



UNIVERSIDADE DA BEIRA INTERIOR
Ciências

RESOLUÇÃO NUMÉRICA DE SISTEMAS DE EQUAÇÕES NÃO-LINEARES

Versão Final Após a Defesa

Paulo Bernardo Oliveira Gouveia

Dissertação
Inserida no Mestrado em
Matemática Para Professores
(2º ciclo de estudos)

Orientador: Prof. Doutor Rui Manuel Pires Almeida
Co-orientador: Prof. Doutor José Carlos Matos Duque

Covilhã, julho de 2018

Dedicatória

Dedico a minha filha Conceição Ciúmara A. Gouveia pelo tempo que ficamos distantes fisicamente um do outro.

Agradecimentos

Agradeço a Deus em primeiro lugar pelo dom da vida e por tudo que sou, agradeço os meus orientadores por serem eruditos, pela disponibilidade e dedicação aplicada na condução desta pesquisa, ao meu pai e a minha família, ao MSc. Infeliz Carvalho Coxe e finalmente o meu entranhável agradecimento aos meus amigos e colegas.

Resumo

Este trabalho foi realizado no âmbito da dissertação para o Mestrado de Matemática para Professores, tem como principal objetivo o estudo da resolução numérica de sistemas de equações não-lineares, que é um assunto de extrema importância com aplicações nas mais diversas áreas da Matemática Aplicada. Após a apresentação de uma resenha histórica deste assunto, são abordados os métodos iterativos do ponto fixo, Newton-Raphson e de Broyden. Para cada um dos métodos iterativos é apresentada a construção da fórmula iterativa, o respectivo algoritmo e a análise de convergência. Com o atual currículo do ensino secundário não é possível a abordagem dos métodos de Newton-Raphson e de Broyden por estes necessitarem do conhecimento de matrizes, contudo é possível o ensino do método do ponto fixo. Espera-se que este trabalho proporcione aos alunos e professores informação importante que contribua para o melhoramento do processo de ensino e aprendizagem no ensino secundário e que a implementação de métodos computacionais sirva para motivar os alunos.

Palavras-chave: Sistemas de equações não-lineares. Métodos do ponto fixo. Newton-Raphson. Broyden. Convergência.

Abstract

This work carried out in the framework of a dissertation for a Master's degree in Mathematics for teachers, has as its main objective the study of the numerical solution of non-linear systems of equations, a subject of the utmost importance having applications in diverse areas of Applied Mathematics. After providing an historical review on this topic, the iterative fixed point, Newton-Raphson and Broyden methods are discussed. For each method, the construction of the iterative formula, the respective algorithm and convergence analysis are contemplated. Although with the current secondary school syllabi, it is not possible to teach the Newton-Raphson and Broyden methods because these require a prior knowledge of matrices, it is however, possible to teach the fixed-point method. It is hoped that this work will provide students and teachers with useful information which will contribute to the improvement of the teaching and learning process on this topic and that the implementation of computational methods will help to motivate students.

Keywords: Systems of nonlinear equations. Fixed point method. Newton-Raphson. Broyden. Convergence.

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Revisão dos métodos numéricos para equações não-lineares	5
2.1	Método do Ponto Fixo	6
2.1.1	Algoritmo	7
2.2	Método de Newton-Raphson	7
2.2.1	Algoritmo	10
3	Considerações básicas sobre sistemas de equações lineares	13
3.1	Normas vetoriais e matriciais	13
3.2	Sistemas de equações lineares	14
3.3	Método de Gauss-Seidel	16
4	Sistemas de equações não-lineares	19
5	Método do ponto fixo	25
5.1	Fórmula iterativa	25
5.2	Convergência	26
5.3	Exemplo	28
6	Método de Newton-Raphson	33
6.1	Fórmula iterativa	33
6.2	Algoritmo	34
6.3	Erro e Convergência	36
6.4	Exemplo	38
7	Método de Broyden	43
7.1	Fórmula iterativa	43
7.2	Convergência	45
7.3	Algoritmo	45
7.4	Exemplo	46
7.5	Método de Broyden com a fórmula de Sherman-Morrison	50
7.6	Algoritmo	50
7.7	Exemplo	50
7.8	Considerações finais	55
8	Exemplo de Aplicação	57
8.1	Método do ponto fixo	57
8.2	Método de Newton	58
8.3	Método de Broyden/Sherman-Morrison	59
9	Conclusão	61
	Bibliografia	63

Lista de Figuras

2.1	Convergência do método do ponto fixo	7
2.2	Divergência do método do ponto fixo	7
2.3	Exemplo de um fluxograma do método do ponto fixo	8
2.4	Interpretação geométrica do Método de Newton-Raphson.	10
2.5	Exemplo de um fluxograma do método de Newton-Raphson	11
4.1	Reatores em séries	19
4.2	Representação gráfica do sistema não-linear	20
5.1	Exemplo de um fluxograma do método do ponto fixo em \mathbb{R}^n	29
5.2	Representação gráfica das iterações do método do ponto fixo	32
6.1	Exemplo de um fluxograma do método de Newton em \mathbb{R}^n	35
6.2	Representação gráfica das iterações do método de Newton	41
7.1	Exemplo de um fluxograma do método de Broyden	47
7.2	Exemplo de um fluxograma do método de Broyden/Sherman-Morrison em \mathbb{R}^n	51
7.3	Representação gráfica das iterações do método de Broyden/Sherman-Morrison	54

Lista de Tabelas

5.1	Resultados das iterações do método do ponto fixo	31
6.1	Resultado das iterações pelo método de Newton-Raphson	40
7.1	Resultado das iterações pelo método de Broyden	49
7.2	Resultado das iterações pelo método de quase-Newton Sherman-Morrison	53
8.1	Aplicação do método do ponto fixo	58
8.2	Aplicação do método de Newton	59
8.3	Aplicação do método de Broyden/Sherman-Morrison	60

Capítulo 1

Introdução

Esta pesquisa, enquadra-se no âmbito da obtenção do grau de Mestre em Matemática para Professores. O estudo do tema é de grande importância, visto que sistemas de equações não-lineares são problemas que podem surgir das mais diversas áreas da Matemática Aplicada. Sabendo que, na maior parte dos problemas matemáticos não é possível encontrar soluções por métodos diretos ou seja, soluções exatas, e quando isto acontece, opta-se pela resolução numérica, usando métodos iterativos, onde a solução é dada por estimativas. Desta feita, o principal objectivo deste trabalho é o estudo da resolução numérica de sistemas de equações não-lineares aplicando os métodos do ponto fixo, Newton-Raphson e de Broyden, bem como a sua possível implementação no Ensino Secundário.

O estudo das raízes de equações tem atraído ao longo do tempo a atenção de vários estudiosos. A primeira referência da qual se tem conhecimento sobre as equações, consta no papiro de Rhind, um dos documentos egípcios mais antigos que tratam de Matemática, escrito há mais ou menos 4000 anos. Como os egípcios não utilizavam a notação algébrica, os métodos de resolução de uma equação eram complexos e cansativos. Os gregos resolviam equações através de Geometria. Mas foram os árabes que, cultivando a Matemática dos gregos, promoveram um acentuado progresso na resolução de equações. Os árabes mantinham grande intercâmbio com os hindus e foram eles que difundiram pelo mundo a utilização do sistema decimal (Indo-árabe) e do zero (0) na escrita dos números. Mais tarde, surgiram os estudos de Alchwarismi ou Al Kworasmi, que é considerado o matemático árabe de maior expressão do século IX.

As equações ganharam mais notoriedade a partir do momento em que passaram a ser escritas com símbolos matemáticos e letras. O primeiro a fazer isso foi o francês François Viète (1540-1603), por esse motivo é chamado "pai da Álgebra".

Bhaskara, tornou-se conhecido pela resolução de uma equação algébrica do 2º grau. A fórmula para a equação do 3º grau foi descoberta pelos matemáticos italianos, Scipione del Ferro (1465-1515) e Niccolò Fontana (1499-1557), este último cognominado por Tartaglia, publicada pela primeira vez por Girolamo Cardano (1501-1576). Tais fórmulas, mas, para as equações do 4º grau são conhecidas como fórmulas de Cardano.

Jean Le Rond D'Alembert foi um filósofo, matemático e físico francês (1717-1783), que enunciou o teorema fundamental da álgebra em 1746, onde afirma: "Toda equação polinomial de grau n possui exatamente n raízes". O teorema foi demonstrado por Gauss em 1799, e incentivou a procura de fórmulas para a equação do 5º grau e de graus superiores. Contudo, só em 1824 é que o matemático norueguês Niels Henrik Abel (1802-1829) provou que equações de grau superior a 4 não podem ser resolvidas por formas coerentes, isto é, não são possíveis de serem resolvidas por radicais e combinações dos coeficientes. O que concluiu a pesquisa das fórmulas para equações de grau $n \geq 5$. Assim, para calcular as raízes de uma equação polinomial de grau igual ou superior a cinco temos que recorrer a métodos numéricos. A partir daí, até hoje, os métodos para o cálculo das raízes de um polinómio de grau $n \geq 5$ são voltados para os métodos iterativos. Tais métodos são também aplicáveis às equações transcendentais, aquelas que contém algumas funções que não são redutíveis a uma fracção entre polinómios, e cuja solução não pode ser expressa através de funções elementares.

O método do ponto fixo e o método de Newton, têm grande importância na resolução de todo o tipo de equações e sistemas de equações não lineares, incluindo as equações diferenciais e integrais. Fazem parte dos métodos numéricos que fazem uso de processos iterativos. Um processo iterativo consiste numa sequência de instruções que são executadas repetidamente, passo a passo. A execução de um ciclo recebe o nome de iteração. Cada iteração depende da anterior e aplicam-se determinados critérios a cada iteração que permitem verificar se foi atingido um resultado próximo o suficiente do resultado esperado. A ideia central dos métodos iterativos é começar com uma aproximação inicial para a solução (raiz) e a cada iteração ir obtendo melhores estimativas.

Newton descobriu um método para aproximar os valores das raízes reais de uma equação numérica, aplicável tanto para equações algébricas como para equações transcendentais. Historicamente, a origem do método de Newton é geométrica. Este método é, também, conhecido como método das tangentes. A variante desse método, que hoje se conhece por método de Newton, diz o seguinte: "Se $f(x) = 0$ tem apenas uma raiz no intervalo $[a, b]$ e se nem $f'(x)$ nem $f''(x)$ se anulam nesse intervalo, escolhido x_0 como aquele dos dois números a e b para o qual $f(x_0)$ e $f''(x_0)$ têm mesmo sinal, então,

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

está mais próximo da raiz que x_0 ".

No entanto, a versão de Raphson é mais simples do que a de Newton, e geralmente considerada superior. Por esta razão, é a versão de Raphson, em vez da de Newton, que pode ser encontrada em livros didáticos de hoje. Raphson propunha que começando com x_0 se construiu a sucessão,

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

Isaac Newton, foi um famoso astrónomo, físico e matemático inglês, um dos nomes mais importantes da história da ciência. As suas descobertas no campo da Astronomia, da Física, da Matemática e da Ótica foram verdadeiramente notáveis. Isaac Newton nasceu em Woolsthorpe-Inglaterra (1643-1727). Seu pai, também Isaac, morreu poucas semanas antes do nascimento do filho. Estudou no Trinity College de Cambridge, onde em 1665 obteve a sua graduação, o objectivo de Newton em Cambridge era uma licenciatura em advocacia. Newton estudou a filosofia de René Descartes, Gassendi, Hobbes, e, em particular, Boyle. A mecânica da Astronomia copernicana de Galileu Galilei atraiu-o e estudou também o sistema de Kepler. De acordo com de Moivre, o interesse de Newton pela Matemática começou no Outono de 1663, quando comprou um livro de Astronomia numa feira em Cambridge e percebeu que não podia compreender a Matemática nele contido. Tentando ler um livro de trigonometria, encontrou que lhe faltavam conhecimentos de geometria e assim decidiu-se a ler, Os Elementos de Euclides. Pouco tempo depois, o Trinity College fechou devido à peste negra que assolou a Inglaterra. Newton foi então para a sua terra natal onde passou pelo seu período mais produtivo em termos de descobertas: o teorema binominal, o cálculo, a lei da gravitação universal, a natureza das cores. Em 1667 regressa para o Trinity College de Cambridge, onde viria a tornar-se professor de Matemática em 1669. Em 1687 Newton escreveu uma das obras mais importantes da História da ciência. Trata-se do "Philosophiae naturalis principia mathematica" (Princípios matemáticos de filosofia natural), em três volumes. Esta obra contém a fundamentação da mecânica clássica, a famosa lei da gravitação universal, as três leis de Newton, entre outros. Durante a sua vida, Isaac Newton fez ainda parte do parlamento britânico, teve cargos na Casa da Moeda britânica e foi presidente da Royal Society. No campo da Matemática, Isaac Newton criou seu famoso Binômio de Newton (através das séries infinitas), muito usado na análise combinatória. Mas, sem dúvida, seu maior trabalho foi na criação do Cálculo Diferencial

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

e Integral. Já no campo que conhecemos hoje como Física, Isaac Newton ficou conhecido como o pai da Mecânica Clássica, devido às suas Leis que regem o movimento dos corpos.

Joseph Raphson foi um matemático inglês. Pouco se sabe sobre sua vida, nem mesmo os anos exatos de seu nascimento e morte, embora o historiador matemático Florian Cajori tenha estimado 1648-1715. Raphson frequentou o Jesus College da Universidade de Cambridge, obtendo a graduação com o título de Master of Arts em 1692. Foi nomeado Fellow da Royal Society em 30 de novembro de 1689, após propostas de adesão feitas por Edmund Halley. A obra de Raphson mais notável é a análise "Aequationum Universalis", que foi publicada em 1690, contém um método, agora conhecido como o Método de Newton-Raphson, para aproximar as raízes de uma equação. Isaac Newton tinha desenvolvido uma fórmula muito similar em seu método de Fluxões (Method of Fluxions), escrito em 1671, mas esta obra só foi publicada em 1736, quase 50 anos depois da análise de Raphson.

A história dos sistemas de equações lineares começa no Oriente. No século I da era cristã, foi publicado um livro intitulado Jiuzhang Suanshu ("Os nove capítulos da arte Matemática"), constituído por 246 problemas de Aritmética e Geometria, dedicados à resolução de sistemas de equações lineares. As operações referidas, eram efetuadas com o auxílio de pequenos paus dispostos numa folha de papel. Através de manipulações sobre esses paus a técnica proposta era semelhante ao método da decomposição de Gauss. No século XIII o matemático chinês Zhu Shijie publicou uma obra intitulada Suanxue Quimeng ("Introdução à ciência do cálculo") onde aperfeiçoou o método de resolução de sistema proposto nos "Nove capítulos". O matemático japonês Seki Takakazu (1642-1708), mais conhecido de Seki Kowa, tendo lido a obra do Shijie, procurou generalizar a álgebra chinesa, libertando-a do recurso aos paus. Em 1683 Seki Kowa, deu outra importante contribuição com a introdução da noção de determinante no seu livro Kaifukudai no Hô, onde a ideia de determinante (como polinómio que se associa a um quadrado de números) veio à luz. Kowa, considerado o maior matemático japonês do século XVII, chegou a essa noção através do estudo de sistemas lineares, sistematizando o velho procedimento chinês (para o caso de duas equações apenas).

No entanto, a resolução de sistemas de equações lineares já tinha sido considerada por vários autores no Ocidente sendo de destacar o contributo de Carl Friedrich Gauss (1777-1875). Na sua obra "Theoria Motus"(1809) Gauss apresentou uma técnica de resolução de sistemas de equações que não é mais do que o método de eliminação de Gauss. Mais tarde o mesmo apresentou um processo iterativo para resolver sistemas lineares de grande dimensão, antecipando o procedimento conhecido de Gauss-Seidel. Philipp Ludwig Von Seidel (1821-1896) foi um astrónomo, físico e matemático alemão que, em 1874 publicou, no seu trabalho sobre resolução iterativa de sistemas de equações lineares, um método que em cálculo numérico tal como já se referiu se denomina método de Gauss-Seidel.

O uso de determinantes no Ocidente começou dez anos depois num trabalho de Leibniz, ligado também a sistemas de equações lineares. Em resumo, Leibniz estabeleceu a condição de compatibilidade de um sistema de três equações a duas incógnitas em termos do determinante de ordem 3 formado pelos coeficientes e pelos termos independentes (este determinante deve ser nulo). Para tanto, criou até uma notação com índices para os coeficientes: o que hoje, por exemplo, escreveríamos como a_{12} .

A conhecida regra de Cramer para resolver sistemas de n equações a n incógnitas, por meio de determinantes, talvez na verdade seja a descoberta do escocês Colin Maclaurin (1698-1746), datando provavelmente de 1729, embora só publicada postumamente em 1748 no seu "Treatise of algebra". O matemático suíço Gabriel Cramer (1704-1752) publicou-a, independentemente, em 1750, em sua "Introdução à análise" das curvas planas. Uma notação superior que a de Maclaurin,

talvez, seja o motivo do qual no mundo matemático tem o nome consagrado "regra de Cramer". O francês Étienne Bézout (1730-1783), autor de textos matemáticos de sucesso no seu tempo, sistematizou em 1764 o processo de estabelecimento dos sinais dos termos de um determinante. Coube a outro francês, Alexandre Vandermonde (1735-1796), em 1771, empreender a primeira abordagem da teoria dos determinantes independente do estudo dos sistemas lineares, embora também os usasse na resolução destes sistemas.

O importante teorema de Laplace, pertence ao Pierre-Simon Laplace (1749-1827), que permite a expansão de um determinante através dos menores de r filas escolhidas e seus respectivos complementos algébricos. Foi demonstrado no ano seguinte pelo próprio Laplace num artigo que, a julgar pelo título, nada tinha a ver com o assunto: "Pesquisas sobre o cálculo integral e o sistema do mundo".

O termo determinante, com o sentido atual, surgiu em 1812 num trabalho de Cauchy sobre o assunto. Neste artigo, apresentado à Academia de Ciências, Cauchy resumiu e simplificou o que era conhecido até então sobre determinantes, melhorou a notação (mas a atual com duas barras verticais ladeando o quadrado de números só surgiria em 1841 com Arthur Cayley) e deu uma demonstração do teorema da multiplicação de determinantes. Meses antes o francês Jacques Philippe Marie Binet (1786-1856) dera a primeira demonstração deste teorema, mas a de Cauchy era superior.

Quem mais contribuiu para consolidar a teoria dos determinantes, o alemão Carl Gustav Jacob Jacobi (1804-1851), cognominado às vezes "o grande algorista", foi com ele que a palavra determinante recebeu aceitação final. Desde logo usou o determinante funcional que posteriormente iria chamar de Jacobiano.

Os desafios de garantir e tornar prático cada vez mais os cálculos computacionais de sistemas de equações não-lineares continuam até os dias de hoje. Um exemplo, é o método de Broyden que também é conhecido de método de quase-Newton. Charles George Broyden (3 de fevereiro de 1933 - 20 de maio de 2011), foi um matemático britânico que se especializou em problemas de otimização e álgebra linear numérica. Embora fosse um físico que trabalhou na English Electric Company (indústria) de 1961 a 1965, decidiu adaptar as ideias de Davidon-Fletcher-Powell (DFP) para resolver alguns sistemas não-lineares de equações com os quais ele estava trabalhando (na English Electric). A pesquisa feita por Broyden em 1965 levou-o ao seu clássico artigo em Matemática da Computação [Bro65], onde descreveu uma modificação do método de Newton ficando conhecida por método de Broyden ou Quase-Newton, no qual propôs dois métodos para resolver sistemas de equações. Esses métodos mais tarde foram conhecidos como os métodos bons e maus de Broyden (ele chamou-os de Método 1 e Método 2), embora ainda haja desentendimento quanto ao melhor. Este trabalho é amplamente reconhecido como um dos principais desenvolvimentos na análise numérica do século passado. Foi professor na UCW Aberystwyth de 1965 a 1967. Mais tarde tornou-se professor sênior na Universidade de Essex. Charles voltou sua atenção para o método DFP para otimização. Ele percebeu que o método, embora geralmente bem sucedido, teve algum comportamento intrigante que ele atribuiu a erros de arredondamento. Sua análise levou em 1970 a um novo método com comportamento melhorado. Ao mesmo tempo, Fletcher, Donald Goldfarb e David Shanno, tendo diferentes abordagens, descobriram o mesmo método. O novo método foi assim denominado método BFGS. Depois de deixar a Universidade de Essex, ele continuou sua carreira na Holanda e Itália, sendo premiado com a cadeira na Universidade de Bolonha. Em anos posteriores, começou a concentrar-se na álgebra linear numérica, em particular métodos de gradiente conjugado e sua taxonomia.

Atualmente os métodos de quase-Newton ainda continuam a ser objecto de estudo com vista a se obter métodos mais eficientes para a resolução de sistemas de equações não-lineares.

Capítulo 2

Revisão dos métodos numéricos para equações não-lineares

Neste capítulo, procuramos introduzir os métodos do ponto fixo e de Newton-Raphson para a resolução de equações não-lineares. Visto que os dois métodos já foram tratados no Projecto de Ensino I e II, e são ponto de partida para os métodos em estudo.

Vamos considerar o problema de encontrar a solução de $f(x) = 0$. A determinação da solução do problema, leva-nos a descrever e a interpretar vários conceitos que são úteis para encontrar algoritmos, que nos permitem aproximar um zero de uma função.

Definição 1. *Zero de uma função é todo o valor da variável independente x que tem por imagem o valor zero. Por outras palavras, zero de uma função é todo o valor de x , pertencente ao domínio dessa função, tal que $f(x) = 0$.*

Sendo necessário que a função seja contínua num dado intervalo, temos

Definição 2 ([San16]). *[Funções de classe C^n] Dada uma função $f : D_f \rightarrow \mathbb{R}$ e um intervalo aberto $I \subset D_f$:*

- Dizemos que f é uma função de classe C^n em I , e escrevemos $f \in C^n(I)$, se a derivada de ordem n de f , $f^{(n)}$, existir e for contínua em todo o intervalo I .
- Dizemos que f é uma função de classe C^∞ em I , se $f \in C^n(I)$, para qualquer $n \in \mathbb{N}$.

OBS:

- A condição $f \in C^0(I)$ significa simplesmente que f é contínua em I .
- Se $f^{(n)}$ existir, então todas as derivadas $f^{(k)}$, com $k < n$, são contínuas, pois para qualquer $k < n$, a função $f^{(k)}$, é diferenciável.

