



Métodos Numéricos básicos para a solução de equações não lineares

Pedro Gabriel Papa Torelli¹

RESUMO: Neste trabalho fazemos uma revisão dos principais métodos numéricos para o cálculo de soluções aproximadas de equações não lineares. Os métodos da bissecção, das cordas, secante e o método de Newton-Raphson são abordados. Algumas aplicações são sugeridas e os resultados são comparados.

Sumário

1 Solução de equações não lineares	14
2 Condições de existência de solução	15
3 Método da Bissecção	16
4 Método das Cordas	18
5 Método de Newton-Raphson	21
6 Aplicações	25

1. Solução de equações não lineares

Veamos um simples problema: Imagine que um grupo de amigos se cotizaram para arrecadar R\$ 1050,00, o custo de uma festa de confraternização. Todos deveriam contribuir igualmente. Perto do dia da realização da confraternização, porém, cinco pessoas desistiram de participar da festa e a parte de cada um do grupo sofreu um aumento de R\$ 17,50. Quantas pessoas tem o grupo de amigos? Trata-se de um problema muito simples, comumente considerado no ensino fundamental, usado como aplicação da teoria sobre equações do segundo grau. De fato, se x representa o número de pessoas do grupo, então, inicialmente, o valor que cada um pagaria pela festa seria $\frac{1050}{x}$. Com a desistência de 5 pessoas, o novo valor a ser pago por cada integrante do grupo passou para $\frac{1050}{x-5}$. A diferença entre os dois valores é de R\$ 17,50, então, temos a equação

$$\frac{1050}{x} - \frac{1050}{x-5} = 17,50$$

ou seja,

$$x^2 - 5x - 300 = 0. \quad (1)$$

¹ Mestrando em Matemática pela Universidade Estadual de Maringá. Email: pgptorelli@gmail.com

A solução do problema passa então pela obtenção da raiz positiva da equação (1), que neste caso, sendo uma equação quadrática com discriminante positivo $\Delta = 1225$, sabemos que existem raízes reais dadas por $x_1 = 20$ e $x_2 = -15$. Portanto, o grupo de amigos era composto por 20 pessoas.

Situações como descrevemos acima, ou seja, problemas reais cuja solução equivale a investigar se uma dada equação possui raiz e, no caso afirmativo, calcular seu valor são muito comuns na Matemática e nas ciências como Engenharias, Física, Química, Biologia entre outras. É importante notar que na imensa maioria dos casos a modelagem dos problemas nos remete a uma equação do tipo

$$f(x) = 0, \quad (2)$$

para a qual não conhecemos métodos ou fórmulas diretas para o cálculo das raízes. Muitas vezes se quer sabemos da existência de raízes. Este é o assunto deste artigo, isto é, a problemática consiste em dada uma função real $f : I \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, encontrar os zeros, ou seja, resolver a equação (2).

Em verdade, dada a equação (2), surgem naturalmente três questões básicas:

1. Existe raiz para a equação? (Existência)
2. Se existe raiz, ela é única? (Unicidade)
3. É possível calcular o valor da raiz? (Cálculo).

Neste artigo vamos discutir estas questões, inicialmente fazendo considerações sobre a existência de raízes e posteriormente apresentando resultados sobre a unicidade e métodos iterativos que nos permitem calcular valores aproximados para as raízes. Os três métodos de aproximação aqui discutidos podem ser encontrados em [2], [5] e [9]. A base em Análise Real aqui presente é provinda de [1], [3], [6], [7], [8] e, principalmente, [4].

2. Condições de existência de solução

É possível estabelecer condições suficientes para a existência de raízes para a equação (2). O resultado principal nesta direção é conhecido como Teorema do Valor Intermediário, que a grosso modo, afirma que uma função contínua deve assumir todos os valores intermediários à quaisquer dois valores assumidos.

Denotamos por $\mathcal{C}([a, b])$ o espaço vetorial das funções reais definidas e contínuas no intervalo fechado e limitado $[a, b] \subset \mathbb{R}$, isto é,

$$\mathcal{C}([a, b]) = \{f : [a, b] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}; f \text{ é contínua em } [a, b]\}.$$

Teorema 2.1 (Teorema do Valor Intermediário) *Sejam $f \in \mathcal{C}([a, b])$ e $k \in \mathbb{R}$ tal que $f(a) < k < f(b)$ (ou $f(b) < k < f(a)$). Então existe ao menos um $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = k$.*

Uma demonstração utilizando o teorema dos intervalos encaixados pode ser encontrada em www.dma.uem.br/kit/teoremadovalorintermediario.html.

Como corolário deste teorema decorre um importante resultado sobre a existência de raiz para a equação (2). Dada sua importância para nosso trabalho, vamos destacá-lo também como um teorema. Para tal, iremos introduzir mais uma notação. Dada uma função real $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, definida num intervalo $[a, b] \subset \mathbb{R}$, denotamos por $\mathcal{Z}(f; (a, b))$ o conjunto dos zeros de f em (a, b) , ou seja, o conjunto das raízes da equação (2), localizadas no interior do intervalo $[a, b]$:

$$\mathcal{Z}(f; (a, b)) = \{c \in (a, b) \text{ tal que } f(c) = 0\}.$$

Também, para cada intervalo fechado e limitado $[a, b] \subset \mathbb{R}$, denotamos por $\mathcal{A}([a, b])$ o conjunto de todas as funções reais, definidas e contínuas no intervalo $[a, b]$ que possuem sinais opostos nos extremos do intervalo $[a, b]$, isto é:

$$\mathcal{A}([a, b]) = \{f \in \mathcal{C}([a, b]); f(a) \cdot f(b) < 0\}.$$

Observe que, para toda $f \in \mathcal{A}([a, b])$ temos uma das possibilidades: $f(a) < 0 < f(b)$ ou $f(b) < 0 < f(a)$. Agora estamos aptos para introduzir o resultado principal desta seção, dado pelo teorema abaixo.

Teorema 2.2 (Existência de solução) *Se $f \in \mathcal{A}([a, b])$ então $\mathcal{Z}(f; (a, b)) \neq \emptyset$.*

Note que a classe $\mathcal{A}([a, b])$ é uma classe admissível para existência de raiz. Questões sobre unicidade e cálculo de raízes persistem e serão tratadas nas próximas seções.

3. Método da Bissecção

É possível demonstrar o Teorema 2.2 por meio de uma abordagem direta e construtiva que fornece um algoritmo para se chegar à uma raiz da equação (2). Este método é o resultado da bissecção sucessiva de intervalos e por isso, o chamamos de Método da Bissecção.

Teorema 3.1 (Método da Bissecção) *Se $f \in \mathcal{A}([a, b])$, então $\mathcal{Z}(f; (a, b)) \neq \emptyset$. Além disso, é possível determinar um algoritmo, por meio de sucessivas bissecções do intervalo $[a, b]$, que encontra uma raiz exata da equação (2) ou gera uma sequência de pontos $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$, que converge para algum $c \in \mathcal{Z}(f; (a, b))$ e satisfaz a seguinte estimativa de erro:*

$$|p_n - c| \leq \frac{(b - a)}{2^n}, \quad \text{para todo } n \in \mathbb{N}. \quad (3)$$

Demonstração: Como $f \in \mathcal{A}([a, b])$, temos que $f(a)$ e $f(b)$ têm sinais opostos. Para fixar ideias suponhamos que

$$f(a) < 0 < f(b).$$

É claro que para a outra possibilidade ($f(b) < 0 < f(a)$) a demonstração é análoga.

