2\theta) = 2R \sin \theta,$$

onde R é o raio da circunferência e θ o ângulo subentendido.

No entanto, o primeiro matemático a tabelar esta função foi Ptolomeu (100-178), no seu *Almagest*, onde também calculou fórmulas para $\text{cor}(\theta_1 + \theta_2)$ e $\text{cor}(\frac{1}{2}\theta)$. O que é interessante notar é que Ptolomeu para calcular $\text{cor}(1^\circ)$ usou um procedimento iterativo onde obtinha sucessivas aproximações, partindo de vários valores iniciais.

O problema de melhorar o método de Ptolomeu preocupou muitos matemáticos, em particular os do mundo árabe, até ao tempo de al-Kashi (séc. XV). Este matemático (e astrónomo) deduziu um elegante método iterativo que envolvia equações algébricas e que, em particular, permitia calcular o valor de $\sin 1^\circ$ partindo de $\sin 3^\circ$. Este problema, conhecido por *trisseccão do ângulo*, constiu um dos problemas mais famosos da história da Matemática e, em particular das equações algébricas.

O conceito de equação algébrica tinha sido introduzido no séc. IX pelo matemático árabe Mohammed ibn Musa al-Khowarismi (780-850) na obra *Ilm al-Jabr wa'i Muquabalah*. Nesta obra eram explicadas, essencialmente, duas operações: *al-jabr* é a operação que consiste em fazer passar de um membro da equação para o outro um termo subtractivo por forma a o tornar aditivo; *al-muquabalah* é a operação que consiste em suprimir os termos idênticos em ambos os membros da equação. O nome de al-Kowarismi deu origem à palavra portuguesa algarismo e deve-se ao facto de ter sido a obra deste matemático que deu a conhecer ao ocidente a numeração hindu-árabe. Outro matemático-filósofo de destaque no contexto das equações alébricas foi o famoso Omar Khayyam (1048-1131), da Pérsia, autor da célebre obra *Odes ao Vinho*.

A notação era, no entanto, bastante deficiente. Importantes contributos no sentido da simplificação da notação foram dados por Leonardo de Pisa (Fibonacci) (1170?-1250?) no

século XIII, Luca de Pacioli (1445?-1517) no século XV, Christoph Rudolf (matemático alemão que introduziu os símbolos + e -) e Robert Recorde (1510?-1558) (matemático inglês que introduziu o símbolo =) no século XVI e, sobretudo, por François Viète (1540-1603), ou à latina como ele preferia, Vieta, nos finais do século XVI.

Após os trabalhos de John Napier (1550-1617) e de Henry Briggs (1556-1630) sobre logaritmos, Vieta desenvolveu, em 1595, um esquema iterativo para calcular um zero de um polinómio de grau 45, problema que tinha sido proposto a todos os matemáticos do mundo por Adrianus Romanus (o verdadeiro nome deste matemático era Adriaan von Roomen mas também preferiu o nome latino; manias da Renascença...). Vieta não só calculou de uma forma brilhante um zero como também apresentou os 23 zeros positivos do referido polinómio!¹ É curioso reparar que, em 1670, o método de Vieta foi descrito como um 'trabalho impróprio para um cristão e mais adequado a alguém que queira comprometer-se a remover os Alpes italianos para a Inglaterra'.

Durante este período muitos matemáticos se dedicaram à tarefa de deduzir métodos iterativos. Por exemplo, nos meados do séc. XVII, Johannes Kepler (1571-1630) produziu um esquema iterativo para resolver a famosa equação

$$\alpha = \beta + e \sin \beta,$$

onde β é função de α a que chamou *regula rostitutionum*. Na segunda metade desse século, a Matemática na Europa ocidental sofreu uma enorme evolução. É de salientar, nesta época, as novas teorias e notações apresentadas por René Descartes (1596-1650) em *La Géométrie* bem como os trabalhos do seu grande rival intelectual Pierre Fermat (1601-1665).

Precedido por este conjunto de resultados, o grande matemático inglês Isaac Newton (1643-1727) publicou, em 1669 no seu célebre trabalho *Principia Mathematica* (Livro 1, Prop.31, Scholium), 'uma versão melhorada do procedimento exposto por Vieta e melhorado por Oughtred' para calcular a solução de $x^3 - 2x - 5 = 0$. Este esquema, que ele também usaria para resolver o problema de Kepler, pode ser representado por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, \dots,$$

e constitui um poderoso e simples método para calcular raízes de equações não lineares. Este método é muitas vezes designado por método de Newton-Raphson pois ele foi sistematicamente estudado por Joseph Raphson (?-1715?) num trabalho que publicou em 1690. Devido aos seus excelentes trabalhos, neste e noutros campos, Newton é considerado como um dos grandes precursores da análise numérica.

2.2 Introdução

A solução de equações e sistemas de equações é um capítulo em que a análise numérica encontra uma solução bastante precisa. Neste capítulo vamos expor alguns métodos que nos permitem obter uma aproximação da solução real de uma equação real da forma

$$f(x) = 0, \tag{2.1}$$

¹Vieta, que possuía um profundo conhecimento matemático, serviu-se para o seu estudo de várias simplificações de notação que introduziu, nomeadamente, a de usar letras não só para denotar constantes como para denotar variáveis; as primeiras letras do alfabeto seriam reservadas para as constantes e as últimas para as variáveis.

onde f pode ser algébrica ou transcendente.

Os valores de x^* tais que $f(x^*) = 0$ são designados por zeros de f , ou raízes de $f(x) = 0$. Só para algumas escolhas particulares de f é que são conhecidos processos que permitem calcular os referidos valores com um número finito de operações.

Exemplo 2.1 As raízes da equação do segundo grau

$$ax^2 + bx + c = 0$$

são facilmente obtidas pela chamada 'fórmula resolvente'

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}, \quad a \neq 0.$$

Exemplo 2.2 As raízes da equação

$$x^3 + px^2 + qx + r = 0$$

podem ser obtidas pelo processo que se segue, devido a Scipione del Ferro (1465-1515) e Niccolò Tartaglia (1499-1557). Fazendo a mudança de variável $x = z - \frac{p}{3}$ obtém-se assim a equação

$$z^3 + az + b = 0,$$

onde

$$a = \frac{1}{3}(3q - p^2) \quad \text{e} \quad b = \frac{1}{27}(2p^3 - 9pq + 27r).$$

As raízes desta nova equação são dadas por

$$z_1 = A + B; \quad z_2 = -\frac{A+B}{2} + \frac{A-B}{2}\sqrt{-3}; \quad z_3 = -\frac{A+B}{2} - \frac{A-B}{2}\sqrt{-3},$$

onde

$$A = \sqrt[3]{\frac{-b}{2} + \sqrt{\frac{b^2}{4} + \frac{a^3}{27}}},$$

$$B = \sqrt[3]{\frac{-b}{2} - \sqrt{\frac{b^2}{4} + \frac{a^3}{27}}}.$$

Assim as raízes da equação dada são

$$x_1 = z_1 - \frac{p}{3}; \quad x_2 = z_2 - \frac{p}{3}; \quad x_3 = z_3 - \frac{p}{3}.$$

É também possível determinar analiticamente as raízes de uma equação polinomial de quarta ordem. Tal fórmula é devida a Ludovico Ferrari (1522-1569). A fórmula para calcular as raízes de uma equação polinomial de quinta ordem foi procurada durante séculos; em 1826, o matemático norueguês Niels Henrik Abel (1802-1829) provou que essa fórmula não existe. Assim, para calcular as raízes de uma equação polinomial de grau igual ou superior a cinco temos que recorrer a métodos numéricos. Além disso, de um modo geral, não existem fórmulas para a determinação das raízes de uma equação não linear não polinomial. É o caso de considerarmos, por exemplo,

$$e^x + \tan x + \log x = 0.$$

A solução analítica de sistemas de equações não lineares também não é possível de obter na maioria dos casos. Como exemplo, considere-se

$$\begin{cases} x^2y + 2xy^2 - xy = 3 \\ xy^2 - 2x^2y + 4xy = -1 \end{cases} .$$

Problemas numéricos desta natureza ocorrem com muita frequência na resolução de equações diferenciais, integração, determinação de extremos, etc. Na impossibilidade de obter a sua solução exacta, vamos considerar os chamados métodos iterativos por forma a obter uma solução aproximada para o problema.

2.3 Métodos iterativos

Consideremos o problema (2.1). A filosofia dos métodos iterativos consiste em, partindo de uma aproximação inicial x_0 para uma solução x^* do problema, gerar uma sucessão de valores

$$x_{k+1} = g(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.2)$$

que seja convergente para essa solução.

Definição 2.3 O método iterativo (2.2) diz-se convergente para x^* se

$$\lim_{k \rightarrow \infty} e_k = 0,$$

onde $e_k := \Delta x_k = x^* - x_k$ é o erro (absoluto) da iteração k .

Dados vários processos iterativos convergentes para a solução x^* de (2.1) coloca-se a questão de saber qual dos processos é mais eficiente. A eficiência de um processo iterativo pode ser medida de várias maneiras: esforço computacional, tempo gasto, etc. Nesta secção iremos definir um conceito que servirá para medir a velocidade de convergência de um determinado processo iterativo.

Definição 2.4 Uma sucessão de iterações $\{x_k\}$ diz-se que converge com ordem de convergência $p \geq 1$ para um ponto x^* se existir uma constante $M > 0$, independente de k , e uma ordem $k_0 \in \mathbb{N}$ a partir da qual

$$|e_{k+1}| \leq M|e_k|^p, \quad (2.3)$$

A constante M é chamada constante erro.

A velocidade de convergência de um processo iterativo está usualmente associada ao conceito de ordem de convergência. Quanto maior for a ordem de convergência mais rápida é, em geral, a velocidade de convergência do processo. A razão de convergência também pode ser um aspecto a considerar mas, normalmente, só é considerada quando se comparam processos iterativos com a mesma ordem de convergência. Aqui, quanto menor for a razão de convergência mais rápida é a convergência do processo.

Observação 2.5 Se $p = 1$ diz-se que o método iterativo converge linearmente para x^* . Neste caso a constante erro M terá que ser inferior a 1 (para o método convergir) e a relação (2.3) pode ser escrita na forma

$$|e_{k+1}| \leq M^{k+1}|e_0|.$$

Se $p = 2$ diz-se que a convergência é quadrática.

Outras questões que surgem naturalmente quando se fala de métodos iterativos são as seguintes.

- Como determinar a aproximação inicial?
- Como definir um método iterativo convergente?
- Como saber que a solução dada pelo método iterativo constitui uma boa aproximação para a solução exacta, isto é, como parar o processo iterativo?

As duas primeiras questões serão respondidas nas próximas secções. Consideremos, por agora, apenas o problema da definição de critérios de paragem para processos iterativos aplicados ao cálculo das raízes de (2.1).

Seja (2.2) o processo iterativo gerador de uma sucessão de aproximações convergente para a solução x^* de (2.1). Os critérios de paragem mais frequentes, quando se pretende aproximar a raiz x^* com uma precisão ε , são:

1. Critério do erro absoluto: $|x_k - x_{k-1}| \leq \varepsilon$;
2. Critério do erro relativo: $|x_k - x_{k-1}| \leq \varepsilon|x_k|$;
3. Critério do valor da função: $|f(x_k)| \leq \varepsilon_1$, onde $\varepsilon_1 \ll \varepsilon$;
4. Critério do número máximo de iterações: $k = k_{max}$.

