

LUCAS PALMA SILVA

MÉTODO DE NEWTON E BACIAS DE
CONVERGÊNCIA

Curitiba
2014

LUCAS PALMA SILVA

MÉTODO DE NEWTON E BACIAS DE
CONVERGÊNCIA

Trabalho de Conclusão do Curso de
Matemática Industrial da
Universidade Federal do Paraná.
Orientadora: Dr.^a Elizabeth Wegner Karas.

Curitiba
Dezembro de 2014

Sumário

1	Revisão de Conceitos	1
1.1	Derivada de uma função real	1
1.2	Derivada de funções de duas variáveis	2
1.3	Conceitos básicos de Otimização	3
2	Método de Newton	5
2.1	Método de Newton para funções de uma variável	5
2.2	Bacias de Atração	10
2.3	Método de Newton para funções de duas variáveis	13
2.4	Método de Newton para minimização de funções	18

Introdução

Encontrar soluções aproximadas de problemas através de uma forma iterativa muitas vezes é uma alternativa para encontrar resultados que quase sempre não podem ser obtidos de uma forma analítica devido a sua complexidade. Utilizam-se por exemplo os métodos iterativos para obtenção: de uma aproximação de raízes de funções, encontrar uma solução aproximada de um sistema de equações lineares ou não lineares, buscar pontos candidatos a minimizadores ou maximizadores de funções, etc. Um dos métodos iterativos utilizados para resolver aproximadamente estes tipos de problemas é o método de Newton, o qual destaca-se em razão de sua rapidez em termos de convergência quando comparado a outros métodos encontrados na literatura.

Este trabalho tem como objetivos:

- Apresentar o método de Newton e sua aplicação para encontrar as raízes de funções reais de uma variável e de funções vetoriais de duas variáveis.
- Aplicar o método de Newton para encontrar aproximações de pontos estacionários de uma função real de duas variáveis.
- Estudar o comportamento do método de Newton com relação à escolha dos pontos iniciais.
- Determinar as bacias de convergência de algumas funções.

O trabalho está estruturado em dois capítulos. No capítulo 1 são apresentados alguns conceitos do Cálculo de uma e duas variáveis que serão importantes para a construção do método de Newton. Dentre eles será discutido a respeito da definição de derivada, aproximação linear de funções, matriz Jacobiana, matriz Hessiana, etc. Será concentrada a atenção em funções cujo domínio é um subconjunto de \mathbb{R} ou \mathbb{R}^2 . No capítulo 2 é discutida a construção do método de Newton utilizando-o para encontrar raízes de funções reais de uma variável e de funções vetoriais de duas variáveis. Também é discutido sua aplicação para determinar os pontos candidatos a minimizadores de funções de duas variáveis. É dedicada uma seção neste capítulo para apresentar os conceitos de bacias de convergência do método de Newton.

São apresentados neste trabalho alguns exemplos da utilização do método de Newton e a representação das bacias de convergências das raízes ou pontos estacionários das funções estudadas. Para resolver estes exemplos e construir as bacias de convergência foi implementado um algoritmo em *Matlab*, o qual está dividido em duas partes, a primeira consiste em encontrar as raízes ou pontos estacionários da função utilizando o método de Newton e a segunda é dedicada a construir as bacias de convergência do método em função dos pontos iniciais. Para encontrar as soluções aproximadas para raízes e pontos estacionários é utilizado como ponto inicial do método um ponto de uma malha delimitada pelo usuário. É considerado um número máximo de iterações que cada ponto inicial tem

para convergir para uma solução do problema dentro de uma tolerância $\varepsilon > 0$ dada. Caso contrário o algoritmo é considerado falho neste ponto.

Para a representação das cores das bacias de convergência tem-se como base o modelo de cores RGB, abreviação para *Red* (vermelho), *Green* (verde) e *Blue* (azul). Uma cor no modelo de cores RGB pode ser descrita pela indicação da quantidade de vermelho, verde e azul que contém. Cada uma pode variar entre o mínimo (completamente escuro) e o máximo (completamente intenso).

Ao final deste trabalho espera-se que o leitor consiga entender o funcionamento do método de Newton para os casos propostos e verificar a importância da escolha do ponto inicial através da observação das bacias de convergência relacionadas às raízes ou pontos estacionários das funções.

Capítulo 1

Revisão de Conceitos

Neste capítulo apresentam-se alguns resultados fundamentais para o entendimento deste trabalho. As principais referências deste capítulo são [1, 2, 3, 5].

Sejam X e Y dois conjuntos quaisquer. Uma função f , que tem como domínio o conjunto X e como contradomínio o conjunto Y , é uma regra que associa cada elemento $x \in X$ a um único elemento $y \in Y$, usualmente denotada por $y = f(x)$.

1.1 Derivada de uma função real

Definição 1.1 (Derivada) [1, pág. 137] *Sejam $f : X \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de uma variável e $x_0 \in X$ um ponto de seu domínio. O limite*

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

quando existe e é finito, denomina-se derivada de f em x_0 e indica-se $f'(x_0)$. Assim,

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

ou ainda, chamando $h = x - x_0$

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Se f admite derivada em x_0 , então diz-se que f é derivável ou diferenciável em x_0 . Se f é derivável em todos os pontos de seu domínio, diz-se que f é derivável.

□

Geometricamente o valor $f'(x_0)$ representa o coeficiente angular da reta tangente r ao gráfico de f no ponto $(x_0, f(x_0))$. Assim um ponto $(x, r(x))$ pertencente à reta r satisfaz a equação:

$$r(x) = f'(x_0)(x - x_0) + f(x_0). \quad (1.1)$$

Derivada de segunda ordem

Seja $f : X \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, onde o conjunto X é tal que $f'(x)$ exista para todo $x \in X$. A derivada de f' denomina-se derivada de segunda ordem de f e é indicada como f'' , assim $f'' = (f')'$. De modo análogo define-se as derivadas de ordens superiores a dois de f .

Classe de funções

Uma função é de classe C^0 quando é contínua em todos os pontos do seu domínio. Pode-se dizer que uma função é de classe C^1 quando é contínua e possui derivada contínua. Analogamente, uma função é de classe C^2 quando é contínua e possui derivadas de primeira e segunda ordem contínuas.

1.2 Derivada de funções de duas variáveis

As principais referências desta seção são [2, 5].

Para este trabalho será utilizado o conceito de derivadas parciais. Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Fixado $b \in \mathbb{R}$ considere a função $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $g(x) = f(x, b)$ que é uma função de uma única variável. Se g tem derivada em um ponto $a \in \mathbb{R}$, então esta denomina-se derivada parcial de f , em relação a x , no ponto (a, b) e denota-se por $f_x(a, b)$. Assim,

$$f_x(a, b) = g'(a). \quad (1.2)$$

Pela definição de derivada, temos,

$$g'(a) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{g(a+h) - g(a)}{h}$$

e assim a igualdade (1.2) fica

$$f_x(a, b) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a+h, b) - f(a, b)}{h}. \quad (1.3)$$

Da mesma forma, a derivada parcial de f em relação a y em (a, b) , denotada por $f_y(a, b)$, é obtida mantendo-se x fixo ($x = a$) e determinando-se a derivada em um ponto $b \in \mathbb{R}$. Deste modo,

$$f_y(a, b) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(a, b+h) - f(a, b)}{h}. \quad (1.4)$$

Definição 1.2 (Vetor Gradiente) *Seja $f : X \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, uma função de classe C^1 que admita derivadas parciais em $(x_0, y_0) \in X$. O vetor*

$$\nabla f(x_0, y_0) = \begin{pmatrix} f_x(x_0, y_0) \\ f_y(x_0, y_0) \end{pmatrix}$$

denomina-se gradiente de f em (x_0, y_0) . □

Geometricamente, $\nabla f(x_0, y_0)$ é um vetor aplicado no ponto (x_0, y_0) na direção de maior crescimento da função f .

