MS211 - Cálculo Numérico

Sistemas Não-lineares e o Método de Newton
(Slides Modificados de M. E. Valle)

Introdução

Nas próximas aulas, estaremos interessados na resolução de sistemas não-lineares da seguinte forma:

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

em que x_i são as incógnitas e $f_i : D \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ $\forall$ $i = 1, \ldots, n$.

Considerando $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), \ldots, f_n(\mathbf{x}))^T$ $\forall$ $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, podemos escrever o sistema não-linear acima na forma $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, sendo $\mathbf{0} = (0, \ldots 0)^T \in \mathbb{R}^n$.

A Transição de $n = 1$ para $n > 1$: Motivação

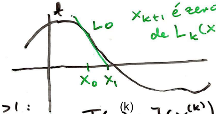
Método de Newton:

Generalização do caso $n=1$

$n=1$:

dado $(x_k, f(x_k))$ temos

$$L_k(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k)$$



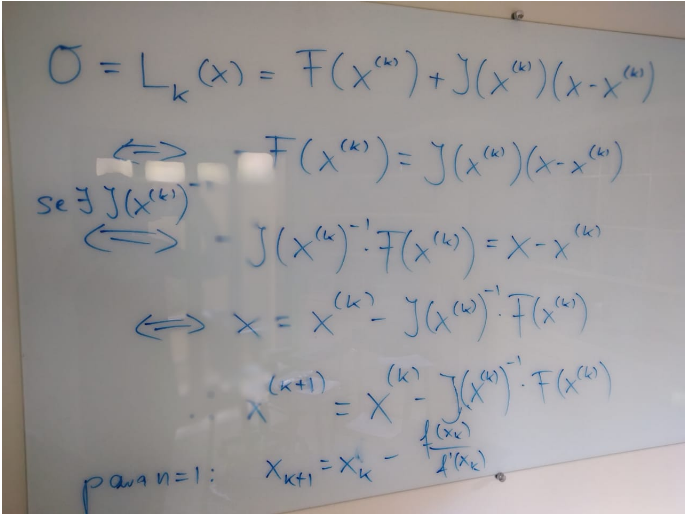
x_{k+1} é zero de $L_k(x)$

$n>1$:

$$L_k(x) = \underbrace{\underbrace{F(x^{(k)})}_{\in \mathbb{R}^n} + \underbrace{J(x^{(k)})}_{\in \mathbb{R}^{n\times n}} \cdot \underbrace{(x - x^{(k)})}_{\in \mathbb{R}^n}}_{\in \mathbb{R}^n}$$

Figura: Aqui $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ é a **matriz Jacobiana**, a generalização de $f'(x)$ para o caso $n > 1$.

Os Métodos de Newton para $n = 1$ e $n > 1$



A Transição de $n = 1$ para $n > 1$: Resolução

Caso geral $(n>1)$:

aproximação local linear é dado por:

$$L_k(x) = F(x^{(k)}) + J(x^{(k)})(x - x^{(k)})$$

$$L_k(x) = 0 \Leftrightarrow J(x^{(k)})\overbrace{(x - x^{(k)})}^{s} = -F(x^{(k)})$$

$$L_k(x^{(k+1)}) = 0 \Leftrightarrow J(x^{(k)})\overbrace{(x^{(k+1)} - x^{(k)})}^{s^{(k)}} = -F(x^{(k)})$$

$$x^{(k+1)} = s^{(k)} + x^{(k)}$$

Figura: Supondo que $\exists\ \mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})^{-1}$, pode-se encontrar $\mathbf{x}^{(k+1)}$ fazendo $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{J}(\mathbf{x}^{(k)})^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$. Porém, a resolução do sistema linear acima requer (geralmente) um esforço computacional menor.

Exemplo 1

O sistema não-linear

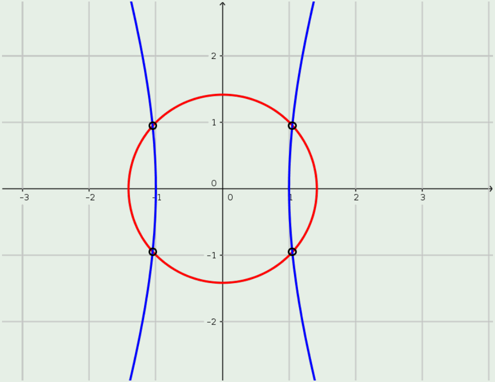
$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 2, \\ x^2 - \frac{y^2}{9} = 1. \end{cases}$$

pode ser escrito como

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 2 = 0, \\ f_2(x_1, x_2) = x_1^2 - \dfrac{x_2^2}{9} - 1 = 0. \end{cases}$$

Exemplo 1

Geometricamente, desejamos encontrar os quatro pontos que pertencem à ambas as curvas $x_1^2 + x_2^2 = 2$ e $x_1^2 - x_2^2/9 = 1$.