Teorema 1 ([dS02]). *[De Bolzano] Seja f uma função contínua num intervalo $[a, b]$, com $f(a)$ e $f(b)$ de sinais contrários, ou seja, $f(a) \cdot f(b) < 0$, então existe pelo menos um ponto x^* no intervalo $[a, b]$ tal que,*

$$f(x^*) = 0. \quad (2.1)$$

Uma das formas de se encontrar o intervalo é construir uma tabela com vários valores de x para $f(x)$ e analisar as mudanças dos sinais de $f(x)$. Onde se verificar as variações dos sinais, ali existe a solução.

Teorema 2 ([San16]). *[de Rolle] Dados uma função $f : D_f \rightarrow \mathbb{R}$ e um intervalo $[a, b] \subset D_f$, se*

- f for contínua em $[a, b]$,
- f for diferenciável em $]a, b[$, e
- $f(a) = f(b)$,

então, existe um ponto $c \in]a, b[$, tal que, $f'(c) = 0$.

Definição 3 (Convergência). *O método iterativo $x_{k+1} = g(x_k)$, para $k = 0, 1, 2, 3, \dots$ diz-se convergente para x^* se $\lim_{k \rightarrow \infty} e_k = 0$, onde $e_k = |x^* - x_k|$, é o erro (absoluto) da iteração k .*

Definição 4 (Ordem de Convergência). *Seja $\{x_k\}$ uma sequência que converge para x^* , diz-se que $\{x_k\}$ tem uma ordem de convergência $p \geq 1$ se existir uma constante $M > 0$, tal que*

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^p} = M. \quad (2.2)$$

A constante M chama-se constante-erro, e p é chamado de ordem de convergência da sequência $\{x_k\}$.

Se $p = 1$ diz-se que a convergência é linear

Se $p > 1$ dizemos que a convergência é supralinear

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

2.1 Método do Ponto Fixo

Definição 5 ([Pin10]). *[Ponto Fixo] Seja g uma função definida num intervalo real $[a, b]$. Dizemos que $x^* \in [a, b]$ é um ponto fixo de g se*

$$x^* = g(x^*). \quad (2.3)$$

O método do ponto fixo consiste em transformar expressões do tipo $f(x) = 0$ em expressões equivalente $x = g(x)$, e a partir de uma aproximação inicial x_0 gerar a sequência $\{x_k\}$ de aproximações para x^* pela relação $x_k = g(x_{k-1})$, pois a função $g(x)$ é tal que, $f(x^*) = 0$, se e somente se $x^* = g(x^*)$. Transformamos assim o problema de encontrar um zero de $f(x)$ no problema de encontrar um ponto fixo de $g(x)$.

Definição 6 ([Pin10]). *Uma função g diz-se contractiva no intervalo $I = [a, b]$ se existir uma constante M com $0 \leq M < 1$ tal que,*

$$|g(x_1) - g(x_2)| \leq M|x_1 - x_2|, \quad \forall x_1, x_2 \in I. \quad (2.4)$$

Um dos casos mais simples e simultaneamente dos mais interessantes na prática ocorre quando $g \in C^1(I)$, em que a aplicação do teorema do valor médio nos conduz a $g(x_2) - g(x_1) = g'(x)(x_2 - x_1)$, com x entre x_1 e x_2 . Portanto, se $|g'(x)| < 1, \forall x \in I$, a função g é contractiva. Nestas condições podemos tomar para M o valor $M = \max_{x \in I} |g'(x)|$

Teorema 3 ([Pin10]). *[Ponto Fixo] Seja o intervalo $I = [a, b]$ tal que $g(I) \subset I$ e $|g(x_1) - g(x_2)| < M|x_1 - x_2|, \forall x_1, x_2 \in [a, b]$, então esta função possui um único ponto fixo neste intervalo, e a sucessão $\{x_k\}$ gerada por $x_k = g(x_{k-1})$ converge para este ponto fixo x^* , qualquer que seja a estimativa inicial $x_0 \in I$.*

Pelo teorema 3, se a função $g \in C^1(I)$, temos que,

$$e_{k+1} = |x_{k+1} - x^*| = |g'(\xi_k)||x^* - x_k| = |g'(\xi_k)|e_k, \text{ e } \xi_k \in]x_k, x^*[.$$

Podemos então escrever:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{e_{k+1}}{e_k} = \lim_{k \rightarrow \infty} |g'(\xi_k)| = |g'(x^*)| \quad (2.5)$$

Assim, temos:

Se $|g'(x^*)| > 1$, a sucessão $\{x_k\}$ é divergente.

Se $|g'(x^*)| = 1$, a sucessão $\{x_k\}$ oscila entre alguns valores, e nunca irá convergir para a solução.

Se $0 < |g'(x^*)| < 1$, o método tem ordem 1, ou seja, a sucessão $\{x_k\}$ converge lentamente para a solução.

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Se $|g'(x^*)| = 0$, o método tem convergência supralinear, ou seja, a sucessão $\{x_k\}$ converge rapidamente para a solução.

As figuras 2.1 e 2.2 representam alguns comportamentos do método do ponto fixo.

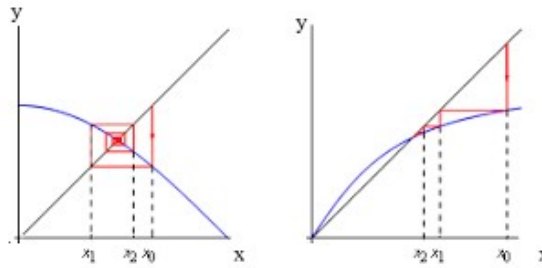


Figura 2.1: Convergência do método do ponto fixo

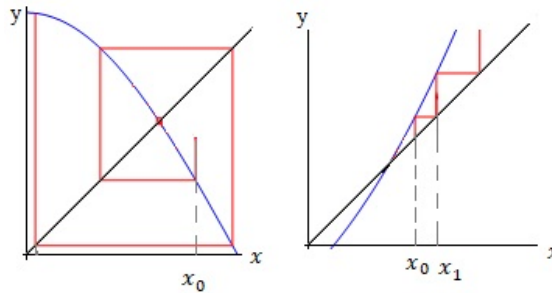


Figura 2.2: Divergência do método do ponto fixo

2.1.1 Algoritmo

1) Dados iniciais

a) x_0 : aproximação inicial;

b) $f(x) = 0 \Leftrightarrow x = g(x)$: Função $g(x)$ é a função de iteração;

c) ϵ : precisão;

2) $k = 0$;

3) $x_{k+1} = g(x_k)$;

4) Se $|x_{n+1} - x_n| < \epsilon$ então faça $x^* = x_{n+1}$. FIM. Caso contrário continue;

5) $n = n + 1$;

Volte ao passo 3.

Na figura 2.3 está um exemplo de um fluxograma do método do ponto fixo.

2.2 Método de Newton-Raphson

É de salientar que os teoremas de "Bolzano" e de "Rolle", também são úteis para o método de Newton-Raphson.

Teorema 4 (De Taylor). *Se a função f e as suas derivadas até à ordem $n + 1$ existem e são contínuas num intervalo contendo x e a então existe um ξ entre x e a tal que o valor de f em x pode ser dado por*

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

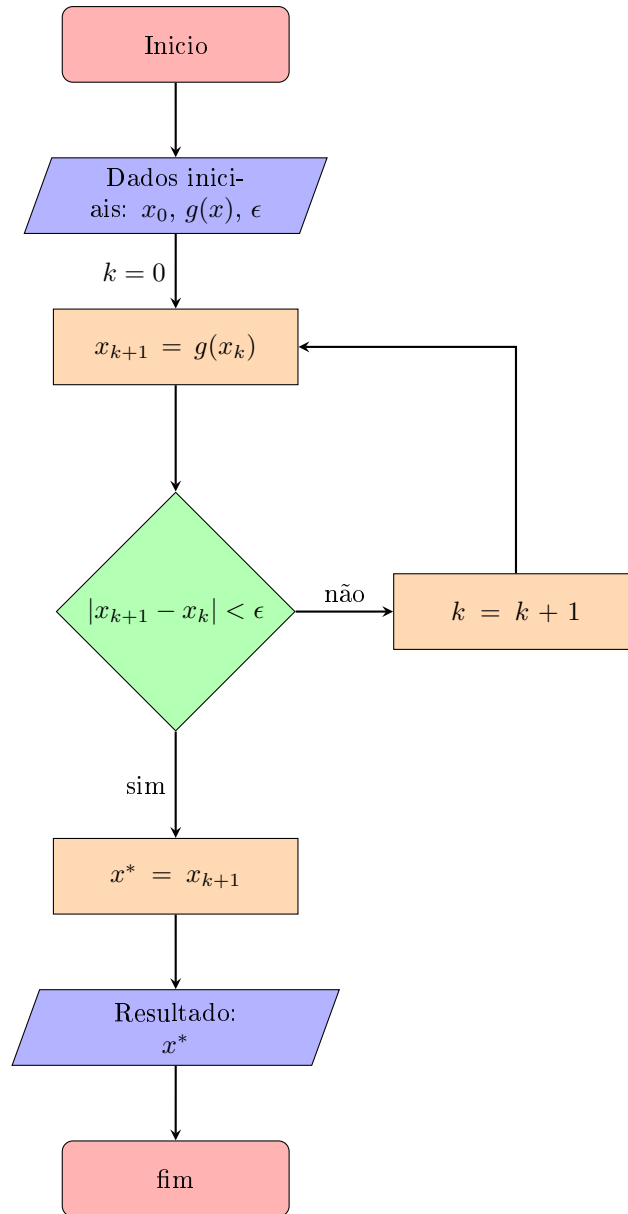


Figura 2.3: Exemplo de um fluxograma do método do ponto fixo

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots + \frac{f^n(a)}{n!}(x-a)^n + R_n(x) \quad (2.6)$$

onde $R_n(x)$ é chamado resto de ordem n e é obtido por

$$R_n(x) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}(a-x)^{n+1}.$$

Se ignorarmos o resto, fica um polinómio de grau n . Então podemos considerar

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x). \quad (2.7)$$

Tomando o polinómio de Taylor de ordem 1 de f em torno de x_n

$$f(x) = f(x_n) + (x-x_n)f'(x_n) + \frac{f''(\xi)(x-x_n)^2}{2}. \quad (2.8)$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Ignorando $\frac{f''(\xi)(x-x_n)^2}{2}$, ou seja, como não conhecemos o valor de ξ que está entre x e x_n consideramos o mesmo como erro, assim tem-se

$$f(x) \approx f(x_n) + (x - x_n)f'(x_n) \quad (2.9)$$

Fazendo $x = x^*$

$$f(x^*) \approx f(x_n) + (x^* - x_n)f'(x_n). \quad (2.10)$$

Uma vez que $f(x^*) = 0$,

$$0 \approx f(x_n) + (x^* - x_n)f'(x_n).$$

Se $f'(x_n) \neq 0$ multiplicando a expressão acima por $\frac{1}{f'(x_n)}$, obtemos:

$$0 \approx \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} + x^* - x_n$$

$$x^* \approx x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = x_{n+1}, \quad (2.11)$$

chega-se a

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad f'(x_n) \neq 0 \text{ e } n=0,1,2,\dots \quad (2.12)$$

logo temos a fórmula de iteração do método de Newton-Raphson.

□

O teorema que se segue é muito prático, porque nos permite averiguar a convergência do método.

Teorema 5 ([Val90]). *Seja $f \in C^2([a, b])$. Se*

$$i) f(a) \cdot f(b) < 0 \quad (2.13)$$

$$ii) f'(x) \neq 0, \forall x \in [a, b] \quad (2.14)$$

$$iii) f''(x) \text{ não muda de sinal em } [a, b], \quad (2.15)$$

então existe um $x^* \in [a, b]$, tal que $f(x^*) = 0$ e se $x_0 \in [a, b]$ é escolhido de forma que $f(x_0)f''(x_0) > 0$, a sequência $\{x_n\}$ gerada pela fórmula recursiva de Newton-Raphson $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$, converge monotonamente e pelo menos quadraticamente para a solução x^* .

Historicamente, a origem do método de Newton-Raphson é geométrica.

A ideia do método de Newton-Raphson é de estimar os zeros de uma função. Para isso, escolhe-se uma aproximação inicial (x_0), com esse valor calcula-se a equação da reta tangente ao gráfico da função neste ponto,

Recta tangente a f em x_0 tem a equação

$$y - f(x_0) = m(x - x_0) \text{ com}$$

$$m = f'(x_0), \text{ ou seja,}$$

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0).$$

Depois, procura-se o ponto em que essa tangente corta o eixo x . Seja ele $(x_1, 0)$. Então

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

$\Leftrightarrow x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$. Repetindo esse processo, cria-se um método iterativo para encontrar uma melhor aproximação do zero da função.

$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$, onde $f'(x_n) \neq 0$ e $k = 0, 1, 2, 3, \dots$. A figura 2.4 ilustra a interpretação geométrica do Método de Newton-Raphson.

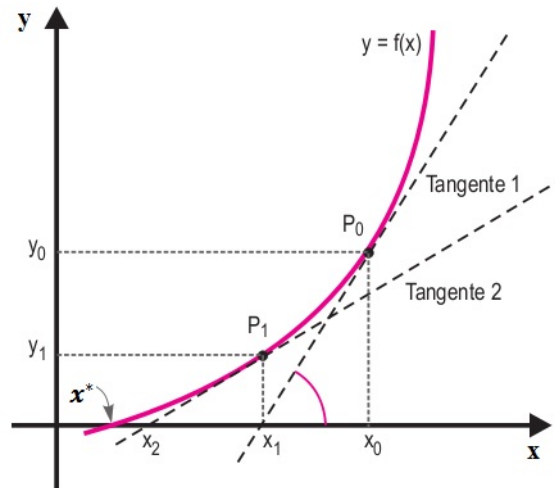


Figura 2.4: Interpretação geométrica do Método de Newton-Raphson.

Um dos aspectos a ter em conta é o critério de paragem, que permite saber quando se devem terminar com as iterações, isto é, que se verifique se foi atingido um resultado próximo o suficiente do resultado que se deseja. Podemos efetuar alguns testes para se verificar se a estimativa x_n está suficientemente próxima da solução desejada, para isto, apresentam-se os seguintes critérios de paragem:

- i) Erro absoluto: $|x^* - x_n| \approx |x_n - x_{n-1}| < \varepsilon$.
- ii) Valor da função: $|f(x_n)| < \varepsilon$.
- iii) Erro relativo: $|x^* - x_n|/|x^*| \approx |x_n - x_{n-1}|/|x_n| < \varepsilon$.

Onde ε é a tolerância.

2.2.1 Algoritmo

Seja a equação $f(x) = 0$.

Supondo que são satisfeitas as condições do teorema de convergência,

1) Dados iniciais

a) x_0 : aproximação inicial

b) ϵ : precisão

2) Se $|f(x_0)| < \epsilon$ então faça $x^* = x_0$. FIM. Caso contrário continue

3) $n = 0$

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

5) Se $|f(x_{n+1})| < \epsilon$ ou se $|x_{n+1} - x_n| < \epsilon$ então faça $x^* = x_{n+1}$. FIM. Caso contrário continue

6) $n = n + 1$

Volte ao passo 4.

Na figura 2.5 está um exemplo de um fluxograma do método de Newton-Raphson.

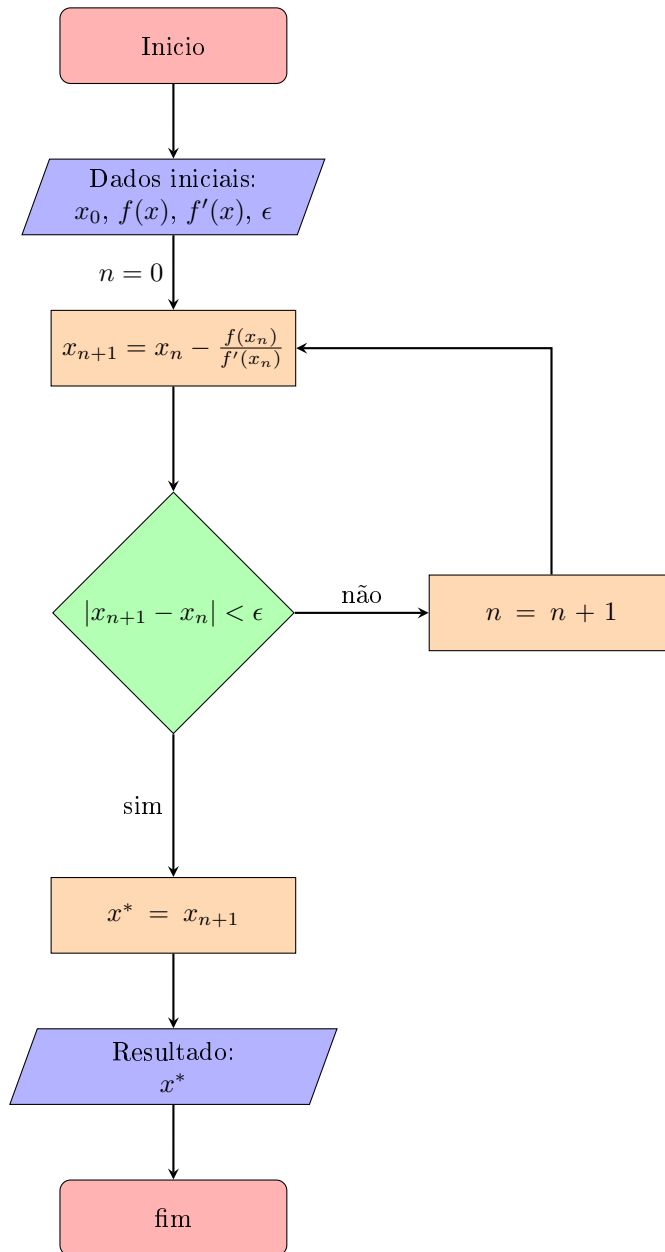


Figura 2.5: Exemplo de um fluxograma do método de Newton-Raphson

Capítulo 3

Considerações básicas sobre sistemas de equações lineares

Neste capítulo procuramos fazer uma sinopse sobre as normas vetoriais, normas matriciais, sistemas lineares e alguns conceitos de álgebra linear.

3.1 Normas vetoriais e matriciais

Os vetores de \mathbb{R}^n podem ser denotados por $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ ou

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}.$$

Definição 7 ([FCF16]). *Uma norma vetorial em \mathbb{R}^n é uma função, $\|\cdot\|$ de \mathbb{R}^n em \mathbb{R} com as seguintes propriedades:*

- i) $\|\mathbf{x}\| \geq 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,
- ii) $\|\mathbf{x}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$
- iii) $\|\alpha\mathbf{x}\| = |\alpha| \cdot \|\mathbf{x}\|, \forall \alpha \in \mathbb{R} \text{ e } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$,
- iv) $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$.

Algumas normas usuais são:

- norma-1 ou norma absoluta $\rightarrow \|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$,
- norma-2 ou norma Euclidiana $\rightarrow \|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |x_i|^2}$,
- norma do máximo $\rightarrow \|\mathbf{x}\|_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \sqrt[p]{\sum_{i=1}^n |x_i|^p} = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$.

Todas estas normas são casos particulares da norma $p \geq 1$,

$$\|\mathbf{x}\|_p = \left(\sum_i^n |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

Por exemplo as normas 1, 2 e ∞ do vetor $\mathbf{x} = (3, -5, 1)$ são:

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}\|_1 &= |3| + |-5| + |1| = 9 \\ \|\mathbf{x}\|_2 &= \sqrt{|3|^2 + |-5|^2 + |1|^2} = \sqrt{35} = 5.9161, \\ \|\mathbf{x}\|_\infty &= \max(|3|, |-5|, |1|) = 5. \end{aligned}$$

Definição 8 ([dS02]). *Sejam $\mathbb{R}^{n \times n}$ o conjunto das matrizes reais de ordem n e $\mathbf{0}$ a matriz nula de ordem n . Uma norma matricial é uma aplicação $\|\cdot\|$ de $\mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}_0^+$ que verifica:*

- i) $\|\mathbf{A}\| = 0$ se e só se $\mathbf{A} = \mathbf{0}$, $\|\mathbf{A}\| \geq 0, \forall \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$,
- ii) $\|\alpha\mathbf{A}\| = |\alpha| \|\mathbf{A}\|, \forall \alpha \in \mathbb{R}, \forall \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$,
- iii) $\|\mathbf{A} + \mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| + \|\mathbf{B}\|$, para todo \mathbf{A} e $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Definição 9. Seja $\|\cdot\|$ uma norma vetorial em \mathbb{R}^n e $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ uma matriz. Então, $\|\mathbf{A}\| = \max_{\mathbf{x} \neq 0} \frac{\|\mathbf{Ax}\|}{\|\mathbf{x}\|}$, $\mathbf{x} \neq 0$ é uma norma matricial, a que chamamos norma matricial natural ou induzida pela norma vetorial.

Propriedades: Seja $\|\cdot\|$ uma norma matricial induzida pela norma vetorial $\|\cdot\|$. Então, para $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ e I a matriz identidade de ordem n :

- i) $\|\mathbf{Ax}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\|$,
- ii) $\|I\| = 1$,
- iii) $\|\mathbf{AB}\| \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{B}\|$.

E em particular, para as normas vetoriais exemplificadas anteriormente podemos definir as normas matriciais seguintes,

Definição 10. Seja $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, então definimos

■ norma-1:

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \left(\sum_{i=1}^n |a_{ij}| \right) \rightarrow \text{a maior soma em valor absoluto das colunas,}$$

■ norma de Frobenius:

$$\|\mathbf{A}\|_F = \|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\sum_{i,j=1}^n |a_{ij}|^2} \rightarrow \text{Raiz quadrada da soma dos quadrados,}$$

■ norma infinita:

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \left(\sum_{j=1}^n |a_{ij}| \right) \rightarrow \text{a maior soma em valor absoluto das linhas.}$$

Por exemplo as normas matriciais 1, 2 e ∞ de

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 3 & 5 \end{bmatrix},$$

são:

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max\{|2| + |3|, |-1| + |5|\} = \max\{5, 6\}, \text{ assim}$$

$$\|\mathbf{A}\|_1 = 6,$$

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{2^2 + (-1)^2 + 3^2 + 5^2} = \sqrt{39}, \text{ assim}$$

$$\|\mathbf{A}\|_2 \approx 6.245,$$

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = \max\{|2| + |-1|, |3| + |5|\} = \max\{3, 8\}, \text{ assim}$$

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = 8.$$

3.2 Sistemas de equações lineares

A determinação do conjunto das soluções de um sistema de equações lineares constitui um tema de estudo relevante dentro da Matemática Aplicada e, particularmente, em muitos tópicos da Engenharia. Para a resolução de sistemas de pequenas dimensões adotamos o método direto de Cramer, e para sistemas de grandes dimensões, o método de Gauss-Seidel.