Uma das ferramentas muito utilizadas em Otimização são as aproximações de Taylor. Estas podem ser utilizadas em funções deriváveis e auxiliam nas demonstrações de teoremas. Neste trabalho será utilizada a aproximação de Taylor de primeira ordem.

Taylor de primeira ordem

Considere $f : X \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ uma função diferenciável e $(a, b) \in X$. Então pode-se escrever

$$f(x, y) = f(a, b) + \nabla f(a, b)^T((x, y) - (a, b)) + r(x, y), \quad (1.5)$$

com $\lim_{(x,y) \rightarrow (a,b)} \frac{r(x,y)}{\|(x,y) - (a,b)\|} = 0$.

O limite nulo citado acima, significa que para (x, y) próximo de (a, b) , o resto $r(x, y)$ é muito pequeno e vai para zero mais rápido que $\|(x, y) - (a, b)\|$.

O polinômio

$$L(x, y) = f(a, b) + \nabla f(a, b)^T((x, y) - (a, b)) \quad (1.6)$$

é chamado polinômio de Taylor de ordem 1 da função f . Note que este polinômio é uma aproximação linear da função f em torno do ponto (a, b) . Além disso, dentre todos os polinômios de grau menor ou igual a um, ele é o que melhor aproxima f e também é o único que satisfaz $L(a, b) = f(a, b)$ e $\nabla L(a, b) = \nabla f(a, b)$.

Matriz Hessiana

Seja $f : X \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^2 . A Matriz Hessiana de f , denotada por $\nabla^2 f$, em um ponto $(x, y) \in X$, é a matriz quadrada das derivadas de segunda ordem de f , ou seja,

$$\nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} f_{xx}(x, y) & f_{xy}(x, y) \\ f_{yx}(x, y) & f_{yy}(x, y) \end{pmatrix}$$

onde $f_{xy}(x, y) = (f_x(x, y))_y$.

Matriz Jacobiana

Considere $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ uma função vetorial e $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, com

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

para $f_1, f_2 : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. As derivadas parciais dessa função em um ponto $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ podem ser organizadas em uma matriz denominada Matriz Jacobiana. Assim, cada linha i da Jacobiana de F é a transposta do vetor gradiente da componente f_i , ou seja,

$$J_F(x, y) = \begin{pmatrix} \nabla f_1^T(x, y) \\ \nabla f_2^T(x, y) \end{pmatrix}.$$

1.3 Conceitos básicos de Otimização

Encontrar um ponto maximizador ou minimizador de uma função é muitas vezes o objetivo de muitos problemas e é um dos focos de interesse deste trabalho. A principal referência desta seção é [3].

Definição 1.3 Considere uma função $f : X \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$. Um ponto $(x^*, y^*) \in X$ é um minimizador local de f em X quando existe $\delta > 0$, tal que $f(x^*, y^*) \leq f(x, y)$, para todo $(x, y) \in X$ com $\|(x, y) - (x^*, y^*)\| < \delta$. Caso $f(x^*, y^*) \leq f(x, y)$, para todo $(x, y) \in X$, (x^*, y^*) é dito minimizador global de f em X . \square

Quando as desigualdades na Definição 1.3 forem estritas para $(x, y) \neq (x^*, y^*)$, diz-se que (x^*, y^*) é um minimizador estrito. Se não for mencionado o conjunto X , significa que $X = \mathbb{R}^2$ e portanto o problema torna-se irrestrito.

A Definição 1.3 pode ser estendida para pontos maximizadores de uma função bastando inverter as desigualdades presentes nesta.

Teorema 1.4 (Condição de Otimalidade) Seja $f : X \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ diferenciável. Se o ponto (x^*, y^*) é um minimizador local de f , então $\nabla f(x^*, y^*) = 0$.

Demonstração. Veja Teorema 2.9 da referência [3]. \square

Um ponto $(x^*, y^*) \in \mathbb{R}^2$ tal que $\nabla f(x^*, y^*) = 0$ é dito ponto crítico ou estacionário da função f .

Como no cálculo de uma única variável, nem todos os pontos críticos correspondem a um máximo ou mínimo. Em um ponto crítico, a função pode ter um máximo local ou um mínimo local, ou ainda nenhum dos dois. Um ponto crítico que não é nem maximizador e nem minimizador, é chamado ponto de sela de f .

Capítulo 2

Método de Newton

As raízes de uma função nem sempre podem ser determinadas analiticamente. Uma forma de encontrar raízes de funções é através de fórmulas iterativas, onde a partir de um ponto é possível encontrar aproximações bem satisfatórias para suas raízes. Uma destas formas é através do Método de Newton, que será trabalhado neste capítulo, cujas principais referências são [3, 5].

2.1 Método de Newton para funções de uma variável

Nesta seção tem-se o interesse em determinar as raízes de uma função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ de classe C^1 . Ou seja, encontrar os valores de $x \in \mathbb{R}$ tais que $f(x) = 0$.

Uma ideia geral do Método de Newton seria encontrar os pontos em que $f(x) = 0$, através da raiz de uma aproximação linear de f em um dado ponto inicial x_0 . Ou seja, se r é a reta tangente a f no ponto x_0 , então o próximo ponto x_1 do método seria o ponto em que $r(x_1) = 0$ pois é onde a aproximação linear se anula. E o processo é repetido até obter um ponto satisfatório para a raiz de f .

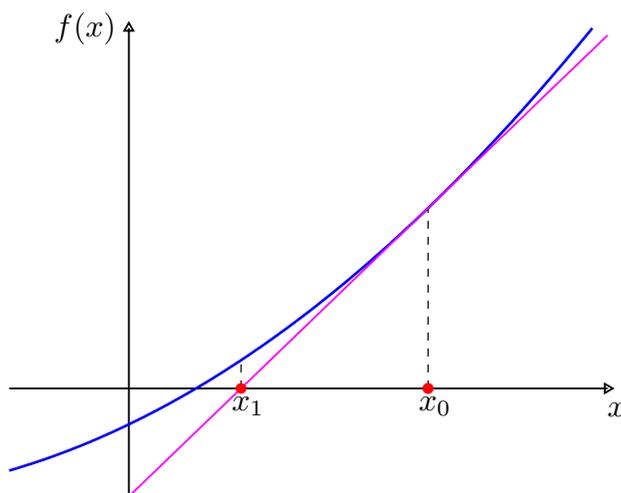


Figura 2.1: Reta tangente ao gráfico de f .

Como foi visto no capítulo anterior uma aproximação linear da função f no ponto x_0 pode ser dada pela reta tangente r no ponto $(x_0, f(x_0))$ e sua equação se dá através de (1.1):

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

Assim, o novo ponto x_1 será tal que $r(x_1) = 0$, ou seja

$$f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) = 0$$

e

$$f'(x_0)(x_1 - x_0) = -f(x_0).$$

Se $f'(x_0) \neq 0$, então

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}. \quad (2.1)$$

A partir do momento em que é encontrado x_1 , é obtida a aproximação linear de f no ponto x_1 . O ponto seguinte x_2 será aquele que anula esta aproximação linear, e assim será repetido o processo iterativamente. Deste modo, dado $k \in \mathbb{N}$ e $x_k \in \mathbb{R}$ com $f'(x_k) \neq 0$, obtém-se o novo iterando x_{k+1} a partir de x_k por

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (2.2)$$

Esta expressão corresponde a uma iteração do método de Newton. Note que esta regra só está bem definida para os pontos $x_k \in \mathbb{R}$ tais que $f'(x_k) \neq 0$. O algoritmo abaixo sintetiza o que foi discutido.