O primeiro e o segundo critérios são assim conhecidos uma vez que os valores por eles obtidos podem constituir estimativas para $|\Delta x_k|$ e $|r_{x_k}|$, respectivamente. O último critério utiliza-se como factor de segurança, para prever o caso em que o processo iterativo possa divergir.

Observação 2.6 *Como a sucessão $\{x_k\}$ é convergente, a sucessão $\{|x_k - x_{k-1}|\}$ também o é e o seu limite é zero. Este facto garante-nos a eficácia dos critérios do erro absoluto e relativo.*

Uma questão final, para a qual não iremos dar grande ênfase, tem a ver com a estabilidade dos algoritmos. Como é sabido, muitos dos problemas que pretendemos resolver podem ser sensíveis a erros, isto é, mal condicionados. Um caso disso é o conhecido exemplo de Wilkinson.

Exemplo 2.7 Consideremos a seguinte equação

$$(x + 1)(x + 2) \cdots (x + 20) = 0.$$

Se efectuarmos as multiplicações vem que

$$x^{20} + 210x^{19} + \cdots + 20! = 0.$$

Perturbemos agora o sistema alterando o coeficiente 210 para $210 + 2^{-23}$. Temos assim um novo problema para resolver na forma

$$x^{20} + (210 + 2^{-23})x^{19} + \cdots + 20! = 0.$$

As raízes deste novo problema são

$$-1, -2, \dots, -8, -14 \pm 2.5i, -16.73 \pm 2.8i, \dots$$

Para estes problemas os métodos iterativos a usar terão que ser escolhidos de forma muito criteriosa por forma a não propagarem muito os erros no processo de cálculo.

2.4 Determinação da aproximação inicial

Num processo iterativo é necessário determinar uma estimativa inicial da solução do problema a resolver. Por várias razões, algumas delas óbvias, é de todo o interesse que essa aproximação esteja o mais próximo possível da solução exacta. Existem vários processos que permitem encontrar essas aproximações iniciais.

Exemplo 2.8 As soluções de $x^{2.1} - 4x + 2 = 0$ podem ser aproximadas inicialmente pelas soluções de $x^2 - 4x + 2 = 0$.

Exemplo 2.9 Se pretendermos aproximar a maior raiz de $x^5 - x - 500 = 0$ podemos tomar para aproximação inicial $x \approx \sqrt[5]{500} = 3.468$.

As técnicas usadas nos exemplos anteriores são muito intuitivas e não podem ser generalizadas a uma gama elevada de problemas. O processo mais usual de obter uma aproximação inicial consiste em determinar um intervalo de pequena amplitude contendo a raiz a calcular. Para isso iremos considerar dois métodos: o processo da localização gráfica e o chamado método de Rolle.

2.4.1 Localização gráfica

Este método consiste em tentar obter graficamente um intervalo que contenha a raiz de (2.1) que pretendemos calcular. Ora, o traçado gráfico da função f pode não ser evidente e constituir, em si, um processo de complicada resolução. Este problema pode ser contornado se reescrevermos a equação (2.1) na forma equivalente

$$f_1(x) = f_2(x), \quad (2.4)$$

sendo f_1 e f_2 funções cujo traçado gráfico seja mais simples que o de f . Assim as raízes de (2.1) serão as soluções de (2.4), isto é, os pontos de intersecção de f_1 com f_2 .

O processo de determinação gráfica de um intervalo que contém a raiz deve ser sempre acompanhado de uma confirmação analítica, confirmação essa que pode ser dada pelo seguinte teorema que resulta como corolário imediato do Teorema de Bolzano.

Teorema 2.10 *Se f for uma função contínua em $[a, b]$ e se $f(a)f(b) < 0$ então existe pelo menos um $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$.*

Se para além das hipóteses do teorema anterior se verificar que a derivada de f não muda de sinal no intervalo $[a, b]$, então a raiz é única nesse intervalo. Temos assim um critério para verificar a existência e unicidade de zero de uma função contínua f num dado intervalo $[a, b]$: se

1. f é contínua em $[a, b]$;
2. $f(a)f(b) < 0$;
3. f' não muda de sinal em $[a, b]$,

então existe uma e uma só raiz de $f(x) = 0$ em $[a, b]$.

Exercício 2.4.1 Localize graficamente as raízes de $f(x) = 0$, sendo $f(x) = |x| - e^x$.

Resolução: Como

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow |x| = e^x,$$

traçando o gráfico de $y = |x|$ e $y = e^x$ (Figura 2.1) verificamos que o seu ponto (único) de intersecção, x^* (a raiz de $f(x) = 0$), se situa no intervalo $(-1, 0)$.

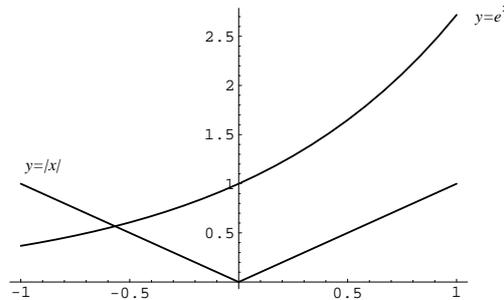


Figura 2.1: Localização gráfica.

De facto tal acontece uma vez que

1. $f \in C((-1, 0))$;
2. $f(-1)f(0) = 0.632 \times (-1) = -0.632 < 0$;
3. $f'(x) = -1 - e^x$, para $x < 0$, e como tal $f'(x) < 0$ para todo o $x \in (-1, 0)$.

2.4.2 Método de Rolle

Quando o método gráfico for de difícil aplicação poderemos usar o chamado método de Rolle. Este método é muito usado quando pretendemos localizar as raízes de uma equação algébrica. (Note-se que quando o grau do polinómio que define a equação algébrica for muito grande o traçado gráfico torna-se complicado.) A justificação teórica do método é dada pelo Teorema de Rolle e o seu corolário seguinte.

Teorema 2.11 *Se f for uma função contínua e diferenciável em $[a, b]$ e se a e b são dois zeros consecutivos de f' , então existe, no máximo, um $\xi \in (a, b)$ tal que $f(\xi) = 0$.*

Este teorema, em linguagem (muito) informal, costuma ser enunciado de forma seguinte: entre dois zeros consecutivos da derivada de uma dada função, existe, no máximo, um zero dessa função.

Para definir o método de Rolle consideremos, previamente, a seguinte definição.

Definição 2.12 *Chamam-se números de Rolle da equação $f(x) = 0$, definida em $I \subseteq \mathbb{R}$, ao conjunto formado pelos pontos fronteira de I e pelos zeros da derivada de f .*

Atendendo ao teorema anterior temos que, uma vez ordenados de forma crescente, entre dois números de Rolle consecutivos existe no máximo uma raiz real da equação. Assim se o valor da função tiver o mesmo sinal nos extremos do intervalo definido por dois números de Rolle consecutivos, a equação não tem nenhuma raiz real nesse intervalo; caso contrário, a equação tem uma só raiz real no intervalo.

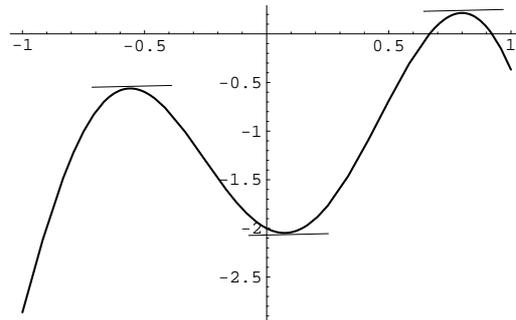


Figura 2.2: Corolário do Teorema de Rolle.

Exercício 2.4.2 Usando o método de Rolle, localize todas as raízes reais de

$$f(x) \equiv x^3 - 2x - 5 = 0.$$

Resolução: A função derivada, definida pela expressão $3x^2 - 2$, tem dois zeros $-\sqrt{2/3}$ e $+\sqrt{2/3}$. Os números de Rolle da equação dada são

$$-\infty, \quad -\sqrt{\frac{2}{3}}, \quad +\sqrt{\frac{2}{3}}, \quad +\infty.$$

Como a função dada é contínua em \mathbb{R} e

r_i	$-\infty$	$-\sqrt{2/3}$	$+\sqrt{2/3}$	$+\infty$
$f(r_i)$	-	-	-	+

temos que a única raiz real da equação dada está no intervalo $(\sqrt{2/3}, +\infty)$.

Note-se que o intervalo obtido no exemplo anterior ainda é bastante grande. Podemos diminuí-lo recorrendo ao seguinte resultado, obtido a partir do Teorema de Taylor e válido apenas para equações algébricas.

Teorema 2.13 (Newton) *Seja $P(x) = 0$ uma equação algébrica. Se para $x = L$ ($L > 0$) o polinómio P e as suas sucessivas derivadas forem não negativas então L constitui um limite superior das raízes positivas de $P(x) = 0$.*

Demonstração: Seja P um polinómio de grau n . Fazendo o seu desenvolvimento de em série Taylor, em torno de $x = L$, temos que

$$P(x) = P(L) + P'(L)(x - L) + \frac{P''(L)}{2!}(x - L)^2 + \dots + \frac{P^{(n)}(L)}{n!}(x - L)^n.$$

Assim é fácil concluir que, nas hipótese do teorema, $P(x) > 0$ para todo o $x > L$, o que prova o pretendido. \square

Um limite inferior l para as raízes negativas de $P(x) = 0$ poderia ser obtido usando o resultado anterior, atendendo a que as raízes negativas de uma equação algébrica $P(x) = 0$, onde P é um polinómio de grau n , são as raízes positivas, com sinal contrário, de $Q(x) \equiv (-1)^n P(-x) = 0$.

Exercício 2.4.3 Prove a afirmação anterior.

Exercício 2.4.4 Determine limites superiores e inferiores para as raízes reais de

$$P(x) \equiv x^3 - 2x - 5 = 0.$$

Resolução: Assim, atendendo a que

	0	1	2	3
$P(x)$	-	-	-	+
$P'(x)$				+
$P''(x)$				+
$P'''(x)$				+

$L = 3$ é limite superior das raízes de $P(x) = 0$. Para determinar um limite inferior das raízes seja

$$Q(x) \equiv (-1)^3 P(-x) = x^3 - 2x + 5$$

Ora, atendendo a que

	0	1
$Q(x)$	-	+
$Q'(x)$		+
$Q''(x)$		+
$Q'''(x)$		+

temos que $l = -1$ é limite inferior das raízes de $P(x) = 0$.

2.5 Cálculo das raízes

Seja f uma função contínua em $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$. Então, pelo Teorema 2.10 existe pelo menos uma raiz x^* de $f(x) = 0$ em (a, b) . Se para além disso se verificar que a derivada de f não muda de sinal no intervalo $[a, b]$, então a raiz é única nesse intervalo.

Localizada a raiz², vamos construir uma sucessão de aproximações convergente para essa raiz. O método mais simples de entre os que iremos estudar é o método das divisões sucessivas conhecido por método da bissecção.