Existem diversos algoritmos que permitem encontrar, caso existam, soluções dum sistema, recorrendo eventualmente a métodos de aproximação.

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Nesta secção vamos falar e apresentar alguns métodos que nos permitem resolver sistemas de equações lineares.

Definição 11. *Um sistema de m equações lineares, nas incógnitas x_1, x_2, \dots, x_n sobre um corpo \mathbb{K} , é, um sistema da forma*

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases} \quad (3.1)$$

Chamamos **forma matricial** do sistema (3.1) à igualdade de matrizes na forma

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{B},$$

com

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad e \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}.$$

Dizemos que, $\mathbf{A} \in M_{m \times n}(\mathbb{K})$ é a **matriz dos coeficientes**,

$\mathbf{x} \in M_{n \times 1}(\mathbb{K})$ é a **matriz das incógnitas**,

$\mathbf{B} \in M_{m \times 1}(\mathbb{K})$ é a **matriz dos termos independentes**,

$[\mathbf{A}|\mathbf{B}]$ é a **matriz ampliada**.

Definição 12. *Seja $\mathbf{A} \in M_{m \times n}(\mathbb{K})$, a característica de \mathbf{A} denota-se por $r(\mathbf{A})$.*

O resultado seguinte permite afirmar quando o sistema formado pela **matriz ampliada** ($[\mathbf{A}|\mathbf{B}]$) tem solução.

Proposição 1 ([ICS14]). *Seja $\mathbf{Ax} = \mathbf{B}$ um sistema de equações lineares, com $\mathbf{A} \in M_{m \times n}(\mathbb{K})$ e $\mathbf{B} \in M_{m \times 1}(\mathbb{K})$. Tem-se:*

- Se $r(\mathbf{A}) < r([\mathbf{A}|\mathbf{B}])$ então o sistema é impossível,
- Se $r(\mathbf{A}) = r([\mathbf{A}|\mathbf{B}]) = n$ então o sistema é possível e determinado,
- Se $r(\mathbf{A}) = r([\mathbf{A}|\mathbf{B}]) < n$ então o sistema é possível e indeterminado.

Definição 13 ([ICS14]). *[Matrizes invertíveis] Seja $\mathbf{A} \in M_{n \times n}(\mathbb{K})$. Dizemos que \mathbf{A} é **invertível** se existir uma matriz $\mathbf{B} \in M_{n \times n}(\mathbb{K})$ tal que*

$$\mathbf{AB} = \mathbf{I}_n = \mathbf{BA}.$$

Proposição 2 ([ICS14]). *Se $\mathbf{A} \in M_{n \times n}(\mathbb{K})$ é invertível então existe uma, e uma só, matriz \mathbf{B} tal que $\mathbf{AB} = \mathbf{I}_n = \mathbf{BA}$.*

Definição 14 ([ICS14]). *Seja $\mathbf{A} \in M_{n \times n}(\mathbb{K})$ invertível, a única matriz \mathbf{B} tal que $\mathbf{AB} = \mathbf{I}_n = \mathbf{BA}$ chamamos **inversa** de \mathbf{A} e representa-se por \mathbf{A}^{-1} .*

$$\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}_n = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}.$$

Definição 15. *Dizemos que um sistema de equações lineares $\mathbf{Ax} = \mathbf{B}$ é um **sistema de Cramer** se \mathbf{A} é uma matriz quadrada e invertível.*

Definição 16 ([ICS14]). *Seja $\mathbf{A} \in M_{n \times n}(\mathbb{K})$. Chamamos de **determinante** de \mathbf{A} , e representa-se por $\det(\mathbf{A})$ ou $|\mathbf{A}|$, ao elemento de \mathbb{K} definido, por recorrência, da seguinte forma:*

Se $n = 1$ então $\det(\mathbf{A}) = a_{11}$.

Se $n > 1$ então

$$\det \mathbf{A} = a_{11}(-1)^{1+1} \det \mathbf{A}(1|1) + \dots + a_{1n}(-1)^{1+n} \det \mathbf{A}(1|n)$$

$$= \sum_{k=1}^n a_{1k}(-1)^{1+k} \det \mathbf{A}(1|k).$$

Onde $\det \mathbf{A}(i|j)$ significa calcular a determinante da matriz \mathbf{A} excepto a linha i e a coluna j , ou seja, eliminando a linha i e a coluna j .

Proposição 3 ([ICS14]). *[Regra de Cramer] Seja $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{B}$ um sistema de equações lineares, com $\mathbf{A} \in M_{n \times n}(\mathbb{K})$ invertível. Para cada $j \in \{1, 2, \dots, n\}$, seja \mathbf{A}_j a matriz que se obtém de \mathbf{A} substituindo a coluna j pela coluna de \mathbf{B} . Então a solução do sistema é dada por:*

$$(x_1 = \frac{\det \mathbf{A}_1}{\det \mathbf{A}}, x_2 = \frac{\det \mathbf{A}_2}{\det \mathbf{A}}, \dots, x_n = \frac{\det \mathbf{A}_n}{\det \mathbf{A}})$$

Definição 17. *Uma matriz $\mathbf{A} \in M_{n \times n}(\mathbb{K})$, diz-se ortogonal se*

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = I_n = \mathbf{A} \mathbf{A}^T.$$

Obs: A regra de Cramer só é prática para sistemas pequenos, assim sendo apresentamos o método de Gauss-Seidel. Lembrando que vamos apenas tratar o caso $m = n$, ou seja, quando a matriz dos coeficientes é quadrada

3.3 Método de Gauss-Seidel

O método de Gauss-Seidel é um método iterativo para resolução de sistemas de equações lineares. O seu nome é uma homenagem aos matemáticos alemães Carl Friedrich Gauss e Philipp Ludwig Von Seidel.

Seja $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{B}$ um sistema linear possível e determinado, com \mathbf{A} matriz quadrada real e invertível. A matriz \mathbf{A} pode ser escrita de infinitas formas $\mathbf{A} = \mathbf{M} + \mathbf{N}$, em que \mathbf{M} e \mathbf{N} são matrizes de mesma ordem de \mathbf{A} , com \mathbf{M} invertível, então

$$(\mathbf{M} + \mathbf{N})\mathbf{x} = \mathbf{B}, \text{ donde}$$

$$\mathbf{M}\mathbf{x} = \mathbf{B} - \mathbf{N}\mathbf{x}$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{B} - \mathbf{N}\mathbf{x}) \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{B} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{x}. \quad (3.2)$$

Podemos considerar:

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} + \mathbf{N} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{D} + \mathbf{L}$$

$$\mathbf{N} = \mathbf{U}$$

onde \mathbf{D} a matriz diagonal, \mathbf{L} é a matriz estritamente triangular inferior, \mathbf{U} a matriz estritamente triangular superior, as matrizes \mathbf{L} e \mathbf{U} têm zero na diagonal principal.

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Nota: A matriz diagonal \mathbf{D} não deverá ter zeros na diagonal principal. Caso isso aconteça, deve-se efetuar uma troca de linhas ou colunas na matriz \mathbf{A} , para se obter uma matriz \mathbf{D} adequada. A partir de (3.2) podemos retirar um método iterativo que consiste em:

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{B} - \mathbf{N}\mathbf{x}^{(k)}).$$

Atendendo às formas específicas de \mathbf{M} e \mathbf{N} , podemos encontrar o método de Gauss-Seidel apresentado na seguinte fórmula:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \times \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right), \quad a_{ii} \neq 0 \quad (3.3)$$

Definição 18 ([dS02]). *Seja \mathbf{A} uma matriz quadrada de ordem n .*

a) \mathbf{A} diz-se diagonal dominante por linhas se

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1 \wedge j \neq i}^n |a_{ij}|$$

b) \mathbf{A} diz-se estritamente diagonal dominante por linhas se

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1 \wedge j \neq i}^n |a_{ij}|$$

Teorema 6 ([Pin10]). *Se \mathbf{A} for uma matriz de estritamente diagonal dominante por linhas, então o método de Gauss-Seidel é convergente.*

Por exemplo a matriz \mathbf{A} é estritamente diagonal dominante por linhas

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -4 & 1 & -2 \\ 2 & 8 & -5 \\ 1 & -2 & 6 \end{bmatrix}.$$

Pois, $|4| > |1| + |-2|$, $|8| > |2| + |-5|$, $|6| > |1| + |-2|$.

Eis alguns critérios de paragem mais usuais do método,

a) Fixado $\varepsilon > 0$, parar quando $\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|_\infty < \varepsilon$ e tomar $\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}^{(k+1)}$

b) Fixado $\delta > 0$, parar quando $\frac{\|\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\|_\infty}{\|\mathbf{x}^{(k+1)}\|_\infty} < \delta$ e tomar $\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}^{(k+1)}$

Exemplo: Dado o sistema de equações lineares, encontre uma aproximação da solução aplicando o método de Gauss-Seidel com duas iterações

$$\begin{cases} -4x_1 + x_2 - 2x_3 = -5 \\ 2x_1 + 8x_2 - 5x_3 = 5 \\ x_1 - 2x_2 + 6x_3 = 5 \end{cases} \quad \mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T.$$

Resolução:

Por (3.3), tem-se

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{-4}(-5 - x_2^{(k)} + 2x_3^{(k)}) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{8}(5 - 2x_1^{(k+1)} + 5x_3^{(k)}) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{6}(5 - x_1^{(k+1)} + 2x_2^{(k+1)}) \end{cases}$$

1ª iteração: $\mathbf{x}^{(1)}$

Cálculo de x_1 (tomando $x_2 = x_3 = 0$):

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

$$x_1^{(1)} = \frac{1}{-4}(-5 - 0 + 2 \times 0) = \frac{1}{-4} \times (-5) = 1.25.$$

Cálculo de x_2 (tomando $x_1 = 1.25$ e $x_3 = 0$):

$$x_2^{(1)} = \frac{1}{8}(5 - 2 \times 1.25 + 5 \times 0) = \frac{1}{-4} \times 2.5 = 0.3125.$$

Cálculo de x_3 (tomando $x_1 = 1.25$ e $x_2 = 0.3125$):

$$x_3^{(1)} = \frac{1}{6}(5 - 1.25 + 2 \times 0.3125) = \frac{1}{6} \times 4.375 = 0.729167.$$

2ª iteração: $\mathbf{x}^{(2)}$

Cálculo de x_1 (tomando $x_2 = 0.3125$ e $x_3 = 0,729167$):

$$x_1^{(2)} = \frac{1}{-4}(-5 - 0.3125 + 2 \times 0,729167) = 0.963542.$$

Cálculo de x_2 (tomando $x_1 = 0.963542$ e $x_3 = 0,729167$):

$$x_2^{(2)} = \frac{1}{8}(5 - 2 \times 0.963542 + 5 \times 0,729167) = 0.839844.$$

Cálculo de x_3 (tomando $x_1 = 0.963542$ e $x_2 = 0.839844$):

$$x_3^{(2)} = \frac{1}{6}(5 - 0.963542 + 2 \times 0.839844) = 0.952691.$$

Como se pode verificar, na construção de cada iteração foi usado o valor mais actualizado de cada variável. Repetindo o processo quantas vezes for necessário, chega-se a uma solução que se deseja.

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1.25 \\ 0.3125 \\ 0.729167 \end{bmatrix}, \mathbf{x}^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.963542 \\ 0.839844 \\ 0.952691 \end{bmatrix}.$$

Capítulo 4

Sistemas de equações não-lineares

Os sistemas de equações não-lineares são problemas que podem surgir dos mais diversificados domínios da Matemática Aplicada. Vamos imaginar que nos é dado um problema, definido por um sistema de equações não-lineares para o qual se pretende encontrar uma solução. Resolver um sistema de equações não-lineares consiste em determinar todos pontos no subespaço do problema que solucione o conjunto de equações, ou seja, encontrar todos os pontos que satisfazem as equações do sistema em simultâneo.

Neste sentido, propomos trabalhar com dois problemas com aplicação em diferentes áreas do conhecimento, que visam aplicar e compreender o estudo feito nessa pesquisa.

Consideremos um primeiro problema que surge na engenharia química.

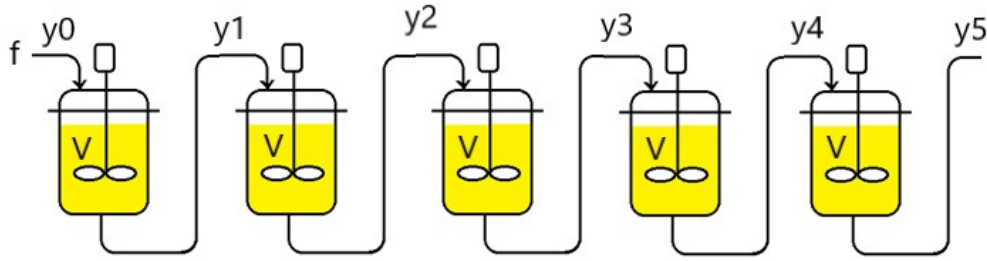


Figura 4.1: Reatores em séries

Vamos considerar uma reação isotérmica e irreversível de segunda ordem, num conjunto de reatores de tanque em série continuamente agitados, como ilustra a figura 4.1. A composição em cada reator é assumida como sendo espacialmente homogénea devido a uma mistura completa. A expressão da taxa de reacção é

$$r = kVy_i^2.$$

O y_i é a concentração de entrada do componente no i -ésimo reator, k é a constante de velocidade da reacção e V é o volume do reator. Um balanço de material sob condições de estado estacionário no i -ésimo reator resulta em,

$$kVy_i^2 = f(y_{i-1} - y_i).$$

Fazendo $\beta = \frac{kV}{f}$, as n equações simultâneas não-lineares podem ser obtidas a partir da seguinte expressão:

$$\beta y_i^2 + y_i - y_{i-1} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$$

Embora se possa construir n equações, as variáveis são $(n + 2)$ no total, elas são $[y_0, \dots, y_n, \beta]$. Por isso, temos dois graus de liberdade. Na análise de um conjunto de reatores, por exemplo, pode-se considerar (β, y_0) conhecido e resolver as restantes n variáveis, incluindo a concentração de saída y_n . Numa situação determinada, talvez desejamos alcançar uma conversão específica e,

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

portanto, considerar (y_0, y_n) como conhecido e resolver as n variáveis restantes, incluindo β (e consequentemente o volume V).

Consideremos uma situação de design onde as concentrações de entrada e saída são especificadas como, $y_0 = 5.0$, $y_5 = 0.5$. A constante de taxa é $k = 0.125$ litro/(moles min) e a taxa de alimentação é $f = 25$ litros/min.

O problema é determinar o volume dos reatores. Por construção isolando V da expressão $\beta = \frac{kV}{f}$ obtém-se $V = \frac{f\beta}{k}$, o problema é então calcular β . No entanto para se obter β é necessário resolver o sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} \beta y_1^2 + y_1 - 5 = 0 \\ \beta y_2^2 + y_2 - y_1 = 0 \\ \beta y_3^2 + y_3 - y_2 = 0 \\ \beta y_4^2 + y_4 - y_3 = 0 \\ \beta \times (0.5)^2 + 0.5 - y_4 = 0 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} x_5 x_1^2 + x_1 - 5 = 0 \\ x_5 x_2^2 + x_2 - x_1 = 0 \\ x_5 x_3^2 + x_3 - x_2 = 0 \\ x_5 x_4^2 + x_4 - x_3 = 0 \\ 0.25 x_5 + 0.5 - x_4 = 0 \end{array} \right. , \quad (4.1)$$

com as incógnitas

$$\mathbf{x} = \{y_1, y_2, \dots, y_{n-1}, \beta\} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}.$$

Este problema irá ser resolvido no final. No entanto, vamos primeiro estudar um problema que por analogia é mais simples, neste caso, o segundo problema que consiste em calcular a intersecção entre a hipérbole $y = \frac{1}{x}$ e a parábola $y = x^2 - 1$. Assim, tem-se o sistema não linear

$$\left\{ \begin{array}{l} y = \frac{1}{x} \\ y = x^2 - 1 \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} xy - 1 = 0 \\ x^2 - y - 1 = 0 \end{array} \right. \quad (4.2)$$

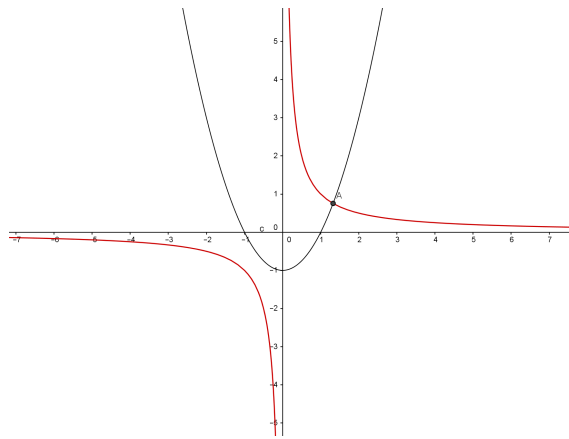


Figura 4.2: Representação gráfica do sistema não-linear

Como é óbvio, diante destes problemas, numa primeira vista podem-se levantar várias questões em torno dos mesmos. Assim sendo, começando com o caso mais simples podemos fazer algumas perguntas sobre o sistema e com base no gráfico procuramos respondê-las, como se segue,

- Será que o sistema acima tem solução? Sim, graficamente o sistema tem solução, analisando o gráfico, o ponto de intersecção entre as linhas que representam as equações, no caso, entre a parábola e a hipérbole, é o ponto que satisfaz o sistema;
- A solução é única? Sim, graficamente pode-se observar que apenas existe um único ponto de intersecção entre as linhas que representação as equações;
- Como obter essa solução? Pode-se obter por vários métodos analíticos e iterativos .

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Primeiramente vamos resolver o sistema (4.2) analiticamente. Isolando y na 2ª equação e substituir na 1ª equação

$$\begin{cases} xy - 1 = 0 \\ x^2 - y - 1 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} xy - 1 = 0 \\ y = x^2 - 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x(x^2 - 1) - 1 = 0 \\ - \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x^3 - x - 1 = 0 \\ - \end{cases}$$

Agora vamos aplicar a fórmula de Cardano-Tartaglia para resolver a equação encontrada. A fórmula de Cardano-Tartaglia aplica-se a equações do tipo

$$x^3 + px + q = 0, \text{ onde } p \text{ e } q \text{ são reais.}$$

As soluções da equação são dadas por:

$$x = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}}.$$

No caso da equação do sistema a solução é

$$x = \sqrt[3]{\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{27}}} + \sqrt[3]{\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{1}{27}}}.$$

Então a solução do sistema é

$$\begin{cases} x = \sqrt[3]{\frac{9+\sqrt{69}}{18}} + \sqrt[3]{\frac{9-\sqrt{69}}{18}} \approx 1.324717957 \\ y = \left(\sqrt[3]{\frac{9+\sqrt{69}}{18}} + \sqrt[3]{\frac{9-\sqrt{69}}{18}}\right)^2 - 1 \approx 0.754877666. \end{cases}$$

Analisando a solução do sistema (4.2), salientamos que, sendo resolvido o sistema de forma analítica, nota-se que a solução é dada por aproximação, e isto já mostra algum grau de dificuldade mesmo em \mathbb{R}^2 .

Com relação ao sistema (4.1), será que é possível ser resolvido de forma analítica? A resposta é não, porque de acordo ao teorema fundamental da álgebra (Jean Le Rond D'Alembert), que afirma: "Toda equação polinomial de grau n possui exatamente n raízes" e ao Niels Abel que provou que equações de grau superior a 4 não podem ser resolvidas por métodos analíticos, mas sim, por métodos numéricos ou iterativos. Como se trata de um sistema em \mathbb{R}^5 , então não será possível representar graficamente.

A resolução dos problemas por métodos iterativos, certamente é o nosso principal objetivo de pesquisa.

Um sistema de equações é dito não linear se não for possível escreve-lo na forma (??). Um sistema de equações não-lineares pode então ser escrito da seguinte forma

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

Onde podemos considerar a função $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = [f_1(x_1, x_2, \dots, x_n), f_2(x_1, x_2, \dots, x_n), \dots, f_n(x_1, x_2, \dots, x_n)]^T$ como uma transformação de um vetor $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ de um espaço n -dimensional \mathbb{R}^n para \mathbb{R}^n .

Então o sistema (4.3) adota a seguinte forma

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}. \quad (4.4)$$

Logo o objetivo é encontrar o zero de \mathbf{F} .

As funções (f_1, f_2, \dots, f_n) são chamadas funções coordenadas de \mathbf{F} . As soluções de (4.4), ou zeros de \mathbf{F} , serão denotadas por $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, assim $\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$.

O sistema (4.3) só em casos excepcionalmente simples admite solução analítica, pelo que os métodos habitualmente utilizados são aproximados os quais, dado o carácter não-linear das equações, assumem a forma de procedimentos iterativos. Para desenvolver estes métodos são adotadas as seguintes vias:

- Generalizar os métodos utilizados para a solução de única equação não-linear,
- Generalizar os métodos que se empregam para o caso de sistemas de equações lineares,
- Combinar os dois casos acima.

Definição 19 (Função Vetorial de Variável Vetorial, Função Coordenada). *Seja $D \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto e*

$$\begin{aligned} \mathbf{F} : D &\rightarrow \mathbb{R}^n \\ \mathbf{x} &\rightarrow (f_1(\mathbf{x}), \dots, f_n(\mathbf{x})), \end{aligned}$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ f_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}) \end{bmatrix},$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in D \subset \mathbb{R}^n$.

A função \mathbf{F} é uma função vetorial de variável vetorial e, para cada $i = 1, \dots, n$, a função f_i é uma função coordenada.

Por vezes, chama-se campo vetorial a uma função $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

O estudo de uma função $\mathbf{F} : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ está muito ligado ao estudo das n funções $f_i : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, n$.

Antes de entrarmos no tema propriamente dito, vamos fazer referência a alguns conceitos, definições e teoremas que são fundamentais para o estudo do tema. Dessa forma recorreu-se a conceitos como "limite", "continuidade" e "diferenciabilidade" de funções de \mathbb{R}^n em \mathbb{R}^n , entre outros.

Definição 20. *Seja \mathbf{F} uma função definida num conjunto $D \subset \mathbb{R}^n$ com valores em \mathbb{R}^n . Diz-se que a função \mathbf{F} tem o limite L em \mathbf{x}_0 , e escreve-se*

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{F}(\mathbf{x}) = L,$$

se dado um número qualquer $\varepsilon > 0$, existe um número $\delta > 0$ com a propriedade

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - L\| < \varepsilon,$$

sempre que $\mathbf{x} \in D$ e

$$0 < \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| < \delta.$$

A existência e o valor de um limite é independente da norma vetorial.

Agora já podemos definir o conceito de continuidade para as funções de \mathbb{R}^n em \mathbb{R}^n , considerando as funções coordenadas de \mathbb{R}^n em \mathbb{R} .

