

Aula 03 - Sistemas Algébricos Não-Lineares e Método de Newton

Élton Fontana

Como visto nas aulas anteriores, para um sistema linear existem três possibilidades para a solução do sistema: a solução existe e é única, não existe solução ou existem infinitas soluções. Para sistemas envolvendo equações não-lineares, existem duas adicionais possibilidades para a resolução do sistema. A primeira delas é que uma única equação pode não ter solução real, como por exemplo a equação $x^2 + 1 = 0$. Neste caso, a curva não irá cruzar o eixo x em nenhum ponto, enquanto que uma reta $ax + b = 0$ irá eventualmente cortar o eixo sempre que $a \neq 0$.

A segunda e mais significativa diferença entre sistemas lineares e não-lineares é que um sistema não-linear pode ter um número finito qualquer de soluções. Por exemplo, curvas definidas por dois polinômios podem se cruzar em n pontos, sendo que cada ponto corresponde a uma solução do *sistema*. Estas características fazem com que o comportamento governado por sistemas de equações não-lineares seja, em geral, muito mais complexo que o governado por equações lineares. Além disso, a maioria dos métodos iterativos utilizados para a resolução de sistemas não-lineares busca *alguma* solução do sistema, não fornecendo informações sobre todas as possíveis soluções.

Apesar disto, equações não lineares surgem com frequência na modelagem de diversos problemas, como por exemplo na área de reatores químicos, em problemas envolvendo distribuição de forças atuando em ângulos distintos e em diversos métodos de resolução de equações diferenciais. Estes problemas requerem que as equações não-lineares sejam resolvidas, sendo que este processo pode ser definido como: Considerando uma função ou um conjunto de funções não-lineares $f(x)$, deve-se encontrar um valor de $x = \alpha$ tal que $f(\alpha) = 0$. Neste caso, as funções podem ser polinomiais ou transcendentais. Além disso, em um sistema com n equações, caso alguma delas for não-linear, os métodos para sistemas lineares já não podem mais ser empregados.

A maioria dos métodos de resolução de sistemas não-lineares são derivados a partir de métodos de busca de raízes de equações não-lineares, como por exemplo os métodos de Newton, secante, etc. A seguir serão discutidas algumas características gerais destes métodos.

1 Características Gerais dos Métodos de Busca de Raízes

O processo de encontrar a raiz de uma equação não-linear, ou de forma equivalente a solução de um sistema não-linear, envolve duas etapas. Primeiramente, deve-se delimitar a solução a um intervalo específico e na sequência refinar a solução até se obter um valor com a precisão desejada.

A etapa de delimitação da solução consiste em encontrar uma estimativa inicial para a solução, que irá servir como um ponto de partida para os métodos iterativos. Como comentado anteriormente, um sistema não-linear pode apresentar múltiplas soluções, sendo que qual destas soluções será obtida irá depender, na maioria dos casos, desta estimativa inicial. Para o caso de uma única função ou sistemas com poucas equações, uma maneira simples de obter uma estimativa inicial é através da análise do gráfico das funções. Para sistemas grandes, no entanto, este procedimento costuma ser impraticável.

Em sequência, a etapa de refinamento da solução envolve determinar a solução com a precisão desejada através de algum procedimento adequado. Estes procedimentos podem ser classificados em três categorias:

1. ***Tentativa e erro***: Estes métodos simplificados consistem basicamente em chutar uma solução inicial e verificar se esta solução satisfaz as equações com a precisão desejada. Caso não satisfizer, escolhe-se outro valor. Este procedimento somente funciona se uma solução aproximada já é conhecida.
2. ***Métodos de domínio fechado***: São métodos que partem de dois valores que englobam alguma solução do problema. Para o caso de um sistema $f(x) = 0$, pode-se escolher um valor a onde $f(a) > 0$ e outro valor b onde $f(b) < 0$. Considerando que a função seja contínua, com certeza existe alguma solução no intervalo $[a, b]$. Estes métodos são muito robustos, pois garante que existe alguma solução no intervalo. No entanto, o processo de convergência pode ser muito lento. Exemplos de métodos que utilizam este procedimento são os de falsa posição e bissecção.