Iniciamos o algoritmo denotando $I_1 = [a_1, b_1]$, onde $a_1 = a$ e $b_1 = b$. Assim, temos que

$$|I_1| = b - a \text{ e } f(a_1) < 0 < f(b_1).$$

Agora, dividimos o intervalo I_1 ao meio, denotamos o ponto médio por $p_1 = \frac{a_1+b_1}{2}$ e calculamos $f(p_1)$. Se $f(p_1) = 0$, então $p_1 \in \mathcal{Z}(f; (a, b))$ é uma raiz exata da equação (2) e o algoritmo acaba. Caso contrário, isto é, se $f(p_1) \neq 0$, então denotamos $I_2 = [a_2, b_2]$, onde

$$\begin{cases} a_2 = a_1 \text{ e } b_2 = p_1, & \text{se } f(p_1) > 0 \\ a_2 = p_1 \text{ e } b_2 = b_1, & \text{se } f(p_1) < 0. \end{cases}$$

Observe que em qualquer uma das possibilidades acima temos que

$$I_2 \subset I_1, |I_2| = \frac{b-a}{2} \text{ e } f(a_2) < 0 < f(b_2).$$

Obtido o intervalo I_2 , o dividimos ao meio através de seu ponto médio $p_2 = \frac{a_2+b_2}{2}$ e calculamos $f(p_2)$. Se $f(p_2) = 0$, então $p_2 \in \mathcal{Z}(f; (a, b))$ e nada mais há para ser feito. Por outro lado, se $f(p_2) \neq 0$, então denotamos por $I_3 = [a_3, b_3]$, onde

$$\begin{cases} a_3 = a_2 \text{ e } b_3 = p_2, & \text{se } f(p_2) > 0 \\ a_3 = p_2 \text{ e } b_3 = b_2, & \text{se } f(p_2) < 0. \end{cases}$$

Em qualquer caso, temos que

$$I_3 \subset I_2, |I_3| = \frac{b-a}{2^2} \text{ e } f(a_3) < 0 < f(b_3).$$

Continuamos o processo de bissecção de modo indutivo. Isto é, uma vez obtidos n intervalos por meio de sucessivas bissecções, dividimos o intervalo I_n ao meio, denotamos o ponto médio por $p_n = \frac{a_n+b_n}{2}$ e calculamos $f(p_n)$. Se $f(p_n) = 0$ então $p_n \in \mathcal{Z}(f; (a, b))$ e nada mais deve ser feito. Mas se $f(p_n) \neq 0$, então denotamos $I_{n+1} = [a_{n+1}, b_{n+1}]$, onde

$$\begin{cases} a_{n+1} = a_n \text{ e } b_{n+1} = p_n, & \text{se } f(p_n) > 0 \\ a_{n+1} = p_n \text{ e } b_{n+1} = b_n, & \text{se } f(p_n) < 0. \end{cases}$$

Da mesma forma, em qualquer caso, temos que

$$I_{n+1} \subset I_n, |I_{n+1}| = \frac{b-a}{2^n} \text{ e } f(a_{n+1}) < 0 < f(b_{n+1}).$$

Logo, para o algoritmo definido temos um número finito de etapas, quando para algum $n \in \mathbb{N}$ tem-se que $p_n \in \mathcal{Z}(f; (a, b))$, ou temos uma sequência infinita de pontos $(p_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset (a, b)$. Vamos mostrar que, neste caso, a sequência $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge para um elemento $c \in \mathcal{Z}(f; (a, b))$. De fato, pela construção temos que $(I_n)_{n \in \mathbb{N}}$ é uma sequência de intervalos encaixantes tal que $|I_n| \rightarrow 0$. Logo, pelo Teorema dos Intervalos Encaixantes (pode ser visto em [4]), vemos que existe um único número real c que pertence a todos os intervalos I_n , isto é:

$$\bigcap_{n=1}^{\infty} I_n = \{c\} \text{ e } \lim(a_n) = c = \lim(b_n).$$

Pela continuidade de f devemos ter que

$$\lim(f(a_n)) = f(c) = \lim(f(b_n)).$$

Como $f(a_n) < 0 < f(b_n), \forall n \in \mathbb{N}$, concluímos que

$$f(c) = \lim(f(a_n)) \leq 0 \text{ e } f(c) = \lim(f(b_n)) \geq 0,$$

de onde resulta que $f(c) = 0$, isto é, $c \in \mathcal{Z}(f; (a, b))$.

Por fim, note também que $a_n < p_n < b_n, \forall n \in \mathbb{N}$. Então, tomando o limite e considerando o Teorema do Confronto (consta em [4]), obtemos que $\lim p_n = c$. A estimativa de erro (3) é consequência direta do fato de que $c, p_n \in I_n = [a_n, b_n]$, e isto completa a demonstração. \square

Veja a demonstração do teorema dos intervalos encaixados em www.dma.uem.br/kit/intervalosencaixados.html.

O Método da Bissecção e a teoremaa de existência nada garantem sobre a unicidade, ou seja, sabemos que existe pelo menos uma raiz no intervalo (a, b) e o método da bissecção encontra uma raiz exata ou determina uma sequência $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ que converge para uma raiz.

4. Método das Cordas

Da mesma forma que na seção anterior, onde apresentamos o método da bissecção, admitimos que f está nas condições do Teorema de Existência de Raiz, isto é, $f \in \mathcal{A}([a, b])$. Agora vamos introduzir um novo método onde impomos condições adicionais para a função f , precisamente que o gráfico de f seja suave e não muda de concavidade, as quais vão garantir, além da existência, a unicidade da raiz no intervalo $[a, b]$. O método é chamado Método das cordas e está baseado na aproximação da raiz da equação (2) por meio da secante (segmentos de retas) que ligam dois pontos do gráfico de f . Intuitivamente, as aproximações da raiz c de f são construídas da seguinte forma: Consideramos a corda ligando os pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$ e denotamos por p_1 a intersecção desta corda com o eixo x . Na sequência tomamos o intervalo $[a, p_1]$ ou $[p_1, b]$, de modo que os valores de f nos extremos tenham sinais opostos, e construímos uma nova corda, cuja intersecção com o eixo x nos dá a aproximação p_2 . Procedemos com este raciocínio e obtemos uma sequência $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ que converge para a raiz c .

Antes de formalizarmos o método, observamos que se $f \in \mathcal{A}([a, b])$ é suficientemente suave, digamos f é duas vezes derivável em $[a, b]$ e

$$f''(x) = 0, \forall x \in [a, b], \quad (4)$$

então f é uma função afim, do tipo $f(x) = \alpha x + \beta$, cujo gráfico coincide com a corda (segmento de reta) que liga os pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$. Analiticamente,

$$f(x) = f(a) + \left[\frac{f(b)f(a)}{b-a} \right] (x-a)$$

e sua única raiz em (a, b) é o ponto c dado por

$$c = a - \frac{f(a)(b-a)}{f(b) - f(a)}.$$

Portanto, supondo (4), a equação (2) é uma equação do primeiro grau e o problema se mostra trivial. Então é razoável supor que f'' não seja identicamente nula em $[a, b]$, isto é, não satisfaz (4). Denotamos $f'' \neq 0$ em $[a, b]$, para indicar que f'' não é identicamente nula em $[a, b]$.

Teorema 4.1 (Método das Cordas) *Se $f \in \mathcal{A}([a, b])$ é duas vezes derivável em $[a, b]$, $f'' \neq 0$ em $[a, b]$ e f'' não muda de sinal em $[a, b]$, então $\mathcal{Z}(f; (a, b)) = \{c\}$. Além disso, a sequência $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ definida por recorrência por*

$$\begin{cases} p_1 = a - \frac{f(a)(b-a)}{f(b)-f(a)} \\ p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)(p_n-u)}{f(p_n)-f(u)}, \quad \text{para } n \geq 1, \end{cases} \quad (5)$$

onde

$$u = \begin{cases} a, & \text{se } f'' \text{ assume o sinal de } f(a) \text{ em algum ponto de } [a, b] \\ b, & \text{se } f'' \text{ assume o sinal de } f(b) \text{ em algum ponto de } [a, b], \end{cases}$$

converge para a única raiz c da equação (2).