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Definição 21. *Seja \mathbf{F} uma função de $D \subset \mathbb{R}^n$ em \mathbb{R}^n da forma $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_n(\mathbf{x})]^T$, onde f_i é a transformação de \mathbb{R}^n para \mathbb{R} para todo $i = 1, \dots, n$ e $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$. Definimos*

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{F}(\mathbf{x}) = L = [L_1, L_2, \dots, L_n]^T$$

se e só se $\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} f_i(\mathbf{x}) = L_i, \forall i = 1, 2, \dots, n$.

A função \mathbf{F} é contínua em $\mathbf{x}_0 \in D$ sempre e quando $\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{F}(\mathbf{x})$ existe e $\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_0)$. Este conceito expressa-se escrevendo $\mathbf{F} \in C(D)$.

No caso de funções de \mathbb{R} em \mathbb{R} , muitas vezes pode provar-se a continuidade demonstrando que a função é diferenciável. Apesar de que este teorema se generaliza a funções de várias variáveis, a derivada de uma função de várias variáveis é mais complexa e não explicaremos aqui. Em vez disso, enunciaremos o seguinte teorema que relaciona a continuidade de uma função de n variáveis num ponto com derivadas parciais da função nesse ponto.

Definição 22 ([FCF16]). *[Derivada Parcial] Sejam $A \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto, $a = (a_1, \dots, a_n) \in A$ e $f : A \rightarrow \mathbb{R}$ uma função. A derivada parcial de f em ordem a x_i no ponto a é, se existir, o limite*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a_1, \dots, a_{i-1}, a_i + h, a_{i+1}, \dots, a_n) - f(a_1, \dots, a_{i-1}, a_i, a_{i+1}, \dots, a_n)}{h}.$$

Neste caso, a derivada parcial é representada por

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(a).$$

Intuitivamente, a derivada parcial de f em ordem a x_i dá-nos uma medida do crescimento da função f na direcção em que está x_i .

Na prática, para calcularmos a derivada parcial de f em ordem a x_i tratamos todas as outras variáveis como constantes e aplicamos as regras usuais da derivação apenas à variável x_i .

Teorema 7 ([Agu89]). *Uma função real de n variáveis reais que admite derivadas parciais de primeira ordem é diferenciável em todo o ponto em que $n - 1$ das derivadas sejam contínuas.*

Definição 23 ([Agu89]). *Diz-se que uma função f é de classe C^r (nalgum conjunto S) e escreve-se $f \in C^r(S)$, quando admite derivadas parciais contínuas até a ordem r em todo os pontos de S .*

Do teorema anterior resulta então:

Corolário 1 ([Agu89]). *Toda a função de classe C^1 é diferenciável.*

Definição 24 ([Kud83]). *A função, que tem num certo ponto (ou num determinado conjunto, respectivamente), derivadas parciais contínuas é chamado continuamente diferenciável neste ponto (ou neste conjunto, respectivamente).*

De acordo com esta definição podemos dizer que a função é continuamente diferenciável num ponto se as suas derivadas parciais neste ponto são contínuas, ou seja, o conceito de continuamente diferenciável está relacionado com o conceito de derivada parcial.

Definição 25 ([FCF16]). *[Matriz Jacobiana, Determinante Jacobiano] Sejam $A \subset \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto, $a \in A$ e $\mathbf{F} : A \rightarrow \mathbb{R}^n$ uma função dada por*

$$\mathbf{F}(x_1, \dots, x_n) = (f_1(x_1, \dots, x_n), \dots, f_m(x_1, \dots, x_n)) \in \mathbb{R}^m.$$

A matriz jacobiana de \mathbf{F} em a é

$$\mathbf{J}_{\mathbf{F}}(a) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(a) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(a) \end{bmatrix}_{m \times n}.$$

Se $n = m$, a matriz jacobiana é quadrada e o determinante chama-se jacobiano de F em a , e é dado por

$$|\mathbf{J}_{\mathbf{F}}|(a) = \begin{vmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(a) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1}(a) & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n}(a) \end{vmatrix}.$$

Teorema 8 ([BFB15]). *Seja \mathbf{F} uma função de $D \subset \mathbb{R}^n$ em \mathbb{R} e $\mathbf{x}_0 \in D$. Se existem as constantes $\delta > 0$ e $K > 0$ com $|\frac{\partial f_j(\mathbf{x})}{\partial x_j}| \leq K$ para cada $j = 1, 2, \dots, n$, sempre que $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\| < \delta$ e $\mathbf{x} \in D$, então \mathbf{F} é contínua em \mathbf{x}_0 .*

Teorema 9 ([Goc18]). *Suponhamos que $\mathbf{F} : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é continuamente diferenciável e que $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$. Então*

$$\mathbf{F}(\mathbf{b}) - \mathbf{F}(\mathbf{a}) = \int_0^1 \mathbf{J}(\mathbf{a} + \theta(\mathbf{b} - \mathbf{a}))(\mathbf{b} - \mathbf{a})d\theta, \quad (4.5)$$

onde \mathbf{J} é a matriz jacobiana de \mathbf{F} .

Seguindo o mesmo raciocínio podemos também enunciar o teorema da desigualdade triangular para integração

Teorema 10 ([Goc18]). *Se $\mathbf{F} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$ é integrável ao longo do intervalo $[\mathbf{a}, \mathbf{b}]$, então*

$$\left\| \int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \mathbf{F}(\mathbf{t})d\mathbf{t} \right\| \leq \int_{\mathbf{a}}^{\mathbf{b}} \|\mathbf{F}(\mathbf{t})\|d\mathbf{t}. \quad (4.6)$$

Vamos definir a continuidade de Lipschitz, que também será útil para o desenvolvimento desse estudo.

Definição 26. *Suponhamos $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Então, \mathbf{F} é Lipschitz contínua em $D \subset \mathbb{R}^n$ se existir uma constante \mathbf{L} com $\mathbf{L} > \mathbf{0}$ tal que*

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}) - \mathbf{F}(\mathbf{y})\| \leq \mathbf{L}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\| \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D.$$

O resultado abaixo, permite verificar se uma sucessão arbitrária converge mesmo não conhecendo o limite, para tal, vamos usar a noção de sucessão de Cauchy.

Definição 27 ([San16]). *[Sucessão de Cauchy] Dizemos que uma sucessão $\{\mathbf{x}_n\} \in \mathbb{R}^n$ é de Cauchy se para todo $\varepsilon > 0$ existir um $N > 0$ tal que*

$$n, m > N \Rightarrow \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m\| < \varepsilon.$$

Ou seja, a partir de certa ordem, a distância entre quaisquer dois termos da sucessão é inferior a ε .

Lema 1. *Toda sucessão de Cauchy é limitada.*

Teorema 11 ([San16]). *Uma sucessão $\{\mathbf{x}_n\} \in \mathbb{R}^n$ converge se e só se for uma sucessão de Cauchy.*

Capítulo 5

Método do ponto fixo

Na secção 2.1 desenvolveu-se um processo iterativo em \mathbb{R} para equações não lineares, transformando-a primeiro num problema equivalente $x = g(x)$. Por construção a função g tem pontos fixos precisamente nas soluções da equação original.

No caso das funções de \mathbb{R}^n em \mathbb{R}^n , vamos também desenvolver um procedimento semelhante.

5.1 Fórmula iterativa

Nesta secção vamos procurar mostrar a construção da fórmula iterativa do método ponto fixo para a resolução de sistemas de equações não-lineares,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x}).$$

Definição 28 ([Pin10]). *[Ponto Fixo] Uma função \mathbf{G} de $D \subset \mathbb{R}^n$ em \mathbb{R}^n tem um ponto fixo em $\mathbf{x}^* \in D$ se $\mathbf{x}^* = \mathbf{G}(\mathbf{x}^*)$. Vamos calcular os pontos fixos de \mathbf{G} usando a sucessão $\{\mathbf{x}_k\}$ gerada por*

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{G}(\mathbf{x}_k), \quad k = 0, 1, \dots \quad (5.1)$$

e a partir de uma aproximação inicial \mathbf{x}_0 .

A função $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ está definida por

$\mathbf{G}(\mathbf{x}) = [g_1(x_1, x_2, \dots, x_n), g_2(x_1, x_2, \dots, x_n), \dots, g_n(x_1, x_2, \dots, x_n)]^T$, ou seja

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

donde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$.

É imprescindível dizer que a transformação de $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x})$ não é única, existem varias formas. Por exemplo, se isolarmos na i -ésima equação a variável x_i , o sistema transforma-se num problema do ponto fixo, assim, tem-se

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = g_1(x_1, x_2, \dots, x_n), \\ x_2 = g_2(x_1, x_2, \dots, x_n), \\ \vdots \\ x_n = g_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{cases}$$

Diante deste cenário, imaginemos, que x_i não está na equação pretendida, neste caso podemos trocar a ordem das equações de modo a se encontrar o x_i adequado que possibilite resolver o sistema.

O estudo da convergência do método do ponto fixo em \mathbb{R}^n constitui uma generalização natural do que foi dito no capítulo 2. E como é óbvio vamos usar a noção de contractividade:

Definição 29. Uma função \mathbf{G} diz contrativa em D se existir uma constante $0 \leq \mathbf{M} < 1$, tal que $\|\mathbf{G}(\mathbf{x}) - \mathbf{G}(\mathbf{y})\| \leq \mathbf{M}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$, $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$.

A demonstração da contractividade de \mathbf{G} não costuma ser fácil. Uma situação que a torna mais viável consiste no caso em que $\mathbf{G} \in C^1(D)$ e D é convexo. Aplicando o teorema 9 à função \mathbf{G} e denotado por \mathbf{J} a respectiva matriz jacobiana temos

$$\mathbf{G}(\mathbf{y}) - \mathbf{G}(\mathbf{x}) = \int_0^1 \mathbf{J}(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x}))(\mathbf{y} - \mathbf{x}) dt, \quad \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in D$$

Aplicando normas, resulta que

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{y}) - \mathbf{G}(\mathbf{x})\| \leq \int_0^1 \|\mathbf{J}(\mathbf{x} + t(\mathbf{y} - \mathbf{x}))\| \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\| dt,$$

pelo teorema do valor médio vem,

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{y}) - \mathbf{G}(\mathbf{x})\| \leq \|\mathbf{J}(\mathbf{x} + \theta(\mathbf{y} - \mathbf{x}))\| \|\mathbf{y} - \mathbf{x}\|, \quad 0 < \theta < 1$$

assim tem-se

$$\|\mathbf{G}(\mathbf{x}) - \mathbf{G}(\mathbf{y})\| \leq \mathbf{M}\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|$$

com

$$\mathbf{M} = \sup_{\mathbf{x} \in D} \|\mathbf{J}(\mathbf{x})\|, \quad \text{pois } D \text{ é convexo.}$$

Se $\|\mathbf{J}(\mathbf{x})\| < 1$, $\forall \mathbf{x} \in D$, então a função \mathbf{G} é contrativa. Nestas condições, podemos tomar para \mathbf{M} o valor

$$\mathbf{M} = \sup_{\mathbf{x} \in D} \|\mathbf{J}(\mathbf{x})\| < 1.$$

5.2 Convergência

À luz do que foi dito na secção 2.1, o teorema 3 é agora formulado de seguinte modo,

Teorema 12 ([Pin10]). Se $\mathbf{G} : D \rightarrow D \subset \mathbb{R}^n$ for uma função contínua contrativa tal que $\mathbf{G}(D) \subset D$, então possui um único ponto fixo neste domínio D , e a sucessão $\{\mathbf{x}_k\}$ gerada por (5.1) converge para este ponto fixo qualquer que seja a estimativa inicial $\mathbf{x}_0 \in D$.

Demonstração. Começando por demonstrar que $\{\mathbf{x}_k\}$ é uma **sequência de Cauchy** em D e consequentemente a **existência** do ponto fixo.

Pela fórmula (5.1) vem

$$\|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\| = \|\mathbf{G}(\mathbf{x}_n) - \mathbf{G}(\mathbf{x}_{n-1})\| \leq \mathbf{M}\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}\| = \dots \leq \mathbf{M}^n \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|$$

$$\|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\| \leq \mathbf{M}^n \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|$$

Pela definição 27, sejam $m, n = m + p \in \mathbb{N}$

$$\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m\| = \|\mathbf{x}_{m+p} - \mathbf{x}_m\| = \|\mathbf{x}_{m+p} - \mathbf{x}_{m+p-1} + \mathbf{x}_{m+p-1} - \mathbf{x}_{m+p-2} + \mathbf{x}_{m+p-2} + \dots - \mathbf{x}_{m+1} + \mathbf{x}_{m+1} - \mathbf{x}_m\|$$

$$\leq \sum_{k=0}^{p-1} \|\mathbf{x}_{m+k+1} - \mathbf{x}_{m+k}\| \leq \sum_{k=0}^{p-1} \mathbf{M}^{m+k} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| = \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| \sum_{k=0}^{p-1} \mathbf{M}^{m+k} =$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

$$= \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| \mathbf{M}^m \sum_{k=0}^{p-1} \mathbf{M}^k = \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| \mathbf{M}^m \left(1 \times \frac{1 - \mathbf{M}^{p-1}}{1 - \mathbf{M}} \right). \quad (5.2)$$

Como $\mathbf{M} < 1$, $\mathbf{M}^{p-1} < 1$, assim obtem-se

$$\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m\| = \|\mathbf{x}_{m+p} - \mathbf{x}_m\| \leq \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\| \mathbf{M}^m \times \frac{1}{1 - \mathbf{M}}.$$

Logo como $\mathbf{M} < 1$ para qualquer que seja $\varepsilon > 0$, $\|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_m\| < \varepsilon$, para n, m suficientemente grandes. Então $\{\mathbf{x}_k\}$ é uma sucessão de Cauchy. Pelo teorema 11, $\{\mathbf{x}_k\}$ é convergente, seja \mathbf{a} o seu limite. Então como \mathbf{G} é contínua, tem-se

$$\mathbf{G}(\mathbf{a}) = \mathbf{G}(\lim \mathbf{x}_n) = \lim \mathbf{G}(\mathbf{x}_n) = \lim \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{a},$$

logo \mathbf{a} é ponto fixo de \mathbf{G} .

Vamos agora demonstrar a **unicidade** partindo do teorema 12. Começamos, supondo que existem em D dois pontos fixos \mathbf{z}_1 e \mathbf{z}_2 distintos, tal que

$$\mathbf{z}_1 = \mathbf{G}(\mathbf{z}_1) \text{ e } \mathbf{z}_2 = \mathbf{G}(\mathbf{z}_2)$$

subtraindo estas duas expressões membro a membro, aplicando normas e invocando a contractividade de \mathbf{G} , vem que

$$\begin{aligned} \|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2\| &= \|\mathbf{G}(\mathbf{z}_1) - \mathbf{G}(\mathbf{z}_2)\| \leq \mathbf{M} \|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2\| \\ &\Leftrightarrow (1 - \mathbf{M}) \|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2\| \leq 0 \\ &\Leftrightarrow 1 - \mathbf{M} > 0 \Rightarrow \|\mathbf{z}_1 - \mathbf{z}_2\| \leq 0 \end{aligned}$$

Logo, $\mathbf{z}_1 = \mathbf{z}_2$.

Seja \mathbf{x}^* o único ponto fixo de \mathbf{G} .

O teorema a seguir é um caso particular do teorema anterior e também mais prático para o método do ponto fixo em \mathbb{R}^n .

Corolário 2 ([BFB15]). *Seja $D = \{(x_1, x_2, \dots, x_n)^t \mid a_i \leq x_i \leq b_i \forall i = 1, 2, \dots, n\}$ para um conjunto de constantes a_1, a_2, \dots, a_n e b_1, b_2, \dots, b_n . Suponhamos que \mathbf{G} seja uma função contínua de $D \subset \mathbb{R}^n$ em \mathbb{R}^n com a propriedade de que $\mathbf{G}(\mathbf{x}) \in D$ sempre que $\mathbf{x} \in D$. Então \mathbf{G} tem um ponto fixo em D .*

Suponhamos que \mathbf{G} tem derivadas parciais contínuas e que haja uma constante $K < 1$ com $|\frac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial x_j}| \leq \frac{K}{n}$ sempre que $\mathbf{x} \in D$, $\forall j = 1, 2, \dots, n$ e para cada função de componente g_i . Então a sucessão $\{\mathbf{x}_k\}_{k=0}^{\infty}$ definido por um \mathbf{x}_0 arbitrariamente seleccionado em D e gerada por $\mathbf{x}_k = \mathbf{G}(\mathbf{x}_{k-1})$ para cada $k \geq 1$, converge para o único ponto fixo $\mathbf{x}^ \in D$ e $\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_m\|_{\infty} \leq \frac{K^m}{1-K} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_{\infty}$.*

Demonstração

$D = \{[x_1, x_2, \dots, x_n]^t \mid a_i \leq x_i \leq b_i \forall i = 1, 2, \dots, n\}$ é um domínio convexo.

Se $|\frac{\partial g_i(\mathbf{x})}{\partial x_j}| \leq \frac{K}{n}$, $\forall \mathbf{x} \in D$, $j = 1, 2, \dots, n$

Então $\|\mathbf{J}(\mathbf{x})\|_{\infty} \leq K < 1$, logo \mathbf{G} é contractiva, com $\mathbf{M} = K$.

Pelo teorema 12, \mathbf{G} tem um único ponto fixo em D e sucessão $\mathbf{x}_k = \mathbf{G}(\mathbf{x}_{k-1})$ converge para esse ponto fixo,

Fazendo em 5.2 $\mathbf{M} = \mathbf{K}$ e $p \rightarrow \infty$, com $K^{p-1} \rightarrow 0$, obtem-se

$$\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_m\|_\infty \leq \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\infty \mathbf{K}^m \times \frac{1}{1 - \mathbf{K}} = \frac{\mathbf{K}^m}{1 - \mathbf{K}} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\infty.$$

□

É importante salientar que o método de Gauss-Seidel é uma aplicação do método do ponto fixo para sistemas de equações lineares.

Algoritmo

Passo 1: Dados iniciais

- a) \mathbf{x}_0 : aproximação inicial,
- b) $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x})$: Função $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ é a função de iteração;
- c) ϵ : precisão;

Passo 2: $\mathbf{n} = 0$;

Passo 3: $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{G}(\mathbf{x}_n)$;

Passo 4: Se $\|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\| < \epsilon$ então faça $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_{n+1}$. FIM. Caso contrário continue;

Passo 5: $\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$. Volte ao passo 3.

Na figura 5.1 está um exemplo de um fluxograma do método do ponto fixo.

5.3 Exemplo

Aplicar o método do ponto fixo à resolução do sistema de equações não-lineares do segundo problema, com uma tolerância de $\epsilon = 10^{-4}$.

Resolução

Pela figura 4.2 podemos obter graficamente $D = \{(x, y)^T | 1.1 \leq x \leq 2, 0.2 \leq y \leq 1\}$, assim $\mathbf{x}^* \in D$ e D é convexo.

Vamos procurar uma função $\mathbf{G} : D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida por $\mathbf{G}(\mathbf{x}) = [g_1(x, y), g_2(x, y)]^T$. Lembremos que a forma de $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ não é única, assim temos a primeira tentativa

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{cases} xy - 1 = 0 \\ x^2 - y - 1 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x = \frac{1}{y} \\ y = x^2 - 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} g_1(x, y) = \frac{1}{y} \\ g_2(x, y) = x^2 - 1 \end{cases}.$$

Calculando as derivadas parciais de $g_1(x, y)$ e $g_2(x, y)$ tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_1}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial g_1}{\partial y} &= -\frac{1}{y^2}, \\ \frac{\partial g_2}{\partial x} &= 2x, \\ \frac{\partial g_2}{\partial y} &= 0. \end{aligned}$$

Analisando cada uma das derivadas parciais, podemos ter a matriz jacobiana de \mathbf{G} em função de x e y ,

$$\mathbf{J}_{\mathbf{G}}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{1}{y^2} \\ 2x & 0 \end{bmatrix}.$$

Aplicando $\|\mathbf{J}(\mathbf{x})\|_\infty = \max\{0 + |-\frac{1}{y^2}|, |2x| + 0\} \leq \max\{0 + 25, 4 + 0\} = 25 > 1, \forall (x, y) \in D$ vimos que a condição suficiente não é satisfeita, logo a convergência do método não está garantida.

Vamos continuar a procura da solução do sistema, desta forma, trocamos o posicionamento das equações. Assim temos

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \begin{cases} x^2 - y - 1 = 0 \\ xy - 1 = 0 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x = \sqrt{y+1} \\ y = \frac{1}{x} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} g_1(x, y) = \sqrt{y+1} \\ g_2(x, y) = \frac{1}{x} \end{cases}.$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

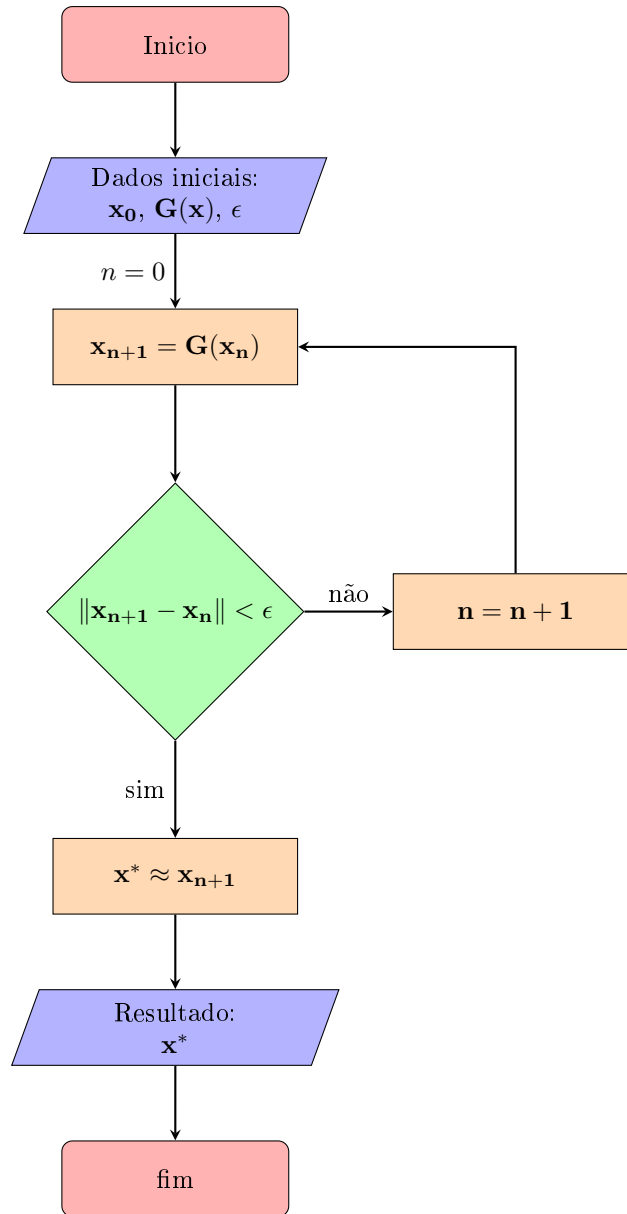


Figura 5.1: Exemplo de um fluxograma do método do ponto fixo em \mathbb{R}^n

Vamos calcular as derivadas parciais de $g_1(x, y)$ e $g_2(x, y)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_1}{\partial x} &= 0, \\ \frac{\partial g_1}{\partial y} &= \frac{1}{2\sqrt{y+1}}, \\ \frac{\partial g_2}{\partial x} &= -\frac{1}{x^2}, \\ \frac{\partial g_2}{\partial y} &= 0. \end{aligned}$$

Analisando cada uma das derivadas parciais, concluímos que são contínuas em D . Assim temos a matriz jacobiana de \mathbf{G} em função de x e y .

$$\mathbf{J}_{\mathbf{G}}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{y+1}} \\ -\frac{1}{x^2} & 0 \end{bmatrix}.$$

Aplicando $\|\mathbf{J}(\mathbf{x})\|_{\infty} = \max\{0 + \frac{1}{2\sqrt{y+1}}, |-\frac{1}{x^2}| + 0\} \leq \max\{0 + 0.5, 0.9 + 0\} = 0.9 < 1, \forall (x, y) \in D$.