2.5.1 Método da bissecção

No método da bissecção não é necessário o conceito de aproximação inicial mas sim o de intervalo inicial $I_0 = [a, b]$. Começemos por determinar o ponto médio de I_0 ,

$$x_1 = \frac{b + a}{2}.$$

Assim, caso $f(a)f(x_1) < 0$, temos que $x^* \in [a, x_1]$; caso contrário temos que $x^* \in [x_1, b]$. Suponhamos, sem perda de generalidade, que $x^* \in I_1 = [a, x_1]$. Obtemos assim um intervalo que

²Localizar uma raiz significa encontrar um intervalo que a contenha essa e apenas essa raiz.

contém a raiz x^* de amplitude igual a metade da amplitude do intervalo inicial. Determinando agora o ponto médio de I_1 ,

$$x_2 = \frac{x_1 + a}{2},$$

podemos obter, de forma análoga, um novo intervalo que contenha a raiz x^* , de amplitude igual a metade da amplitude do intervalo I_1 . Seja esse intervalo $I_2 = [x_1, x_2]$. O processo repete-se determinando uma sucessão $\{x_k\}$ que converge, evidentemente, para x^* .

O algoritmo do método da bissecção pode ser dado como se segue.

Algoritmo 2.1 Método da bissecção

Ler a e b ;

Se $f(a)f(b) \geq 0$ então parar;

Repetir

$$c := \frac{a+b}{2};$$

Se $f(a)f(c) \leq 0$ então $b := c$ caso contrário $a := c$

até que $|b - a| \leq \varepsilon_1$ ou $|f(c)| \leq \varepsilon_2$;

Escrever $x^* \approx c$.

Exercício 2.5.1 Melhore o algoritmo anterior.

Observação 2.14 *Notemos que, no método da bissecção, a exigência de unicidade de raiz é supérflua. A única exigência é a de que a função tenha sinal contrário nos extremos do intervalo e tal é verificado sempre que exista, nesse intervalo, um número ímpar de raízes.*

Verifica-se facilmente que, sendo o intervalo inicial $I_0 = [a, b]$, a amplitude do intervalo I_n (obtido ao fim de n iterações) é dada por

$$\frac{b - a}{2^n},$$

uma vez que a amplitude do intervalo I_{k+1} é sempre igual a metade da amplitude do intervalo I_k , para $k = 1, 2, \dots$

Exercício 2.5.2 Considere o método da bissecção. Seja L a amplitude do intervalo $[a, b]$ que contém uma e uma só raiz x^* de $f(x) = 0$ e $\{x_1, x_2, \dots\}$ a sucessão de pontos médios gerados pelo referido método. Mostre que

- $|x^* - x_{k+1}| \leq |x_{k+1} - x_k| = \frac{L}{2^{k+1}}$.

- O número n de iterações necessárias para garantir uma aproximação da raiz com uma precisão δ é dado por $n \geq -\frac{\ln \frac{\delta}{L}}{\ln 2}$.

Resolução: 1. Faz-se, sem problemas, por indução.

2. Ao fim de n iterações obtemos o valor x_n . Assim, pela primeira parte, para calcular qual o n que verifica $|x^* - x_n| \leq \delta$, vamos determinar qual o n tal que

$$|x_n - x_{n-1}| = \frac{L}{2^n} \leq \delta.$$

Temos, sucessivamente,

$$\frac{L}{2^n} \leq \delta \Rightarrow \frac{L}{\delta} \leq 2^n \Rightarrow n \geq -\frac{\ln \frac{\delta}{L}}{\ln 2}.$$

Observação 2.15 *Note-se que, atendendo ao que foi demonstrado no exercício anterior, a demonstração da convergência do método da bissecção resulta imediatamente uma vez que*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} |x^* - x_k| \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{L}{2^k} = 0.$$

Este método possui algumas vantagens bem como algumas desvantagens em relação a outros métodos que iremos estudar nas secções seguintes. A primeira grande vantagem é que o método da bissecção converge sempre (desde que exista raiz no intervalo inicial). A segunda vantagem é que existe uma possibilidade de, *a priori*, poder indicar um majorante para o erro cometido ao fim de um certo número de iterações.

A grande desvantagem do método da bissecção reside no facto da sua velocidade de convergência ser muito lenta quando comparada com a dos outros métodos. De facto prova-se que, atendendo à definição de ordem de convergência dada, o método da bissecção converge linearmente e possui uma constante erro $M = \frac{1}{2}$, isto é,

$$|e_{k+1}| \leq \frac{1}{2}|e_k|.$$

Exemplo 2.16 É bem sabido que os planetas ao girar em torno do Sol (e os satélites artificiais em torno da Terra) descrevem órbitas elípticas. Para determinar em que ponto da elipse se encontra o móvel num determinado instante t há que resolver a chamada equação de Kepler

$$x - e \sin x = z,$$

onde e é a excentricidade (conhecida) da elipse (e que é um valor que varia entre zero, caso a órbita fosse circular, e próximo de um, caso a órbita fosse muito alongada) e z é um número que se calcula a partir de t . Aqui $f(x) = x - e \sin x - z$.

Vamos considerar o caso em que $e = 0.5$ e $z = 0.7$. Temos que $f(0) = -0.7 < 0$ e $f(2) = 1.3 - 0.5 \sin 2 > 1.3 - 0.5 = 0.8 > 0$. Assim, podemos começar o método da bissecção com o intervalo $I_0 = [0, 2]$. Pelo facto de $f(1) < 0$ temos que a solução pretendida se encontra no intervalo $I_1 = [1, 2]$. Após cinco aplicações do método da bissecção concluímos que a solução se encontra no intervalo $I_5 = [1.125, 1.1875]$. Tomando como aproximação para a solução o ponto médio $1.15625 = (1.125 + 1.1875)/2$ temos a garantia que o valor absoluto do erro é inferior a 0.03125.

Exercício 2.5.3 Usando o método da bissecção, determine um valor aproximado para o zero de $f(x) = |x| - e^x$, com um erro que não exceda 0.15.

Resolução: Atendendo ao exercício 3.1, temos que a raiz x^* de $f(x) = 0$ existe e é única no intervalo $(-1, 0)$. Vamos determinar qual o menor valor de n tal que $|x^* - x_n| \leq 0.15$. Pelo exercício anterior, esse valor pode ser determinado por

$$\frac{1}{2^n} \leq 0.15 \Leftrightarrow n \geq -\frac{\ln 0.15}{\ln 2} = 2.74.$$

Logo, $n = 3$, isto é, temos que efectuar 3 iterações. Partindo do intervalo inicial $(-1, 0)$ temos $x_1 = 0.5$. Como $f(x_1) = -0.16065$ vem que

$$x^* \in [-1, -0.5].$$

Prosseguindo o processo obtemos $x_2 = -0.75$ e como $f(-0.75) = 2.7776$ vem que

$$x^* \in [-0.75, -0.5].$$

Concluimos então que $x^* \approx x_3 = -0.6256$ é uma aproximação cujo erro não excede a tolerância dada.

2.5.2 Método de Newton

O método de Newton, que iremos estudar nesta secção, é um dos métodos mais conhecidos e usados na determinação de aproximações numéricas de raízes de equações não lineares. Para o definir, iremos começar por efectuar uma abordagem analítica fazendo depois a sua interpretação geométrica.

Seja $f \in C^2([a, b])$, com $[a, b] \subset \mathbb{R}$, e $x^* \in [a, b]$ a única raiz de $f(x) = 0$ nesse intervalo. Pela fórmula de Taylor temos que, se $x_0 \in [a, b]$,

$$f(x^*) = f(x_0) + f'(x_0)(x^* - x_0) + \frac{f''(\xi)}{2}(x^* - x_0)^2, \quad \xi \in I\{x^*, x_0\}.$$

Como $f(x^*) = 0$ e supondo $f'(x^*) \neq 0$ para todo o $x \in [a, b]$, vem que

$$x^* = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} - \frac{f''(\xi)}{2f'(x_0)}(x^* - x_0)^2, \quad \xi \in I\{x^*, x_0\}. \quad (2.5)$$

Seja $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$. Procedendo de forma análoga, poderemos definir um método iterativo dado pela fórmula de recorrência

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (2.6)$$

que pretendemos que seja convergente para x^* . Este processo iterativo é designado por método de Newton ou método de Newton-Raphson ou ainda método da tangente. Esta última designação resulta da interpretação geométrica do processo iterativo.

Interpretação geométrica: Consideremos a recta tangente à curva $y = f(x)$ no ponto de abcissa x_k . Essa recta é dada por

$$y = f(x_k) + \frac{1}{f'(x_k)}(x - x_k).$$

O ponto de intersecção da recta tangente com o eixo das abcissas é dado por

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

Temos assim que a iteração x_{k+1} dada pelo método de Newton é a abcissa do ponto de intersecção da recta tangente à curva $y = f(x)$ no ponto $(x_k, f(x_k))$ com a recta $y = 0$.

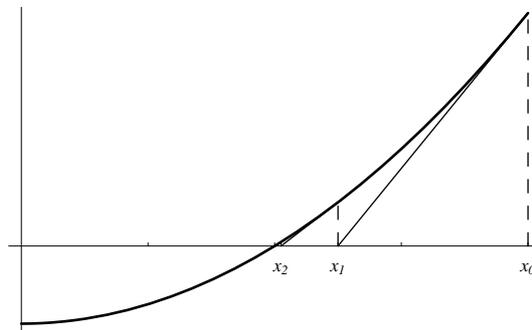


Figura 2.3: Método de Newton.

Vamos agora estabelecer quais as condições que deverão ser impostas para que a sucessão de aproximações geradas pelo método de Newton convirja para a raiz x^* de $f(x) = 0$.

Teorema 2.17 *Se*

1. $f \in C^2([a, b])$,
2. $f(a)f(b) < 0$,
3. $f'(x) \neq 0, x \in [a, b]$,
4. $f''(x) \leq 0$ ou $f''(x) \geq 0, x \in [a, b]$,

então a sucessão $\{x_k\}, k = 0, 1, \dots$, gerada pelo método (2.6), com $x_0 \in [a, b]$ tal que

5. $f(x_0)f''(x_0) > 0$,

converge para a única raiz x^* de $f(x) = 0$ em $[a, b]$.

Demonstração: Vamos supor, sem perda de generalidade, que: $f(a) < 0$, f' é positiva em $[a, b]$ e que f'' é não negativa no mesmo intervalo. Supondo verificadas as hipóteses do teorema, consideremos $x_0 = b$. Provemos que a sucessão $\{x_k\}$ gerada pelo método (2.6) tem as seguintes propriedades.

- A sucessão é não crescente e limitada.

Com efeito, vamos provar (por indução) que $x_{k+1} \in [x^*, x_k]$, para todo o $k \in \mathbb{N}_0$. Por (2.5) tem-se que,

$$x^* - x_1 = -\frac{f''(\xi)}{2f'(b)}(x^* - b)^2 \leq 0, \quad \xi \in I\{x^*, b\},$$

isto é, $x^* \leq x_1$. Por outro lado, por (2.6), com $k = 0$, tem-se que $x_1 < b$.