Demonstração: Para demonstrarmos a primeira parte do teorema, ou seja, a afirmação de que $\mathcal{Z}(f; (a, b)) = \{c\}$, basta provar a unicidade pois a existência de raiz já está garantida pelo Teorema 2. Logo, suponhamos, por absurdo, que existam $c_1, c_2 \in (a, b)$ tais que $f(c_1) = f(c_2) = 0$ e $c_1 \neq c_2$, digamos, $c_1 < c_2$. Como $f \in \mathcal{A}([a, b])$ para fixar o raciocínio, admitamos que

$$f(a) < 0 < f(b). \quad (6)$$

O outro caso ($f(b) < 0 < f(a)$) pode ser considerado de modo análogo. Também para fixar as ideias, como f'' não é identicamente nula em $[a, b]$ e não muda de sinal, suponhamos que

$$f''(x) \leq 0, \forall x \in [a, b] \text{ e } f''(x_0) < 0, \text{ para algum } x_0 \in [a, b]. \quad (7)$$

Aqui, também observamos que para a outra possibilidade (f'' não identicamente nula assumindo o sinal positivo) a demonstração é análoga. Feitas as suposições necessárias, pelo Teorema de Rolle (veja em [4]), concluímos que existe $\theta \in (c_1, c_2)$ tal que $f(\theta) = 0$. Das hipóteses sobre f e por (7) concluímos que o gráfico de f é côncavo para baixo em (a, b) e portanto, θ é um ponto de máximo local de f . Deste fato e levando em conta que o gráfico de f não troca de concavidade (é sempre côncavo para baixo), concluímos que f é crescente em (a, θ) e decrescente em (θ, b) . Logo, $f(a) < 0$ e $f(b) < 0$, o que é um absurdo, pois contradiz (6). Assim, está provada a unicidade da raiz para a equação (2), ou seja, existe um único ponto $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$.

Antes de passarmos à demonstração da segunda parte do teorema observamos que:

$$\text{se } f(a) < 0 < f(b), \text{ então } \begin{cases} f(x) < 0, \forall x \in [a, c] \\ f(x) > 0, \forall x \in (c, b], \end{cases}$$

e por outro lado,

$$\text{se } f(b) < 0 < f(a), \text{ então } \begin{cases} f(x) > 0, \forall x \in [a, c] \\ f(x) < 0, \forall x \in (c, b]. \end{cases}$$

Agora, vamos provar a segunda parte do teorema, isto é, mostrar que $p_n \rightarrow c$ quando $n \rightarrow \infty$. De início vamos verificar que $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ é convergente, provando, com isto que ela é uma sequência monótona e limitada.

Novamente, antes de iniciar a argumentação é necessário fixar o cenário, e suponhamos então que

$$f(a) < 0 < f(b), \quad (8)$$

como sempre, o outro caso pode ser tratado com um raciocínio parecido. Denotamos por $g_1 : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ a função cujo gráfico é a reta que liga os pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$, isto é,

$$g_1(x) = f(a) + \left[\frac{f(b) - f(a)}{b - a} \right] (x - a).$$

Um cálculo simples mostra que p_1 definido em (5) é a única raiz de g_1 no intervalo (a, b) . Também decorre de (8) que a reta que liga os pontos $(a, f(a))$ e $(b, f(b))$ tem inclinação positiva, ou seja, g_1 é uma função crescente.

Para continuar, suponhamos que f'' assuma o sinal positivo em algum ponto de (a, b) , e como sempre, o caso contrário tem demonstração análoga. Então o gráfico de f é côncavo para cima e portanto, devemos ter $f(x) < g_1(x)$ para todo $x \in (a, b)$. Logo, em particular,

$$0 = f(c) < g_1(c).$$

Como $g_1(p_1) = 0$, então $g_1(p_1) < g_1(c)$ e, conseqüentemente,

$$p_1 < c \text{ e } f(p_1) < 0.$$

Na situação fixada por nós, f'' assume o sinal de $f(b)$ (positivo), então

$$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)(p_1 - b)}{f(p_1) - f(b)}$$

é a única raiz da função $g_2 : [p_1, b] \rightarrow \mathbb{R}$ cujo gráfico é a reta que liga os pontos $(p_1, f(p_1))$ e $(b, f(b))$. Pelo mesmo raciocínio aplicado à função g_1 , logo acima, temos que $f(x) < g_2(x), \forall x \in (p_1, b)$ e, em particular, $0 = f(c) < g_2(c)$. Como $g_2(p_2) = 0$, então $g_2(p_2) < g_2(c)$ e, conseqüentemente,

$$p_1 < p_2 < c \text{ e } f(p_2) < 0.$$

Agora suponha que para $n \in \mathbb{N}$ tenhamos verificado que $p_1 < p_2 < p_3 < \dots < p_{n-1} < p_n < c$. Então, $f(p_n) < 0$ e

$$p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)(p_n - b)}{f(p_n) - f(b)}$$

é a única raiz da função $g_{n+1} : [p_n, b] \rightarrow \mathbb{R}$ cujo gráfico é a reta que liga os pontos $(p_n, f(p_n))$ e $(b, f(b))$. Novamente usando que o gráfico de f é côncavo para cima, segue que $f(x) < g_{n+1}(x), \forall x \in [p_n, b]$. Em particular, $0 = f(c) < g_{n+1}(c)$, de onde vemos que

$$p_n < p_{n+1} < c.$$

Assim, por indução, $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ é monótona crescente e limitada superiormente por c . Logo, $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ é convergente. Denotamos por um momento $p = \lim(p_n)$.

Tomando o limite em (5), obtemos

$$p = p - \frac{f(p)(p-b)}{f(p) - f(b)}$$

de onde resulta que

$$f(p)(p-b) = 0. \quad (9)$$

Desde que $p \leq c < b$, temos $(p-b) \neq 0$. Isto e (9) nos levam a concluir que

$$f(p) = 0.$$

Pela unicidade da raiz de f em (a, b) devemos ter que $p = c$ e isto completa a demonstração do teorema. \square

5. Método de Newton-Raphson

Nesta seção, novamente supomos que f esteja nas condições do teorema de existência de raiz para a equação (2), isto é, $f \in \mathcal{A}([a, b])$. O método de Newton-Raphson, também conhecido como método das tangentes, é um método baseado no conceito de derivada, precisamente usando uma interpretação geométrica da derivada, construímos uma sequência de pontos $(p_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset (a, b)$ que converge para a raiz c de f .

Dada $f \in \mathcal{A}([a, b])$ suponhamos adicionalmente que f é diferenciável em $[a, b]$ e $f'(x) \neq 0$, para todo $x \in (a, b)$. Nestas condições está garantida a existência e unicidade de raiz de f em (a, b) , isto é, existe um único ponto $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$. De fato, a existência é consequência do Teorema 2 e a unicidade pode ser vista supondo, por absurdo, que existam c_1 e c_2 em (a, b) tais que $f(c_1) = f(c_2) = 0$ e $c_1 \neq c_2$. Logo, pelo Teorema de Rolle, deveria existir θ entre c_1 e c_2 tal que $f'(\theta) = 0$, o que não pode ocorrer uma vez que, por hipótese, $f'(x) \neq 0$, para todo $x \in (a, b)$.

Escolhemos aleatoriamente $p_1 \in (a, b)$ e seja p_2 o ponto sobre o eixo x onde a reta tangente ao gráfico de f no ponto $(p_1, f(p_1))$ corta o eixo x . Então

$$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)}{f'(p_1)}.$$

Supondo que $p_2 \in (a, b)$, na sequência, denotamos por p_3 o ponto sobre o eixo x onde a reta tangente ao gráfico de f no ponto $(p_2, f(p_2))$ corta o eixo x . Isto é,

$$p_3 = p_2 - \frac{f(p_2)}{f'(p_2)}.$$

Supondo que sempre tenhamos $p_n \in (a, b)$ e prosseguindo desta forma, definimos por recorrência uma sequência de pontos $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ como segue:

$$\begin{cases} p_1 \in (a, b) \text{ fixado arbitrariamente,} \\ p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)}{f'(p_n)}, \quad \text{para } n \geq 1. \end{cases} \quad (10)$$

Com hipóteses adicionais sobre a função f é possível mostrar que a sequência $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ é uma sequência de pontos do intervalo (a, b) que converge para c , a única raiz de f em (a, b) .

Teorema 5.1 (Método de Newton-Raphson) *Seja $f \in \mathcal{A}([a, b])$ duas vezes derivável em $[a, b]$. Suponha que $0 < m = \min_{a \leq x \leq b} |f'(x)|$ e existe $M > 0$ tal que $|f''(x)| \leq M$, para todo $x \in [a, b]$. Então $\mathcal{Z}(f; (a, b)) = \{c\}$ e, além disso, se $p_1 \in V_\delta(c) = (c - \delta, c + \delta)$, onde*

$$\delta = \min \left\{ |c - a|, |c - b|, \frac{1}{K} \right\} \text{ e } K = \frac{M}{2m}, \quad (11)$$

temos que a sequência $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ está bem definida pela recorrência (10) e converge para c .