3. **Métodos de domínio aberto:** Esta classe de métodos não mantém a solução presa em um intervalo específico. Como consequência, não são tão robustos quanto os de domínio fechado e podem vir a divergir. No entanto, utilizam informações da própria equação não-linear para aproximar a solução, sendo por isso consideravelmente mais eficientes que os de domínio aberto. Exemplos de métodos de domínio aberto são os de Newton, secante e ponto-fixo.

Apesar de os métodos de tentativa e erro e de domínio fechado serem úteis para encontrar raízes de equações, a sua aplicação para a resolução de sistemas não-lineares é bem restrita, sendo que os métodos de domínio aberto são mais facilmente aplicados neste caso. Em particular, os métodos de Newton e do ponto fixo podem facilmente ser estendidos para a resolução de sistemas não-lineares, como será apresentado a seguir.

2 Método de Newton

O método de Newton é possivelmente o método mais conhecido e utilizado para a solução de equações não-lineares. A seguir será apresentada uma breve revisão da aplicação do método para uma única equação (problema de encontrar raízes) e na sequência será apresentada a expansão para sistemas.

2.1 Método de Newton para uma Equação

O método de Newton pode ser obtido diretamente através da expansão em série de Taylor de uma função em torno de um ponto. Considere que se deseja encontrar os valores de x que satisfazem a equação:

$$f(x) = 0$$

A expansão em série de Taylor de uma função $f(x)$ em torno de um ponto x_0 é dada como:

$$\begin{aligned} f(x) &= f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n \end{aligned}$$

Vale ressaltar que a expansão em série de Taylor é válida para praticamente qualquer função infinitamente diferenciável em x_0 . Neste caso, a função é dita *analítica* em x_0 .

Considere agora que a expansão seja feita nas vizinhanças do ponto x_0 . Neste caso, a diferença $x - x_0$ é pequena e os termos $(x - x_0)^2$, $(x - x_0)^3$, $\dots$ podem ser desprezados. Este processo *lineariza* a expansão, pois somente os termos de ordem até 1 são significativos. Com isso, a expansão pode ser expressa como:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

Pode-se utilizar a expressão acima para avaliar as raízes de $f(x)$:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) = 0$$

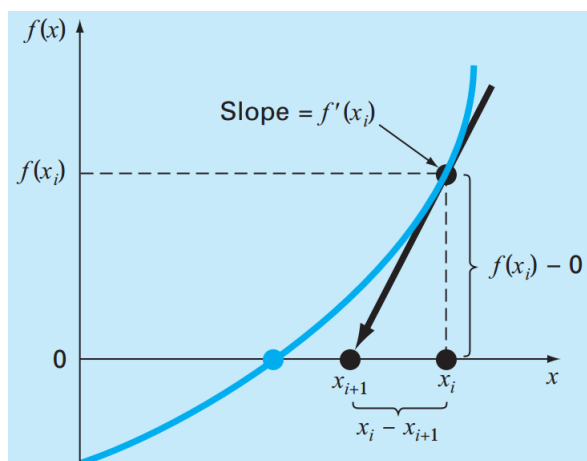
Reescrevendo a equação anterior:

$$(x - x_0) = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \quad \rightarrow \quad x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

Assumindo que $x = x_0$ seja uma raiz da equação, $f(x_0) = 0$. A expressão anterior pode ser utilizada para partir de um ponto x_0 qualquer e buscar um valor de x tal que $f(x) = 0$. De forma generalizada, o método iterativo de Newton é expresso como:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

Na figura a seguir é ilustrado como o ponto x_{i+1} é calculado com base em x_i . A principal vantagem do método de Newton é utilizar o valor da derivada no ponto x_i para determinar o novo ponto x_{i+1} .



Exemplo 01: Utilize o método de Newton para encontrar o ponto de intersecção das funções $f(x) = e^{-x^2}$ e $g(x) = x$.