Algoritmo 2.1 *Método de Newton para funções de uma variável*

Dados: $x_0 \in \mathbb{R}$, $\varepsilon > 0$

Faça $k = 0$

REPITA

SE $f'(x_k) \neq 0$

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

SENÃO

Pare com insucesso

$k = k + 1$

ATÉ QUE $|f(x_k)| \leq \varepsilon$

Note que este algoritmo gera uma sequência $(x_k) \subset \mathbb{R}$. Deseja-se que esta sequência convirja para alguma das raízes da função na qual aplica-se o método. O algoritmo foi implementado em *Matlab*, adotando-se $\varepsilon = 10^{-10}$ e um número máximo de iterações de 30.

Exemplo 2.1 *Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ com $f(x) = x^3 - 3x$. Apesar de suas raízes serem conhecidas, 0 e $\pm\sqrt{3}$, aplica-se o método de Newton em diferentes pontos iniciais para entender o método. A Figura 2.2 mostra o gráfico da função f .*

Para iniciar o método se faz necessário verificar se as condições iniciais do método são satisfeitas. Os pontos em que o método não está bem definido são aqueles que anulam a derivada, ou sejam,

$$f'(x) = 3x^2 - 3 = 0.$$

Portanto os pontos críticos de f são 1 e -1 . Logo, o método falha quando qualquer ponto da sequência x_k é um dos pontos críticos de f , para $k \in \mathbb{R}$.

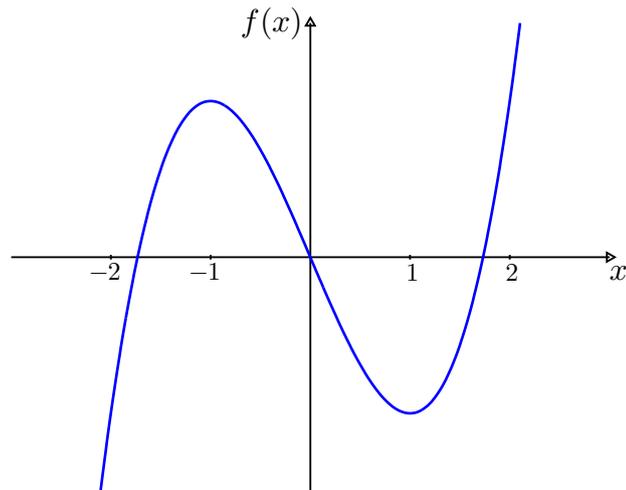


Figura 2.2: Gráfico da função $f(x) = x^3 - 3x$.

- Tome como ponto inicial $x_0 = \frac{1}{2}$. Por (2.1) tem-se:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{2} - \frac{\left(\frac{1}{2}\right)^3 - 3\left(\frac{1}{2}\right)}{3\left(\frac{1}{2}\right)^2 - 3} \\ &= -0, \overline{11}. \end{aligned}$$

Por (2.2)

$$\begin{aligned} x_2 &= -0, \overline{11} - \frac{(-0, \overline{11})^3 - 3(-0, \overline{11})}{3(-0, \overline{11})^2 - 3} \\ &= 0,00092592592. \end{aligned}$$

Repetindo o método iterativamente tem-se $x_4 = 0$ que já é uma das raízes de f .

- Escolhendo um segundo ponto inicial $x_0 = 100$, por (2.1) tem-se:

$$\begin{aligned} x_1 &= 100 - \frac{(100)^3 - 3(100)}{3(100)^2 - 3} \\ &= 66,6733340000667. \end{aligned}$$

Por (2.2)

$$\begin{aligned} x_2 &= 66,6733340000667 - \frac{(66,6733340000667)^3 - 3(66,6733340000667)}{3(66,6733340000667)^2 - 3} \\ &= 44,458890583209. \end{aligned}$$

De uma maneira iterativa tem-se $x_{15} = 1,73205080756888$ que é uma aproximação bem satisfatória da raiz $\sqrt{3} = 1,732050807568877$.

- Tomando $x_0 = -85$, tem-se que $x_{15} = -1,73205080756888$ e a sequência irá convergir para a raiz $-\sqrt{3}$.

Exemplo 2.2 Seja a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = x^4 - x^2$. Novamente, mesmo que suas raízes sejam conhecidas, pode-se aplicar o Método de Newton para entender um pouco do funcionamento do método.

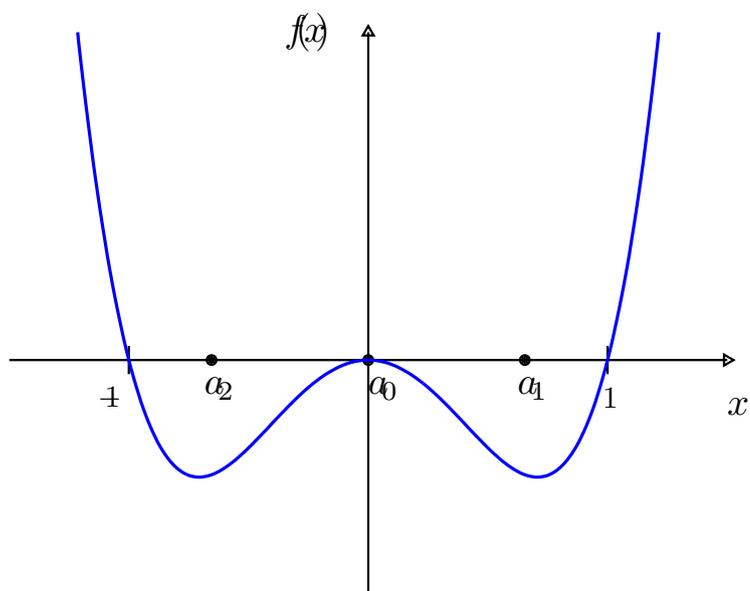


Figura 2.3: Gráfico da função $f(x) = x^4 - x^2$

Antes é observado na Figura 2.3 o comportamento desta função.

Por se tratar de uma função simples, fica fácil de verificar que as suas raízes são: 1, -1 e 0. A derivada de f é $f'(x) = 4x^3 - 2x$ e seus pontos críticos são: 0 , $\frac{\sqrt{2}}{2}$ e $-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$. Cabe salientar que nestes pontos o método não está bem definido. Portanto o algoritmo falha em encontrar uma raiz de f , sempre que o ponto inicial ou um dos pontos da sequência gerada pelo método for um ponto crítico de f .

Agora para executar o método é necessário escolher o ponto inicial do algoritmo. A seguir será analisado o comportamento do método com diferentes pontos iniciais.

- Considere o ponto inicial $x_0 = 2$. Logo por (2.1) tem-se

$$\begin{aligned}x_1 &= 2 - \frac{(2)^4 - (2)^2}{4(2)^3 - 2(2)} \\ &= 1,57.\end{aligned}$$

Por (2.2), tem-se

$$\begin{aligned}x_2 &= 1,57 - \frac{(1,57)^4 - (1,57)^2}{4(1,57)^3 - 2(1,57)} \\ &= 1,28.\end{aligned}$$

Repetindo o processo iterativamente, obtém-se

$$x_7 = 1,000000000000664,$$

o qual já está bem próximo de 1, uma das raízes desta função. Portanto com poucas iterações já se tem uma aproximação bem satisfatória para esta raiz.