Exemplo 2

O sistema não-linear

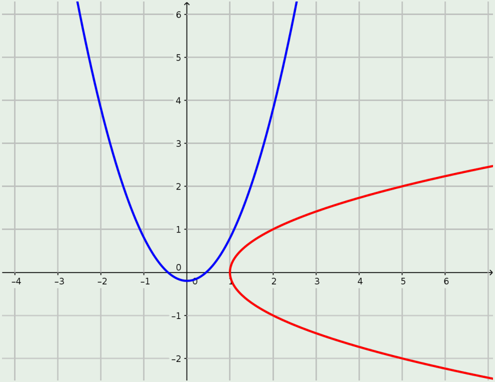
$$\begin{cases} x^2 - y = 0.2, \\ x - y^2 = 1. \end{cases}$$

pode ser escrito como

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_1^2 - x_2 - 0.2 = 0, \\ f_2(x_1, x_2) = x_1 - x_2^2 - 1 = 0. \end{cases}$$

Exemplo 2

Observe que as curvas $y = x^2 - 0.2$ e $x = 1 + y^2$ não se interceptam.



Logo, esse sistema não admite solução!

Notação

Denotaremos

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{bmatrix}.$$

Desta forma, o sistema não-linear

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

pode ser escrito de forma compacta como

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

Formulação do Problema e Hipóteses

Resolução de Sistema Não-Linear

Dada uma função $\mathbf{F} : D \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, determine $\xi \in D$ tal que

$$\mathbf{F}(\xi) = \mathbf{0}.$$

Em geral, assumiremos a existência da solução $\xi \in D$. Assumiremos também que o domínio D de $\mathbf{F}$ é um conjunto aberto e $\mathbf{F}$ possui derivadas contínuas nesse conjunto.

Vetor Gradiente

Definição 3 (Vetor Gradiente)

O vetor das derivadas parciais de f_i, denotado por

$$\nabla f_i(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_i}{\partial x_1}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial f_i}{\partial x_2}(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f_i}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{bmatrix},$$

é chamado **vetor gradiente** de f_i.

Matriz Jacobiana

Definição 4 (Matriz Jacobiana)

A matriz das derivadas parciais de **F**, denotada por

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \ldots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \ldots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \ldots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}.$$

é chamada **matriz Jacobiana** de **F**.

Aproximação Linear

Aproximação Linear

A aproximação linear $\mathbf{L}$ de uma função não-linear $\mathbf{F} : D \to \mathbb{R}^n$ em um ponto $\mathbf{a} \in D$ é dada pela equação

$$\mathbf{L}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{a}) + \mathbf{J}(\mathbf{a})(\mathbf{x} - \mathbf{a}).$$

Exemplo 5

Determine a matriz Jacobiana da função **F** do sistema não-linear:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1^3 - 3x_1x_2^2 + 1 \\ 3x_1^2x_2 - x_2^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Exemplo 5

Determine a matriz Jacobiana da função **F** do sistema não-linear:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} x_1^3 - 3x_1x_2^2 + 1 \\ 3x_1^2x_2 - x_2^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Resposta: A matriz Jacobiana de **F** é

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} 3x_1^2 - 3x_2^2 & -6x_1x_2 \\ 6x_1x_2 & 3x_1^2 - 3x_2^2 \end{bmatrix}$$

Exemplo 6 (Tridiagonal de Broyden)

Determine a matriz Jacobiana da seguinte função **F**:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -2x_1^2 + 3x_1 - 2x_2 + 1 \\ \vdots \\ -x_{i-1} - 2x_i^2 + 3x_i - 2x_{i+1} + 1 \\ \vdots \\ -2x_n^2 + 3x_n - x_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Exemplo 6 (Tridiagonal de Broyden)

Determine a matriz Jacobiana da seguinte função **F**:

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -2x_1^2 + 3x_1 - 2x_2 + 1 \\ \vdots \\ -x_{i-1} - 2x_i^2 + 3x_i - 2x_{i+1} + 1 \\ \vdots \\ -2x_n^2 + 3x_n - x_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Resposta: A matriz Jacobina de **F** é

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} -4x_1 + 3 & -2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & -4x_2 + 3 & -2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & -4x_n + 3 \end{bmatrix}.$$

Método de Newton

O método de Newton é um dos principais métodos usados para a resolução de um sistema não-linear.