Suponhamos agora que $x_k \in [x^*, x_{k-1}] \subseteq [x^*, b]$. Temos então que, de modo análogo ao efectuado em (2.5),

$$x^* - \left(x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}\right) = -\frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)}(x^* - x_k)^2, \quad \xi_k \in I\{x^*, x_k\}, \quad (2.7)$$

ou seja

$$x^* - x_{k+1} = -\frac{f''(\xi_k)}{2f'(x_k)}(x^* - x_k)^2 \leq 0.$$

Isto implica que $x^* \leq x_{k+1}$. Por outro lado, por (2.6) e atendendo às hipóteses do teorema, temos que $x_{k+1} - x_k \leq 0$. Provámos então o pretendido.

- A sucessão converge para x^* .

A convergência da sucessão decorre do facto de ela ser não crescente e limitada. Seja $\alpha = \lim_{k \rightarrow +\infty} x_k$. Vamos provar que $\alpha = x^*$. Tomando limites em (2.6) e tendo em conta o facto de $f \in C^2([a, b])$, temos que

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

o que implica $f(\alpha) = 0$. Uma vez que x^* é a única raiz de f em $[a, b]$ temos que

$$\alpha = \lim_{k \rightarrow +\infty} x_k = x^*.$$

Está assim demonstrado o teorema. \square

O teorema seguinte estabelece igualmente uma condição necessária para a convergência do método de Newton. A diferença em relação ao anterior reside apenas na quinta condição: enquanto que o teorema anterior nos dá um critério para a escolha da aproximação inicial, o seguinte dá-nos uma condição que garante a convergência do método para qualquer aproximação inicial escolhida no intervalo $[a, b]$.

Teorema 2.18 *Se*

1. $f \in C^2([a, b])$,
2. $f(a)f(b) < 0$,
3. $f'(x) \neq 0, \quad x \in [a, b]$,
4. $f''(x) \leq 0$ ou $f''(x) \geq 0$,
5. $\left|\frac{f(a)}{f'(a)}\right| \leq b - a$ e $\left|\frac{f(b)}{f'(b)}\right| \leq b - a$,

então, qualquer que seja $x_0 \in [a, b]$, a sucessão $\{x_k\}$ gerada pelo método (2.6) converge para a única raiz x^* de $f(x) = 0$ em $[a, b]$.

Demonstração: As hipóteses 1, 2 e 3 garantem a existência e unicidade de raiz em $[a, b]$. Provemos que se $x_0 = a$ ou $x_0 = b$ então $x_1 \in (a, b)$. Com efeito, sendo $x_0 = a$ tem-se $x_1 = a - f(a)/f'(a)$ e da hipótese 5 vem que $-(b-a) < f(a)/f'(a) < b-a$, donde $x_1 < b$. Por outro lado, pelas hipóteses 2 e 3 temos que $f(a)$ tem sinal contrário a $f'(a)$ e como tal $f(a)/f'(a) < 0$. Assim $x_1 - a < 0$ e logo $a < x_1$. De modo idêntico se provaria que se $x_0 = b$ então $x_1 \in (a, b)$.

Suponhamos que $f(a) < 0$. Pela hipótese 4, para $x \in [a, b]$, $f''(x) \leq 0$ ou $f''(x) \geq 0$. Consideremos $f''(x) \leq 0$. Então, de (2.5),

$$x^* - x_1 = -\frac{f''(\xi)}{2f'(a)}(x^* - x_0)^2 \geq 0, \quad \xi \in (a, x^*),$$

e, como tal, $x_1 \in (a, x^*)$. Prova-se também que, nas mesmas condições, $x_2 \in (x_1, x^*)$ e, sucessivamente, $x_{k+1} \in (x_k, x^*)$, $k = 0, 1, \dots$

Provamos assim que a sucessão $\{x_k\}$ converge monotonamente para x^* .

Os restantes casos podem ser considerados de forma análoga. \square

O algoritmo para o método de Newton pode ser dado como se segue.

Algoritmo 2.2 Método de Newton

Ler x_0 ;

$k := 0$;

Repetir

$$d := \frac{f(x_k)}{f'(x_k)};$$

$$x_{k+1} := x_k - d;$$

$$k := k + 1$$

até que $|d| \leq \varepsilon_1$ ou $k = kmax$;

Escrever $x^* \approx x_k$.

Exercício 2.5.4 Melhore o algoritmo anterior.

Este método possui vantagens e desvantagens em relação ao método da bissecção. As grandes desvantagens do método de Newton residem no facto deste poder divergir (caso a aproximação inicial escolhida não seja *suficientemente próxima* da raiz) e de haver necessidade de calcular a derivada da função (mais esforço computacional). Por outro lado o método de Newton converge muito rapidamente o que faz com que seja um dos métodos mais eficazes para a aproximação de raízes de equações não lineares.

Não é difícil provar a convergência é quadrática do método de Newton. De facto, por (2.7),

$$x^* - x_{k+1} = -\frac{f''(\xi)}{2f'(x_k)}(x^* - x_k)^2, \quad \xi \in I\{x^*, x_k\}.$$

Tomando módulos obtemos

$$|e_{k+1}| \leq M|e_k|^2,$$

com

$$M = \frac{1}{2} \frac{\max_{x \in [a,b]} |f''(x)|}{\min_{x \in [a,b]} |f'(x)|}. \quad (2.8)$$

Assim, supondo verificadas as hipóteses do Teorema 2.17, concluímos que o método de Newton tem ordem de convergência $p = 2$.

Exercício 2.5.5 Mostre que, se $\{x_k\}$ for a sucessão gerada pelo método de Newton (2.6) então

$$|x^* - x_{k+1}| \leq M|x_{k+1} - x_k|^2,$$

com M dado por (2.8).

Outra vantagem do método de Newton em relação ao método da bissecção tem a ver com o facto do método de Newton se poder generalizar muito facilmente (como veremos) para sistemas de equações não lineares. Além disso, este método também se pode aplicar ao cálculo numérico de raízes complexas.

Exercício 2.5.6 Localize graficamente as raízes de $f(x) = 0$, onde

$$f(x) = x^2 - 1 - \ln(x + 1),$$

e aproxime a maior delas usando o método de Newton duas vezes.

Resolução: Como $f(x) = 0 \Leftrightarrow x^2 - 1 = \ln(x + 1)$, traçando o gráfico de $y = x^2 - 1$ e de $y = \ln(x + 1)$ (figura 4) verificamos que $f(x) = 0$ possui duas raízes reais: $x_1^* \in (-1, 0)$ e $x_2^* \in (1, 2)$.

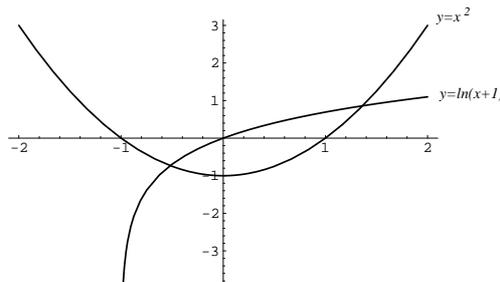


Figura 2.4: Localização gráfica.

Façamos a confirmação analítica apenas para x_2^* . Assim:

1. $f \in C((1, 2))$;
2. $f(1) = -\ln 2 < 0$ e $f(2) = 3 - \ln 3 = 1.901388 > 0$;
3. $f'(x) = 2x - (x - 1)^{-1} > 0$, para $x \in (1, 2)$.

Logo a raiz x_2^* de $f(x) = 0$ existe e é única no intervalo $[1, 2]$.

Para aplicarmos o método de Newton temos que primeiro provar a sua convergência. Como $f(x) = x^2 - 1 - \ln(x + 1)$, $f'(x) = 2x - (x - 1)^{-1}$ e $f''(x) = 2 + (x - 1)^{-2}$ temos que $f \in C^2([1, 2])$. Por outro lado, como $f''(x) \geq 0$, para todo o $x \in [1, 2]$, o Teorema 2.17 garante que o método de Newton aplicado à equação dada gera uma sucessão de valores convergentes para x_2^* desde que x_0 seja escolhido por forma a que $f(x_0)f''(x_0) > 0$, isto é, por forma a que

$$f(x_0) > 0.$$

Seja então $x_0 = 2$. Assim

$$x_1 = 2 - \frac{f(2)}{f'(2)} = 1.48144;$$

$$x_2 = 1.48144 - \frac{f(1.48144)}{f'(1.48144)} = 1.369785.$$

Uma estimativa para o erro pode ser dada por

$$|x_2 - x_1| = 0.1116554.$$

Método da secante. A desvantagem que o método de Newton apresenta ao calcular a derivada de uma função pode ser contornada pelo método da secante. Este método consiste em substituir em (2.6) $f'(x_k)$ por $(f(x_k) - f(x_{k-1})) / (x_k - x_{k-1})$. Obtemos assim a fórmula de recorrência

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f(x_k) - f(x_{k-1})}(x_k - x_{k-1}), \quad k = 0, 1, \dots$$

Em termos geométricos este método resulta do método de Newton pela substituição da recta tangente à curva $y = f(x)$ em $(x_k, f(x_k))$ pela secante que passa pelos pontos $(x_k, f(x_k))$ e $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$. Essa recta é dada pela expressão

$$y = f(x_k) + \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}(x - x_k).$$

Considerando $y = 0$ temos que o valor de x obtido é igual ao valor de x_{k+1} obtido pelo método da secante.³ Para que a sucessão gerada pelo método da secante convirja para a única raiz de $f(x) = 0$ em $[a, b]$ prova-se que é suficiente que se verifiquem as hipóteses do Teorema 2.18. Prova-se ainda que a ordem de convergência do método da secante é

$$p = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} \approx 1.618.$$

Por este facto a convergência deste método diz-se superlinear.

Exercício 2.5.7 Construa o algoritmo para o método da secante.

Exercício 2.5.8 Repita o exercício 2.5.6 para o método da secante.

³Note-se que o método da secante necessita não de uma mas de duas aproximações iniciais x_{-1} e x_0 , muitas vezes tomadas como sendo os extremos do intervalo que contém a raiz.

2.5.3 Método do ponto fixo

O método do ponto fixo não é propriamente um método mas sim uma classe de métodos (o método de Newton, por exemplo, pertence à classe de métodos do ponto fixo). Este método tem grande importância na resolução de todo o tipo de equações, incluindo as equações diferenciais e integrais. Neste momento vamos apenas considerar o problema da determinação das raízes de uma equação não linear $f(x) = 0$.

O método do ponto fixo consiste em converter o problema de determinar os zeros de uma função no problema (equivalente) de calcular os pontos fixos de uma outra função.

Definição 2.19 *Seja f uma função definida num intervalo $[a, b] \in \mathbb{R}$. Dizemos que $x^* \in [a, b]$ é um ponto fixo de f se $x^* = f(x^*)$.*

Assim, o problema de determinar os valores de x para os quais $f(x) = 0$ (zeros de f) é transformado no problema equivalente de determinar os valores de x para os quais $g(x) = x$ (pontos fixos de g). Consideremos o seguinte exemplo.