Demonstração: A primeira parte do teorema sobre a existência e unicidade da raiz c para f é consequência imediata do Teorema 2 e do Teorema de Rolle.

Para demonstrarmos a segunda parte do teorema, consideremos o seguinte lema:

Lema 5.2 *Se $\alpha \in (a, b)$ e β é dado por $\beta = \alpha - \frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)}$, então $|\beta - c| \leq K|\alpha - c|^2$.*

Demonstração: Se $\alpha = c$, então $\beta = c$ e o resultado está satisfeito ocorrendo a igualdade. Então suponhamos $\alpha \neq c$. Pelo Teorema de Taylor, sabemos que existe η entre α e c tal que

$$f(c) = f(\alpha) + f'(\alpha)(c - \alpha) + \frac{1}{2}f''(\eta)(c - \alpha)^2.$$

Desta igualdade e sabendo que $f(c) = 0$, segue que

$$-f(\alpha) = f'(\alpha)(c - \alpha) + \frac{1}{2}f''(\eta)(c - \alpha)^2. \quad (12)$$

Substituindo (12) na definição de β , concluímos que

$$\beta - c = \frac{1}{2} \frac{f''(\eta)}{f'(\alpha)} (c - \alpha)^2.$$

Ao tomarmos o módulo nesta igualdade e utilizarmos a limitação de f'' , obtemos

$$|\beta - c| \leq \frac{1}{2} \frac{M}{|f'(\alpha)|} (c - \alpha)^2 \leq \frac{M}{2m} (c - \alpha)^2 = K|\alpha - c|^2$$

e finalizamos a prova do lema. □

Agora retornamos à demonstração do teorema. É claro que a δ -vizinhança de c , isto é, o intervalo $V_\delta(c) = (c - \delta, c + \delta) \subset (a, b)$ é não nula. Seja $p_1 \in V_\delta(c)$ aleatoriamente fixado. Também tomando

$$p_2 = p_1 - \frac{f(p_1)}{f'(p_1)},$$

pelo Lema 1, obtemos

$$|p_2 - c| \leq K|p_1 - c|^2 < K\delta^2 \leq K\frac{1}{K}\delta = \delta,$$

ou seja, $p_2 \in V_\delta(c) \subset (a, b)$. Se para $n \geq 1$ tivermos $p_n \in V_\delta(c)$ e tomarmos $p_{n+1} = p_n - \frac{f(p_n)}{f'(p_n)}$, então pelo Lema 1, temos

$$|p_{n+1} - c| \leq K|p_n - c|^2 < K\delta^2 \leq \delta,$$

ou seja, $p_{n+1} \in V_\delta(c)$. Logo, por indução concluímos: sempre que $p_1 \in V_\delta(c)$ e $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ for definido pela recorrência (10), temos

$$p_n \in V_\delta(c) \text{ e } |p_{n+1} - c| \leq K|p_n - c|^2, \forall n \in \mathbb{N}. \quad (13)$$

Para finalizar, vamos mostrar que $(p_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge para c . De fato, usando (13), temos

$$\begin{aligned} |p_2 - c| &\leq K|p_1 - c|^2 = K|p_1 - c||p_1 - c| \leq K\delta|p_1 - c|; \\ |p_3 - c| &\leq K|p_2 - c|^2 = K|p_2 - c||p_2 - c| \leq K\delta K\delta|p_1 - c| = (K\delta)^2|p_1 - c|; \\ |p_4 - c| &\leq K|p_3 - c|^2 = K|p_3 - c||p_3 - c| \leq K\delta(K\delta)^2|p_1 - c| = (K\delta)^3|p_1 - c|. \end{aligned}$$

Logo, supondo que para $n \geq 2$ tenhamos $|p_n - c| < (K\delta)^{n-1}|p_1 - c|$, então

$$|p_{n+1} - c| \leq K|p_n - c|^2 \leq K|p_n - c||p_n - c| \leq K\delta(K\delta)^{n-1}|p_1 - c| = (K\delta)^n|p_1 - c|.$$

Portanto, por indução, provamos que

$$|p_{n+1} - c| < (K\delta)^n|p_1 - c|, \text{ para todo } n \in \mathbb{N}. \quad (14)$$

Agora, de (11) temos que $\delta < \frac{1}{K}$, o que implica $(K\delta) < 1$. Logo,

$$\lim(K\delta)^n = 0. \quad (15)$$

Passando o limite em (14) e usando (15), obtemos $\lim p_n = c$ e isto completa a demonstração. \square

Observação 5.3

Na prática, quando o método de Newton-Raphson é programado para um computador e p_1 é escolhido de forma não cautelosa, ou quando o zero da função se encontra muito próximo a um dos extremos do intervalo considerado, o método de Newton-Raphson pode não convergir para o zero da função, podendo apresentar uma sequência de pontos que não converge (tende a mais ou menos infinito) ou uma sequência que oscila entre pontos e não converge para o valor da raiz. Em contrapartida, encontrar uma vizinhança $V_\delta(c)$ com δ satisfazendo a condição posta em (11) pode mostrar-se inviável, pois o extremo refinamento das informações pode resultar em um intervalo de comprimento muito pequeno quando comparado às intenções do problema no qual é desejado resolver, e assim, os extremos do intervalo encontrado já são aproximações satisfatórias para o zero da função.

De modo a exemplificar tais fatos vamos apresentar aqui tais situações para que na prática possamos ver que tomar pontos para iniciar o método de Newton-Raphson sem que este esteja incluso na vizinhança de raio expresso em (11) pode acarretar resultados indesejados.

Iremos, então, analisar a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = x^3 - 2x - 5$. Primeiramente, claro, devemos determinar um intervalo no qual seja garantida a existência de uma raiz para esta função. Deste pressuposto, ao analisarmos os pontos $x = -1$ e $x = 3$ notamos que estes são tais que $f(-1) = -4$ e $f(3) = 16$. Por este fato e notando que f é uma função polinomial, e portanto, contínua, temos que pelo Teorema do Valor Intermediário, o Teorema 1, f possui ao menos uma raiz no intervalo $[-1, 3]$.

Vamos aplicar o método de Newton-Raphson com a finalidade de encontrar a raiz da função f , porém, daremos um ponto inicial não escolhido devidamente. O ponto que iremos iniciar as iterações será $x = 0$ e a partir deste, na Tabela 1 podemos visualizar o comportamento das aproximações obtidas.

n	p_n	$f(p_n)$
1	0	-5
2	-2,5	-16,625
3	-1,5671641791	-5,7146324514
4	-0,5025924450	-4,1217695422
5	-3,8207064676	-53,1324879623
6	-2,5493933913	-16,4707576140
7	-1,6081114997	-5,9423896750
8	-0,5761004336	-4,0390020905
9	-4,5977095833	-92,9952575692
10	-3,0835431467	-28,1519768702

Tabela 1: Aproximação da raiz de f pelo Método de Newton-Raphson com p_1 desfavorável.

Ao analisar a tabela, podemos concluir que p_1 escolhido indevidamente acarretou em uma sequência de aproximações que não manifestam caráter de convergência.

Agora, tomemos para estudo a função $h : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $h(x) = \frac{30 \cdot \ln(x)}{2^x} +$

1. Novamente aplicando a teoria de existência, notamos que se escolhermos os pontos

$x = 0,5$ e $x = 5$, teremos que $h(0,5) \approx -13,7038721520$ e $h(5) \approx 2,5088480429$, portanto, podemos afirmar que existe ao menos uma raiz da função h no intervalo $\left[\frac{1}{2}, 5\right]$, pois h é uma função contínua em $(0, \infty)$.

Deste modo, novamente aplicaremos o Método de Newton-Raphson partindo de uma primeira aproximação descuidadamente escolhida, a saber, $x = 2,5$. A Tabela 2 ilustra o comportamento neste caso.

n	p_n	$h(p_n)$
1	2,5	5,8593654253
2	7,1990139453	1,4030296152
3	12,7888324386	1,0108042853
4	154,0124851784	≈ 1
5	$\approx 2 \cdot 10^{44}$	≈ 1

Tabela 2: Aproximação da raiz de h pelo Método de Newton-Raphson com p_1 desfavorável.