- Tomando $x_0 = -2$, tem-se que

$$x_7 = -1,000000000000664$$

e a sequência irá convergir para a raiz -1.

- Tomando $x_0 = \frac{1}{2}$, tem-se que

$$x_{20} = 0,000000466773728$$

e a sequência irá convergir para a raiz 0.

Assim, nota-se que dependendo do ponto inicial, o método converge para uma determinada raiz.

- Agora considere o ponto inicial $x_0 = -\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$. Neste caso como $-\left(\frac{\sqrt{2}}{2}\right)$ é um ponto crítico de f , o método não está bem definido e portanto falha.
- Discute-se a seguir a obtenção de um ponto inicial $x_0 = a$ em que o método entra em ciclo, ou seja em que, por exemplo o segundo iterando retorne para a , isto é $x_2 = a$. Neste caso o método irá falhar.

Tomando $x_0 = a$ em (2.1) e considerando $x_1 = b$, tem-se

$$b = x_1 = a - \frac{f(a)}{f'(a)}. \quad (2.3)$$

Por (2.2) e pela condição de que $x_2 = x_0$, tem-se que

$$x_2 = b - \frac{f(b)}{f'(b)} = a. \quad (2.4)$$

Substituindo a expressão de b , dada em (2.3) em (2.4), segue que

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

e conseqüentemente

$$\frac{f(a)}{f'(a)} = \frac{f(b)}{f'(b)}. \quad (2.5)$$

Por outro lado, f é uma função par, logo sua derivada é uma função ímpar, ou seja para todo $x \in \mathbb{R}$, $f(-x) = f(x)$ e $f'(-x) = -f'(x)$, e conseqüentemente

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

Portanto quando $b = -a$, a igualdade (2.5) se verifica. Substituindo em (2.3), tem-se que

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

Usando as expressões de f e f' , tem-se

$$\frac{3a^4 - a^2}{4a^3 - 2a} = 2a.$$

Donde segue que

$$7a^4 - 3a^2 = 0$$

com raízes $a_0 = 0$, $a_1 = \sqrt{\frac{3}{7}}$ e $a_2 = -\sqrt{\frac{3}{7}}$. Como $a = 0$ é um ponto crítico de f , o método não está bem definido tendo este ponto como valor inicial. Portanto o método irá ciclar quando o ponto inicial é a_1 ou a_2 .

Este exemplo mostra que o desempenho do método de Newton depende da escolha do ponto inicial, podendo falhar em alguns casos. Pode-se observar a partir desta seção que de acordo com o ponto inicial considerado, o método de Newton pode convergir para alguma das raízes, não estar bem definido, entrar em ciclo ou ainda não convergir. Então a escolha do ponto inicial é fundamental para um bom funcionamento do método. Discute-se na próxima seção o comportamento do método de acordo com diversos pontos iniciais.

2.2 Bacias de Atração

A ideia básica de bacias de atração é analisar o comportamento do método ao ser aplicado em uma função f de acordo com pontos iniciais distintos. A bacia de atração ou de convergência de uma raiz x^* de f é o conjunto de pontos iniciais x_0 para os quais a sequência (x_k) gerada pelo método de Newton converge para x^* .

Para visualizar graficamente as bacias de convergência, cria-se uma malha do domínio de f e para cada ponto da malha aplica-se o método de Newton e verifica-se quando este obteve solução e caso positivo para qual raiz convergiu. Cada raiz é

caracterizada por uma cor e cada ponto da malha será pintado da cor que representa a raiz a qual ele convergiu. As bacias de atração irão identificar através dos pontos da malha os diferentes tipos de soluções através das cores que caracterizam cada raiz. Por exemplo, suponha que uma função possua três raízes, r_1 , r_2 e r_3 as quais são caracterizadas pelas cores azul, verde e vermelho, respectivamente. Deste modo, se dado em um ponto inicial o método convergir para a raiz r_1 este ponto é pintado de azul, caso convirja para r_2 é pintado de verde e se convergir para r_3 é pintado de vermelho. Estipula-se neste trabalho que caso a sequência não convirja, então o ponto inicial será pintado de preto, considerando-se que o método falhou.

Foi implementado um algoritmo em *Matlab* que obtém as raízes pelo método de Newton a partir de diversos pontos iniciais escolhidos através de uma malha de pontos, conforme discutido acima. A partir de um ponto inicial é gerada uma sequência (x_k) pelo método de Newton. Caso a distância de x_k a uma raiz r seja inferior a 10^{-10} , considerou-se que a sequência convergiu para r e o ponto inicial foi pintado com a cor correspondente à raiz r . Caso este critério não tenha sido satisfeito para nenhuma das raízes de f após um número máximo de iterações k_{\max} , foi considerado que o método falhou com aquele ponto inicial e este é pintado de preto. Foi adotado $k_{\max} = 30$.

Exemplo 2.3 *Seja a função $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ dado por $f(x) = x^4 - x^2$ do Exemplo 2.2, com raízes 0, 1 e -1 . Como visto na seção anterior, dependendo do ponto inicial o método poderá convergir para qualquer uma das três raízes. Apresenta-se agora as bacias de convergência desta função.*

Na Figura 2.4, são observadas as bacias de convergência de f . Nesta, é possível notar que os pontos iniciais para os quais as sequências geradas pelo método de Newton convergem para a raiz -1 estão pintados em azul, os pontos cujas sequências convergem para a raiz 0 estão pintados de verde e os pontos cujas sequências convergem para raiz 1 estão pintados de vermelho.

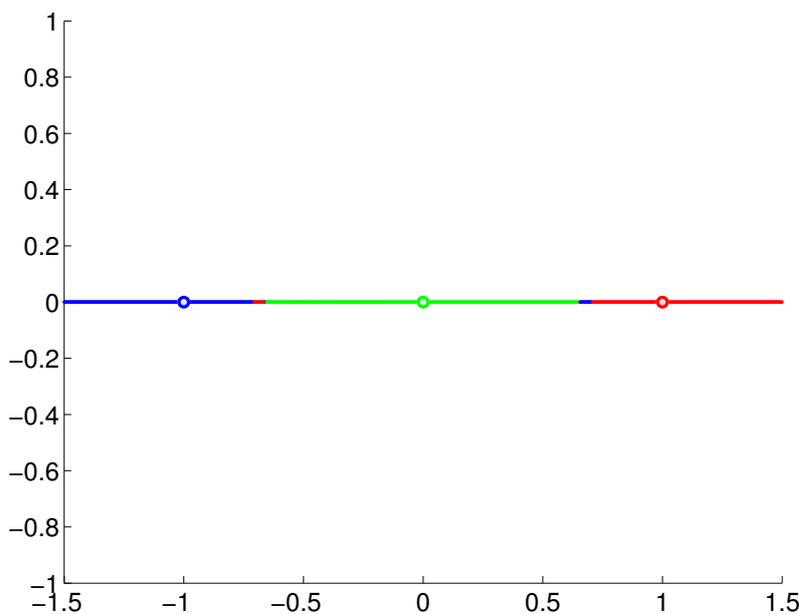


Figura 2.4: Bacias de convergência de f .

Na Figura 2.5 amplia-se a Figura 2.4 nas proximidades do ponto $(-\sqrt{\frac{3}{7}}, 0)$. Nesta é possível verificar que o ponto $(-\sqrt{\frac{3}{7}}, 0)$ está pintado de preto, uma vez que ele

é um ponto em que o método cicla, não convergindo para nenhuma das raízes de f .