Exemplo 2.20 A excentricidade da órbita de Vénus é dada por $e = 0.07$. Suponhamos que pretendemos resolver a equação de Kepler

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow x - 0.007 \sin x - z = 0,$$

quando $z = 0.7$. Como o termo $0.007 \sin x$ é muito menor que 0.7 temos que uma aproximação para a raiz da solução pode ser dada por $x \approx 0.7$. Substituindo este valor em $0.007 \sin x$ obtemos $\approx 0.007 \sin 0.7 \approx 0.004510$. Introduzindo este valor na equação de Kepler temos uma nova aproximação para a sua raiz dada por $x \approx 0.7 + 0.004510 = 0.704510$. Este processo poderia continuar dando assim origem a um processo iterativo da forma $x_{k+1} = 0.007 \sin x_k - 0.7$, $k = 0, 1, \dots$, e $x_0 = 0.7$.

Depois de transformarmos o problema na forma da determinação dos pontos fixos de uma função g , as sucessivas aproximações são calculadas, a partir de uma aproximação inicial x_0 dada, pela fórmula

$$x_{k+1} = g(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.9)$$

A função g é chamada função de iteração do método. Notemos que, no caso do método de Newton, a função de iteração é dada por

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

No exemplo anterior escolhemos para função de iteração $g(x) = 0.7 + 0.007 \sin x$.

A questão que se coloca é a seguinte: dada uma equação $f(x) = 0$ com raiz $x^* \in [a, b]$, como escolher uma função de iteração g por forma a que as sucessivas aproximações dadas por (2.9) convirjam para x^* ? Antes de mais notemos que, supondo que g é contínua e que $x_k \rightarrow x^*$, se verifica

$$x^* = \lim x_{k+1} = \lim g(x_k) = g(\lim x_k) = g(x^*).$$

Assim, uma condição necessária para que o processo iterativo (2.9) convirja para zero x^* de f é que x^* seja um ponto fixo de g .

Exemplo 2.21 Notemos que a equação de Kepler dada no exemplo anterior se pode escrever na forma

$$x = g(x) = \arcsin \frac{x - 0.7}{0.007}.$$

Neste caso, para a aproximação inicial $x_0 = 0.7$ temos que $x_1 = 0$ e $x_2 = \arcsin(-100)$ que é um valor que nem sequer está definido.

Como poderemos decidir qual a melhor escolha para a função de iteração? Em geral, interessa que $g(x)$ varie pouco com x . O caso ideal seria ter g constante; nesse caso, para x_0 arbitrário, teríamos $x_1 = x^*$. Para responder a esta questão, consideremos o seguinte teorema.

Teorema 2.22 (Ponto Fixo) *Se*

1. *g é uma função contínua em $[a, b]$ e*

2. *$g(x) \in [a, b]$ para todo o $x \in [a, b]$,*

então g tem um ponto fixo em $[a, b]$. Se, além disso,

3. *$|g'(x)| \leq K < 1$, para todo o $x \in [a, b]$,*

então o ponto fixo é único e a sucessão gerada por (2.9) converge para esse ponto, qualquer que seja a aproximação inicial $x_0 \in [a, b]$.

Demonstração: Vamos mostrar sucessivamente a existência de ponto fixo, a unicidade e, finalmente, a convergência do método.

- Existência.

Se $g(a) = a$ ou $g(b) = b$ temos que g tem (obviamente) um ponto fixo. Caso contrário, e atendendo à hipótese 2 do teorema, temos que $g(a) > a$ e $g(b) < b$. Consideremos a função auxiliar $h(x) = g(x) - x$ definida em $[a, b]$. Como h é contínua e $h(a)h(b) < 0$ concluímos que existe um ponto $\xi \in [a, b]$ tal que $h(\xi) = 0$, ou seja, tal que $g(\xi) = \xi$.

- Unicidade

Suponhamos que ξ_1 e ξ_2 são dois pontos fixos de g . Então

$$|\xi_1 - \xi_2| = |g(\xi_1) - g(\xi_2)| = |g'(\eta)||\xi_1 - \xi_2| \leq K|\xi_1 - \xi_2|,$$

onde η pertence ao intervalo definido por ξ_1 e ξ_2 . Assim sendo $(1 - K)|\xi_1 - \xi_2| \leq 0$ o que implica $\xi_1 = \xi_2$, uma vez que $0 \leq K < 1$.

- Convergência

Considerando $x_0 \in [a, b]$ temos que

$$|x_{k+1} - x^*| = |g(x_k) - g(x^*)| = |g'(\eta_k)||x_k - x^*| \leq K|x_k - x^*|,$$

onde η pertence ao intervalo definido por x_k e x^* . Assim sendo

$$|x_{k+1} - x^*| \leq K^{k+1}|x_0 - x^*|. \quad (2.10)$$

Tomando limites e atendendo a que $K < 1$ temos que

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} x_{k+1} = x^*,$$

o que prova o pretendido. \square

Exemplo 2.23 Resolvamos mais uma vez a equação de Kepler mas, desta vez, consideremos:

1. a excentricidade $e = 0.5$ e $z = 0.7$;
2. a excentricidade $e = 0.5$ e $z = 2$.

Vamos apenas efectuar os cálculos para o caso 2, isto é, vamos considerar apenas a equação $x - 0.5 \sin x - 2 = 0$. Para usar o método do ponto fixo consideremos a função de iteração

$$g(x) = 0.5 \sin x + 2, \quad x \in [2, 3].$$

Vejam os se, para esta função e para este intervalo, se verificam as condições de convergência do método.

Como g é uma função contínua, vamos provar que $g(x) \in [2, 3]$, para todo o $x \in [2, 3]$, isto é, que o gráfico de g está totalmente contido no quadrado $[2, 3] \times [2, 3]$. Para isso temos que provar que $g(2), g(3) \in [2, 3]$ e que o valor g em todos os seus extremos locais também se encontra nesse intervalo. Ora, $g(2) = 2.4546$, $g(3) = 2.0706$ e a função g é monótona decrescente (pois $g'(x) = 0.5 \cos x$). Assim sendo, $g(x) \in [2, 3]$, para todo o x a variar nesse intervalo.

Para provar que o método converge basta apenas provar que o majorante do módulo de g' em $[2, 3]$ é inferior a um. Como se vê facilmente

$$|g'(x)| = |0.5 \cos x| \leq 0.5,$$

e, como tal, $K = 0.5$ e o método $x_{k+1} = 0.5 \sin x_k + 2$, $k = 0, 1, 2, \dots$, converge para a única raiz da equação em $[2, 3]$, qualquer que seja $x_0 \in [2, 3]$. A determinação das sucessivas iterações é feita de forma óbvia.

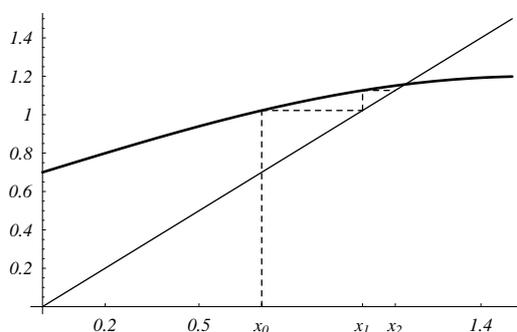


Figura 2.5: Caso 1: $g(x) = 0.5 \sin x + 0.7$ e $x_0 = 0.7$.

Observação 2.24 Nas Figuras 2.5 e 2.6 podemos visualizar o gráfico da função de iteração do método do ponto fixo considerado no exemplo anterior, para os casos 1 e 2, respectivamente, bem como o gráfico da bissetriz dos quadrantes ímpares. A abcissa da intersecção dos dois gráficos é o ponto fixo que pretendemos calcular. Como se pode ver, o método do ponto fixo pode ser descrito da seguinte forma (gráfica). A partir de x_0 , no eixo das abcissas, traçamos um segmento de recta vertical até intersectar o gráfico de g . A ordenada da intersecção é o ponto x_1 . A partir do ponto de intersecção traçamos um segmento de recta horizontal até encontrarmos a bissetriz $y = x$. A abcissa desse ponto final é x_1 . Para determinar as restantes iterações repete-se sucessivamente este processo: vertical até ao gráfico de g , horizontal até à bissetriz.

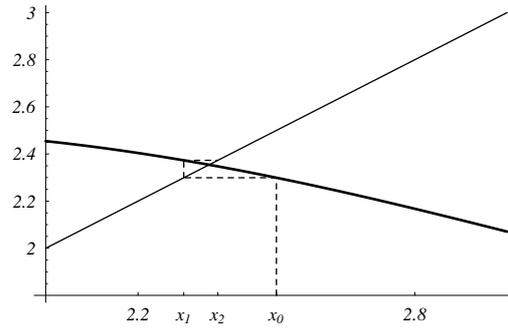


Figura 2.6: Caso 2: $g(x) = 0.5 \sin x + 2$ e $x_0 = 2.5$.

Regressemos, de novo, à questão de saber qual a melhor escolha para a função de iteração. O Teorema do Ponto Fixo permite-nos afirmar que se uma função de iteração não verificar as hipóteses do teorema, essa função não deve ser considerada. Pode, no entanto, dar-se o caso de possuímos duas funções de iteração que verifiquem, ambas, as hipóteses do teorema. Neste caso, por qual optar? Notemos que, por (2.10), se considerarmos duas funções de iteração g_1 e g_2 tais que

$$|g_1'(x)| \leq |g_2'(x)| < 1, \quad x \in [a, b],$$

podemos concluir que a sucessão definida pelo método $x_{k+1} = g_1(x_k)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, converge mais rapidamente que a sucessão definida por $x_{k+1} = g_2(x_k)$, $k = 0, 1, 2, \dots$, pois para o primeiro método temos $|e_{k+1}| \leq M_1|e_k|$ e para o segundo $|e_{k+1}| \leq M_2|e_k|$, com $M_1 \leq M_2$. Assim sendo, a escolha deveria recair sobre a função g_1 .

Observação 2.25 *Notemos que, no caso geral, o método do ponto fixo tem uma convergência linear. Além disso, essa convergência é local, uma vez que ela só acontece quando o x_0 está suficientemente próximo do ponto fixo.*

Consideremos agora os seguintes corolários do Teorema do Ponto Fixo.

Corolário 2.26 *Nas hipóteses do teorema anterior tem-se que*

$$|e_k| \leq K^k \max\{x_0 - a, b - x_0\}.$$

Demonstração: Resulta imediatamente de (2.10). \square

Corolário 2.27 *Nas hipóteses do teorema anterior tem-se que*

$$|e_k| \leq \frac{K^k}{1 - K} |x_1 - x_0|.$$

Demonstração: Por um processo análogo ao efectuado na demonstração do Teorema do Ponto Fixo temos que

$$|x_{k+1} - x_k| \leq K^k |x_1 - x_0|.$$

Consideremos $l > k$ e $|x_l - x_k|$. Assim

$$|x_l - x_k| \leq \sum_{j=k}^{l-1} |x_{j+1} - x_j| \leq |x_1 - x_0| \sum_{j=k}^l K^j.$$

Logo

$$\sum_{j=k}^l K^j \leq K^k \sum_{j=0}^{\infty} K^j = \frac{K^k}{1-K}.$$

Concluimos então que

$$|x_l - x_k| \leq \frac{K^k}{1-K} |x_1 - x_0|.$$

Tomando limites quando $l \rightarrow +\infty$ temos

$$|x^* - x_k| \leq \frac{K^k}{1-K} |x_1 - x_0|,$$

o que prova o pretendido. \square

Como vimos, o método do ponto fixo tem convergência linear. No entanto, o método de Newton (caso particular do método do ponto fixo quando a função de iteração é dada por $g(x) = x - f(x)/f'(x)$) tem convergência quadrática. O próximo teorema diz-me em que condições podemos garantir uma ordem de convergência dois no método do ponto fixo.