A condição suficiente é satisfeita. Vamos provar a seguinte condição,

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}) \in D, \forall \mathbf{x} \in D,$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

para $g_1(x, y)$ tem-se

$$\begin{aligned} 0.2 &\leq y &&\leq 1 \\ 1.2 &\leq y + 1 &&\leq 2 \\ 1.1 &\leq \sqrt{y+1} &\leq \sqrt{2} &\approx 1.41 . \\ \text{logo,} &&& \\ 1.1 &\leq g_1(x, y) &\leq \sqrt{2} &\approx 1.41 \end{aligned}$$

e para $g_2(x, y)$ tem-se

$$\begin{aligned} 1.1 &\leq x &&\leq 2 \\ \frac{1}{2} &\leq \frac{1}{x} &&\leq \frac{1}{1.1} . \\ \text{logo,} &&& \\ 0.5 &\leq g_2(x, y) &\leq 0.91 \end{aligned}$$

Logo a condição $\mathbf{G}(\mathbf{x}) \in D, \forall \mathbf{x} \in D$, é satisfeita. Então a convergência do método está garantida. Aplicação do método tem-se

$$\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{cases} x_1 = G_1(x_0, y_0) \\ y_1 = G_2(x_0, y_0) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = \sqrt{y_0 + 1} \\ y_1 = \frac{1}{x_0} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_1 = 1.414213562 \\ y_1 = 0.5 \end{cases}$$

$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 1.414213562 \\ 0.5 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 1.414213562 \\ 0.5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.585786438 \\ 0.5 \end{bmatrix}.$$

$$\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\infty = \max\{0.585786438; 0.5\} = 0.585786438 > 10^{-4}$$

$$\begin{cases} x_2 = G_1(x_1, y_1) \\ y_2 = G_2(x_1, y_1) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_2 = \sqrt{y_1 + 1} \\ y_2 = \frac{1}{x_1} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_2 = 1.224744871 \\ y_2 = 0.707106781 \end{cases}$$

$$\mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 1.224744871 \\ 0.707106781 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} 1.224744871 \\ 0.707106781 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1.414213562 \\ 0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.189468691 \\ 0.207106781 \end{bmatrix}.$$

$$\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|_\infty = \max\{0.189468691; 0.207106781\} = 0.207106781 > 10^{-4}$$

$$\begin{cases} x_3 = G_1(x_2, y_2) \\ y_3 = G_2(x_2, y_2) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_3 = \sqrt{y_2 + 1} \\ y_3 = \frac{1}{x_2} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_3 = 1.306562965 \\ y_3 = 0.816496581 \end{cases}$$

$$\mathbf{x}_3 = \begin{bmatrix} 1.306562965 \\ 0.816496581 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} 1.306562965 \\ 0.816496581 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1.224744871 \\ 0.707106781 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.081818094 \\ 0.1093898 \end{bmatrix}.$$

$$\|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2\|_\infty = \max\{0.081818094; 0.1093898\} = 0.1093898 > 10^{-4}$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

$$\begin{cases} x_4 = G_1(x_3, y_3) \\ y_4 = G_2(x_3, y_3) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_4 = \sqrt{y_3 + 1} \\ y_4 = \frac{1}{x_3} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_4 = 1.347774677 \\ y_4 = 0.765366865 \end{cases}$$

$$\mathbf{x}_4 = \begin{bmatrix} 1.347774677 \\ 0.765366865 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3 = \begin{bmatrix} 1.347774677 \\ 0.765366865 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1.306562965 \\ 0.816496581 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.041211712 \\ 0.051129716 \end{bmatrix}.$$

$$\|\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3\|_\infty = \max\{0.041211712; 0.051129716\} = 0.051129716 > 10^{-4}$$

$$\begin{cases} x_5 = G_1(x_4, y_4) \\ y_5 = G_2(x_4, y_4) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_5 = \sqrt{y_4 + 1} \\ y_5 = \frac{1}{x_4} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x_5 = 1.32867109 \\ y_5 = 0.741963785 \end{cases}$$

$$\mathbf{x}_5 = \begin{bmatrix} 1.32867109 \\ 0.741963785 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_4 = \begin{bmatrix} 1.32867109 \\ 0.741963785 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1.347774677 \\ 0.765366865 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.019103587 \\ 0.02340308 \end{bmatrix}.$$

$$\|\mathbf{x}_5 - \mathbf{x}_4\|_\infty = \max\{0.019103587; 0.02340308\} = 0.02340308 > 10^{-4}$$

Na tabela 5.1 está um resumo dos resultados,

n	\mathbf{x}_n	$\mathbf{G}(\mathbf{x}_n)$	$\ \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}\ _\infty$
0	(2;1)	(1.414213562 ; 0.5)	
1	(1.414213562 ; 0.5)	(1.224744871 ; 0.707106781)	0.585786438 > 10 ⁻⁴
2	(1.224744871 ; 0.707106781)	(1.306562965 ; 0.816496581)	0.207106781 > 10 ⁻⁴
3	(1.306562965 ; 0.816496581)	(1.347774677 ; 0.765366865)	0.109389800 > 10 ⁻⁴
4	(1.347774677 ; 0.765366865)	(1.328671090 ; 0.741963785)	0.051129716 > 10 ⁻⁴
5	(1.328671090 ; 0.741963785)	(1.319834757 ; 0.752631714)	0.023403080 > 10 ⁻⁴
6	(1.319834757 ; 0.752631714)	(1.323869976 ; 0.757670606)	0.010667929 > 10 ⁻⁴
7	(1.323869976 ; 0.757670606)	(1.325771770 ; 0.755361190)	0.004035219 > 10 ⁻⁴
8	(1.325771770 ; 0.755361190)	(1.324900445 ; 0.754277639)	0.001901726 > 10 ⁻⁴
9	(1.324900445 ; 0.754277639)	(1.324491464 ; 0.754773692)	0.001083551 > 10 ⁻⁴
10	(1.324491464 ; 0.754773692)	(1.324678713 ; 0.755006753)	0.000408981 > 10 ⁻⁴
11	(1.324678713 ; 0.755006753)	(1.324766679 ; 0.754900030)	0.000233061 > 10 ⁻⁴
12	(1.324766679 ; 0.754900030)	(1.324726398 ; 0.754849904)	0.000106723 > 10 ⁻⁴
13	(1.324726398 ; 0.754849904)	-	0.000050126 < 10 ⁻⁴

Tabela 5.1: Resultados das iterações do método do ponto fixo

Aplicando o critério de paragem, obtém-se

$$\|\mathbf{x}_{13} - \mathbf{x}_{12}\|_\infty = \max\{0.000040281; 0.000050126\} = 0.000050126 < 10^{-4}. \text{ Logo,}$$

$$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}_{13} = \begin{bmatrix} 1.324726398 \\ 0.754849904 \end{bmatrix}, \text{ é a estimativa da solução do sistema dado.}$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Na figura 5.2 está a representação gráfica das iterações, pelo método do ponto fixo.

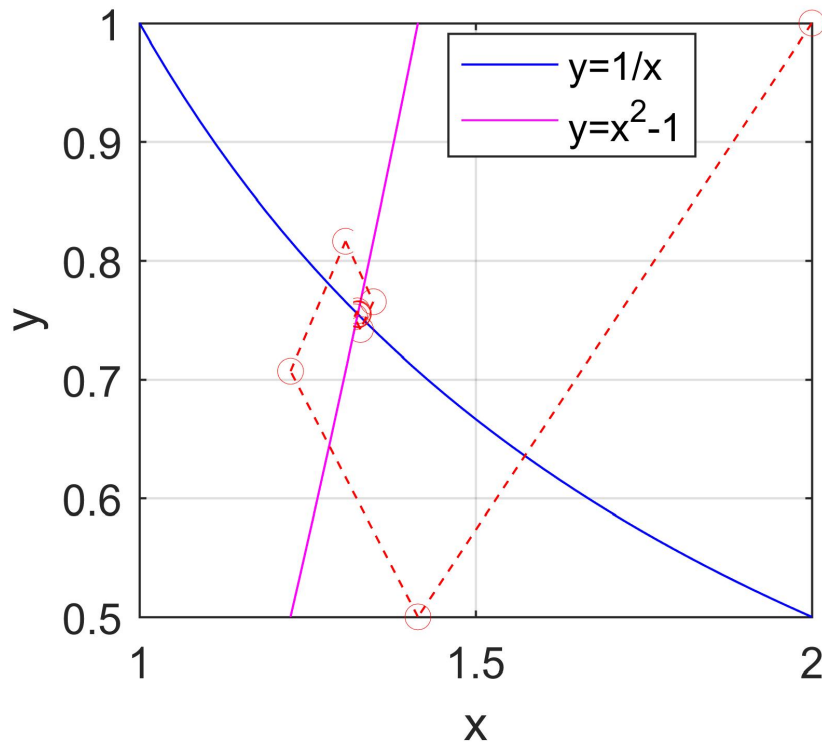


Figura 5.2: Representação gráfica das iterações do método do ponto fixo

Capítulo 6

Método de Newton-Raphson

Um dos métodos que mais facilmente se generaliza ao caso n -dimensional é o método de Newton-Raphson. Vimos no capítulo 2 que se obtém ao aproximar a função f pelo seu desenvolvimento em polinômio de Taylor de ordem 1 em torno de x_n . Desta forma, para se achar um processo de resolução numérica, vamos lembrar a fórmula de Taylor para funções de várias variáveis, considerando a existência da aproximação linear.

6.1 Fórmula iterativa

Neste item, vamos mostrar por construção a fórmula iterativa do método de Newton-Raphson, tendo em conta o que se mostrou na secção 2.2, vamos seguir com um raciocínio semelhante, mas, em \mathbb{R}^n .

Consideremos primeiro \mathbf{F} uma função, $\mathbf{F} : D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \end{bmatrix},$$

e $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0) \in D$, temos

$$\begin{cases} f_1(x) \approx f_1(x_0) + \left(\frac{\partial f_1}{\partial x}\right)_{\mathbf{x}_0} (x - x_0) + \left(\frac{\partial f_1}{\partial y}\right)_{\mathbf{x}_0} (y - y_0) \\ f_2(x) \approx f_2(x_0) + \left(\frac{\partial f_2}{\partial x}\right)_{\mathbf{x}_0} (x - x_0) + \left(\frac{\partial f_2}{\partial y}\right)_{\mathbf{x}_0} (y - y_0) \end{cases}$$

ou seja

$$\begin{bmatrix} f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} f_1(x_0, y_0) \\ f_2(x_0, y_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{bmatrix}_{\mathbf{x}_0} \times \begin{bmatrix} x - x_0 \\ y - y_0 \end{bmatrix},$$

em que cada linha é o desenvolvimento de um campo escalar, até à primeira ordem. Estando \mathbf{x} na vizinhança de \mathbf{x}_0 , contido no domínio D , podemos escrever, numa forma matricial mais condensada,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) \approx \mathbf{F}(\mathbf{x}_0) + \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), \quad (6.1)$$

onde $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ é matriz jacobiana da função \mathbf{F} , calculada no ponto \mathbf{x}_0 , onde são supostas existirem as derivadas parciais intervenientes.

Vamos agora seguir um raciocínio análogo para um campo vetorial $\mathbf{F} : D \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$.

Para se obter uma aproximação da raiz de $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, $\mathbf{x} \in D \subset \mathbb{R}^n$, ou seja, uma aproximação da solução do sistema

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Vamos partir de uma aproximação inicial \mathbf{x}_0 e fazer $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1 \in D \subset \mathbb{R}^n$, de maneira que o primeiro membro de (6.1) venha ser matriz nula $n \times 1$, isto é,

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) + \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) \quad (6.2)$$

em que $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ é matriz jacobiana de \mathbf{F} , calculada no ponto \mathbf{x}_0 ,

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{\mathbf{x}_0}.$$

A equação (6.2) é um sistema linear do tipo $\mathbf{Ax} = \mathbf{B}$. Para se obter a solução é necessário se ter em conta as seguintes condições:

- Se a matriz jacobiana $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ for retangular, é mais provável que o sistema seja impossível ou indeterminado,
- Se o determinante $|\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)| = 0$, é impossível encontrar a raiz da função \mathbf{F} ,
- Se o determinante $|\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)| \neq 0$, a matriz $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ é invertível no ponto \mathbf{x}_0 , permitindo assim, a obtenção de \mathbf{x}_1 na equação acima, por

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0) = -\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}_0), \quad (6.3)$$

donde, atendendo a que $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}_0) = \mathbf{I}_n$, a matriz identidade de ordem n e neste caso \mathbf{I}_n é o elemento neutro da multiplicação de matrizes, vem

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) \quad (6.4)$$

que conduz à fórmula iterativa do chamado método de Newton-Raphson para sistemas de equações não lineares, genericamente

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{J}(\mathbf{x}_n)^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}_n). \quad (6.5)$$

Na prática, querendo evitar a inversão de matrizes, podemos usar a fórmula iterativa na forma

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_n), \quad (6.6)$$

onde, podemos denotar $\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n = \mathbf{S}_n$, e vem

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)\mathbf{S}_n = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_n), \quad (6.7)$$

que constitui um sistema de equações lineares, possível e determinado, pois $|\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)| \neq 0$. A estimativa, \mathbf{x}_{n+1} pode ser calculada a partir de \mathbf{x}_n , por

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{S}_n + \mathbf{x}_n. \quad (6.8)$$

6.2 Algoritmo

Dados $\mathbf{F}(\mathbf{x})$, \mathbf{x}_0 , ε , faça:

Passo 1: $n = 0$;

Passo 2: calcule $\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$, se $\|\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)\| < \varepsilon$, faça $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_n$ e pare; caso contrário:

Passo 3: calcule $\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)$;

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Passo 4: obtenha \mathbf{S}_n , solução do sistema linear: $\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)\mathbf{S}_n = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$;

Passo 5: faça $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{S}_n + \mathbf{x}_n$;

Passo 6: se $\|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\| < \epsilon$, faça $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_{n+1}$ e pare; caso contrário:

Passo 7: $n = n + 1$; volte ao passo 2.

Na figura 6.1 está um exemplo de um fluxograma do método de Newton-Raphson.

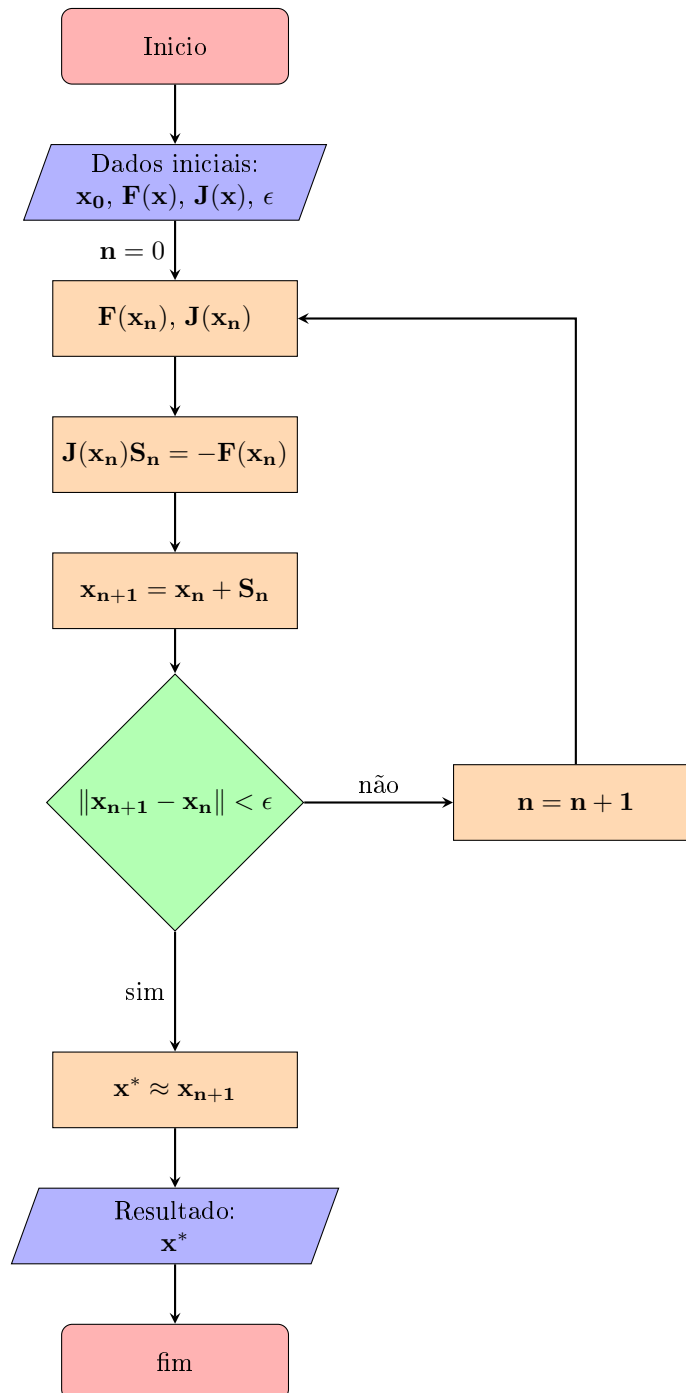


Figura 6.1: Exemplo de um fluxograma do método de Newton em \mathbb{R}^n

6.3 Erro e Convergência

Antes de prosseguir convém sublinhar que as noções de convergência, ordem de convergência, etc., introduzidas na subsecção 2.2, continuam válidas desde que, naturalmente se substitua $|\cdot|$ por $\|\cdot\|$. A equivalência de normas em \mathbb{R}^n (recordar as definições da subsecção 3.1) assegura que os resultados não são influenciados na sua essência pela escolha concreta da norma.

Teorema 13 ([Goc18]). *Suponhamos que $F: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ é continuamente diferenciável e $F(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. Se*

1. *A jacobiana $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)$ de F em \mathbf{x}^* é não singular ($|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)| \neq 0$)*

2. *\mathbf{J} é Lipschitz contínuo numa vizinhança de \mathbf{x}^* ,*

então, para todo \mathbf{x}_0 suficientemente próximo de \mathbf{x}^ , o método de Newton produz uma sequência $\{\mathbf{x}_k\}$ que converge quadraticamente para \mathbf{x}^* .*

Demonstração: Pelo teorema 9 (fórmula 4.5)

$$\begin{aligned} \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) &= \int_0^1 \mathbf{J}(\mathbf{x}^* + \theta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) d\theta \\ &= \int_0^1 \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) d\theta + \int_0^1 (\mathbf{J}(\mathbf{x}^* + \theta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) d\theta \\ &= \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) + \int_0^1 (\mathbf{J}(\mathbf{x}^* + \theta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) d\theta \end{aligned}$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) = \int_0^1 (\mathbf{J}(\mathbf{x}^* + \theta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) d\theta.$$

Assim, por (4.6), vem

$$\begin{aligned} \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)\| &= \left\| \int_0^1 (\mathbf{J}(\mathbf{x}^* + \theta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) d\theta \right\| \\ &\leq \int_0^1 \|(\mathbf{J}(\mathbf{x}^* + \theta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)\| d\theta \\ &\leq \int_0^1 \|\mathbf{J}(\mathbf{x}^* + \theta(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\| d\theta \\ &\leq \int_0^1 \mathbf{L}\theta \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 d\theta \\ &\leq \mathbf{L} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 \int_0^1 \theta d\theta \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{L} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 \\ &= \frac{\mathbf{L}}{2} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2 \end{aligned}$$

Analisando sem a continuidade de Lipschitz de \mathbf{J} pode-se apenas concluir

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) = \mathbf{O}\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|$$

Mas, precisa-se da continuidade de Lipschitz para se obter uma estimativa muito próxima da solução,

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) = \mathbf{O}(\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2).$$

Por outro lado vem,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^* &= \mathbf{x}_k - \mathbf{x}^* - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}(\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) \\ &= \mathbf{x}_k - \mathbf{x}^* - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}(\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) + \mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)) \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*) + \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}(\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)), \end{aligned}$$

então,

$$\begin{aligned} \|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| &\leq \|(\mathbf{I} - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}^*))(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)\| + \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}(\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*))\| \\ &\leq \|\mathbf{I} - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\| + \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\| \|\mathbf{F}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{F}(\mathbf{x}^*) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*)\|, \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \|\mathbf{I} - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\| + \frac{\mathbf{L}}{2} \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\| \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2. \quad (6.9)$$

Usando novamente a continuidade de Lipschitz de \mathbf{J} , vem

$$\begin{aligned} \|\mathbf{I} - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| &= \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}(\mathbf{J}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*))\| \\ &\leq \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\| \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{I} - \mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \leq \mathbf{L} \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\| \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|. \quad (6.10)$$

Substituindo (6.10) em (6.9) obtém-se

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq \frac{3\mathbf{L}}{2} \|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\| \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2.$$

Para \mathbf{x}_k suficientemente próximo de \mathbf{x}^* ,

$$\|\mathbf{J}(\mathbf{x}_k)^{-1}\| \leq 2\mathbf{M}, \quad (6.11)$$

com $\mathbf{M} = \|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}\|$, pois $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ é contínua numa vizinhança de \mathbf{x}^* então,

$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\| \leq 3\mathbf{L}\mathbf{M} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2, \quad (6.12)$$

e

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}^*\|}{\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*\|^2} = C, \quad 0 < C < \infty.$$

Portanto, se \mathbf{x}_0 for suficientemente próximo de \mathbf{x}^* , então o método de Newton-Raphson tem convergência pelo menos quadrática.