Inegavelmente notamos da tabela 2 que o Método de Newton-Raphson resultou uma sequência de aproximações que tende a infinito, donde somos capazes de concluir que o ponto de início das iterações mal escolhido pode também acarretar uma sequência de pontos que tende a infinito, por exemplo.

6. Aplicações

Nesta seção consideramos dois problemas em que empregamos os métodos abordados acima e comparamos os resultados obtidos. Pretende-se, assim, explicitar a eficiência de um deles.

Problema 1: Estudos em microbiologia permitem obter informações a respeito de bactérias, como identificação, avaliação de seu crescimento, estimativas sobre contaminação, agentes patogênicos, entre outros. Um destes estudos está relacionado com a contaminação de alimentos ou amostras clínicas, sendo interessante determinar um tempo aproximado para se manusear um certo material sem que haja contaminação por bactérias. Para a abordagem deste problema, é necessário que tenhamos uma função que modela o crescimento populacional das bactérias consideradas.

Posto isso, inicialmente é feito um estudo acerca do crescimento populacional para uma bactéria específica, e para que seja possível coletar dados são feitas amostragens de modo a obter uma função que modele o crescimento populacional. Para este propósito são deixados ao ar livre recipientes, conhecidos como placas de Petri, inicialmente estéreis e munidos de um meio de cultura parcialmente próprio para a reprodução da bactéria em questão. Tais placas são então abertas e seladas uma a cada 30 minutos. Por meio desta metodologia estuda-se a bactéria em questão, de modo a investigar o biovolume presente em cada placa.

Suponhamos que após repetir este experimento para se ter dados próximos aos reais, a análise microbiológica muniu-se de uma tabela contendo dados do biovolume da bactéria em função do tempo e a partir de algum método de ajuste de curva, como o método dos mínimos quadrados ou aproximação por funções racionais ou polinômios

trigonométricos, foi possível modelar o biovolume em função do tempo pela função $g(t) = t^2 + \ln(t) - t + 1$. A Figura 1 apresenta um esboço do gráfico desta função obtido pelo programa Geogebra.

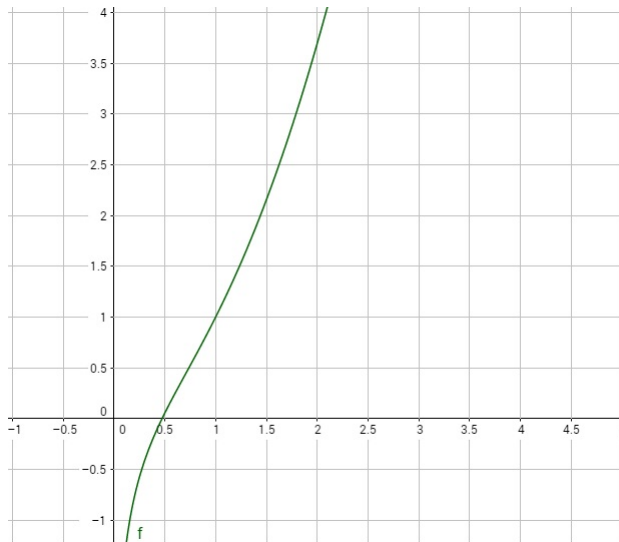


Figura 1: Gráfico da função $g(t) = t^2 + \ln(t) - t + 1$.

A partir disto, foi observado que a raiz desta função g representa o momento limite em que não haveria biovolume de bactérias na placa e que a partir deste instante começa uma contaminação. Ou seja, as bactérias somente começam a se instalar na placa após um instante k , raiz da função g . Logo, a função que realmente modela o crescimento populacional da bactéria é:

$$f(t) = \begin{cases} 0 & \text{se } t \leq k \\ t^2 + \ln(t) - t + 1 & \text{se } t > k. \end{cases}$$

Veja na Figura 2 um esboço do gráfico que relaciona o biovolume de bactérias, em mm^3/L , versus o tempo, em escala de 30 minutos.

Note que caso seja conhecido o valor de k , teremos o momento em que a bactéria se instala nas placas de Petri, o que pode ser útil para se estimar o tempo em que algum alimento ou material possa ser manuseado sem risco de contaminação pela bactéria. Assim, passamos agora para o problema puramente matemático, ou seja, resolver a equação

$$t^2 + \ln(t) - t + 1 = 0. \quad (16)$$

Denotando como antes,

$$g(t) = t^2 + \ln(t) - t + 1$$

vemos que g está bem definida para todo $t > 0$, ou seja, o domínio da função g é o intervalo $(0, \infty)$. Também temos que g é contínua em $(0, \infty)$ e portanto, fixados $0 < a < b < \infty$, teremos que $g \in \mathcal{C}([a, b])$. Para usarmos a teoria de existência e também os métodos iterativos anteriormente estudados é necessário encontrar um intervalo $[a, b] \subset (0, \infty)$ conveniente, que isole no seu interior a raiz da equação (16). Olhando as hipóteses dos teoremas estudados vemos que $[a, b] \subset (0, \infty)$ deve ser tal que

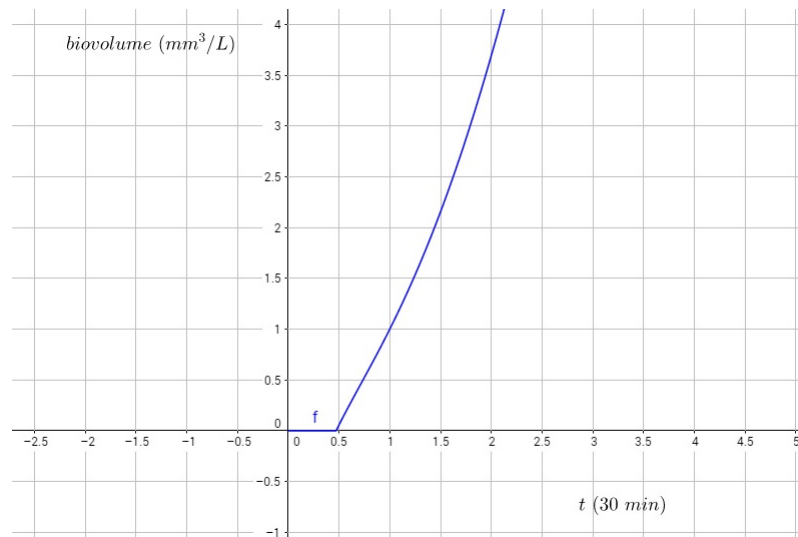


Figura 2: Gráfico da função f : tempo (t) vs biovolume de bactérias (*biovolume*).

- i) $g(a)$ e $g(b)$ tenham sinais opostos;
- ii) g' não se anule em $[a, b]$;
- iii) g'' não seja identicamente nula e não troque de sinal em $[a, b]$.

Um cálculo simples nos dá que

$$g'(t) = \frac{2t^2 - t + 1}{t} \quad \text{e} \quad g''(t) = \frac{2t^2 - 1}{t}, \quad t > 0.$$

Facilmente podemos estudar os sinais de g' e g'' , obtendo que g' é positiva para qualquer $t > 0$, $g''(t) < 0$ para $t \in \left(0, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ e $g''(t) > 0$ para $t \in \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \infty\right)$.

Como $g'(t) > 0$, não existem pontos críticos e g é uma função crescente em todo intervalo $(0, \infty)$. Olhando o sinal de g'' concluímos que o gráfico de g é côncavo para baixo no intervalo $\left(0, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ e côncavo para cima no intervalo $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \infty\right)$. No ponto $\frac{\sqrt{2}}{2}$ o gráfico troca de concavidade e em cada um dos intervalos $\left(0, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ e $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \infty\right)$ vemos que g'' não muda de sinal e nunca se anula. Portanto já vemos que a escolha de um intervalo de isolamento da raiz em $[a, b]$ deve ser tal que

$$[a, b] \subset \left(0, \frac{\sqrt{2}}{2}\right) \quad \text{ou} \quad [a, b] \subset \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \infty\right)$$

Por meio de uma calculadora vemos que

$$g\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) = \left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^2 + \ln\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right) - \frac{\sqrt{2}}{2} + 1 \approx 0,446319628 > 0$$

e como g é crescente, vemos que $g(x) > 0$, para todo $x \geq \frac{\sqrt{2}}{2}$. Isto descarta a possibilidade de se escolher $[a, b] \subset \left(\frac{\sqrt{2}}{2}, \infty\right)$.