Teorema 2.28 *Suponhamos que, para além das hipóteses do Teorema do Ponto Fixo, se tem $g'(x^*) = 0$ (onde x^* é o único ponto fixo de g em $[a, b]$), e g'' limitada em $[a, b]$. Então o método do ponto fixo (2.9) converge para x^* de forma quadrática, qualquer que seja $x_0 \in [a, b]$.*

Demonstração: Pelo Teorema do Ponto Fixo temos que o método (2.9) converge para x^* . Falta apenas provar que a convergência é quadrática.

Pela fórmula de Taylor temos que

$$x_{k+1} - x^* = g(x_k) - g(x^*) = g'(x^*)(x_k - x^*) + \frac{1}{2}g''(\xi_k)(x_k - x^*)^2, \quad \xi \in I\{x^*, x_k\}.$$

Como $g'(x^*) = 0$ concluimos facilmente que

$$|e_{k+1}| \leq M|e_k|^2,$$

onde

$$M = \frac{1}{2} \max_{x \in [a, b]} |g''(x)|.$$

Está assim demonstrado o pretendido. \square

Exercício 2.5.9 Mostre que se no ponto fixo x^* de g se tem $g'(x^*) = g''(x^*) = 0$ podemos concluir (mediante certas condições) que o método (2.9) tem convergência cúbica. Diga quais são essas condições de convergência.

2.6 Zeros de polinómios

Suponhamos agora que pretendemos resolver a equação algébrica $p(x) = 0$ onde

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0, \quad a_n \neq 0, \quad (2.11)$$

é um polinómio de coeficientes reais. Este problema aparece com muita frequência e existem para ele muitos resultados específicos. Nesta secção faremos apenas uma breve referência a alguns desses resultados.

2.6.1 Resultados básicos

Um resultado básico sobre polinómios é dado no Teorema Fundamental da Álgebra, devido a Gauss e a Euler e que apresentamos sem demonstração.

Teorema 2.29 (Teorema Fundamental da Álgebra) *Seja p um polinómio de grau $n \geq 1$ de coeficientes reais. Então existe $x^* \in \mathbb{C}$ tal que $p(x^*) = 0$.*

Temos também que, no caso particular dos polinómios, se x^* é um zero real de p então

$$p(x) = (x - x^*)q(x),$$

onde q é um polinómio de grau $n - 1$ de coeficientes reais. Se x^* é um zero complexo de p o seu conjugado $\overline{x^*}$ também o é e, como tal,

$$p(x) = (x - x^*)(x - \overline{x^*})q(x),$$

sendo q um polinómio de grau $n - 2$ de coeficientes reais. Atendendo a estes resultados podemos escrever.

Corolário 2.30 *Se p for um polinómio de grau n de coeficientes reais, admite n zeros, reais ou complexos, iguais ou distintos.*

Corolário 2.31 *Se p for um polinómio de grau ímpar admite, pelo menos, uma raiz real.*

A localização das raízes reais de uma equação algébrica pode ser feita por variadíssimos processos. De entre os processos mais populares destaca-se o método de Rolle (já referido neste curso). Outro resultado muito útil para determinar o número de zeros reais positivos de um polinómio foi enunciado por Descartes em 1637: 'O número de zeros reais positivos de um polinómio é limitado pelo número de variações de sinal da sucessão dos seus coeficientes'. Mais tarde Gauss demonstrou que 'o número de zeros reais positivos de um polinómio (contando com a multiplicidade) tem a mesma paridade do número de variações de sinal da sucessão dos seus coeficientes'. Temos então o seguinte teorema.

Teorema 2.32 (Regra de Sinal de Descartes) *O número de raízes reais positivas da equação $p(x) = 0$, sendo p dado por (2.11), é igual ao número de variações de sinal da sucessão $\{a_n, a_{n-1}, \dots, a_0\}$ ou um número inferior mas da mesma paridade.*

Demonstração: Vamos efectuar a demonstração por indução.

Comecemos por considerar p um polinómio de grau um. Neste caso o resultado é óbvio pois a raiz de $p(x) = 0$, com $p(x) = a_1x + a_0$, só é positiva quando e só quando $a_1a_0 > 0$.

Suponhamos agora que o resultado é válido para todos os polinómios de grau $n - 1$ e consideremos p um polinómio de grau n dado por (2.11), com $a_n > 0$ (sem perda de generalidade).

Se $a_0 = p(0) > 0$, o número de variações de sinal da sucessão dos coeficientes de p tem que ser par pois o primeiro e o último termo da sucessão são positivos. Por outro lado, o número de raízes positivas de $p(x) = 0$ também é par pois $\lim_{x \rightarrow +\infty} p(x) = +\infty$.

A mesma argumentação poderia ser usada no caso de $a_0 = p(0) < 0$; neste caso, tanto o número de variações de sinal da sucessão dos coeficientes de p como o número de zeros positivos de p são ímpares. Concluimos então que o número de raízes positivas de $p(x) = 0$ tem a mesma paridade do número de variações de sinal.

Falta apenas provar que o número de variações de sinal limita o número de raízes positivas. Suponhamos que $p(x) = 0$ tem m raízes reais positivas e que o número de variações de sinal da sucessão dos seus coeficientes é $V < m$. Assim sendo, temos que ter $m \geq V + 2$ (para manter a paridade). Mas, pelo Teorema de Rolle, p' tem que ter pelo menos $V + 1$ raízes reais positivas, o que contraria a hipótese de indução uma vez que o número de variações de sinal dos coeficientes de p' (polinómio de grau $\leq n - 1$) é inferior a V . Logo $m \leq V$. \square

Observação 2.33 *Notemos que a regra de sinal de Descartes não tem em conta a multiplicidade das raízes. No entanto, podemos afirmar o resultado demonstrado por Gauss, isto é que o número de raízes reais positivas de $p(x) = 0$ (contando com a multiplicidade) tem a mesma paridade do número de variações de sinal da sucessão dos seus coeficientes.*

Exercício 2.6.1 Usando a regra de sinal de Descartes, determine o número de raízes reais de $p(x) = 0$, onde $p(x) = x^3 - 2x - 5$.

Resolução: Comecemos pelas raízes positivas. Como a sucessão de sinais dada pelos coeficientes no polinómio é $\{+, -, -\}$ temos que o número de variações de sinal é 1 e como tal existe uma raiz positiva de $p(x) = 0$.

Para as raízes negativas consideremos o polinómio auxiliar $q(x) := (-1)^3 p(-x) = x^3 - 2x + 5$. Como a sucessão de sinais dada pelos coeficientes do polinómio q é $\{+, -, +\}$ temos que o número de variações de sinal é 2 e como tal existem 2 ou 0 raízes negativas de $p(x) = 0$.

2.6.2 Cálculo de valores de um polinómio. Factorização

O cálculo dos zeros de um polinómio é feito, na maioria das vezes, recorrendo ao método de Newton. Quando se aplica este método há necessidade de calcular, em cada iteração, o valor do polinómio e da sua derivada num ponto. Esse cálculo deve ser efectuado de forma eficiente uma vez que grande parte do esforço computacional a ele se deve.

Suponhamos que se pretende calcular $p(\bar{x})$, com p um polinómio dado por (2.11). Se considerarmos o polinómio escrito na forma canónica (tal como em (2.11)) efectuamos n adições/subtracções e $2n - 1$ multiplicações/divisões. No entanto, se considerarmos

$$p(x) = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + \cdots + x(a_{n-1} + a_n x))),$$

designada por forma encaixada do polinómio, ao calcular $p(\bar{x})$ só efectuamos n adições/subtrações e n multiplicações/divisões. Esta forma é a base do chamado método de Horner.

O algoritmo seguinte permite calcular o valor $p(\bar{x})$.

Algoritmo 2.4 Método de Horner

Ler $a_i, i = 0, 1, \dots, n$;
 Ler \bar{x} ;
 $p := a_n$;
 Para i de $n - 1$ até 0 fazer
 $p := p\bar{x} + a_i$;
 Escrever p .

Se p for um polinómio dado por (2.11) e \bar{x} um número real temos que

$$p(x) = (x - \bar{x})q(x) + r, \quad (2.12)$$

onde q é um polinómio de grau $n - 1$, digamos

$$q(x) = b_{n-1}x^{n-1} + b_{n-2}x^{n-2} + \dots + b_1x + b_0, \quad (2.13)$$

e r uma constante. Note-se que o valor de $p(\bar{x}) = r$, ou seja, temos o seguinte resultado demonstrado por Paolo Ruffini (1765-1822).

Teorema 2.34 (Ruffini) *O valor numérico de $p(\bar{x})$ de um polinómio $p(x)$ em $x = \bar{x}$ é igual ao resto da divisão de $p(x)$ por $(x - \bar{x})$.*

A chamada regra de Ruffini, que consiste em substituir (2.11) e (2.13) em (2.12) e igualando os coeficientes de potências de x do mesmo grau, permite obter os valores $b_i, i = 0, 1, \dots, n - 1$, e o valor de r de acordo com o seguinte algoritmo.

Algoritmo 2.5 Regra de Ruffini

Ler $a_i, i = 0, 1, \dots, n$;
 Ler \bar{x} ;
 $b_{n-1} := a_n$;
 Para i de $n - 2$ até 0 fazer
 $b_i := b_{i+1}\bar{x} + a_{i+1}$;
 $r := b_0\bar{x} + a_0$;
 Escrever r e $b_i, i = 0, 1, \dots, n - 1$.

Estes dois algoritmos permitem obter facilmente os valores da derivada de p dado por (2.11) num dado ponto \bar{x} . Assim, uma vez que, por (2.12),

$$p'(x) = (x - \bar{x})q'(x) + q(x),$$

temos que $p'(\bar{x}) = q(\bar{x})$.

O algoritmo seguinte usa o método de Horner e a regra de Ruffini para calcular o valor de derivada de p em \bar{x} .

Algoritmo 2.6 Valores da derivada de um polinómio

Ler a_i , $i = 0, 1, \dots, n$;
 Ler, \bar{x} ;
 $b_{n-1} := a_n$;
 $q := b_{n-1}$;
 Para i de $n - 2$ até 0 fazer
 $b_i := b_{i+1}\bar{x} + a_{i+1}$;
 $q := q\bar{x} + b_i$;
 Escrever q .

2.6.3 Cálculo dos zeros

Vamos começar por considerar o caso em que p , dado por (2.11), tem apenas zeros reais simples. Neste caso, podemos aplicar qualquer um dos métodos iterativos estudados. No entanto, sugerimos o seguinte procedimento.

1. Determina-se a localização (mesmo que grosseira) dos zeros $x_n^* < x_{n-1}^* < \dots < x_2^* < x_1^*$.
2. Partindo de um valor $x_0 > x_1^*$, usando o método de Newton, calcula-se uma aproximação numérica para o maior zero x_1^* , com a precisão desejada (prove que o método converge).
3. Pelo algoritmo de Horner/Ruffini divide-se p por $x - x_1^*$ e regressa-se ao passo 2 para determinar x_2^* . Repetindo sucessivamente este processo, determinamos numericamente todos os zeros do polinómio.
4. Para refinar as aproximações obtidas, aplica-se o método de Newton a p sendo as aproximações iniciais os valores obtidos no passo 3.