R: $x = 0.6529$

2.1.1 Problemas com o Método de Newton

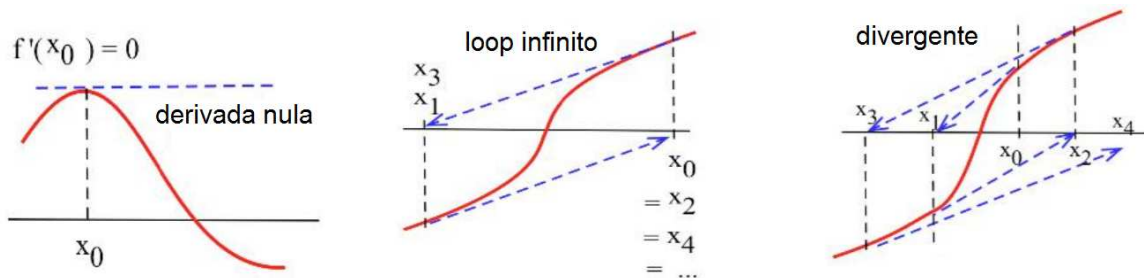
Como pode ser observado no exemplo anterior, o método de Newton usualmente converge rapidamente para a solução do problema. De fato, pode-se mostrar que para um processo convergente para encontrar uma raiz $x = a$, o erro e_i segue uma relação da forma:

$$e_{i+1} = \frac{1}{2} \frac{f''(a)}{f'(a)} e_i^2$$

o que indica que a convergência é de segunda ordem (quadrática).

No entanto, dependendo do valor inicial considerado, a relação anterior pode não ser satisfeita. Neste caso, o procedimento iterativo pode convergir para outra raiz, divergir ou apresentar uma convergência muito lenta.

Como o método de Newton envolve o cálculo do termo $f(x_i)/f'(x_i)$, um problema óbvio do método é que $f'(x_i)$ deve ser diferente de zero. Mesmo quando $f'(x_i)$ é somente próximo a zero, a tendência é que o ponto x_{i+1} resultará em um valor muito distante de x_i , o que pode fazer com que o método convirja para outra solução ou tenha uma convergência muito lenta. Além disso, dependendo do formato da função e das condições iniciais empregadas, o método pode mesmo vir a divergir ou entrar em um loop infinito, como ilustrado na figura a seguir.



Além destes problemas, diversos outros fatores podem dificultar a convergência do método de Newton, como por exemplo raízes muito próximas, dificuldade em encontrar um chute inicial adequado, mal condicionamento das equações não-lineares e a falta de conhecimento sobre a natureza das raízes (reais ou complexas).

Em muitos casos, os problemas de convergência podem ser evitados utilizando um método de amortecimento da solução, de forma a fazer com que os valores de x_i variem menos entre uma iteração e outra. Isto pode ser conseguido através do uso de um parâmetro de relaxação λ_i , escrevendo a relação para x_{i+1} como:

$$x_{i+1} = x_i + \lambda_i \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

O parâmetro λ_i deve ser definido no intervalo entre 0 e 1, sendo que quanto mais próximo de 0. Valores abaixo de 1 tendem a fazer com que a solução seja mais lenta em comparação com o método normal, porém podem evitar com que a solução divirja.

2.2 Método de Newton para Sistemas

Um sistema não-linear pode ser escrito de forma geral como:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

Na forma vetorial, este sistema é expresso simplesmente como:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0$$

Para o caso de funções de várias variáveis, a expansão em série de Taylor em torno de um ponto leva em conta a dependência com todas as variáveis. Por exemplo, para um função $f(x, y)$, a expansão em torno de um ponto (x_0, y_0) é da forma:

$$\begin{aligned} f(x, y) &= f(x_0, y_0) + \frac{\partial f}{\partial x}(x - x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(y - y_0) + \\ &\frac{1}{2!} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x - x_0)^2 + \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x - x_0)(y - y_0) + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(y - y_0)^2 \right) + \dots \end{aligned}$$

Para uma função de n variáveis, a expansão pode ser expressa, de uma forma geral, como:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^T H(f(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0))) + \dots$$

onde $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ e $\nabla f(\mathbf{x}_0)$ é o gradiente de $f(\mathbf{x})$ avaliado em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$:

$$\nabla f(\mathbf{x}_0) = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}(\mathbf{x}_0), \frac{\partial f}{\partial x_2}(\mathbf{x}_0), \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n}(\mathbf{x}_0) \right)$$