Veamos também que de $\sqrt{2} < \sqrt{3}$, concluímos que

$$\frac{\sqrt{3}}{3} = \frac{1}{\sqrt{3}} < \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2},$$

$$g\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) = \left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)^2 + \ln\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) - \frac{\sqrt{3}}{3} + 1 \approx 0,2066769198 > 0$$

e

$$g\left(\frac{1}{10}\right) = \left(\frac{1}{10}\right)^2 + \ln\left(\frac{1}{10}\right) - \frac{1}{10} + 1 \approx -1,392585093 < 0.$$

Logo uma possível escolha para o intervalo $[a, b]$, intervalo de isolamento da raiz, é o intervalo $\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right] \subset \left(0, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$. Note que $g \in \mathcal{A}\left(\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]\right)$, com $g\left(\frac{1}{10}\right) < 0 < g\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$, é duas vezes derivável em $\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$, $g'(t) \neq 0, \forall t \in \left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$, $g'' \neq 0$ em $\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$ e g'' não muda de sinal em $\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$ (em particular g'' é negativa no intervalo, mesmo sinal de $g\left(\frac{1}{10}\right)$). As limitações m e M , respectivamente, limitante inferior de $|g'|$ e limitante superior de $|g''|$ podem ser obtidas. De fato, como g'' é negativa no intervalo de isolamento, temos g' decrescente, sabemos também que g' é positiva, então

$$m = \min_{\frac{1}{10} \leq t \leq \frac{\sqrt{3}}{3}} |g'(t)| = g'\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right) \approx 1,8867513459. \quad (17)$$

Calculando temos que $g'''(t) = \frac{2}{t^3} > 0, \forall t \in \left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$. Logo, g'' é crescente e negativa no intervalo considerado e, consequentemente, $|g''|$ é decrescente e positiva. Portanto

$$M = \max_{\frac{1}{10} \leq t \leq \frac{\sqrt{3}}{3}} |g''(t)| = -g''\left(\frac{1}{10}\right) = 98. \quad (18)$$

De (17) e (18) temos que

$$1,8867513459 < |g'(t)| \quad \text{e} \quad |g''(t)| < 98, \quad \forall t \in \left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right].$$

Resumindo a argumentação acima, vimos que a função g no intervalo $\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$ satisfaz as hipóteses dos Teoremas 3, 4 e 5. Portanto, existe uma única raiz da equação (16) no intervalo $\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$. Vamos então aplicar os métodos aqui apresentados.

Como nosso intuito é aproximar a raiz de g , para termos um norteammento, suporemos que seja desejada uma estimativa tal que esta tenha erro menor que 10^{-4} .

Método da bissecção: No primeiro método, o da bissecção, temos que é possível ter um erro menor que 10^{-4} caso $|p_n - c| \leq \frac{b_n - a_n}{2} = \frac{(b-a)}{2^n} < 10^{-4}$ e nesse caso específico, como estamos tomando o intervalo $\left[\frac{1}{10}, \frac{\sqrt{3}}{3}\right]$, devemos ter $\frac{\frac{\sqrt{3}}{3} - \frac{1}{10}}{2^n} < 10^{-4}$. Veja que $n = 13$ satisfaz a desigualdade anterior. Deste modo, vamos construir uma tabela com algumas informações sobre o processo de iteração, sendo estas os extremos de cada subintervalo, a aproximação, o valor de g nas aproximações e o erro máximo que pode ser obtido. Na Tabela 3, a coluna Erro máximo relativa à iteração i representa o valor máximo que $|p_n - c|$ pode apresentar em cada subintervalo I_i .

n	a_n	b_n	p_n	$g(p_n)$	Erro máximo
1	1/10	$1/\sqrt{3}$	0,3386751346	-0,3066882239	0,238675134
2	0,3386751346	$1/\sqrt{3}$	0,4580127019	-0,0290954287	0,119337567
3	0,4580127019	$1/\sqrt{3}$	0,5176814855	0,0919175163	0,059668783
4	0,4580127019	0,5176814855	0,4878470937	0,0323944384	0,029834391
5	0,4580127019	0,4878470937	0,4729298978	0,0019246814	0,014917195
6	0,4580127019	0,4729298978	0,4654712998	-0,0135126075	0,007458597
7	0,4654712998	0,4729298978	0,4692005988	-0,0057762828	0,003729298
8	0,4692005988	0,4729298978	0,4710652483	-0,0019214433	0,001864649
9	0,4710652483	0,4729298978	0,4719975731	0,0000027007	0,000932324
10	0,4710652483	0,47199757305	0,4715314106	-0,0009590999	0,0004661623
11	0,4715314106	0,47199757305	0,4717644918	-0,0004781319	0,0002330812
12	0,4717644918	0,47199757305	0,4718810324	-0,0002376987	0,0001165406
13	0,4718810324	0,47199757305	0,4719393027	-0,0001174948	0,000058270

Tabela 3: Aproximação da raiz de g pelo Método da Bissecção.

É importante ressaltar que o método da bissecção nos permite calcular o erro da aproximação obtida para a raiz da função.

Método da secante: Para o segundo método não há como estimar o erro facilmente como no método anterior, entretanto, na prática, é comum utilizar-se como critério de parada das iterações os valores de g nos pontos encontrados. Porém, como o método da bissecção nos permite calcular o erro da aproximação, utilizaremos como critério para parada das iterações a aproximação obtida na última iteração do método anterior, ou seja, nosso critério para o cessamento das iterações será uma iteração que se assemelhe a 0,4719393027, onde há a estimativa de que $|0,4719393027 - c| < 10^{-4}$.

Deste modo, na Tabela 4, estão explícitos os pontos encontrados após cada iteração e também, o valor da função g aplicada nesses pontos.

Método de Newton-Raphson: Para a utilização do terceiro método, é necessário determinar $V_\delta(c)$, onde δ é dado por (11). Da definição de δ temos que é necessário estimar $|c - a|$ e $|c - b|$ e calcular $\frac{1}{K}$. Como o ponto c é desconhecido, é impossível obter um número exato para $|c - a|$ e $|c - b|$, mas é possível que obtenhamos um valor que seja menor que estes dois para que possamos determinar uma vizinhança aceitável centrada no ponto c para assim admitirmos uma aproximação inicial p_1 e prosseguirmos com o método de Newton-Raphson.

n	p_n	$g(p_n)$
1	0,5156610080	0,0879395608
2	0,4909717560	0,0387128332
3	0,4803970015	0,0172418471
4	0,4757448369	0,0077146876
5	0,4736747416	0,0034586862
6	0,4727489815	0,0015518921
7	0,4723340537	0,0006966017
8	0,4721478971	0,0003123850
9	0,4720643411	0,0001404143
10	0,4720268297	0,0000630458
11	0,4720099878	0,0000283079
12	0,4720024259	0,0000127104
13	0,4719990306	0,0000057071

Tabela 4: Aproximação da raiz de g pelo Método das Cordas.

Note que se considerarmos os pontos $z = \left(\frac{1}{10} + \frac{1}{20}\right)$ e $w = \left(\frac{\sqrt{3}}{3} - \frac{1}{20}\right)$, temos que

$$g(z) = g\left(\frac{1}{10} + \frac{1}{20}\right) = g\left(\frac{3}{20}\right) \approx -1,0246199848 < 0$$

e

$$g(w) = g\left(\frac{\sqrt{3}}{3} - \frac{1}{20}\right) = g\left(\frac{20\sqrt{3} - 3}{60}\right) \approx 0,1108577334 > 0.$$

Note que estes cálculos foram realizados para mostrar que mesmo avançando $\frac{1}{20}$ de a e retornando $\frac{1}{20}$ de b , obtemos que a raiz c não se encontra nos intervalos $[a, z]$ e $[w, b]$. Portanto, podemos afirmar que

$$|c - a| > |z - a| = \frac{1}{20} \text{ e } |c - b| > |b - w| = \frac{1}{20}.$$

Ainda temos que

$$K \approx \frac{98}{2 \cdot 1,8867513459} \approx 25,9705658122 \Rightarrow \frac{1}{K} \approx 0,0385051295,$$

ou seja, a vizinhança $V_\delta(c)$ terá raio aproximadamente igual a $\delta = 0,0385051295$, o que mostra a inviabilidade, para os fins do problema inicial, de se aplicar o método de Newton-Raphson em um intervalo tão restrito. Mais ainda, o comprimento deste intervalo representa 2,31030777049 minutos, ou seja, em torno de 2 minutos e 18 segundos quanto ao tempo para contaminação. Assim, para um erro de 2 minutos, pode-se tornar inviável utilizar o método de Newton-Raphson nestas condições, pois é possível que para os fins do estudo qualquer ponto neste intervalo já dê uma aproximação satisfatória.