Exercício 2.6.2 Construa o algoritmo implícito no procedimento descrito anteriormente.

No caso de alguma das raízes x^* ter multiplicidade $m > 1$ podemos escrever

$$p(x) = (x - x^*)^m q(x),$$

onde o polinómio q , de grau $n - m$, é tal que $q(x^*) \neq 0$. A aproximação desta raiz é feita com recurso ao método de Newton modificado

$$x_{k+1} = x_k - m \frac{p(x_k)}{p'(x_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

Exercício 2.6.3 Prove que se x^* for um zero de multiplicidade m de um polinómio p , o método de Newton modificado (2.14) converge localmente (quais as condições de convergência?) e de forma quadrática para x^* .

Para calcular as raízes complexas de uma equação algébrica o método da bissecção não pode ser usado. Quanto ao método de Newton (ou o da secante), ele só convergirá para uma raiz complexa se a aproximação inicial for um número complexo (e se forem satisfeitas as condições de convergência), sendo todo o processo realizado com aritmética complexa. Note-se que, após determinada uma raiz complexa, ficamos imediatamente a conhecer outra raiz (a sua conjugada).

2.7 Sistemas de equações não lineares (breve introdução)

2.7.1 Introdução

Nesta secção vamos descrever, de forma sucinta, a aplicação dos métodos do ponto fixo em geral, e do método de Newton em particular, à resolução numérica de sistemas de equações não lineares.

Consideremos o ponto $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ e a aplicação F , suficientemente regular, definida por

$$F : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R}^n \\ (x_1, \dots, x_n) & \longrightarrow & (f_1(x_1, \dots, x_n), \dots, f_n(x_1, \dots, x_n)) \end{array} .$$

É nosso objectivo determinar a solução $x^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)$ do sistema de n equações em n incógnitas

$$\begin{cases} f_1(x_1, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, \dots, x_n) = 0 \end{cases} ,$$

que, noutra notação, pode ser escrito na forma

$$F(x) = 0, \tag{2.15}$$

com

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix}, \quad 0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{2.16}$$

A resolução de sistemas de equações não lineares por processos analíticos pode ser bastante difícil ou mesmo impossível. Nesse caso temos necessidade de recorrer a métodos numéricos no sentido de obter uma solução aproximada. Iremos considerar métodos iterativos da forma

$$x^{(k+1)} = G(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots, \tag{2.17}$$

com

$$G(x) = \begin{bmatrix} g_1(x) \\ g_2(x) \\ \vdots \\ g_n(x) \end{bmatrix}, \tag{2.18}$$

que determinem uma sucessão de aproximações para uma raiz x^* da equação vectorial (2.15), a partir de uma dada aproximação inicial

$$x^{(0)} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}^{(0)}. \tag{2.19}$$

Uma questão essencial quando se lida com métodos iterativos tem a ver com a convergência do processo: dada uma sucessão de aproximações $\{x^{(k)}\}$ gerada pelo processo iterativo, como saber se ela é convergente para a solução x^* do sistema? Para definir convergência temos que introduzir, previamente, o conceito de norma vectorial.

Definição 2.35 Uma norma vectorial (real) é uma aplicação $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}_0^+$ que verifica

1. $\forall x \in \mathbb{R}^n, \quad \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0,$
2. $\forall x \in \mathbb{R}^n, \forall \lambda \in \mathbb{R}, \quad \|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|,$
3. $\forall x, y \in \mathbb{R}^n, \quad \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$

Poderíamos definir, de igual modo, normas vectoriais complexas. Deixa-se a construção dessa definição ao cuidado dos alunos.

Exercício 2.7.1 Prove que as seguintes funções são normas vectoriais:

1. Norma 1: $\forall x \in \mathbb{R}^n, \quad \|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|.$
2. Norma 2 ou norma euclideana: $\forall x \in \mathbb{R}^n, \quad \|x\|_2 = (\sum_{i=1}^n x_i^2)^{1/2}.$
3. Norma infinito ou norma de Chebyshev: $\forall x \in \mathbb{R}^n, \quad \|x\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|.$

Estamos agora em condições de introduzir o conceito de convergência de uma sucessão de vectores.

Definição 2.36 A sucessão de vectores $\{x^{(k)}\}$ diz-se convergente para $x^* \in \mathbb{R}^n$ se, para todo $\epsilon > 0$, existe uma ordem k_0 tal que, para todo $k > k_0$, se tem $\|x^{(k)} - x^*\| < \epsilon$. Nesse caso escreve-se

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} x^{(k)} = x^*.$$

Apresentemos de seguida o teorema que garante a convergência de um método iterativo da forma (2.17). Este teorema é uma generalização do Teorema do Ponto Fixo para sistemas de equações e a sua demonstração não irá ser considerada.

Teorema 2.37 Seja x^* uma solução de (2.15) e \mathcal{V}_{x^*} uma vizinhança desse ponto que não contém mais nenhuma raiz da equação vectorial (2.15). Se x^* for um ponto fixo de G , função dada por (2.17)-(2.18), e se

$$\|J_G(x)\| \leq K < 1, \quad \forall x \in \mathcal{V}_{x^*},$$

onde $J_G(x)$ é a matriz de Jacobi de G

$$J_G(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix},$$

então o método (2.17) converge para x^* , qualquer que seja $x^{(0)} \in \mathcal{V}_{x^*}$.

Observação 2.38 De notar que a definição e teorema anteriores dependem do conceito de norma. Uma vez que é possível considerar várias normas, uma questão legítima seria a de saber se é possível que uma sucessão de vectores convirja quando se considera uma determinada norma e divirja quando se considera outra. Para as normas mais usuais (dadas no Exercício 2.7.1) é possível demonstrar que se uma sucessão de vectores convergir segundo uma das normas ela também converge quando se considera outra qualquer. Por este facto diz-se que estamos em presença de normas equivalentes.

Consideremos agora o problema da definição de critérios de paragem para processos iterativos aplicados ao cálculo das raízes de sistemas de equações não lineares $F(x) = 0$.

Seja $\{x^{(k)}\}$ a sucessão de aproximações gerada pelo processo iterativo convergente para a solução x^* do sistema. Os critérios de paragem mais frequentes são:

1. Critério do erro absoluto: $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \varepsilon$;
2. Critério do erro relativo: $\|x^{(k)} - x^{(k-1)}\| \leq \varepsilon \|x^{(k)}\|$;
3. Critério do valor da função: $\|F(x^{(k)})\| \leq \varepsilon_1$, com $\varepsilon_1 \ll \varepsilon$;
4. Critério do número máximo de iterações: $k = kmax$.

Antes de passarmos à definição dos processos iterativos vamos considerar o problema da determinação da aproximação inicial que, para sistemas de equações, pode ser um problema de difícil resolução. Na prática existem processos que permitem, *a priori*, determinar boas estimativas iniciais para a solução pretendida. Esses processos dependem muito do problema em questão e como tal não são passíveis de um tratamento generalizado.

Existe, no entanto, uma forma de poder obter uma boa aproximação inicial quando os sistemas são de pequena dimensão. Essa forma é a localização gráfica. Este processo consiste na mera generalização do efectuado na secção anterior e, como tal, não iremos fazer a sua abordagem na forma geral mas sim recorrendo a um exemplo.

Exemplo 2.39 Considere-se o sistema de equações não lineares

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 1 \\ xy + x = 1 \end{cases} .$$

Traçando o gráfico de $f_1(x, y) = 0$ e $f_2(x, y) = 0$, com

$$\begin{cases} f_1(x, y) = x^2 + y^2 - 1 \\ f_2(x, y) = xy + x - 1 \end{cases} ,$$

verificamos que uma solução do sistema é $(x, y) = (1, 0)$ e que a outra está próxima de $(x, y)^{(0)} = (1, 1)$.

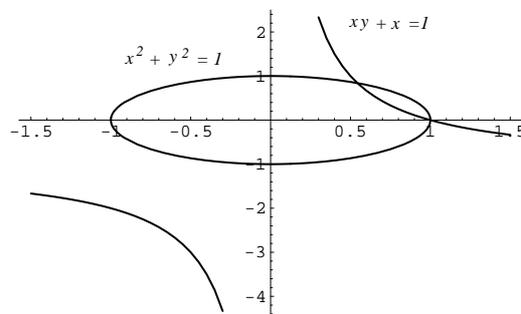


Figura 2.7: Localização gráfica.

2.7.2 Método iterativo de Newton

Seja dado o sistema de equações não lineares $F(x) = 0$ definido por (2.16). Pretendemos determinar uma aproximação para a raiz $x^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)$ do referido sistema sendo dada uma aproximação inicial (2.19). Suponhamos que $F \in C^2(\mathcal{V}_{x^*})$, com \mathcal{V}_{x^*} uma vizinhança de x^* . Pela fórmula de Taylor temos que, se $x^{(0)} \in \mathcal{V}_{x^*}$,

$$F(x^*) = F(x^{(0)}) + J_F(x^{(0)})(x^* - x^{(0)}) + \dots,$$

onde

$$J_F(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(x) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(x) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(x) \end{bmatrix}$$

é a matriz de Jacobi de F no ponto x . Como $F(x^*) = 0$ e supondo

$$\det(J_F(x)) \neq 0, \quad \forall x \in \mathcal{V}_{x^*},$$

podemos definir, de forma idêntica à secção anterior, o processo iterativo

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - J_F^{-1}(x^{(k)})F(x^{(k)}), \quad k = 0, 1, \dots,$$

que pretendemos que seja convergente para x^* . Este processo iterativo é designado por método de Newton ou método de Newton-Raphson.

Para provar a convergência deste processo iterativo, notemos que o método de Newton pode ser escrito na forma (2.17) sendo a função de iteração dada por

$$G(x) = x - J_F^{-1}(x)F(x). \tag{2.20}$$

Assim, a convergência do método resulta do Teorema 2.37 de acordo com o próximo exercício.

Exercício 2.7.2 Prove que o método de Newton converge de forma quadrática para a raiz x^* de $F(x) = 0$ se a aproximação inicial for escolhida suficientemente próxima dessa raiz.

Sugestão: Mostre que $J_G(x) = 0$, sendo G a função de iteração (2.20).

Notemos que o carácter local da convergência deste método nos obriga a ter o cuidado de escolher uma aproximação inicial que esteja *suficientemente próxima* da solução que pretendemos determinar.

Antes de apresentar o algoritmo que traduz o método de Newton, notemos que podemos evitar, em cada iteração, o cálculo da matriz inversa $J_F^{-1}(x^{(k)})$ se fizermos

$$\begin{cases} J_F(x^{(k)})\delta^{(k)} & = -F(x^{(k)}) \\ \delta^{(k)} & = x^{(k+1)} - x^{(k)} \end{cases}. \tag{2.21}$$

Algoritmo 2.7 Método de Newton

Ler $x^{(0)}$;
 $k := 0$;
 Repetir
 Se $\det(J_F(x^{(k)})) = 0$ então parar;
 Resolver $J_F(x^{(k)})\delta = -F(x^{(k)})$;
 $x^{(k+1)} := x^{(k)} + \delta$;
 $k := k + 1$
 até que $\|\delta\| \leq \varepsilon_1$ ou $k = kmax$;
 Escrever $x^* \approx x^{(k)}$.