A matriz $H(f(\mathbf{x}_0))$ é chamada de matriz Hessiana de $f(\mathbf{x})$, sendo também avaliada em $\mathbf{x} = \mathbf{x}_0$. Esta matriz é expressa como:

$$H(f(\mathbf{x}_0)) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(\mathbf{x}_0) \end{bmatrix}$$

Considerando novamente que as distâncias $\mathbf{x} - \mathbf{x}_0$ são pequenas, pode-se desprezar os termos de alta ordem e linearizar a função em torno de $\mathbf{x}_0$:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$$

Aplicando este conceito para todas as funções do sistema não-linear apresentado anteriormente, o sistema pode ser expresso como:

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_1(\mathbf{x}_0) + \nabla f_1(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_2(\mathbf{x}_0) + \nabla f_2(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0$$

$$\vdots$$

$$f_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = f_m(\mathbf{x}_0) + \nabla f_m(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0$$

Na forma vetorial, este sistema pode ser expresso como:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) + \begin{bmatrix} \nabla f_1(\mathbf{x}_0) \\ \nabla f_2(\mathbf{x}_0) \\ \vdots \\ \nabla f_m(\mathbf{x}_0) \end{bmatrix} \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0$$

O vetor formado com o gradiente das funções $f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)$ forma uma matriz chamada de **matriz Jacobiana** ($J(x)$) do sistema. Neste caso, como as derivadas são avaliadas em $\mathbf{x}_0$, a matriz Jacobiana é expressa como:

$$J(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

Usando a definição da matriz Jacobiana, o sistema pode ser expresso como:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}_0) + J(\mathbf{x}_0) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) = 0$$

De forma semelhante ao realizado para uma única equação, pode-se expressar a relação anterior como um processos iterativo:

$$J(\mathbf{x}_i) \cdot (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i) = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_i)$$

Para facilitar a resolução, pode-se definir um vetor *deslocamento* $\mathbf{h}_i = \mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i$:

$$J(\mathbf{x}_i) \cdot \mathbf{h}_i = -\mathbf{F}(\mathbf{x}_i)$$

A partir da resolução do sistema linear, obtém-se o vetor deslocamento e na sequência os valores de $\mathbf{x}_{i+1}$ podem ser então avaliados.

Neste caso, a solução é um vetor e não um escalar. Assim, pode-se partir de um vetor inicial $\mathbf{x}_0$, determinar os termos $\mathbf{F}(\mathbf{x}_i)$ e $J(\mathbf{x}_i)$ e na sequência obter o valor da nova solução $\mathbf{x}_{i+1}$. É importante destacar que a etapa de obtenção de $\mathbf{x}_{i+1}$ sempre irá envolver a resolução de um sistema linear.

Uma maneira de evitar a solução do sistema linear é expressar a relação anterior como:

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + J^{-1}(\mathbf{x}_i)\mathbf{F}(\mathbf{x}_i)$$

Nesta forma, porém, é necessário determinar a inversa da matriz Jacobiana para cada iteração. Caso a matriz Jacobiana for singular (não possuir inversa), o método de Newton falha e não pode ser usado para obter a solução. Uma matriz é singular se o seu determinante for igual a zero, portanto esta é uma maneira simples de avaliar se o método de Newton pode ser empregado.

Os critérios que garantem que o método de Newton será ou não convergente dependem de diversos fatores, porém de forma geral pode-se dizer que o método tende a ser convergente para qualquer chute inicial *suficientemente próximo* da solução que se está buscando.

Exemplo 02: Encontre a solução do seguinte sistema não-linear, usando como condição inicial $\mathbf{x} = (0, 1)$:

$$x_1^2 + x_2^2 - 4 = 0$$

$$x_1 x_2 - 1 = 0$$

Exemplo 03: Utilize o método de Newton para obter a solução do seguinte sistema

não-linear. Utilize como solução inicial $\mathbf{x}^0 = (1, 0, 1)$

$$x^2 + y^2 + z^2 = 5$$

$$x^2 + y^3 - z = 0$$

$$x + z = 3$$