Porém para que seja possível visualizar o comportamento do método de Newton-Raphson ao ser posto em prática, será apresentada a Tabela 5, a seguir, que informa os pontos da sequência (p_n) encontrados pelas iterações e também o valor de f nestes.

Para a escolha da aproximação p_1 , podemos utilizar os métodos anteriores para determinarmos o intervalo a ser utilizado aqui, que pelo método das secantes, podemos aproximar por $(0,4719990306 - 0,0385051295, 0,4719990306 + 0,0385051295)$, ou seja, pelo intervalo $(0,4334939011, 0,5105041601)$.

Por estar neste intervalo, vamos considerar $p_1 = 0,434$ e aplicar o método de Newton-Raphson. As iterações são expressas na Tabela 5.

n	p_n	$g(p_n)$
1	0,434	-0,0803547449
2	0,4709932273	-0,0020701716
3	0,4719956544	-0,0000012568
4	0,4719962637	-0,0000000000000462

Tabela 5: Aproximação da raiz de g pelo Método de Newton-Raphson.

Note que para $n = 3$ já obteríamos o resultado desejado, porém, de modo a tornar mais clara a velocidade de convergência do método realizamos uma iteração adicional e notamos que o número de dígitos nulos após a vírgula na aproximação de $g(p_n)$ supera o número máximo de casas consideradas nas aproximações deste estudo, que seria de 10 casas decimais após a vírgula. Veja que neste método há uma convergência consideravelmente mais rápida para a raiz da equação quando comparamos aos métodos anteriores, porém, há um fator a ser considerado: foi necessário iniciar este método a partir de um ponto já muito próximo do zero da função.

Agora, voltando ao problema do estudo do biovolume de bactérias, podemos concluir que as aproximações foram:

- Método da Bissecção: 0,4719975731, ou seja, o tempo estimado para a contaminação seria de 14,159927193 min;
- Método das Cordas: 0,4719990306, ou seja, o tempo estimado para a contaminação seria de 14,195570918 min;
- Método de Newton-Raphson: 0,4719962637, ou seja, o tempo estimado para a contaminação seria de 14,159887911 min.

Em todas as aproximações acima, temos que o tempo procurado para se poder manusear o material sem ter a possível contaminação por uma bactéria específica é o de 14 minutos e 10 segundos.

É possível notar algumas particularidades neste exemplo quando analisamos a eficiência dos métodos. Claramente tivemos que o método das secantes se mostrou mais eficiente que o método da bissecção, e que ainda, o método de Newton-Raphson superou o da secante quando analisamos as tabelas. Porém, é necessário levar-se em conta que o método de Newton-Raphson exigiu um intervalo muito restrito para o início das iterações.

Problema 2: Neste item apresentamos um problema exclusivamente matemático, sem contextualizações. É desejada a aproximação da raiz da equação

$$x^3 + 2x + 2 = 0. \quad (19)$$

Se denotarmos por h a função dada por $h(x) = x^3 + 2x + 2$, vemos que esta é definida para todo $x \in \mathbb{R}$, e por se tratar de uma função polinomial, é de classe C^∞ , logo, os métodos estudados são todos aplicáveis.

Para a determinação de um intervalo que contenha a raiz da equação (19), novamente nos atentamos às hipóteses dos teoremas estudados e vemos que é necessário determinar $[a, b] \subset \mathbb{R}$ tal que

- i) $h(a)$ e $h(b)$ tenham sinais opostos;
- ii) h' não se anule em $[a, b]$;
- iii) h'' não seja identicamente nula e não troque de sinal em $[a, b]$.

Calculando as derivadas da função h obtemos que para todo $x \in \mathbb{R}$

$$h'(x) = 3x^2 + 2 \quad \text{e} \quad h''(x) = 6x.$$

Ao estudar os sinais de h' e h'' concluímos que h' é estritamente positiva em todo seu domínio, $h''(x) > 0$ para $x \in (0, \infty)$ e $h''(x) < 0$ para $x \in (-\infty, 0)$.

Sabemos ainda que $x = 0$ é ponto crítico de h' , nos levando a analisar que h' é decrescente no intervalo $(-\infty, 0)$ e é crescente no intervalo $(0, \infty)$. Estudando o sinal de h'' vemos que esta possui sinal negativo em $(-\infty, 0)$ e positivo em $(0, \infty)$ e se anula em $x = 0$.

Das informações acima vemos que é necessário determinar um intervalo $[a, b]$, de isolamento da raiz, tal que

$$[a, b] \subset (-\infty, 0) \quad \text{ou} \quad [a, b] \subset (0, \infty)$$

Já que $h'(x) > 0, \forall x \in \mathbb{R}$ então h é crescente em todo seu domínio. Notando também por cálculos elementares que $h(0) = 2$, podemos descartar a possibilidade de considerar $[a, b] \subset (0, \infty)$.

Podemos ver que

$$h\left(-\frac{1}{100}\right) = \left(-\frac{1}{100}\right)^3 - \frac{2}{100} + 2 = 1,979999 > 0$$

e

$$h(-3) = (-3)^3 + 2(-3) + 2 = -31 < 0.$$

Assim, podemos tomar $[a, b] = \left[-3, -\frac{1}{100}\right]$, já que $h \in \mathcal{A}\left(\left[-3, -\frac{1}{100}\right]\right)$. Ainda vemos que em $\left[-3, -\frac{1}{100}\right]$ h é duas vezes derivável, $h'(x) \neq 0$, $h'' \neq 0$ e h'' não muda de sinal neste mesmo intervalo, sendo este o mesmo sinal de $h(-3) < 0$. Ainda pudemos ver acima que $h(-3) < 0 < h\left(-\frac{1}{100}\right)$.

Fixado o intervalo para a análise podemos determinar as limitações m e M . Por h' se tratar de uma função decrescente e positiva em $\left[-3, -\frac{1}{100}\right]$, temos que

$$m = \min_{-3 \leq x \leq -1/100} |h'(x)| = h'(-3) = 29. \quad (20)$$

Calculando temos que $h'''(x) = 6 > 0, \forall x \in \mathbb{R}$. Logo, h'' é crescente e negativa em $\left[-3, -\frac{1}{100}\right]$. Portanto

$$M = \max_{-3 \leq x \leq -1/100} |h''(x)| = -h''(-3) = 18. \quad (21)$$

De (20) e (21) temos que para todo $x \in \left[-3, -\frac{1}{100}\right]$

$$29 < |h'(x)| \quad \text{e} \quad |h''(x)| < 18.$$

Assim, resumindo as informações acima, temos que h no intervalo $\left[-3, -\frac{1}{100}\right]$ satisfaz as hipóteses dos Teoremas 3, 4 e 5. Portanto, existe uma única raiz para (19) neste intervalo. Vejamos agora, as aproximações obtidas por cada método.