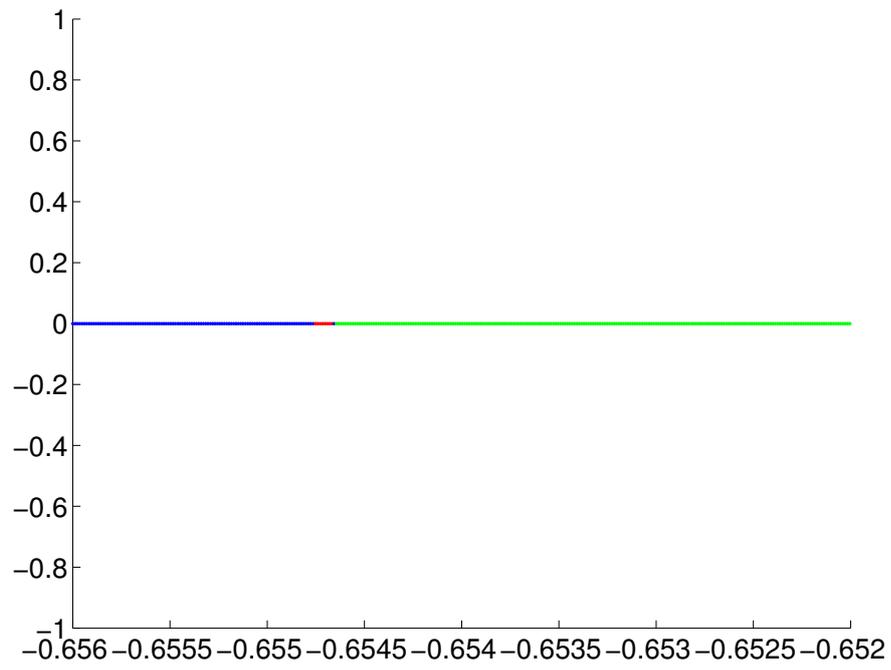


Figura 2.5: Ampliação nas proximidades do ponto $(-\sqrt{\frac{3}{7}}, 0)$.

2.3 Método de Newton para funções de duas variáveis

Seja $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ uma função de classe C^2 . Tem-se como objetivo nesta seção encontrar as soluções aproximadas para $F(x, y) = 0$. De uma forma equivalente a que foi realizado para funções de uma variável, considere $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ um ponto inicial uma aproximação linear de F em torno de (x_0, y_0) pode ser dada por

$$L(x, y) = F(x_0, y_0) + J_F(x_0, y_0)((x, y) - (x_0, y_0)), \quad (2.6)$$

onde J_F é a Matriz Jacobiana definida no Capítulo 1.

Da mesma forma que foi observado no Método de Newton para uma variável, o segundo ponto do método, $(x_1, y_1) \in \mathbb{R}^2$, é o ponto em que a aproximação linear se anula, ou seja, $L(x_1, y_1) = 0$. Deste modo,

$$J_F(x_0, y_0)((x_1, y_1) - (x_0, y_0)) = -F(x_0, y_0). \quad (2.7)$$

Se $J_F(x_0, y_0)$ é não singular, então

$$(x_1, y_1) = (x_0, y_0) - (J_F(x_0, y_0))^{-1}F(x_0, y_0). \quad (2.8)$$

A partir do momento em que é encontrado (x_1, y_1) , é obtida a aproximação linear de F no ponto (x_1, y_1) . O ponto seguinte (x_2, y_2) será aquele que anula esta aproximação linear, e assim será repetido o processo iterativamente. Portanto dado $k \in \mathbb{N}$ e um ponto $(x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2$ o novo iterando $(x_{k+1}, y_{k+1}) \in \mathbb{R}^2$ obtido pelo método de Newton é dado por

$$(x_{k+1}, y_{k+1}) = (x_k, y_k) - (J_F(x_k, y_k))^{-1}F(x_k, y_k). \quad (2.9)$$

Note que caso $J_F(x_k, y_k)$ é singular, para algum $(x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2$ com $k \in \mathbb{N}$, o método não está definido e a sequência não irá prosseguir.

O algoritmo a seguir sintetiza o que foi discutido.

Algoritmo 2.2 *Método de Newton para funções de duas variáveis*

Dados $(x_0, y_0) \in \mathbb{R}^2$ e $\varepsilon > 0$

Faça $k = 0$

REPITA

SE $J_F(x_k, y_k)$ é não singular

$$(x_{k+1}, y_{k+1}) = (x_k, y_k) - (J_F(x_k, y_k))^{-1}F(x_k, y_k)$$

SENÃO

Pare com insucesso

$$k = k + 1$$

ATÉ QUE $\|F(x_k, y_k)\| \leq \varepsilon$

Exemplo 2.4 *Considere $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida por*

$$F(x, y) = \begin{pmatrix} x^3 - 3xy^2 - 1 \\ 3x^2y - y^3 \end{pmatrix}.$$

Função a qual é representada no espaço complexo da forma $f(z) = z^3 - 1$, onde $z = x + iy$.

Apresentam-se neste exemplo as bacias de convergência de cada uma das raízes da função F do método de Newton.

As raízes de F podem ser obtidas analiticamente, como discutido abaixo:

$$F(x, y) = 0 \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} x^3 - 3xy^2 - 1 = 0 \\ 3x^2y - y^3 = 0 \end{cases}$$

- Se $y = 0$, da primeira equação tem-se $x = 1$.
- Se $3x^2 - y^2 = 0$, então $3x^2 = y^2$. Substituindo na primeira equação obtém-se $x^3 - 3x(3x^2) = 1$. Assim, $x = -\frac{1}{2}$. Deste modo, tem-se $3(-\frac{1}{2})^2 = y^2$ e portanto $y = \pm \frac{\sqrt{3}}{2}$.

Logo as raízes são: $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$.

O Método de Newton está bem definido quando a Matriz Jacobiana de F no ponto corrente é não singular, ou seja, nos pontos em que o $\det(J_F) \neq 0$. Neste caso, a matriz Jacobiana é dada por $J_F \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3x^2 - 3y^2 & -6xy \\ 6xy & 3x^2 - 3y^2 \end{pmatrix}$, e seu determinante

$$\begin{aligned} \det(J_F) &= (3x^2 - 3y^2)^2 + 36x^2y^2 \\ &= 9x^4 - 18x^2y^2 + 9y^4 + 36x^2y^2 \\ &= 9(x^4 + y^4 + 2x^2y^2) \\ &= 9(x^2 + y^2)^2 > 0, \end{aligned}$$

para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\}$. Logo o método está bem definido para todos os pontos, com exceção da origem.

Considerando (x, y) não nulos, a forma iterativa do método por (2.9) se dá:

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3x_k^2 - 3y_k^2 & -6x_ky_k \\ 6x_ky_k & 3x_k^2 - 3y_k^2 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} x_k^3 - 3x_ky_k^2 - 1 \\ 3x_k^2y_k - y_k^3 \end{pmatrix}.$$

E assim é possível construir as bacias de convergência da função F que podem ser visualizadas na Figura 2.6 onde as raízes de f estão assinaladas em preto.

Ao tomar como ponto inicial um ponto na região verde, a sequência gerada pelo método de Newton convergirá para a raiz $(1, 0)$, na região azul convergirá para a raiz $\left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right)$ e na região vermelha para a raiz $\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$.