□

6.4 Exemplo

Aplicar o método de Newton-Raphson à resolução do sistema de equações não-lineares, neste caso o segundo problema, $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0$, com uma tolerância de $\varepsilon = 10^{-4}$, onde $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ é dado por:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x^2 - y - 1 \\ xy - 1 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Resolução:

Antes, vamos verificar as condições de convergência pelo teorema 13 em $D = \{(x, y)^T | 1.1 \leq x \leq 2, 0.2 \leq y \leq 1\}$.

* Calculando as derivadas parciais da função \mathbf{F} , tem-se

$\frac{\partial f_1}{\partial x} = 2x$, $\frac{\partial f_1}{\partial y} = -1$, $\frac{\partial f_2}{\partial x} = y$ e $\frac{\partial f_2}{\partial y} = x$. Assim, a função \mathbf{F} é continuamente diferenciável porque as suas derivadas parciais são contínuas. Verificando a condição da $|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)| \neq 0$, tem-se

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2x & -1 \\ y & x \end{bmatrix},$$

Aplicando $|\mathbf{J}(\mathbf{x})| = 2x^2 + y \geq 2 \times (1.1)^2 + 0.2 > 0$, $\forall (x, y) \in D$. Logo, a matriz jacobiana $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)$ de \mathbf{F} em $\mathbf{x}^* \in D$ é não singular.

Agora vamos verificar se \mathbf{J} é Lipschitz contínua. Sabendo que $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$ e $\mathbf{b} = (b_1, b_2)$, vem

$$\begin{aligned} \|\mathbf{J}(\mathbf{a}) - \mathbf{J}(\mathbf{b})\|_\infty &= \left\| \begin{bmatrix} 2a_1 & -1 \\ a_2 & a_1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2b_1 & -1 \\ b_2 & b_1 \end{bmatrix} \right\|_\infty = \left\| \begin{bmatrix} 2(a_1 - b_1) & 0 \\ a_2 - b_2 & a_1 - b_1 \end{bmatrix} \right\|_\infty \\ &= \max\{2|a_1 - b_1| + 0; |a_2 - b_2| + |a_1 - b_1|\}, \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{a} - \mathbf{b}\|_\infty = \left\| \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right\|_\infty = \max\{|a_1 - b_1|; |a_2 - b_2|\}$$

assim podemos ter 2 casos distintos:

1) Se $|a_1 - b_1| \leq |a_2 - b_2| \Rightarrow \|a - b\|_\infty = |a_2 - b_2|$ e

$$\begin{aligned} \|\mathbf{J}(\mathbf{a}) - \mathbf{J}(\mathbf{b})\|_\infty &= \max\{2|a_1 - b_1| + 0; |a_2 - b_2| + |a_1 - b_1|\}, \\ &\leq \max\{2|a_2 - b_2|; 2|a_2 - b_2|\} \\ &= 2|a_2 - b_2| \\ &= 2\|a - b\|_\infty \end{aligned}$$

2) Se $|a_1 - b_1| > |a_2 - b_2| \Rightarrow \|a - b\|_\infty = |a_1 - b_1|$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{J}(\mathbf{a}) - \mathbf{J}(\mathbf{b})\|_\infty &= \max\{2|a_1 - b_1| + 0; |a_2 - b_2| + |a_1 - b_1|\}, \\ &\leq \max\{2|a_1 - b_1|; 2|a_1 - b_1|\} \\ &= 2|a_1 - b_1| \\ &= 2\|a - b\|_\infty \end{aligned}$$

Logo \mathbf{J} é de Lipschitz, com $\mathbf{L} = 2$. Assim sendo o método terá uma convergência quadrática.

Agora já podemos aplicar o método com garantia de convergência.

Passo 1: Começemos por $\mathbf{n} = \mathbf{0}$

Passo 2:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Passo 3:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_0) = \left[\begin{array}{cc} 2x & -1 \\ y & x \end{array} \right]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} = \left[\begin{array}{cc} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{array} \right].$$

Passo 4: $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)\mathbf{S}_0 = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)$

$$\left[\begin{array}{cc} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} x \\ y \end{array} \right] = - \left[\begin{array}{c} 2 \\ 1 \end{array} \right] \Leftrightarrow \left[\begin{array}{cc} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} x \\ y \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} -2 \\ -1 \end{array} \right]$$

Usando a regra de Cramer, obtemos

$$|\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)| = \left| \begin{array}{cc} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{array} \right| = 8 + 1 = 9$$

$$\mathbf{S}_0 = \left[\begin{array}{c} -0.555555556 \\ -0.222222222 \end{array} \right].$$

Passo 5: $\mathbf{x}_1 = \mathbf{S}_0 + \mathbf{x}_0$

$$\mathbf{x}_1 = \left[\begin{array}{c} -0.555555556 \\ -0.222222222 \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} 2 \\ 1 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} 1.444444444 \\ 0.777777778 \end{array} \right]$$

Passo 6: $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\infty = \|\mathbf{S}_0\|_\infty < \varepsilon = \max\{|-0.555555556|, |-0.222222222|\} = 0.555555556 > 10^{-4}$, falso

Passo 7: $\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$

Passo 1: $\mathbf{n} = 1$

Passo 2:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_1) = \left[\begin{array}{c} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{array} \right].$$

Passo 3:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_1) = \left[\begin{array}{cc} 2x & -1 \\ y & x \end{array} \right] = \left[\begin{array}{cc} 2.888888888 & -1 \\ 0.777777778 & 1.444444444 \end{array} \right].$$

Passo 4: $\mathbf{J}(\mathbf{x}_1)\mathbf{S}_1 = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_1)$

$$\left[\begin{array}{cc} 2.888888888 & -1 \\ 0.777777778 & 1.444444444 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} x \\ y \end{array} \right] = - \left[\begin{array}{c} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{array} \right] \Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \left[\begin{array}{cc} 2.888888888 & -1 \\ 0.777777778 & 1.444444444 \end{array} \right] \left[\begin{array}{c} x \\ y \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} -0.308641974 \\ -0.123456790 \end{array} \right]$$

Usando a regra de Cramer, obtemos

$$|\mathbf{J}(\mathbf{x}_1)| = \left| \begin{array}{cc} 2.888888888 & -1 \\ 0.777777778 & 1.444444444 \end{array} \right| = 4.950617282.$$

$$\mathbf{S}_1 = \left[\begin{array}{c} -0.114990302 \\ -0.023552231 \end{array} \right].$$

Passo 5: $\mathbf{x}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{x}_1$

$$\mathbf{x}_2 = \left[\begin{array}{c} -0.114990302 \\ -0.023552231 \end{array} \right] + \left[\begin{array}{c} 1.444444444 \\ 0.777777778 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} 1.329454142 \\ 0.754225547 \end{array} \right]$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

Passo 6: $\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|_\infty = \|\mathbf{S}_1\|_\infty < \varepsilon = \max\{|-0.114990302|, |-0.023552231|\}$
 $= 0.114990302 > 10^{-4}$, falso

Passo 7: $\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$

Passo 1: $\mathbf{n} = 2$

Passo 2:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_2) = \begin{bmatrix} 0.013222769 \\ 0.002708278 \end{bmatrix}.$$

Passo 3:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_2) = \left[\begin{array}{cc} 2x & -1 \\ y & x \end{array} \right]_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_2} = \begin{bmatrix} 2.658908288 & -1 \\ 0.754225547 & 1,329454142 \end{bmatrix}.$$

Passo 4: $\mathbf{J}(\mathbf{x}_2)\mathbf{S}_2 = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_2)$

$$\begin{bmatrix} 2.658908288 & -1 \\ 0.754225547 & 1,329454142 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.013222769 \\ -0.002708278 \end{bmatrix}$$

Usando a regra de Cramer, obtemos

$$|\mathbf{J}(\mathbf{x}_2)| = \begin{vmatrix} 2.684210526 & -1 \\ 0.754385965 & 1.342105263 \end{vmatrix} = 4.289122184.$$

$$\mathbf{S}_2 = \begin{bmatrix} -0.004729952 \\ 0.000646260 \end{bmatrix}.$$

Passo 5: $\mathbf{x}_3 = \mathbf{S}_2 + \mathbf{x}_2$

$$\mathbf{x}_3 = \begin{bmatrix} -0.004729952 \\ 0.000646260 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1.329454142 \\ 0.754225547 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.324724190 \\ 0.754871807 \end{bmatrix}$$

Passo 6: $\|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2\|_\infty = \|\mathbf{S}_2\|_\infty < \varepsilon = \max\{|-0.004729952|; |0.000646260|\}$
 $= 0.004729952 > 10^{-4}$,

Passo 1: $\mathbf{n} = 3$

Passo 2:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_3) = \begin{bmatrix} 0.000022373 \\ -0.000003056 \end{bmatrix}.$$

A tabela 6.1, mostra os resultados da aplicação do método.

n	\mathbf{x}_n	$\ \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}\ _\infty$
0	(2, 1)	
1	(1.444444444, 0.777777778)	0.555555556 > 10^{-4}
2	(1.329454142, 0.754225547)	0.114990302 > 10^{-4}
3	(1.324724190, 0.754871807)	0.004729952 > 10^{-4}
4	(1.324717960, 0.754877670)	0.000006233 < 10^{-4}

Tabela 6.1: Resultado das iterações pelo método de Newton-Raphson

$\|\mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3\|_\infty = 0.000006233 < 10^{-4}$, então

$$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}_4 = \begin{bmatrix} 1.324717960 \\ 0.754877670 \end{bmatrix}, \text{ é a estimativa da solução do sistema dado.}$$

Na figura 6.2 está a representação gráfica das iterações, pelo método de Newton.

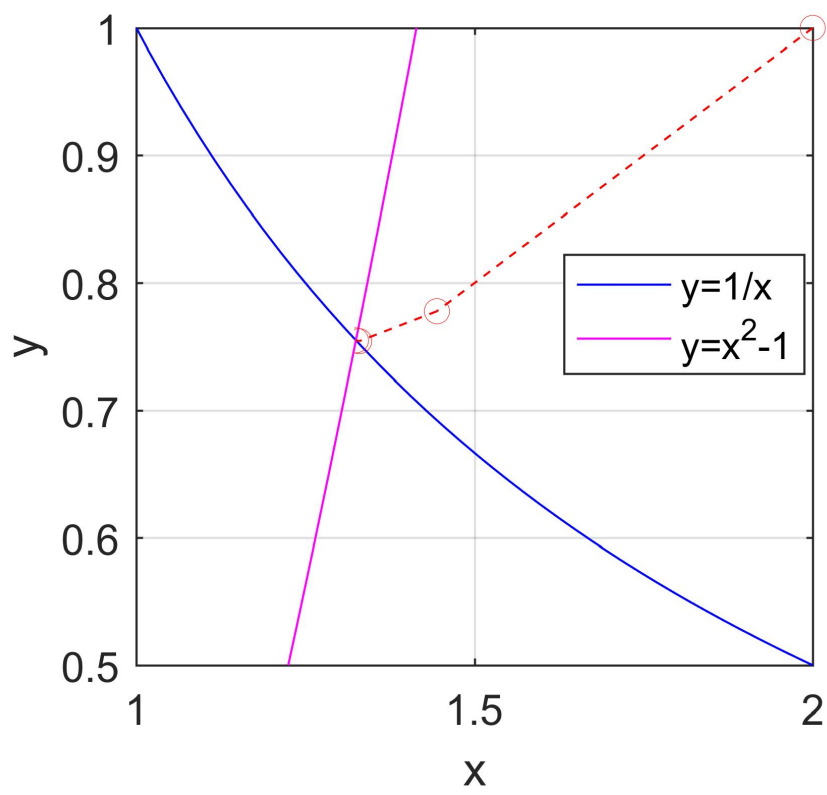


Figura 6.2: Representação gráfica das iterações do método de Newton

Capítulo 7

Método de Broyden

O método de Newton é um método iterativo usado com frequência para resolver sistemas de equações não-lineares porque converge rapidamente e qualquer que seja a aproximação inicial próxima da solução é suficiente para garantir a convergência do método. A principal desvantagem do método de Newton é que o cálculo direto da matriz jacobiana (\mathbf{J}) é computacionalmente caro. Este fato motivou o desenvolvimento do método quasi-Newton.

O método Broyden ou quasi-Newton, foi elaborado para resolução de sistemas não-lineares da forma $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, onde $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Consiste basicamente em gerar uma sequência $\{\mathbf{x}_n\}$ com boas garantias de convergência, sem no entanto se avaliar a matriz Jacobiana a cada iteração como é necessário no método de Newton. Visto que, a Jacobiana nem sempre é uma operação fácil de se calcular, a ideia subjacente ao método Broyden é aproximar a jacobiana apenas na primeira iteração e realizar uma actualização nas outras iterações.

7.1 Fórmula iterativa

Vamos procurar mostrar por construção a fórmula iterativa do método de Broyden.

Inicialmente vamos considerar o modelo linear, aproximação a $\mathbf{F}(\mathbf{x})$,

$$\mathbf{l}_{n+1}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) + \mathbf{B}_{n+1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{n+1}) \quad (7.1)$$

em que $\mathbf{l}_{n+1}(\mathbf{x}) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\mathbf{B}_{n+1} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{x}, \mathbf{x}_{n+1} \in \mathbb{R}^n$ que satisfaz

$\mathbf{l}_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1})$ para qualquer matriz \mathbf{B}_{n+1} .

onde $\mathbf{J}(\mathbf{x}_n) \approx \mathbf{B}_n$ e $\mathbf{J}(\mathbf{x}_{n+1}) \approx \mathbf{B}_{n+1}$.

No método de Broyden a ideia é utilizar apenas uma aproximação da matriz jacobiana $\mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$ por outra matriz \mathbf{B}_0 , isto é, na primeira iteração e as outras devem ser atualizadas em cada iteração, de modo que

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{B}_n^{-1} \mathbf{F}_n.$$

Seja

$$\mathbf{B}_n \mathbf{S}_n = -\mathbf{F}_n. \quad (7.2)$$

A matriz \mathbf{B}_{n+1} deve ser tal que $\mathbf{l}_{n+1}(\mathbf{x}_n) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$, por isso, Broyden propôs que \mathbf{B}_{n+1} fosse dada por

$$\mathbf{B}_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) \Leftrightarrow \mathbf{B}_{n+1} = \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_n)}{\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n}. \quad (7.3)$$

esta expressão também é conhecida como equação da secante,

onde a expressão, $\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n = \mathbf{S}_n$ é conhecida como o deslocamento efetuado e $\mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) = \Delta \mathbf{F}_n$ é conhecida como a variação no resultado depois de efetuado aquele deslocamento. Assim a expressão (7.3) fica,

$$\mathbf{B}_{n+1}\mathbf{S}_n = \Delta\mathbf{F}_n. \quad (7.4)$$

A equação (7.4) não especifica um valor único para \mathbf{B}_{n+1} . Apenas n elementos desta matriz podem ser determinados em função dos restantes $n(n-1)$. Estes podem tomar quaisquer valores. Assim, para $\mathbf{S}_n \neq \mathbf{0}$, existe um subespaço linear de dimensão $n(n-1)$ de matrizes que satisfazem (7.4). Para selecionar uma delas, exige-se que a matriz satisfaça outra condição. Vamos tentar minimizar a variação que surge no modelo linear quando passamos do ponto \mathbf{x}_n para \mathbf{x}_{n+1} , onde a matriz \mathbf{B}_n será modificada para \mathbf{B}_{n+1} . Se \mathbf{B}_{n+1} for uma aproximação de $\mathbf{J}(\mathbf{x}_{n+1})$ sujeita a (7.4). Para qualquer $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, a diferença entre o modelo (7.1) e o modelo $\mathbf{l}_n(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) + \mathbf{B}_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n)$ é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_{n+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{l}_n(\mathbf{x}) &= \mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) + \mathbf{B}_{n+1}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) - \mathbf{B}_n(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \\ &= \mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) - \mathbf{B}_{n+1}(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) + (\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \\ &= (\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n). \end{aligned}$$

Se o vector $\mathbf{x} - \mathbf{x}_n$ for expresso como $\alpha(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) + \mathbf{p}$ em que \mathbf{p} é ortogonal a \mathbf{S}_n , $\mathbf{p}^T\mathbf{S}_n = \mathbf{0}$, tem-se

$$\mathbf{l}_{n+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{l}_n(\mathbf{x}) = \alpha(\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n)(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) + (\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n)\mathbf{p}.$$

Para reduzir $\mathbf{l}_{n+1}(\mathbf{x}) - \mathbf{l}_n(\mathbf{x})$ e como o primeiro termo do segundo membro, de acordo a condição (7.4), é igual a

$$\alpha(\Delta\mathbf{F}_n - \mathbf{B}_n\mathbf{S}_n) \neq 0,$$

só nos resta tentar anular o segundo termo do segundo membro. Assim \mathbf{B}_{n+1} deve ser escolhida de tal forma que

$$(\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n)\mathbf{p} = \mathbf{0}, \quad \forall \mathbf{p} \in \{\mathbf{S}_n\}^\perp \quad (7.5)$$

A diferença $\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n$ deve ser uma matriz de característica igual a um com a forma $\mathbf{u}_n\mathbf{S}_n^T$, $\mathbf{u}_n \in \mathbb{R}^n$, isto é, uma matriz cujas as linhas são vetores múltiplos do vector \mathbf{S}_n ,

Assim sendo, tem-se

$$\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{B}_n = \mathbf{u}_n\mathbf{S}_n^T, \text{ ou seja,}$$

$$\mathbf{B}_{n+1} = \mathbf{B}_n + \mathbf{u}_n\mathbf{S}_n^T \quad (7.6)$$

Sabendo que, $\mathbf{B}_{n+1}\mathbf{S}_n = \Delta\mathbf{F}_n$, assim vem

$$(\mathbf{B}_n + \mathbf{u}_n\mathbf{S}_n^T)\mathbf{S}_n = \Delta\mathbf{F}_n, \quad (7.7)$$

a partir desta expressão pode-se determinar \mathbf{u}_n por:

$$\mathbf{u}_n = \frac{\Delta\mathbf{F}_n - \mathbf{B}_n\mathbf{S}_n}{\mathbf{S}_n^T\mathbf{S}_n}, \text{ substituindo em (7.6) obtem-se} \quad (7.8)$$

$$\mathbf{B}_{n+1} = \mathbf{B}_n + \frac{(\Delta \mathbf{F}_n - \mathbf{B}_n \mathbf{S}_n) \mathbf{S}_n^T}{\mathbf{S}_n^T \mathbf{S}_n}. \quad (7.9)$$

Esta fórmula é conhecida como a fórmula de actualização de Broyden. O termo actualização usa-se porque a matriz \mathbf{B}_{n+1} , é uma aproximação de $\mathbf{J}(\mathbf{x}_{n+1})$, surge a partir da actualização da matriz \mathbf{B}_n (aproximação de $\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)$).

7.2 Convergência

Vamos analisar a convergência local do método de Broyden. Veremos que, se a aproximação inicial \mathbf{x}_0 , estiver suficientemente perto da solução \mathbf{x}^* e se \mathbf{B}_0 também estiver perto de $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)$, com $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)$ uma matriz não singular, então a sequência $\{\mathbf{x}_n\}$, converge superlinearmente para \mathbf{x}^* . Considere o seguinte lema,

Lema 2 ([dGF98]). *Seja $D \subseteq \mathbb{R}^n$ um conjunto aberto e convexo que contém \mathbf{x}_n e \mathbf{x}_{n+1} , com $\mathbf{x}_n \neq \mathbf{x}_{n+1}$. Sejam ainda $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, a matriz $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ Lipschitz contínua no conjunto D , com a constante \mathbf{L} , $\mathbf{B}_n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definida por (7.9). Então, para norma 2 de matrizes, tem-se*

$$\|\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{J}(\mathbf{x}_{n+1})\| \leq \|\mathbf{B}_n - \mathbf{J}(\mathbf{x}_n)\| + \frac{3\mathbf{L}}{2} \|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\| \quad (7.10)$$

Além disso, se $\mathbf{x}^* \in D$ e $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ verifica a condição de Lipschitz mais fraca

$$\|\mathbf{J}(\mathbf{x}_n) - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \leq \mathbf{L} \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}^*\|. \quad (7.11)$$

Então

$$\|\mathbf{B}_{n+1} - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| \leq \|\mathbf{B}_n - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\| + \frac{\mathbf{L}}{2} (\|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}^*\|_2 + \|\mathbf{x}_n - \mathbf{x}^*\|_2). \quad (7.12)$$

Teorema 14 ([dGF98]). *Seja $\mathbf{F} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, uma função continuamente diferenciável num conjunto aberto e convexo $D \subseteq \mathbb{R}^n$. Suponha que existem $\mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^n$, e $r, \beta > 0$, tais que $V(\mathbf{x}^*, r) \subset D$, $\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$, a matriz $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}$ existe, $\|\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)^{-1}\| \leq \beta$ e $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ é Lipschitz contínua no conjunto $V(\mathbf{x}^*, r)$, com constante L . Então existem constantes positivas ε e δ tais que se*

$$\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_2 \leq \varepsilon$$

$$\|\mathbf{B}_0 - \mathbf{J}(\mathbf{x}^*)\|_2 \leq \delta,$$

a sequência $\{\mathbf{x}_n\}$, gerada pelo método de Broyden converge superlinearmente para \mathbf{x}^* .

Se \mathbf{B}_n , apenas verifica a propriedade (7.12), então a sequência $\{\mathbf{x}_n\}$ converge pelo menos linearmente para \mathbf{x}^* .

A demonstração destes resultados pode ser consultado em [dGF98] ou [FNZ17].

7.3 Algoritmo

Dados $\mathbf{F}(\mathbf{x})$, \mathbf{x}_0 , ε , faça:

Passo 1: Tome $\mathbf{n} = 0$;

Passo 2: Calcule $\mathbf{B}_0 \approx \mathbf{J}(\mathbf{x}_0)$;

Passo 3: Obtenha \mathbf{S}_n , resolvendo o sistema linear: $\mathbf{B}_n \mathbf{S}_n = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$;

Passo 4: Determine $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{S}_n + \mathbf{x}_n$, a partir do \mathbf{x}_{n+1} calcule $\mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1})$;

Passo 5: Aplique o critério de paragem $\|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\| < \varepsilon$, se for verdadeira faça $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_{n+1}$ e pare; caso contrário continue:

Passo 6: Calcule $\Delta \mathbf{F}_n = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$;

Passo 7: Atualize $\mathbf{B}_{n+1} = \mathbf{B}_n + \frac{(\Delta \mathbf{F}_n - \mathbf{B}_n \mathbf{S}_n) \mathbf{S}_n^T}{\mathbf{S}_n^T \mathbf{S}_n}$,

Passo 8: $\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$; volte ao passo 3.