Uma grande desvantagem do método de Newton consiste em determinar, em cada iteração, a solução de um sistema de equações lineares diferente. Na prática é usual considerar a mesma matriz de Jacobi em várias iterações ou mesmo durante todo o processo. Nesse caso, dizemos que estamos na presença do método de Newton modificado. Existem ainda outras modificações a este método (para evitar, por exemplo, o cálculo de n^2 derivadas) mas não as iremos considerar neste curso.

Algoritmo 2.8 Método de Newton modificado

Ler $x^{(0)}$;
 $J_F := J_F(x^{(0)})$;
 Se $\det(J_F) = 0$ então parar;
 $k := 0$;
 Repetir
 Resolver $J_F\delta = -F(x^{(k)})$;
 $x^{(k+1)} := x^{(k)} + \delta$;
 $k := k + 1$
 até que $\|\delta\| \leq \varepsilon_1$ ou $k = kmax$;
 Escrever $x^* \approx x^{(k)}$.

Exercício 2.7.3 Melhore os algoritmos anteriores.

Exercício 2.7.4 Determine uma aproximação para a solução de

$$F(x) = 0 \Leftrightarrow \begin{cases} x^2 + y^2 - 1 = 0 \\ xy + x - 1 = 0 \end{cases},$$

diferente de $(1, 0)$, efectuando duas iterações de método de Newton. Indique uma estimativa para o erro cometido.

Resolução: Seja $x^* = (x_1^*, x_2^*)$ a solução pretendida. Como vimos, a aproximação inicial pode ser dada por $(x, y)^{(0)} = (1, 1)$.

Para não sobrecarregar a notação consideremos $(x, y)^{(k)} = (x_k, y_k)$, $k = 0, 1, \dots$. Como

$$J_F(x_k, y_k) = \begin{bmatrix} 2x_k & 2y_k \\ y_k + 1 & x_k \end{bmatrix},$$

temos que

$$\det(J_F(x_k, y_k)) \neq 0 \Leftrightarrow x_k^2 - y_k^2 - y_k \neq 0.$$

Apliquemos o método de Newton na forma (2.21).

- Primeira Iteração

Como $x_0^2 - y_0^2 - y_0 = -1 \neq 0$ podemos efectuar a primeira iteração do método. Assim

$$\begin{bmatrix} 2x_0 & 2y_0 \\ y_0 + 1 & x_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x_0 \\ \delta y_0 \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} x_0^2 + y_0^2 - 1 \\ x_0 y_0 + x_0 - 1 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x_0 \\ \delta y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Daqui sai que

$$\begin{bmatrix} \delta x_0 \\ \delta y_0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0 \end{bmatrix}$$

e, como tal,

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

- Segunda Iteração

Como $x_1^2 - y_1^2 - y_1 = -1.75 \neq 0$ podemos efectuar a segunda iteração do método. Assim obtemos, de modo análogo,

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 0.5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.25 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Daqui sai que

$$\begin{bmatrix} \delta x_1 \\ \delta y_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/28 \\ -1/7 \end{bmatrix}$$

e, como tal,

$$\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15/28 \\ 6/7 \end{bmatrix}.$$

Temos assim que

$$x^* \approx \left(\frac{15}{28}, \frac{6}{7} \right) = (0.5357, 0.8571),$$

sendo uma estimativa para o erro cometido dada por

$$\|x^* - x^{(2)}\|_\infty \approx \|x^{(2)} - x^{(1)}\|_\infty = \max \left\{ \frac{1}{28}, \frac{1}{7} \right\} = \frac{1}{7} = 0.1429.$$

2.8 Exercícios de aplicação à engenharia

Exercício 2.8.1 De Santis (1976) deduziu uma relação para o factor de compressibilidade dos gases reais da forma

$$z = \frac{1 + y + y^2 - y^3}{(1 - y)^3},$$

onde $y = b/4\nu$, sendo b a correcção de van der Waals e ν o volume molar. Se $z = 0.892$ qual o valor de y ?

Exercício 2.8.2 Baseado no trabalho de Frank-Kamenetski (1955), as temperaturas no interior de um material com fontes de calor embebidas podem ser determinadas pela equação

$$e^{-0.5t} \cosh(e^{0.5t}) = \sqrt{0.5L_{er}}.$$

Dado $L_{er} = 0.088$, determine t .

Exercício 2.8.3 Um medicamento administrado a um doente produz uma concentração na corrente sanguínea dada por

$$c(t) = Ate^{-t/3} \text{ mg/ml}$$

t horas depois de injectadas A unidades. A concentração máxima de segurança é de 1 mg/ml .

1. Que quantidade deve ser injectada para que seja atingida a concentração máxima de segurança e em que altura ocorre esse máximo?
2. Uma concentração adicional do mesmo medicamento deve ser administrada no doente depois da concentração ter descido para 0.25 mg/ml . Determine quando é que a segunda injeção deve ser administrada (em minutos).
3. Assumindo que a concentração após injeções consecutivas é aditiva e que 0.75% da quantidade original injectada é administrada na segunda injeção, em que altura deve ser dada a terceira injeção?

Exercício 2.8.4 A concentração, C , de uma bactéria poluente num lago decresce de acordo com a expressão

$$C = 80e^{-2t} + 20e^{-0.1t},$$

onde t representa o tempo. Determine o tempo necessário para que a concentração de bactérias fique reduzida a 10.

Exercício 2.8.5 Em engenharia ambiental a equação que se segue pode ser usada para calcular o nível de oxigénio, c , existente num rio a jusante de um local de descarga de esgoto:

$$c = 10 - 15(e^{-0.1x} - e^{-0.5x}),$$

em que x representa a distância a partir do local de descarga. Usando um método à sua escolha, determine em que local (a partir da descarga) em que o nível de oxigénio atinge o valor 4.

Sugestão: Sabe-se que o referido local se encontra, no máximo, a 5 km a jusante do local de descarga.

Exercício 2.8.6 Em engenharia oceânica, a equação para a altura de uma determinada onda num cais é dada por

$$h = h_0 \left[\sin \left(\frac{2\pi x}{\lambda} \right) \cos \left(\frac{2\pi t v}{\lambda} \right) + e^{-x} \right].$$

Determine uma aproximação para o valor de x sabendo que $h = 0.5h_0$, $\lambda = 20$, $t = 10$ e $v = 50$.

Exercício 2.8.7 Muitos campos da engenharia requerem o conhecimento de estimativas precisas para o número de habitantes de uma determinada região. Assim, por exemplo, os engenheiros das áreas dos transportes consideram ser importante saber como varia o número de habitantes de uma cidade e dos seus subúrbios.

Suponhamos que a população de uma determinada zona urbana decresce ao longo do tempo de acordo com a equação

$$P_u(t) = P_{u,max} e^{-k_u t} + P_{u,min}$$

e que a população suburbana cresce ao longo do tempo de acordo com

$$P_s(t) = \frac{P_{s,max}}{1 + \left(\frac{P_{s,max}}{P_0} - 1 \right) e^{-k_s t}},$$

sendo as constantes $P_{u,max}$, k_u , $P_{u,min}$, $P_{s,max}$, P_0 e k_s parâmetros estimados empiricamente.

Determine o instante t (e os correspondentes valores de $P_u(t)$ e $P_s(t)$) em que as regiões urbanas e suburbanas têm o mesmo número de habitantes, usando, para tal, os seguintes valores: $P_{u,max} = 60000$, $k_u = 0.04$, $P_{u,min} = 120000$, $P_{s,max} = 300000$, $P_0 = 5000$ e $k_s = 0.06$.

Exercício 2.8.8 Para calcular a aspecto de uma calha de escoamento, por gravidade, com o objectivo de minimizar o tempo de descarga de um determinado produto granulado (Chiarella, Charlton, Roberts (1975)), é necessário resolver as seguintes equações não lineares pelo método de Newton

$$\begin{cases} f_n(\theta_1, \dots, \theta_N) \equiv \frac{\sin \theta_{n+1}}{v_{n+1}} (1 - \mu w_{n+1}) - \frac{\sin \theta_n}{v_n} (1 - \mu w_n) = 0, & n = 1, \dots, N-1 \\ f_N(\theta_1, \dots, \theta_N) \equiv \Delta y \sum_{j=1}^N \tan \theta_j - X = 0 \end{cases},$$

onde

$$(i) \quad v_n^2 = v_0^2 + 2gn\Delta y - 2\mu\Delta y \sum_{j=1}^n \frac{1}{\cos \theta_j}, \quad n = 1, \dots, N,$$

e

$$(ii) \quad w_n = -\Delta y v_n \sum_{j=1}^N \frac{1}{v_j^3 \cos \theta_j}, \quad n = 1, \dots, N.$$

A constante v_0 é a velocidade inicial do produto granulado, X a coordenada em x do extremo final da calha, μ a força de atrito, N o número de segmentos da calha e g a constante de gravidade. As variáveis θ_j são os ângulos que os respectivos segmentos da calha fazem com a vertical e v_j a velocidade das partículas no j -ésimo segmento da calha.

Resolva o sistema para $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_N)$ usando o método de Newton com $\mu = 0$, $X = 2$, $\Delta y = 0.2$, $N = 20$, $v_0 = 0$, e $g = 32$ pés/seg², onde os valores de v_n e w_n são dados por (i) e (ii). Aplique o método até que

$$\|\theta^{(k+1)} - \theta^{(k)}\| < 10^{-2} \text{rad.}$$

2.9 Referências bibliográficas

- K.E. Atkinson (1989), *An Introduction to Numerical Analysis*, 2th ed., John Wiley, New York.
- R.L. Burden e J.D. Faires (1988), *Numerical Analysis*, 4th ed., PWS-Kent, Boston.
- S.D. Conte e C. de Boor (1980), *Elementary Numerical Analysis*, 3th ed., McGraw-Hill, New York.
- H. Goldstine (1977), *A History of Numerical Analysis from 16th Through the 19th Century*, Springer-Verlag, New York.
- C. Houzel (1988), *Équations algébriques*, Mathématiques en Méditerranée, Édisud/Musées de Marseille, pp. 58-67.
- J.A. Ferreira e M.F. Patrício (1999), *Análise Numérica, Textos de Apoio*, DMUC, Coimbra.
- R. Kress (1998), *Numerical Analysis*, Springer-Verlag, New York.
- H. Pina (1995), *Métodos Numéricos*, McGraw-Hill, Alfragide.
- J.R. Rice (1983), *Numerical Methods, Software, and Analysis*, McGraw-Hill, Tokyo.
- M. Rosa (1992), *Tópicos de Análise Numérica, Textos de Apoio*, DMUC, Coimbra.
- J.M. Sanz-Serna (1998), *Diez Lecciones de Cálculo Numérico*, Universidad de Valladolid, Valladolid.
- J. Stoer e R. Bulirsch (1980), *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, Berlin.
- M.R. Valença (1988), *Métodos Numéricos*, INIC, Braga.