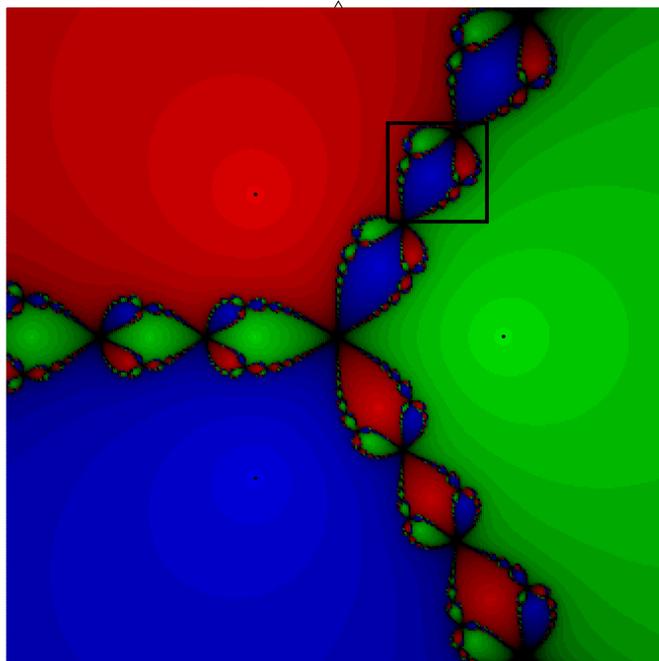


Figura 2.6: Gráfico das bacias de convergência de F do Exemplo 2.4.

As diferentes tonalidades nas bacias correspondem à velocidade com que a sequência converge para uma dada raiz. Quanto mais claro, menos iterações foram necessárias para que a sequência tenha sido considerada convergente segundo a precisão ε dada. O método irá falhar nas fronteiras destas bacias, que são os pontos assinalados em preto.

A Figura 2.6 representa uma imagem fractal [4]. Este é um tema muito bonito mas que sai do escopo deste trabalho. De modo geral um fractal é uma figura que tem algumas propriedades que a diferenciam das figuras convencionais como:

- Estrutura fina, ou seja, o grau de detalhamento não diminui quando examina-se uma porção arbitrariamente pequena do fractal. A Figura 2.7 é a ampliação de uma pequena região da figura original. Note que nela encontra-se a mesma riqueza de detalhes da figura original.
- Auto-similaridade, ou seja, uma porção do fractal reproduz a forma de uma porção maior, o que também pode ser visualizado nas Figuras 2.6 e Figura 2.7.

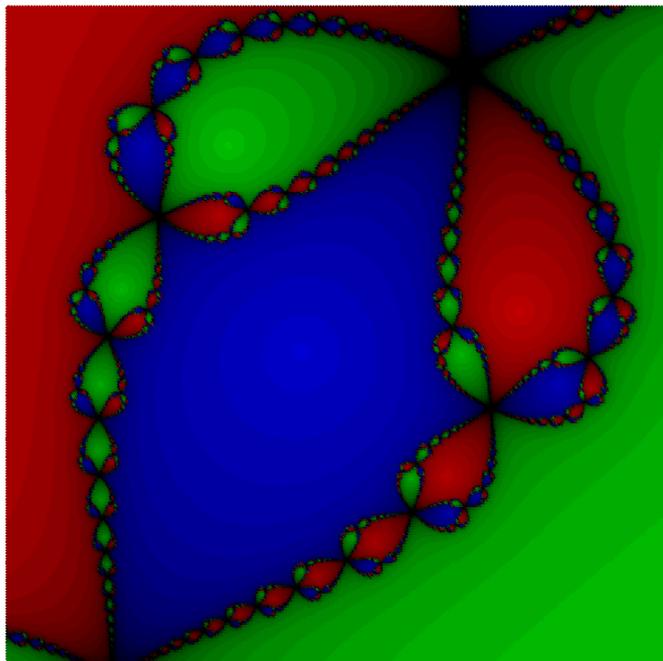


Figura 2.7: Ampliação da região assinalada da Figura 2.6.

Exemplo 2.5 Considere $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida por:

$$F(x, y) = \begin{pmatrix} x^3 - 3xy^2 + x^2 - y^2 + x + 1 \\ 3x^2y - y^3 + 2xy + y \end{pmatrix}.$$

Em que neste caso F é representada no espaço complexo da forma $f(z) = z^3 + z^2 + z + 1$.

As raízes desta função são: $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$; $\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e estão assinaladas em branco na Figura 2.8. Da mesma forma realizada no exemplo anterior, o método está bem definido quando a matriz Jacobiana de F é não singular. Neste caso, a Jacobiana é dada por

$$J_F(x, y) = \begin{pmatrix} 3x^2 - 3y^2 + 2x + 1 & -6xy - 2y \\ 6xy + 2y & 3x^2 - 3y^2 + 2x + 1 \end{pmatrix},$$

e seu determinante

$$\det(J_F) = (3x^2 - 3y^2 + 2x + 1)^2 + 4y^2(3x + 1)^2 > 0,$$

para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2 \setminus \left\{ \left(-\frac{1}{3}, \pm\sqrt{\frac{2}{3}} \right) \right\}$. Nestes pontos o método está bem definido e de acordo com (2.9) tem-se

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} - J_F \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix}^{-1} F \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix}.$$

A Figura 2.8 representa as bacias de convergência de cada uma das raízes da função F , tal que quando são tomados pontos iniciais nas regiões pintadas em azul a sequência gerada irá convergir para a raiz $(0, -1)$, se o ponto inicial for tomado na região vermelha a sequência irá convergir para a raiz $(0, 1)$ e se o ponto inicial estiver na região verde a sequência irá convergir para a raiz $(-1, 0)$.

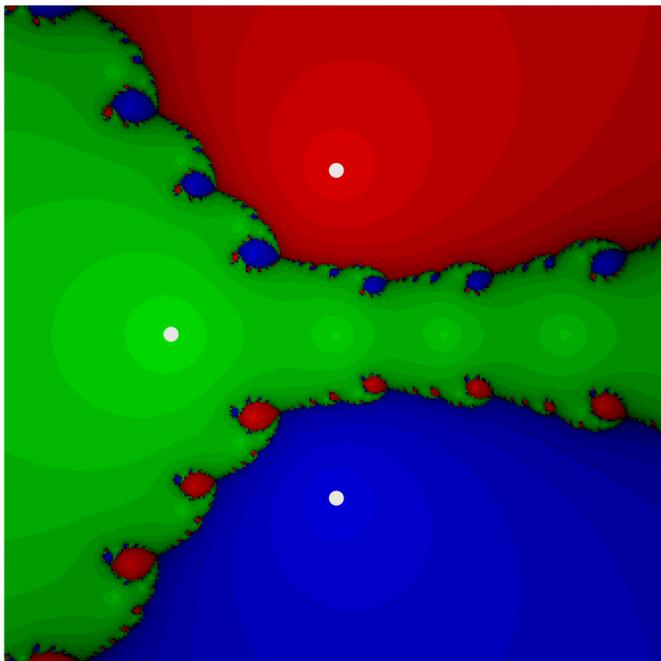


Figura 2.8: Gráfico das bacias de convergência de F do Exemplo 2.5

Exemplo 2.6 Considere $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ definida por:

$$F(x, y) = \begin{pmatrix} x^5 - 10x^3y^2 + 5xy^4 + 1 \\ 5x^4y - 10x^2y^3 + y^5 \end{pmatrix}.$$

Que pode ser representada no espaço complexo da forma $f(z) = z^5 - 1$.

Pode-se utilizar o método de Newton para encontrar as raízes de F e suas respectivas bacias de convergência.