Vimos anteriormente que o método de Netwon determina, a cada iteração, a solução da aproximação linear da função.

Dessa forma, conhecida uma aproximação $\mathbf{x}^{(k)}$, o método de Newton define $\mathbf{x}^{(k+1)}$ como sendo a solução do sistema linear

$$\mathbf{L}(\mathbf{x}) = \mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right) + \mathbf{J}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\left(\mathbf{x} - \mathbf{x}^{(k)}\right) = \mathbf{0},$$

ou seja, $\mathbf{x}^{(k+1)}$ é tal que

$$\mathbf{J}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\left(\mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}\right) = -\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right).$$

Tomando $\mathbf{s}^{(k)} = \mathbf{x}^{(k+1)} - \mathbf{x}^{(k)}$, conhecido por **passo de Newton**, temos que a nova aproximação é

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{s}^{(k)},$$

em que $\mathbf{s}^{(k)}$ é a solução do sistema linear

$$\mathbf{J}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\mathbf{s}^{(k)} = -\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right).$$

Resumindo, dado uma aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)}$, o método de Newton define a sequência $\{\mathbf{x}^{(k)}\}$ através dos seguintes passos:

- Resolve $\mathbf{J}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)\mathbf{s}^{(k)} = -\mathbf{F}\left(\mathbf{x}^{(k)}\right)$.
- Define $\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{s}^{(k)}$.

Espera-se que a sequência convirja para a solução ξ do sistema não-linear $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, ou seja,

$$\lim_{k\to\infty} \mathbf{x}^{(k)} = \xi.$$

Exemplo 7

Efetue uma iterações do método de Newton, com $\mathbf{x}^{(0)} = [1, 5]^T$, para determinar a solução do sistema não-linear:

$$\mathbf{F}(x, y) = \begin{bmatrix} x + y - 3 \\ x^2 + y^2 - 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

cujas soluções são $\xi^{(1)} = [3, 0]^T$ e $\xi^{(2)} = [0, 3]^T$.

Exemplo 7

Efetue uma iterações do método de Newton, com $\mathbf{x}^{(0)} = [1, 5]^T$, para determinar a solução do sistema não-linear:

$$\mathbf{F}(x, y) = \begin{bmatrix} x + y - 3 \\ x^2 + y^2 - 9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

cujas soluções são $\xi^{(1)} = [3, 0]^T$ e $\xi^{(2)} = [0, 3]^T$.

Resposta: Primeiramente, observe que a matriz Jacobiana da função **F** em um ponto (x, y) arbitrário é

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

Considerando $\mathbf{x}^{(0)} = [1, 5]^T$, temos:

$$\mathbf{J}(1,5) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 10 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{F}(1,5) = \begin{bmatrix} 3 \\ 17 \end{bmatrix}.$$

Resolvendo o sistema linear

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 10 \end{bmatrix} \mathbf{s}^{(0)} = \begin{bmatrix} -3 \\ -17 \end{bmatrix},$$

encontramos o passo de Newton

$$\mathbf{s}^{(0)} = \begin{bmatrix} -13/8 \\ -11/8 \end{bmatrix}.$$

Logo, temos $\mathbf{x}^{(1)} = [-5/8, 29/8]^T$.

Critério de Parada

Dada uma aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)}$, efetuamos as iterações do método de Netwon até:

- encontrarmos $\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})$ próximo do vetor nulo, isto é,

$$\|\mathbf{F}(\mathbf{x}^{(k)})\|_\infty \leqslant \epsilon_1, \quad \text{com } \epsilon_1 > 0,$$

ou

- não detectarmos alterações significativas de uma iteração para a outra, ou seja,

$$D_r = \|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|_\infty \leqslant \epsilon_2, \quad \text{com } \epsilon_2 > 0,$$

ou

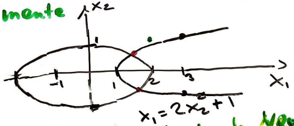
- até atingirmos um número máximo k_{max} de iterações!