Na figura 7.1 está um exemplo de um fluxograma do método de Broyden.

7.4 Exemplo

Aplicar o método de Broyden ou quase-Newton à resolução do sistema de equações não-lineares, neste caso o segundo problema, $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, com uma tolerância de $\varepsilon = 10^{-4}$, onde $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ é dado por:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{cases} x^2 - y - 1 = 0 \\ xy - 1 = 0 \end{cases} \quad \mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Resolução: As condições de convergência são quase idêntica às do método de Newton.

Passo 1: Começamos $\mathbf{n} = 0$

Passo 2:

$$\mathbf{B}_0 = \mathbf{J}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} 2x & -1 \\ y & x \end{bmatrix}_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} = \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Passo 3: $\mathbf{B}_0 \mathbf{S}_0 = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_0)$

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Usando a regra de Cramer, obtemos

$$|\mathbf{B}_0| = \begin{vmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 8 + 1 = 9,$$

$$\mathbf{S}_0 = \begin{bmatrix} -0.555555556 \\ -0.222222222 \end{bmatrix}.$$

Passo 4: $\mathbf{x}_1 = \mathbf{S}_0 + \mathbf{x}_0$

$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} -0.555555556 \\ -0.222222222 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.444444444 \\ 0.777777778 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_1) = \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix}.$$

Passo 5: $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\infty = \|\mathbf{S}_0\|_\infty = \max(|-0.555555556|, |-0.222222222|) = 0.555555556 > 10^{-4}$,

Passo 6:

$$\Delta \mathbf{F}_0 = \mathbf{F}(\mathbf{x}_1) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.691358026 \\ -0.876543210 \end{bmatrix}.$$

Passo 7: $\mathbf{B}_1 = \mathbf{B}_0 + \frac{(\Delta \mathbf{F}_0 - \mathbf{B}_0 \mathbf{S}_0) \mathbf{S}_0^T}{\mathbf{S}_0^T \mathbf{S}_0}$

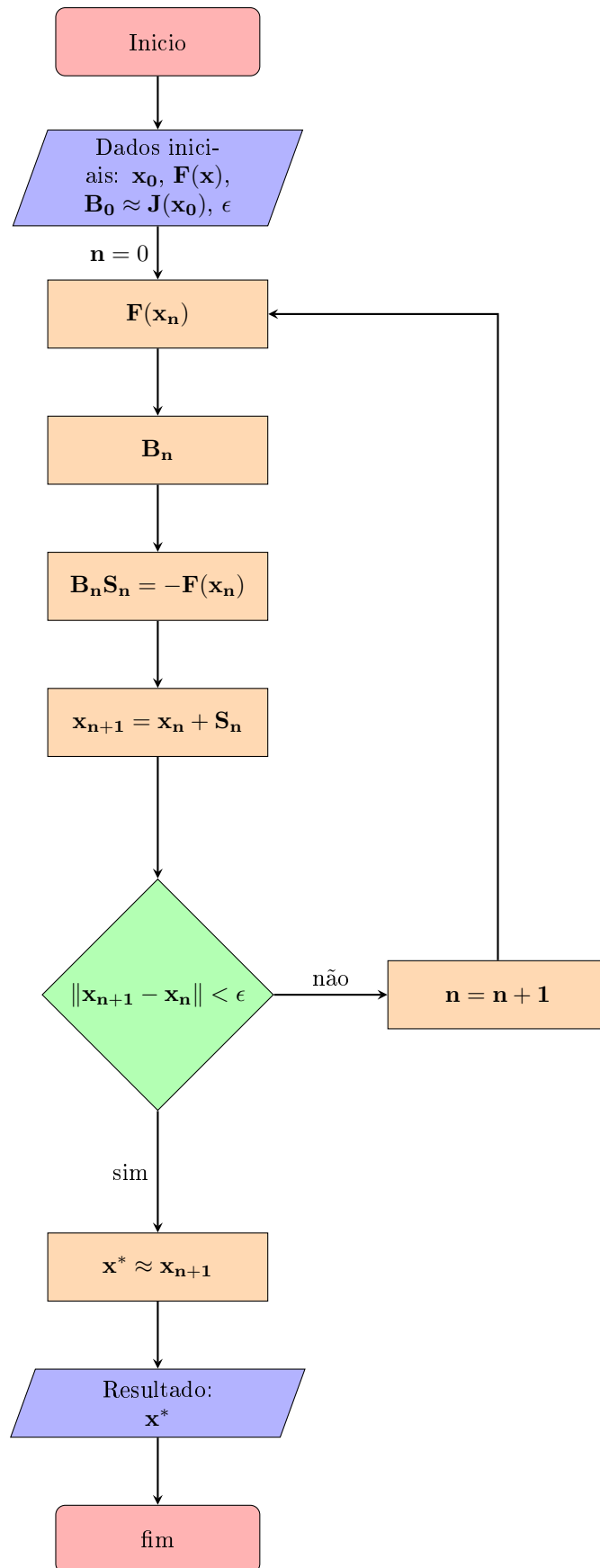


Figura 7.1: Exemplo de um fluxograma do método de Broyden

$$\mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} + \frac{\left(\begin{bmatrix} -1.691358026 \\ -0.876543210 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -2.000000002 \\ -0.777777778 \end{bmatrix} \right) \times \begin{bmatrix} -0.555555556 & -0.222222222 \end{bmatrix}}{0.358024692}$$

$$= \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0.171467765 & -0.068587106 \\ 0.054869684 & 0.021947874 \end{bmatrix} \times \frac{1}{0.358024692} =$$

$$\mathbf{B}_1 = \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0.478927205 & -0.191570882 \\ 0.153256703 & 0.061302682 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.521072795 & -1.191570882 \\ 1.153256703 & 2.061302682 \end{bmatrix}.$$

Passo 8: $\mathbf{n} = \mathbf{1}$

Passo 3: $\mathbf{B}_1 \mathbf{S}_1 = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_1)$

$$\begin{bmatrix} 3.521072795 & -1.191570882 \\ 1.153256703 & 2.061302682 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix} \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} 3.521072795 & -1.191570882 \\ 1.153256703 & 2.061302682 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.308641974 \\ -0.123456790 \end{bmatrix}.$$

Usando a regra de Cramer, obtemos

$$|\mathbf{B}_1| = \begin{vmatrix} 3.521072795 & -1.191570882 \\ 1.153256703 & 2.061302682 \end{vmatrix} = 8.632183903,$$

$$\mathbf{S}_1 = \begin{bmatrix} -0.090743206 \\ -0.009123638 \end{bmatrix}.$$

Passo 4: $\mathbf{x}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{x}_1$

$$\mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} -0.090743206 \\ -0.009123638 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1.444444444 \\ 0.777777778 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.353701238 \\ 0.768654140 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_2) = \begin{bmatrix} 0.063852902 \\ 0.040528061 \end{bmatrix}.$$

Passo 5: $\|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1\|_\infty = \|\mathbf{S}_1\|_\infty = \max(|-0.090743206|, |-0.009123638|) = 0.090743206 > 10^{-4}$,

Passo 6:

$$\Delta \mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{x}_2) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_1) = \begin{bmatrix} 0.063852902 \\ 0.040528061 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.244789072 \\ 0.768654140 \end{bmatrix}.$$

Passo 7: $\mathbf{B}_2 = \mathbf{B}_1 + \frac{(\Delta \mathbf{F}_1 - \mathbf{B}_1 \mathbf{S}_1) \mathbf{S}_1^T}{\mathbf{S}_1^T \mathbf{S}_1}$

$$\mathbf{B}_2 = \mathbf{B}_1 + \frac{\left(\begin{bmatrix} -0.244789072 \\ 0.768654140 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.308641973 \\ -0.123456790 \end{bmatrix} \right) \times \begin{bmatrix} -0.090743206 & -0.009123638 \end{bmatrix}}{0.008317570}$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

$$\mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} 3.521072795 & -1.191570882 \\ 1.153256703 & 2.061302682 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0.005794217 & -0.000582571 \\ -0.003677646 & -0.000369763 \end{bmatrix} \times \frac{1}{0.008317570}$$

$$\mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} 3.521072795 & -1.191570882 \\ 1.153256703 & 2.061302682 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0.696623763 & -0.070040980 \\ -0.442153921 & -0.044455695 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{B}_2 = \begin{bmatrix} 2.824449032 & -1.261611861 \\ 0.711102782 & 2.016846987 \end{bmatrix}.$$

Passo 8: $\mathbf{n} = 2$

A tabela 7.1, ilustra aplicação do método

n	\mathbf{x}_n	\mathbf{F}_n	$\ \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}\ _\infty$
0	(2 ; 1)	(2; 1)	
1	(1.444444444 ; 0.777777778)	(0.308641974 ; 0.123456790)	0.555555556 > 10^{-4}
2	(1.353701238 ; 0.768654140)	(0.063852902 ; 0.040528061)	0.090743206 > 10^{-4}
3	(1.326415424 ; 0.758179849)	(0.001198028 ; 0.005661446)	0.027285814 > 10^{-4}
4	(1.326050553 ; 0.755801870)	(0.002608199 ; 0.002231488)	0.002377979 > 10^{-4}
5	(1.325250412 ; 0.754713354)	(0.001575301 ; 0.000184183)	0.001088516 > 10^{-4}
6	(1.324945242 ; 0.754807175)	(0.000673522 ; 0.000078404)	0.000305170 > 10^{-4}
7	(1.324718238 ; 0.754877543)	(0.000000867 ; 0.000000049)	0.000227004 > 10^{-4}
8	(1.324717966 ; 0.754877663)	(0.000000026 ; 0.000000002)	0.000000272 < 10^{-4}

Tabela 7.1: Resultado das iterações pelo método de Broyden

Como $\|\mathbf{x}_8 - \mathbf{x}_7\|_\infty = 0.000000272 < 10^{-4}$, assim consideramos

$$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}_8 = \begin{bmatrix} 1.324717966 \\ 0.754877663 \end{bmatrix}, \text{ é a estimativa da solução do sistema dado.}$$

7.5 Método de Broyden com a fórmula de Sherman-Morrison

O método de Broyden gera a sucessão $\{\mathbf{x}_n\}$, como foi estudado no capítulo anterior. Computacionalmente o cálculo de (7.2) não é muito prático, no entanto, tendo em atenção que a modificação de Broyden consiste numa matriz de característica unitária, é possível recorrer à fórmula de Sherman-Morrison, para obter diretamente a inversa de \mathbf{B}_{n+1} a partir de \mathbf{B}_n [Pin10]. Invocando esta fórmula, pondo $\mathbf{H}_n = \mathbf{B}_n^{-1}$ e com base em (7.9), chega-se à expressão

$$\mathbf{H}_{n+1} = \mathbf{H}_n + \frac{(\mathbf{S}_n - \mathbf{H}_n \Delta \mathbf{F}_n) \mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n}{\mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n \Delta \mathbf{F}_n}, \quad (7.13)$$

válida desde que $\mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n \Delta \mathbf{F}_n \neq 0$. Evita-se deste modo a condensação ou fatorização da matriz \mathbf{B}_n em cada iteração.

7.6 Algoritmo

Dados $\mathbf{F}(\mathbf{x})$, \mathbf{x}_0 , ε , faça:

Passo 1: $\mathbf{n} = 0$;

Passo 2: Calcule $\mathbf{B}_n \approx \mathbf{J}(\mathbf{x}_n)$;

Passo 3: Faça $\mathbf{H}_n = \mathbf{B}_n^{-1}$; e obtenha $\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$

Passo 4: Obtenha \mathbf{S}_n , fazendo a seguinte multiplicação de matrizes: $\mathbf{S}_n = -\mathbf{H}_n \mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$;

Passo 5: Determine $\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{S}_n + \mathbf{x}_n$, a partir do \mathbf{x}_{n+1} calcule $\mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1})$;

Passo 6: Aplique o critério de paragem $\|\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\| < \varepsilon$, se for verdadeira faça $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}_{n+1}$ e pare; caso contrário continue;

Passo 7: Calcule $\Delta \mathbf{F}_n = \mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1}) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$;

Passo 8: Actualize $\mathbf{H}_{n+1} = \mathbf{H}_n + \frac{(\mathbf{S}_n - \mathbf{H}_n \Delta \mathbf{F}_n) \mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n}{\mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n \Delta \mathbf{F}_n}$,

Passo 9: $\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$; volte ao passo 4.

Na figura 7.2 está um exemplo de um fluxograma do método de Broyden/Sherman-Morrison.

7.7 Exemplo

Considere o exemplo da Secção 7.4, resolve aplicando o método de Broyden na versão de Sherman-Morrison,

Passo 1: Começemos $\mathbf{n} = 0$

Passo 2:

$$\mathbf{B}_0 \approx \mathbf{J}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} 2x & -1 \\ y & x \end{bmatrix}_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0} = \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Passo 3: Calculando a matriz inversa de \mathbf{B}_0 , tem-se

$$\mathbf{H}_0 = \mathbf{B}_0^{-1} = \begin{bmatrix} 0.22222222 & 0.11111111 \\ -0.11111111 & 0.44444444 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Passo 4: $\mathbf{S}_0 = -\mathbf{H}_0 \mathbf{F}(\mathbf{x}_0)$

$$\mathbf{S}_0 = \begin{bmatrix} 0.22222222 & 0.11111111 \\ -0.11111111 & 0.44444444 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -2 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.55555556 \\ -0.22222222 \end{bmatrix}.$$

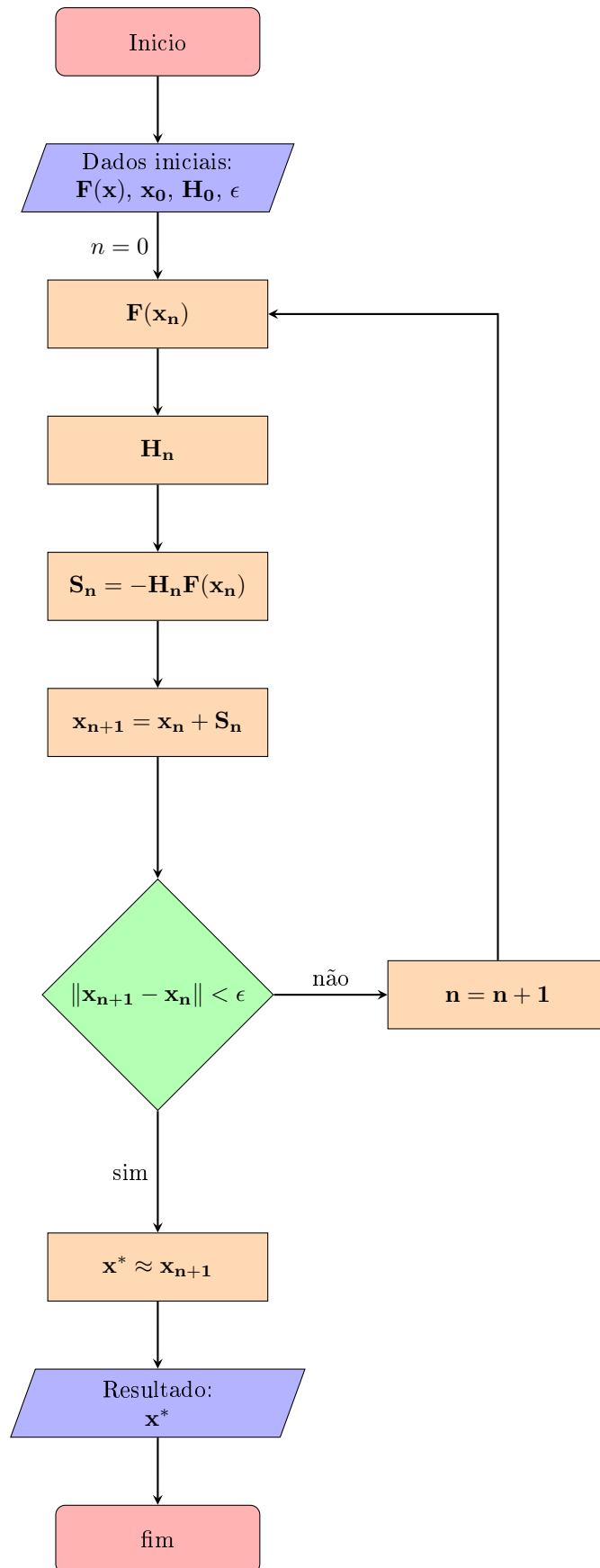


Figura 7.2: Exemplo de um fluxograma do método de Broyden/Sherman-Morrison em \mathbb{R}^n

$$\mathbf{S}_0 = \begin{bmatrix} -0.555555556 \\ -0.222222222 \end{bmatrix}.$$

Passo 5: $\mathbf{x}_1 = \mathbf{S}_0 + \mathbf{x}_0$

$$\mathbf{x}_1 = \begin{bmatrix} -0.555555556 \\ -0.222222222 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.444444444 \\ 0.777777778 \end{bmatrix}.$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_1) = \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix}.$$

Passo 6: $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\infty = \|\mathbf{S}_0\|_\infty = \max(|-0.555555556|, |-0.222222222|) = 0.555555556 > 10^{-4}$.

Passo 7: $\Delta\mathbf{F}_0 = \mathbf{F}(\mathbf{x}_1) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_0)$

$$\Delta\mathbf{F}_0 = \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.691358026 \\ -0.876543210 \end{bmatrix}.$$

Passo 8: $\mathbf{H}_{n+1} = \mathbf{H}_n + \frac{(\mathbf{S}_n - \mathbf{H}_n \Delta\mathbf{F}_n) \mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n}{\mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n \Delta\mathbf{F}_n}$

$$\mathbf{H}_1 = \begin{bmatrix} 0.222222222 & 0.111111111 \\ -0.111111111 & 0.444444444 \end{bmatrix} +$$

$$\frac{\left(\begin{bmatrix} -0.555555556 \\ -0.222222222 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.473251029 \\ -0.201646090 \end{bmatrix} \right) \times \begin{bmatrix} -0.098765432 & -0.160493827 \end{bmatrix}}{0.307727481}$$

$$\mathbf{H}_1 = \begin{bmatrix} 0.222222222 & 0.111111111 \\ -0.111111111 & 0.444444444 \end{bmatrix} + \frac{\left(\begin{bmatrix} -0.082304526 \\ -0.020576132 \end{bmatrix} \right) \times \begin{bmatrix} -0.098765432 & -0.160493827 \end{bmatrix}}{0.307727481}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.222222222 & 0.111111111 \\ -0.111111111 & 0.444444444 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.008128842 & 0.013209368 \\ 0.002032211 & 0.003302342 \end{bmatrix} \times \frac{1}{0.307727481}$$

$$\mathbf{H}_1 = \begin{bmatrix} 0.222222222 & 0.111111111 \\ -0.111111111 & 0.444444444 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.026415717 & 0.042925540 \\ 0.006603929 & 0.010731385 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0.248637939 & 0.154036652 \\ -0.104507182 & 0.455175830 \end{bmatrix}.$$

Passo 9: $\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$; volte ao **passo 4** e siga os mesmos passos.

Passo 4: $\mathbf{S}_1 = -\mathbf{H}_1 \mathbf{F}(\mathbf{x}_1)$

$$\mathbf{S}_1 = \begin{bmatrix} 0.248637939 & 0.154036652 \\ -0.104507182 & 0.455175830 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -0.308641974 \\ -0.123456790 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.095756975 \\ -0.023939244 \end{bmatrix}.$$

Passo 5: $\mathbf{x}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{x}_1$

$$\mathbf{x}_2 = \begin{bmatrix} -0.095756975 \\ -0.023939244 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.348687469 \\ 0.753838534 \end{bmatrix}.$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_2) = \begin{bmatrix} 0.065119355 \\ 0.016692585 \end{bmatrix}.$$

Passo 6: $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\infty = \|\mathbf{S}_0\|_\infty = \max(|-0.095756975|, |-0.023939244|) = 0.095756975 > 10^{-4}$.

Passo 7: $\Delta\mathbf{F}_1 = \mathbf{F}(\mathbf{x}_2) - \mathbf{F}(\mathbf{x}_1)$

$$\Delta\mathbf{F}_1 = \begin{bmatrix} 0.065119355 \\ 0.016692585 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0.308641974 \\ 0.123456790 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.243522619 \\ -0.106764205 \end{bmatrix}.$$

Passo 8: $\mathbf{H}_{n+1} = \mathbf{H}_n + \frac{(\mathbf{S}_n - \mathbf{H}_n \Delta\mathbf{F}_n) \mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n}{\mathbf{S}_n^T \mathbf{H}_n \Delta\mathbf{F}_n}$

$$\mathbf{H}_2 = \begin{bmatrix} 0.248637939 & 0.154036652 \\ -0.104507182 & 0.455175830 \end{bmatrix} + \frac{\begin{bmatrix} -0.018762412 \\ -0.000792621 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} -0.021306994 & -0.025646649 \end{bmatrix}}{0.007926879}$$

$$\mathbf{H}_2 = \begin{bmatrix} 0.248637939 & 0.154036652 \\ -0.104507182 & 0.455175830 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.000399771 & 0.000481193 \\ -0.000016888 & 0.000020328 \end{bmatrix} \times \frac{1}{0.007926879}$$

$$\mathbf{H}_2 = \begin{bmatrix} 0.248637939 & 0.154036652 \\ -0.104507182 & 0.455175830 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.050432283 & 0.060703967 \\ 0.002130519 & 0.002564448 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{H}_2 = \begin{bmatrix} 0.248238169 & 0.153555459 \\ -0.104524070 & 0.455155502 \end{bmatrix}.$$

Passo 9: $\mathbf{n} = \mathbf{n} + 1$; volte ao **passo 4** e siga os mesmos passos.

A tabela 7.2 está aplicação do método.

n	\mathbf{x}_n	$\ \mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1}\ _\infty$
0	(2 ; 1)	
1	(1.44444444 ; 0.77777778)	$0.5983516 > 10^{-4}$
2	(1.34868747 ; 0.75383853)	$0.09870403 > 10^{-4}$
3	(1.32562763 ; 0.75286437)	$0.02308040 > 10^{-4}$
4	(1.32469626 ; 0.75427597)	$0.00169118 > 10^{-4}$
5	(1.32471280 ; 0.75481284)	$0.00053713 > 10^{-4}$
6	(1.32471792 ; 0.75487713)	$0.0000645 < 10^{-4}$

Tabela 7.2: Resultado das iterações pelo método de quase-Newton Sherman-Morrison

Como $\|\mathbf{x}_6 - \mathbf{x}_5\|_\infty = 0.0000645 < 10^{-4}$, assim consideramos

$$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}_6 = \begin{bmatrix} 1.32471792 \\ 0.75487713 \end{bmatrix}, \text{ é a estimativa da solução do sistema dado.}$$

Na figura 7.3 está a representação do exemplo, aplicando o método de Broyden/Sherman-Morrison.