Para o método de Newton estar bem definido a matriz Jacobiana de F deve ser não singular. Neste caso, a Jacobiana é

$$J_F(x, y) = \begin{pmatrix} 5x^4 - 30x^2y^2 + 5y^4 & -20x^3y + 20xy^3 \\ 20x^3y - 20xy^3 & 5x^4 - 30x^2y^2 + 5y^4 \end{pmatrix},$$

e seu determinante

$$\det(J_F) = (5x^4 - 30x^2y^2 + 5y^4)^2 + 20^2(x^3y + xy^3)^2 > 0$$

para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2 \setminus \{(0, 0)\}$. Portanto o método está bem definido para todos os pontos, exceto a origem.

A função F tem cinco raízes assinaladas em preto na Figura 2.9 juntamente com as respectivas bacias de convergência.

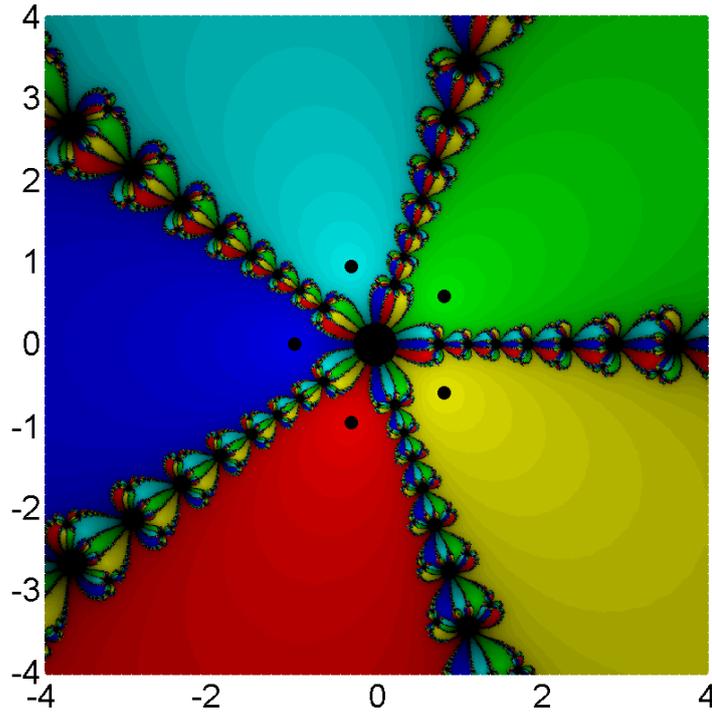


Figura 2.9: Gráfico das bacias de convergência de F .

2.4 Método de Newton para minimização de funções

Seja $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ uma função de classe C^2 . O problema a ser trabalhado é encontrar os pontos candidatos a minimizadores ou pontos estacionários de f , ou seja, encontrar os pontos em que $\nabla f(x, y) = 0$.

Como muitas vezes não é possível resolver este problema de uma forma direta, pode-se encontrar soluções aproximadas para a resolução deste tipo de problema. Da mesma forma que o método de Newton foi utilizado nas seções anteriores para encontrar raízes de funções, nesta seção o método será utilizado para obter aproximações da solução de problemas da forma $\nabla f(x, y) = 0$. O problema de encontrar os candidatos a minimizadores da função f pode ser visto como um caso particular do problema de encontrar as raízes de uma função vetorial F , considerando na seção anterior $F = \nabla f$. Assim, $J_F = \nabla^2 f$ e o método está bem definido nos pontos em que a Hessiana $\nabla^2 f$ é não singular e a expressão (2.9) se reescreve como

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} - \left(\nabla^2 f \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} \right)^{-1} \left(\nabla f \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} \right). \quad (2.10)$$

O algoritmo a seguir sintetiza o Método de Newton para resolução de problemas de encontrar candidatos a minimizadores de uma função f .

Algoritmo 2.3 *Método de Newton para minimização de funções*

Dados $\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ e $\varepsilon > 0$

Faça $k = 0$

REPITA

SE $\nabla^2 f(x_k, y_k)$ é não singular

$$\begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} - \left(\nabla^2 f \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix} \right)^{-1} \nabla f \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \end{pmatrix}.$$

SENÃO

Pare com insucesso

$$k = k + 1$$

ATÉ QUE $\|\nabla f(x_k, y_k)\| \leq \varepsilon$

Exemplo 2.7 Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f(x, y) = 2x^3 - 3x^2 - 6xy(x - y - 1).$$

O gradiente de f é dado por

$$\nabla f(x, y) = \begin{pmatrix} 6x^2 - 12xy - 6x + 6y^2 + 6y \\ -6x^2 + 12xy + 6x \end{pmatrix}.$$

Os pontos estacionários de f são os pontos em que $\nabla f = 0$, ou sejam

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} ; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ; \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \text{ e } \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

A Hessiana de f é dada por

$$\nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} 12x - 12y - 6 & -12x + 12y + 6 \\ -12x + 12y + 6 & 12x \end{pmatrix}.$$

Como discutido, o método está bem definido nos pontos em que a matriz é não singular, ou sejam, nos pontos em que

$$\begin{aligned} \det(\nabla^2 f) &= 6(2x - 2y - 1)(4x - 2y - 1) \\ &= 4xy - 4y^2 - 2y + 2x - 1 \\ &= (2x - 2y - 1)(2y + 1) \neq 0. \end{aligned}$$

Portanto os pontos que pertencem às retas

$$2x - 2y - 1 = 0 \quad \text{e} \quad 2y + 1 = 0 \tag{2.11}$$

são os pontos em que o Método de Newton não estará bem definido. Os pontos estacionários de f estão assinalados na Figura 2.10 em preto.

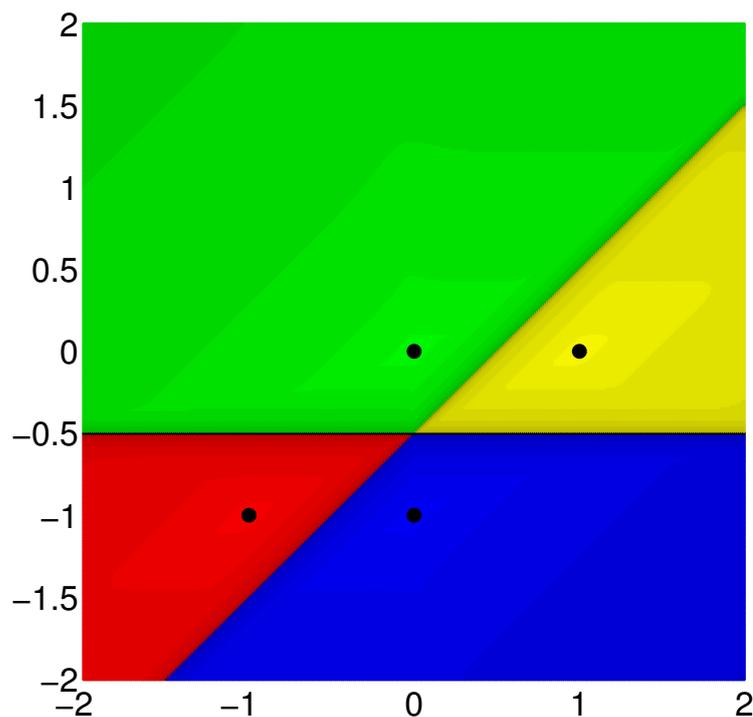


Figura 2.10: Gráfico das bacias de convergência

As fronteiras destas bacias são as retas dadas em (2.11) que correspondem justamente aos pontos iniciais em que o método de Newton falha.