O Método de Newton em Forma Tabelar: Exemplo

Exemplo

Considere
$$x_1 - 2x_2^2 = 1$$
$$\frac{x_1^2}{4} + x_2^2 = 1$$

(a) Localize as raízes graficamente



(b) Aplique o método de Newton com $x^{(0)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ e $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0.05$

$$F(x) \begin{cases} f_1(x) = x_1 - 2x_2^2 - 1 = 0 \\ f_2(x) = \frac{x_1^2}{4} + x_2^2 - 1 = 0 \end{cases}$$

Considere

It. k	$x^{(k)}$	$F(x^{(k)})$	$\|F(x^{(k)})\|_\infty$	$\|s^{(k-1)}\|_\infty$	$s^{(k)}$
0	$\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$	$1 \geq 0.05$	–	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} \end{pmatrix}$

O Método de Newton em Forma Tabelar: Exemplo

Iteração 1

$s^{(0)}$ é a solução de

$$J(x^{(0)}) \cdot s^{(0)} = -F(x^{(0)})$$

$$J(x) = \begin{pmatrix} 1 & -4x_2 \\ \frac{x_1}{2} & 2x_2 \end{pmatrix}$$

$$x^{(0)} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow J(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} 1 & -4 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & -4 & 1 \\ 1 & 2 & -1 \end{array}\right) \leadsto \left(\begin{array}{cc|c} 1 & -4 & 1 \\ 0 & 6 & -2 \end{array}\right)$$

$$\leadsto \left(\begin{array}{cc|c} 1 & -4 & 1 \\ 0 & 1 & -\frac{1}{3} \end{array}\right) \leadsto \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & -\frac{1}{3} \\ 0 & 1 & -\frac{1}{3} \end{array}\right)$$

$$\therefore s^{(0)} = \begin{pmatrix} -1/3 \\ -1/3 \end{pmatrix} \Rightarrow x^{(1)} = x^{(0)} + s^{(0)}$$

$$= \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0.33333 \\ -0.33333 \end{pmatrix}$$

k	$x^{(k)}$	$F(x^{(k)})$	$\lVert F(x^{(k)}) \rVert_\infty$	$\lVert s^{(k-1)} \rVert_\infty$	$s^{(k)}$
1	$\begin{pmatrix} 1.6667 \\ [illegible] \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.22222 \\ 0.13889 \end{pmatrix}$	$0.22222 \geq \varepsilon_1$	0.33333	

O Método de Newton em Forma Tabelar: Exemplo

Iteração 2

$s^{(1)}$ é solução de

$$J(x^{(1)}) \cdot s^{(1)} = -F(x^{(1)})$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & -2.6667 & 0.22222 \\ 0.83333 & 1.3333 & -0.13889 \end{array}\right)$$

$$\ldots \leadsto s^{(1)} = \begin{pmatrix} -0.20833 \cdot 10^{-1} \\ -0.91146 \cdot 10^{-1} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow x^{(2)} = x^{(1)} + s^{(1)}$$

$$= \begin{pmatrix} 1.6667 \\ 0.66667 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.020833 \\ 0.091146 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1.6458 \\ 0.57552 \end{pmatrix}$$

k	$x^{(k)}$	$F(x^{(k)})$	$\Vert F(x^{(k)})\Vert_\infty$	$\Vert s^{(k-1)}\Vert$	s^*
2	$\begin{pmatrix} 1.6458 \\ 0.57552 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -0.16615 \cdot 10^{-1} \\ 0.84161 \cdot 10^{-2} \end{pmatrix}$	0.016615 $< \varepsilon_1 = 0{,}05$		

PARE

Resultado:

$$x^{(2)} = \begin{pmatrix} 1.6458 \\ 0.57552 \end{pmatrix}$$

Considerações Finais

Observe que cada iteração do método de Newton requer:

1. Avaliação da matriz Jacobiana.
2. Resolução de um sistema linear.

Logo, o método de Newton é computacionalmente caro!

A vantagem é que, **sob certas condições** sobre a aproximação inicial $\mathbf{x}^{(0)}$, a função $\mathbf{F}$ e a matriz Jacobiana $\mathbf{J}$, a sequência $(\mathbf{x}^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ produzida pelo método de Newton **converge** para a solução de $\mathbf{F}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ com **ordem de convergência pelo menos quadrática.**

Muito grato pela atenção!