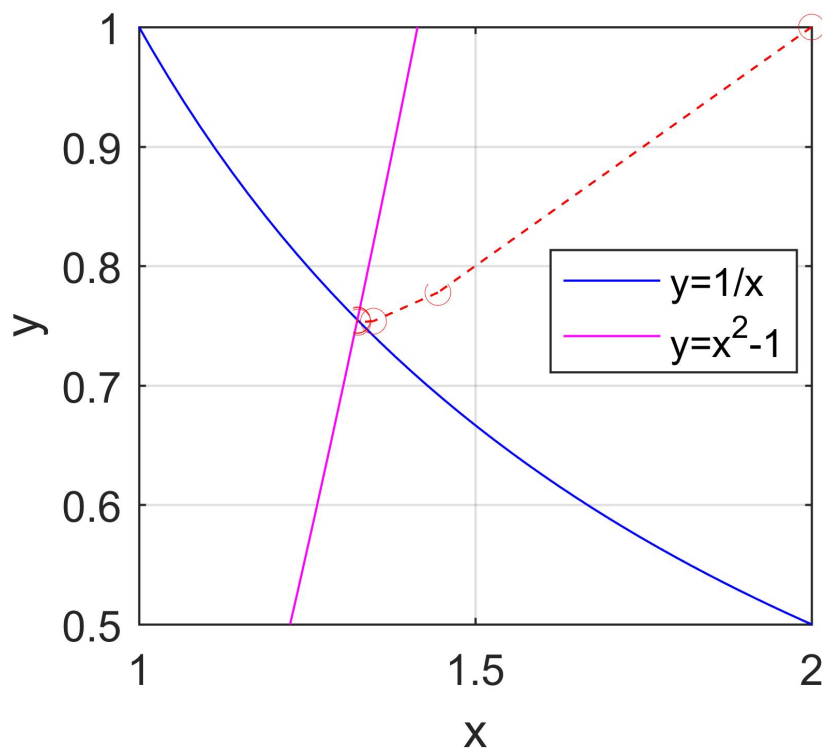


Figura 7.3: Representação gráfica das iterações do método de Broyden/Sherman-Morrison

7.8 Considerações finais

Os métodos que tratamos nesta pesquisa, não são os únicos que podem ser usados para a resolução de equações não lineares. Existem inúmeros algoritmos iterativos para se encontrar a solução dos mesmos, além dos métodos tratados podemos referir por exemplo o método espectral, método de tensor. É importante ainda fazer referência de alguns artigos recentes dedicados ao estudo de resolução de sistemas de equações não lineares. Visto que os sistemas não-lineares são também usados em casos de otimização de sistemas, Zhang et al.[ZDC99], propuseram uma nova equação quase-Newton, utilizando uma interpolação quadrática para o gradiente da função objectivo. Apresentaram ainda em [ZX01] uma classe de equações modificadas quase-Newton com um parâmetro vectorial que utiliza as informações disponíveis do gradiente e da função. Wei et al. [WLQ06] propuseram uma classe de novas equações quase-Newton usando a fórmula de terceira ordem de Taylor da função objetivo. De acordo com o trabalho de Wei et al., Biglari et al. [BHL11] propuseram um novo método quase-Newton usando um modelo tensor de quarta ordem.

No entanto o método de Broyden ainda continua em estudo, como podemos constatar pelo recente artigo, lançado em 2017 pelos chineses Xiaowei Fang, Ni Qin e Meilan Zeng em [FNZ17]. Os autores apresentam um método baseado em uma nova equação quase-Newton que explora informações adicionais assumindo uma relação entre as informações das três últimas iterações. Com pressupostos leves, obtêm a convergência local superlinear deste método. Os experimentos numéricos feitos pelos autores mostram que o método proposto é promissor.

Capítulo 8

Exemplo de Aplicação

Consideremos o problema referenciado no Cap.4 (primeiro problema)

com os seguintes dados

$$\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\},$$

$$x_0 = 5.0,$$

$k = 0.125$ litros/(moles min) e a taxa de alimentação é $f = 25$ litros/min.

$V = ?$. Sabendo que $V = \frac{fx_5}{k}$,

tem-se o sistema

$$\begin{cases} x_5x_1^2 + x_1 - 5 = 0 \\ x_5x_2^2 + x_2 - x_1 = 0 \\ x_5x_3^2 + x_3 - x_2 = 0 \\ x_5x_4^2 + x_4 - x_3 = 0 \\ 0.25x_5 + 0.5 - x_4 = 0 \end{cases}$$

ou seja

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_5x_1^2 + x_1 - 5 \\ x_5x_2^2 + x_2 - x_1 \\ x_5x_3^2 + x_3 - x_2 \\ x_5x_4^2 + x_4 - x_3 \\ 0.25x_5 + 0.5 - x_4 \end{bmatrix}.$$

8.1 Método do ponto fixo

Dado o sistema de equações não-lineares, resolva-o aplicando o método do ponto fixo. Com uma tolerância de $\varepsilon = 10^{-8}$, e uma aproximação inicial de

$$\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Vamos lembrar que este problema é complexo, sendo um sistema de \mathbb{R}^5 , a sua representação gráfica não será possível, a determinação do domínio D não será explicitamente definido e a determinação da função $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ é complicada e trabalhosa. Pela forma que nos é dado o sistema, isolando diretamente as variáveis o método do ponto fixo não converge. Só será possível caso se efetue algumas transformações equivalentes no sentido de se encontrar a função $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ que garante a convergência do método.

A função $\mathbf{G}(\mathbf{x})$ foi encontrada pela fórmula $\mathbf{x}_n + p\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)$ com $p = 0.3$, ou seja

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

$$\begin{cases} x_1 = x_1 + 0.3(x_5x_1^2 + x_1 - 0.5) \\ x_2 = x_2 + 0.3(x_5x_2^2 + x_2 - x_1) \\ x_3 = x_3 + 0.3(x_5x_3^2 + x_3 - x_2) \\ x_4 = x_4 + 0.3(x_5x_4^2 + x_4 - x_3) \\ x_5 = x_5 + 0.3(0.25x_5 + 0.5 - x_4) \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} g_1 = x_1 + 0.3(x_5x_1^2 + x_1 - 0.5) \\ g_2 = x_2 + 0.3(x_5x_2^2 + x_2 - x_1) \\ g_3 = x_3 + 0.3(x_5x_3^2 + x_3 - x_2) \\ g_4 = x_4 + 0.3(x_5x_4^2 + x_4 - x_3) \\ g_5 = x_5 + 0.3(0.25x_5 + 0.5 - x_4) \end{cases}$$

Na tabela 8.1 está um resumo das iterações do método do ponto fixo.

n	\mathbf{x}_n	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\ \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\ $
0	\mathbf{x}_0	4.00000000	3.00000000	2.00000000	1.00000000	1.00000000	-
1	\mathbf{x}_1	-0.50000000	0.60000000	1.10000000	1.00000000	1.07500000	$1.74475078 > 10^{-8}$
2	\mathbf{x}_2	1.06937500	0.15390000	0.55977500	0.70750000	1.14437500	$0.88861034 > 10^{-8}$
3	\mathbf{x}_3	1.85596307	0.42041107	0.33043620	0.49133528	1.12079688	$0.45650866 > 10^{-8}$
4	\mathbf{x}_4	1.64096544	0.79164794	0.32071536	0.36189396	1.03413769	$0.24951999 > 10^{-8}$
5	\mathbf{x}_5	1.81326807	0.85201296	0.43008423	0.30890894	0.91514556	$0.18026226 > 10^{-8}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
169	\mathbf{x}_{169}	2.22616545	1.29194116	0.86913555	0.63992831	0.55971335	$2.749 \times 10^{-8} > 10^{-8}$
170	\mathbf{x}_{170}	2.22616547	1.29194117	0.86913556	0.63992831	0.55971334	$2.469 \times 10^{-8} > 10^{-8}$
171	\mathbf{x}_{171}	2.22616548	1.29194119	0.86913558	0.63992832	0.55971333	$2.039 \times 10^{-8} > 10^{-8}$
172	\mathbf{x}_{172}	2.22616549	1.29194120	0.86913556	0.63992833	0.55971333	$1.535 \times 10^{-8} > 10^{-8}$
173	\mathbf{x}_{173}	2.22616550	1.29194121	0.86913559	0.63992833	0.55971333	$1.048 \times 10^{-8} > 10^{-8}$
174	\mathbf{x}_{174}	2.22616550	1.29194121	0.86913560	0.63992834	0.55971333	$7.054 \times 10^{-9} < 10^{-8}$

Tabela 8.1: Aplicação do método do ponto fixo

Número de iterações: 174.

$$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}_{174} = \begin{bmatrix} 2.22616550 \\ 1.29194121 \\ 0.86913560 \\ 0.63992834 \\ 0.55971333 \end{bmatrix}, \text{ é a estimativa da solução do sistema dado.}$$

Como podemos ver o método convergiu lentamente.

8.2 Método de Newton

Consideremos o mesmo problema, aplicando o método de Newton-Raphson. Com uma tolerância de $\varepsilon = 10^{-8}$, e uma aproximação inicial de

$$\mathbf{x}_0 = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 2 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$\begin{cases} x_5x_1^2 + x_1 - 5 = 0 \\ x_5x_2^2 + x_2 - x_1 = 0 \\ x_5x_3^2 + x_3 - x_2 = 0 \\ x_5x_4^2 + x_4 - x_3 = 0 \\ 0.25x_5 + 0.5 - x_4 = 0 \end{cases}$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_5 x_1^2 + x_1 - 5 \\ x_5 x_2^2 + x_2 - x_1 \\ x_5 x_3^2 + x_3 - x_2 \\ x_5 x_4^2 + x_4 - x_3 \\ 0.25x_5 + 0.5 - x_4 \end{bmatrix},$$

Resolução:

Antes, vamos verificar as condições de convergência pelo teorema 13.

Facilmente podemos verificar que a função \mathbf{F} é continuamente diferenciável porque as suas derivadas parciais são contínuas em \mathbb{R} , no ponto $\mathbf{x}^* \in D$ e $\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = \mathbf{0}$. Logo, a matriz jacobiana $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)$ de \mathbf{F} em $\mathbf{x}^* \in D$ é contínua.

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 2x_5 x_1 + 1 & 0 & 0 & 0 & 5x_1^2 \\ -1 & 2x_5 x_2 + 1 & 0 & 0 & x_2^2 \\ 0 & -1 & 2x_5 x_3 + 1 & 0 & x_3^2 \\ 0 & 0 & -1 & 2x_5 x_4 + 1 & x_4^2 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0.25 \end{bmatrix}.$$

A tabela 8.2 mostra as iterações do método de Newton.

n	\mathbf{x}_n	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\ \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\ $
0	\mathbf{x}_0	4.00000000	3.00000000	2.00000000	1.00000000	1.00000000	–
1	\mathbf{x}_1	2.41183005	1.68703138	1.17272980	0.73896140	0.95584560	$1.58817000 > 10^{-8}$
2	\mathbf{x}_2	2.17213292	1.34639134	0.93946356	0.66903403	0.67613611	$0.34064000 > 10^{-8}$
3	\mathbf{x}_3	2.20961784	1.28733995	0.87185316	0.64201915	0.56807661	$0.10805950 > 10^{-8}$
4	\mathbf{x}_4	2.22603306	1.29185110	0.86911181	0.63992867	0.55971468	$0.01641522 > 10^{-8}$
5	\mathbf{x}_5	2.22616547	1.29194119	0.86913559	0.63992834	0.55971335	$0.00013241 > 10^{-8}$
6	\mathbf{x}_6	2.22616547	1.29194119	0.86913559	0.63992834	0.55971335	$0.00000000 < 10^{-8}$

Tabela 8.2: Aplicação do método de Newton

Número de iterações: 6.

$$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}_6 = \begin{bmatrix} 2.22616547 \\ 1.29194119 \\ 0.86913559 \\ 0.63992834 \\ 0.55971335 \end{bmatrix}, \text{ é a estimativa da solução do sistema dado.}$$

8.3 Método de Broyden/Sherman-Morrison

Consideremos o mesmo exemplo, encontremos a estimativa do sistema aplicando o método de Broyden/Sherman-Morrison.

A tabela 8.3 ilustra aplicação do método.

Número de iterações: 16.

$$\mathbf{x}^* \approx \mathbf{x}_{16} = \begin{bmatrix} 2.22616547 \\ 1.29194119 \\ 0.86913559 \\ 0.63992834 \\ 0.55971335 \end{bmatrix}, \text{ é a estimativa da solução do sistema dado.}$$

Resolução Numérica de Sistemas de Equações Não-Lineares

n	\mathbf{x}_n	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	$\ \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n\ $
0	\mathbf{x}_0	4.00000000	3.00000000	2.00000000	1.00000000	1.00000000	–
1	\mathbf{x}_1	2.41183005	1.68703138	1.17272980	0.73896140	0.95584560	$2.23621000 > 10^{-8}$
2	\mathbf{x}_2	2.26157457	1.50519066	1.05594255	0.70819978	0.83279913	$0.2921793 > 10^{-8}$
3	\mathbf{x}_3	2.16921607	1.34755704	0.94476481	0.67247741	0.68990965	$0.2596776 > 10^{-10}$
4	\mathbf{x}_4	2.17482298	1.30652336	0.90633573	0.65723294	0.62893177	$0.08451443 > 10^{-8}$
5	\mathbf{x}_5	2.19770369	1.29334009	0.88551266	0.64786221	0.59144883	$0.05122214 > 10^{-8}$
6	\mathbf{x}_6	2.21696883	1.29079255	0.87431470	0.64251528	0.57006112	$0.03144923 > 10^{-8}$
7	\mathbf{x}_7	2.22493198	1.29134521	0.87026540	0.64051751	0.56207002	$0.01216400 > 10^{-8}$
8	\mathbf{x}_8	2.22654537	1.29174416	0.86923983	0.64000150	0.56000598	$0.00288799 > 10^{-8}$
9	\mathbf{x}_9	2.22643253	1.29186687	0.86916341	0.63995419	0.55981677	$0.00026772 > 10^{-8}$
10	\mathbf{x}_{10}	2.22624231	1.29194269	0.86911007	0.63991824	0.55967295	$0.00025837 > 10^{-8}$
11	\mathbf{x}_{11}	2.22620372	1.29193343	0.86914078	0.63993279	0.55973117	$0.00007823 > 10^{-8}$
12	\mathbf{x}_{12}	2.22617127	1.29194181	0.86913421	0.63992790	0.55971158	$0.00003968 > 10^{-8}$
13	\mathbf{x}_{13}	2.22616596	1.29194151	0.86913517	0.63992814	0.55971258	$0.00000551 > 10^{-8}$
14	\mathbf{x}_{14}	2.22616554	1.29194123	0.86913553	0.63992831	0.55971324	$0.00000092 > 10^{-8}$
15	\mathbf{x}_{15}	2.22616547	1.29194119	0.86913559	0.63992834	0.55971335	$0.00000053 > 10^{-8}$
16	\mathbf{x}_{16}	2.22616547	1.29194119	0.86913559	0.63992834	0.55971335	$7.7 \times 10^{-10} < 10^{-8}$

Tabela 8.3: Aplicação do método de Broyden/Sherman-Morrison

Pela estimativa da solução do sistema por cada método, podemos efetuar o cálculo aproximado do volume:

$$V = \frac{fx_5}{k},$$

$$V = \frac{25 \times 0.55971333}{0.125} \approx 112. \quad \mathbf{R:} \text{ o volume de cada reactor é aproximadamente } 112 \text{ l.}$$

Capítulo 9

Conclusão

Nesta pesquisa, abordámos a "**resolução numérica de sistemas de equações não-lineares**", através dos métodos do ponto fixo, Newton-Raphson e de Broyden ou quase-Newton. Para melhor compreensão, procurámos mostrar as deduções das fórmulas iterativas e analisámos as condições de convergência de cada método, visto que estas nos permitem saber quando o problema tem solução aplicando um determinado método. Da aplicação dos métodos nos dois exemplos considerados, podemos constatar a partir dos resultados obtidos nesta pesquisa que o método do ponto fixo tem uma convergência linear na maioria dos casos (modo geral, converge lentamente), e a transformação equivalente que se aplica $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{G}(\mathbf{x})$, não é única. Para o método de Newton, desde que se cumpra as condições do teorema 13, o método terá uma convergência quadrática, ou seja, converge rapidamente para a solução partindo de qualquer posição inicial suficientemente boa. A principal inconveniência que surge na implementação do método de Newton é a necessidade de, em cada iteração se calcular as derivadas parciais, no caso, a matriz jacobiana (\mathbf{J}). Em certas aplicações, as funções não são conhecidas analiticamente e a jacobiana não é possível ser determinada. Este facto, motivou o desenvolvimento do método quasi-Newton ou Broyden. Para o método de Broyden quando a aproximação inicial \mathbf{x}_0 , estiver suficientemente próxima da solução \mathbf{x}^* e se \mathbf{B}_0 estiver próximo de $\mathbf{J}(\mathbf{x}^*)$, então a sequência $\{\mathbf{x}_n\}$ converge superlinearmente para \mathbf{x}^* . No entanto, a utilização da fórmula de Broyden/Sherman-Morrison evita a resolução de um sistema linear em cada iteração, diminuindo o volume de cálculos. Os métodos de quase-Newton modificados ainda continuam a ser objecto de estudo com vista a se obter métodos mais eficientes. Quanto à sua possível implementação no ensino, pode ser aplicado desde que os alunos tenham conhecimentos de equações não-lineares, sistemas de equações, derivadas e matrizes. Neste caso, a implementação do método do ponto fixo seria mais adequada no Ensino Secundário, e ao passo que os métodos de Newton e de Broyden, pelo facto do uso de matrizes, deveriam ser implementados numa fase posterior. Mas, infelizmente, cá em Portugal, foi retirado do programa oficial de matemática do ensino secundário a resolução de sistemas. No entanto achamos que é uma matéria que deveria ser tratada, uma vez que é de extrema importância no estudo de problemas e com aplicação em várias áreas de conhecimento.

Bibliografia

- [Agu89] F. R. Dias Agudo. *Análise Real. Volume I*. Escolar Editora, Lisboa, 1989. 23
- [BFB15] R.L. Burden, J.D. Faires, and A.M. Burden. *Numerical Analysis*. Cengage Learning, 2015. Available from: <https://books.google.pt/books?id=9DV-BAAAQBAJ>. 24, 27
- [BHL11] Fahimeh Biglari, Malik Abu Hassan, and Wah June Leong. New quasi-Newton methods via higher order tensor models. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 235(8):2412 – 2422, 2011. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042710006072>. 55
- [Bro65] C. G. Broyden. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations. *Math. Comp.*, 19:577–593, 1965. Available from: <https://doi.org/10.2307/2003941>. 4
- [BS98] Ali Bouaricha and Robert B. Schnabel. Tensor methods for large sparse systems of nonlinear equations. *Mathematical Programming*, 82(3):377–400, Aug 1998. Available from: <https://doi.org/10.1007/BF01580076>.
- [CL09] Wanyou Cheng and Dong-Hui Li. A derivative-free nonmonotone line search and its application to the spectral residual method. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 29(3):814–825, 2009. Available from: <http://dx.doi.org/10.1093/imanum/drn019>.
- [dGF98] Edite Manuel da G.P. Fernandes. *Computação Numérica. 2ª edição*. Universidade do Minho, 1998. Available from: <http://hdl.handle.net/1822/5828>. 45
- [dS02] Fernando Manuel Correia dos Santos. *Fundamentos de Análise Numérica*. Edições Sílabo, Lisboa, Outubro 2002. 5, 13, 17
- [Eve11] Howard Eves. *Introdução à História da Matemática*. UNICAMP, Agosto 2011.
- [FCF16] Luís Bandeira Francisco Coelho and Nuno Francisco. *Introdução à Matemática, Álgebra, Análise e Otimização*. Lidel - Edições Técnicas, Lisboa, Agosto 2016. 13, 23
- [FNZ17] Xiaowei Fang, Qin Ni, and Meilan Zeng. A modified quasi-Newton method for nonlinear equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 328:44 – 58, 2017. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042717303242>. 45, 55
- [Goc18] Mark S. Gockenbach. Newton’s method for nonlinear systems [online]. 2018. Available from: <http://www.math.mtu.edu/~msgocken/ma5630spring2003/lectures/newton/newton/node2.html> [cited 11 de fevereiro de 2018]. 24, 36
- [ICS14] Cécilia Perdigão Isabel Cabral and Carlos Saiago. *Álgebra Linear*. Escolar Editora, Lisboa, 2014. 15, 16
- [Kud83] L. D. Kudriávstev. *Curso de Análisis Matemático*. Editorial MIR. MOSCÚ, Moscou, 1983. 23
- [Lim04] Elon Lages Lima. *Análise no Espaço R^n* . Elon Lages Lima (Editor), Rio de Janeiro, 2004.
- [Pin10] Heitor Pina. *Métodos Numéricos*. Escolar Editora, setembro 2010. 6, 17, 25, 26, 50

- [RdRL88] Maria A. Gomes Ruggiero and Vera Lúcia da Rocha Lopoies. *Cálculo Numérico: Aspectos teóricos e Computacionais*. McGraw-Hill Ltda, S. Paulo, 1988.
- [San16] João Paulo Santos. *Cálculo numa Variável Real*. Editora: IST Press, Lisboa, 2016. 5, 24
- [Val90] Maria Raquel Valença. *Métodos Numéricos*. Instituto Nacional de Investigação Científica, 1990. 9
- [WLQ06] Zengxin Wei, Guoyin Li, and Liqun Qi. New quasi-Newton methods for unconstrained optimization problems. *Applied Mathematics and Computation*, 175(2):1156 – 1188, 2006. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0096300305006685>. 55
- [ZDC99] J. Z. Zhang, N. Y. Deng, and L. H. Chen. New quasi-Newton equation and related methods for unconstrained optimization. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 102(1):147–167, Jul 1999. Available from: <https://doi.org/10.1023/A:1021898630001>. 55
- [ZX01] Jianzhong Zhang and Chengxian Xu. Properties and numerical performance of quasi-Newton methods with modified quasi-Newton equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 137(2):269 – 278, 2001. Available from: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042700007135>. 55