Método da bissecção: Novamente, como no exemplo anterior, tomaremos um valor máximo para o erro que desejamos, e desta forma, seguiremos as iterações até alcançar tal objetivo. No caso do método da bissecção a estimativa de erro é possível e, supondo que desejemos um erro menor que 10^{-3} , então temos que, para o intervalo considerado, tal erro é possível ser alcançado caso o número n de iterações seja tal que $\frac{-\frac{1}{100} + 3}{2^n} < 10^{-3}$, ou seja, $n \geq 12$. Assim, na Tabela 6 podemos notar o desenvolvimento deste primeiro método.

n	a_n	b_n	p_n	$h(p_n)$	Erro máximo
1	-3	-1/100	-1,505	-4,4188626249	1,495
2	-1,505	-1/100	-0,7575	0,0503417686	0,7475
3	-1,505	-0,7575	-1,13125	-1,7101906738	0,37375
4	-1,13125	-0,7575	-0,944375	-0,7309853103	0,186875
5	-0,944375	-0,7575	-0,8509375	-0,3180342732	0,0934375
6	-0,8509375	-0,7575	-0,80421875	-0,1285802899	0,04671875
7	-0,80421875	-0,7575	-0,780859375	-0,0378410100	0,023359375
8	-0,780859375	-0,7575	-0,7691796875	0,0065651609	0,0116796875
9	-0,780859375	-0,7691796875	-0,7750195312	-0,0155586312	0,0058398437
10	-0,7750195312	-0,7691796875	-0,7720996093	-0,0044769865	0,0014599609
11	-0,772096093	-0,7691796875	-0,7706396484	0,0010490150	0,0014599609
12	-0,7720996093	-0,7706396484	-0,7713696289	-0,0017127526	0,0007299804

Tabela 6: Aproximação da raiz de h pelo Método da Bissecção.

Método da secante: Novamente lembramos que para este método não há estimativa para o erro como no método anterior, e portanto, iremos utilizar como critério de parada a aproximação dada pelo método anterior, que nos garante o erro desejado nas aproximações. Assim, neste método, encerraremos as iterações ao termos uma aproximação p_i tal que $|p_i - (-0,7713696289)| < 10^{-3}$ como pode ser visto na Tabela 7.

Note que este método obteve uma convergência consideravelmente lenta, resultando aproximações muito próximas às anteriores. Tal fato pode ser justificado, quando analisamos o gráfico desta função, pela notável inclinação da curva neste intervalo, o que ocasionou a construção de secantes com diferenças de inclinação muito pequenas.

n	p_n	$h(p_n)$
1	-0,1895087079	1,6141766534
2	-0,3286086299	1,3072983867
3	-0,4423337297	1,0287859084
4	-0,5244876716	0,8067447498
5	-0,587264477	0,6228992009
6	-0,6348016149	0,4745888014
7	-0,6704651997	0,3576796808
8	-0,6970369127	0,2672635010
9	-0,7167219733	0,1983828653
10	-0,7312407783	0,1465144373
11	-0,7419131115	0,1077987848
12	-0,7497381275	0,0790905005
13	-0,7554646251	0,0579068418
14	-0,7596495161	0,0423320061
15	-0,7627046516	0,0309113780
16	-0,7649333287	0,0225532603
17	-0,7665582124	0,0164451593
18	-0,7677424005	0,0119860289
19	-0,7686051606	0,0087331878
20	-0,7692336026	0,0063616292
21	-0,7696912928	0,0046332914
22	-0,7700245872	0,0033740906

Tabela 7: Aproximação da raiz de h pelo Método das Cordas.

Método de Newton-Raphson: Para utilizarmos este método é necessário determinar $V_\delta(c)$, para isso, é exigido estimar $|c - a|$ e $|c - b|$ e calcular $\frac{1}{K}$.

De um estudo já visto já podemos determinar $\frac{1}{K}$ a partir de m e M já definidos:

$$K = \frac{18}{2 \cdot 29} \approx 0,3103448275 \Rightarrow \frac{1}{K} \approx 3,2222222222.$$

Para estimarmos $|c - a|$ e $|c - b|$ consideremos os pontos $z' = \left(-3 + \frac{1}{100}\right)$ e $w' = \left(-\frac{1}{100} - \frac{1}{100}\right)$. Note que

$$h(z') = h(-2,99) \approx -30,710899 < 0$$

e

$$h(w') = h(-0,02) \approx 1,959992 > 0,$$

ou seja, mesmo avançando $\frac{1}{100}$ de a e retornando $\frac{1}{100}$ de b , obtemos que a raiz c não se encontra nos intervalos $[a, z']$ e $[w', b]$. Portanto, podemos afirmar que

$$|c - a| > |z' - a| = \frac{1}{100} \quad \text{e} \quad |c - b| > |b - w'| = \frac{1}{100}.$$

Desta forma, vemos que $\delta \approx 3,222222222 > 3,2$. Veja que o intervalo que estamos considerando, $\left[-3, -\frac{1}{100}\right]$ possui comprimento $b - a = -\frac{1}{100} - (-3) = 2,99$. De acordo com as aproximações pelos métodos anteriores, temos que para a escolha de p_1 , o método de Newton-Raphson garante a convergência da sequência de aproximações caso tomemos p_1 no intervalo $(-0,7713696289 - 3,2, -0,01 + 3,2) = (-3,9713696289, 3,19)$, ou seja, não é necessário nenhuma restrição adicional ao intervalo anteriormente considerado.

Por estar compreendido no intervalo $[a, b]$, escolhemos $p_1 = -2$ para iniciar as iterações do método de Newton-Raphson que são apresentadas na Tabela 8 abaixo.

n	p_n	$h(p_n)$
1	-2	-10
2	-1,2857142857	-2,6967930029
3	-0,8981985756	-0,5210284459
4	-0,7803263582	-0,0358006347
5	-0,7709709408	-0,0002040726

Tabela 8: Aproximação da raiz de h pelo Método de Newton-Raphson.

Veja que pelo método de Newton-Raphson uma aproximação semelhante às obtidas pelos métodos anteriores foi alcançada com apenas 5 iterações, mostrando sua eficiência e contrapondo um número maior de iterações visto nas tabelas dos primeiros dois métodos.

Sintetizando as aproximações obtidas pelos três métodos, temos que estas foram:

- -0,7713696289 pelo método da bissecção;
- -0,7700245872 pelo método da secante;
- -0,7709709408 pelo método de Newton-Raphson.

Conclusões gerais podem ser obtidas a partir das tabelas numéricas apresentadas anteriormente e naturalmente o leitor já pôde observar que o Método de Newton-Raphson se mostra realmente eficaz. Além disso, um fenômeno comum na Teoria das Aproximações aqui é percebido: aproximações melhores e sequências com convergência mais rápida são obtidas quando se exige mais do problema em questão. De fato, o Método de Newton-Raphson é mais eficaz, porém, como já discutido anteriormente, escolher o primeiro ponto desta sequência tendo a garantia de que a mesma irá convergir pode não ser uma tarefa óbvia e vantajosa frente ao problema dado. O Método das Cordas pode ser uma alternativa interessante, caso suas hipóteses sejam satisfeitas. O Método da Bissecção possui convergência lenta, mas é de extrema importância uma vez que garante a existência de raízes e ainda, estima o erro da aproximação.

O métodos numéricos apresentados aqui podem ser executados on-line em http://www.dma.uem.br/kit/paginas/proced_numericos.

Referências

1. ANTON, H.; BIVENS, I.; DAVIS, S. *Cálculo*. 10. ed. Porto Alegre: Bookman, 2014. 15
2. ASANO, C. H.; COLLI, E. *Cálculo Numérico: Fundamentos e Aplicações*. Departamento de Matemática Aplicada, IME-USP, 2009. 15
3. BARTLE, R. G. *Elementos de Análise Real*. Rio de Janeiro: Editora Campus LTDA, 1983. 15
4. BARTLE, R. G.; SHERBERT, D. R. *Introduction to Real Analysis*. 4. ed. John Wiley & Sons, 2010. 15
5. DE QUADROS, R.; DE BORTOLI, A. L. *Fundamentos de Cálculo Numérico para Engenheiros*, Porto Alegre, 2009. 15
6. KUDRIÁVTSEV, L. D. *Curso de Análisis Matemático*. Vol 1. Editora MIR, 1984. 15
7. MOREIRA, C. N.; CABRAL, M. A. P. *Curso de Análise Real*. Departamento de Matemática Aplicada, IM-UFRJ, 2011. 15
8. RUDIM, W. *Principles of Mathematical Analysis*. 3. ed. McGraw-HILL International Book Company, 1976. 15
9. RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. da R. *Cálculo Numérico: Aspectos teóricos e computacionais*. 2. ed. São Paulo: Pearson, 1996. 15
10. D. Andrade (2019, março 15). Intervalos encaixados. Acesso <http://www.dma.uem.br/kit/intervalosencaixados.html>
11. D. Andrade (2019, abril 15). O Teorema do Valor Intermediário. Acesso <http://www.dma.uem.br/kit/teoremadovalorintermediario.html>