As bacias são regiões delimitadas por estas retas e portanto não são fractais como ocorreu nos exemplos da seção anterior.

Exemplo 2.8 Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f(x, y) = x^4 + y^2 - 5x^2 + 3x.$$

O gradiente de f é dado por

$$\nabla f(x, y) = \begin{pmatrix} 4x^3 - 10x + 3 \\ 2y \end{pmatrix}.$$

A Hessiana é dada por

$$\nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} 12x^2 - 10 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Como discutido, o método está bem definido nos pontos em que a matriz é não singular. Neste caso,

$$\det(\nabla^2 F) = 24x^2 - 20 > 0$$

para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, com $x \neq \pm\sqrt{\frac{5}{6}}$. Nos demais pontos o método de Newton está bem definido.

As bacias de convergência dos pontos estacionários de f são representadas pela Figura 2.11 .

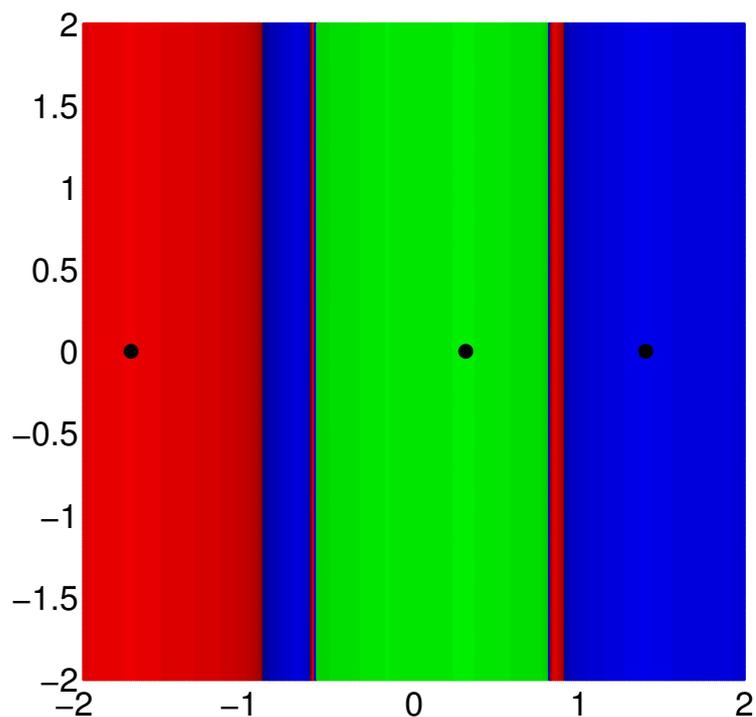


Figura 2.11: Gráfico das bacias de convergência.

Exemplo 2.9 Considere $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ definida por

$$f(x, y) = -10xy - 4x^2 + 3y - y^4.$$

Pode-se utilizar o método de Newton para encontrar os candidatos a minimizadores ou pontos estacionários desta função e esboçar as bacias de convergência a eles relacionados.

O gradiente de f é dado por

$$\nabla f(x, y) = \begin{pmatrix} -10y - 8x \\ -10x + 3 - 4y^3 \end{pmatrix}.$$

A Hessiana de f é dada por

$$\nabla^2 f(x, y) = \begin{pmatrix} -8 & -10 \\ -10 & -12y^2 \end{pmatrix}.$$

Para o método estar bem definido a matriz deve ser não singular, ou sejam os pontos em que

$$\det(\nabla^2 f) = 96y^2 - 100 > 0$$

para todo $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, com $y \neq \pm \frac{5}{\sqrt{24}}$.

As bacias de convergência dos pontos estacionários de f são representadas pela Figura 2.12.

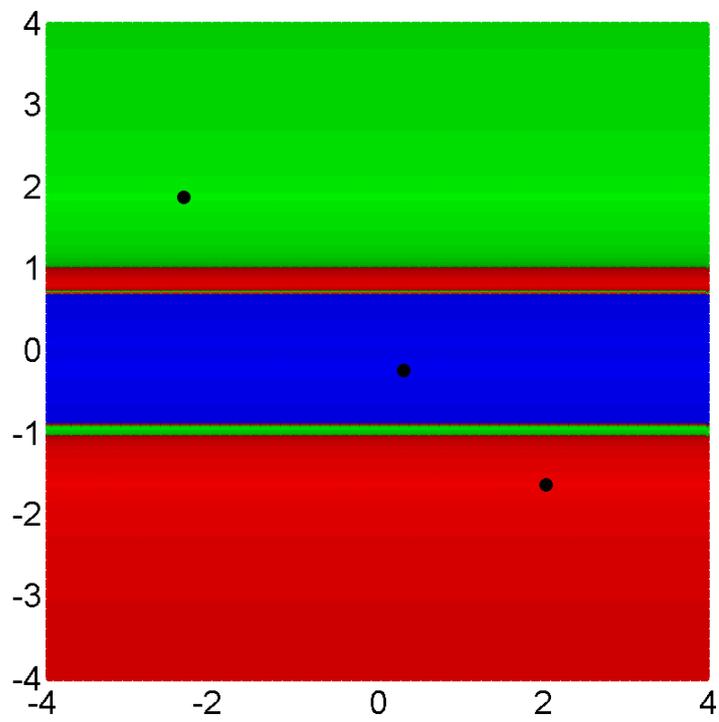


Figura 2.12: Gráfico das bacias de convergência de $\nabla f(x, y)$

Conclusão

Discutiu-se neste trabalho a respeito da utilização do método de Newton para obter aproximações de pontos que anulam funções reais e vetoriais. Pelo método ser de forma iterativa, foi visto que a escolha do ponto inicial é de sumária importância para se obter uma resposta satisfatória do método. Isto foi possível perceber ao visualizar as bacias de convergência, onde pode-se observar que mesmo um ponto inicial que satisfaça as condições nessessárias para o bom funcionamento do método, não se tem uma garantia da convergência do método neste ponto, pois ao longo das iterações podem ocorrer problemas ou situações que o método não consigo progredir.

Foi possível verificar que para o caso de encontrar as aproximações das raízes de funções vetoriais as bacias de convergência geraram uma figura fractal. Já no caso de encontrar os pontos estacionários de uma função de duas variáveis as bacias não geraram uma figura com as propriedades de uma figura fractal, concluindo-se que cabe uma estudo mais aprofundado deste tema.

Conjectura-se que as bacias de convergência do método de Newton aplicado para se determinar os zeros de uma função $F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ formarão um fractal se F pode ser descrita como uma função definida no plano complexo \mathbb{C} . Por outro lado, se F é escrita como o gradiente de uma função $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, ou seja, se existe f tal que $F = \nabla f$, conjectura-se que as bacias não formarão fractais.

Referências Bibliográficas

- [1] H.L. Guidorizzi. *Um curso de cálculo*, volume 1. LTC, Rio de Janeiro, 5a edição, 2001.
- [2] H.L. Guidorizzi. *Um curso de cálculo*, volume 2. LTC, Rio de Janeiro, 5a edição, 2001.
- [3] A.A. Ribeiro e E.W. Karas. *Otimização Contínua: aspectos teóricos e computacionais*. Cengage Learning, São Paulo, 2013.
- [4] C.P. Serra e E.W. Karas. *Fractais gerados por Sistemas Dinâmicos Complexos*. Champagnat, Curitiba, 1997.
- [5] J. Stewart. *Cálculo*, volume 2. Cengage Learning, 2009. Tradução da 6a edição.