

FUNÇÕES ITERADORAS DE ORDEM DE CONVERGÊNCIA SUPERIOR À DO MÉTODO DE NEWTON

Mário M. Graça, Pedro T. Lima

Departamento de Matemática
Instituto Superior Técnico
Universidade de Lisboa
Av. Rovisco Pais,
1049-001 Lisboa, Portugal.
e-mail: mgraca@math.tecnico.ulisboa.pt
plima@math.tecnico.ulisboa.pt

Resumo: Para aproximar um zero de uma função real, construímos recursivamente uma família de funções iteradoras recorrendo a regras de quadratura de Newton-Cotes fechadas. Provamos que a partir de uma regra de quadratura com n nós se obtém uma função iteradora de ordem de convergência pelo menos $n + 1$, começando com $n = 1$. São apresentados alguns exemplos numéricos ilustrando a eficiência dos algoritmos propostos.

Abstract: Based on Newton-Cotes closed quadrature rules a family of iterative functions is recursively constructed in order to approximate a root of a real function. We prove that with the help of a n -node quadrature rule an iterating function with convergence order of at least $n + 1$ is obtained, starting with $n = 1$. Some numerical examples are presented to illustrate the efficiency of the proposed methods.

palavras-chave: Regras de quadratura; métodos iterativos; método de Newton-trapézios; método de Newton-Simpson; ordem de convergência.

keywords: Quadrature rules; iterative methods; Newton-trapezoidal method; Newton-Simpson method; convergence order.

1 Introdução

Regras de quadratura aplicadas na construção de métodos iterativos para equações não lineares, de ordem de convergência superior à do método de Newton, é assunto que tem sido objecto de investigação de vários autores, por exemplo [3], [22], [6], [11], [16]. Todavia, com frequência na literatura tais métodos são apresentados caso a caso ou para um conjunto muito restrito de regras de quadratura. Neste trabalho procuramos abordar a questão numa perspectiva uniformizadora e sistemática.

Fixado um inteiro positivo n , definimos recursivamente uma função iteradora $t_n : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ baseada numa regra de quadratura de Newton-Cotes fechada, com $n + 1$ nós (ver Definição 2.1). Sobre integração numérica ver, por exemplo, [14] Ch. 6, [2] Ch. 5, e para as regras de Newton-Cotes [7], Ch. 3, e [10]. Neste trabalho a função t_0 , tomada como função iteradora de base, coincide com a iteradora de Newton.

Se o método de Newton tiver ordem de convergência $p \geq 2$, provamos no Teorema 3.2, que a nossa função iteradora t_n possui ordem de convergência não inferior a $p + n$, pelo que ficamos assim habilitados a construir métodos iterativos de ordem de convergência arbitrária para a resolução de equações não lineares, por via de quadraturas numéricas (sobre classificação de processos iterativos em função da sua ordem de convergência ver, por exemplo, [19]).

Iniciamos este trabalho começando por estabelecer, na Secção 2, uma relação entre a aproximação de uma raiz z real duma equação $f(x) = 0$ e um método de quadratura, por aplicação do teorema fundamental do cálculo. Embora nos restrinjamos ao caso das regras de Newton-Cotes fechadas, outras regras de quadratura poderão ser usadas.

Mostramos no parágrafo 3.1, que a função iteradora t_0 (que aqui tomamos como função iteradora de base de recursividade), coincide com a função iteradora clássica de Newton.

Para $n \geq 1$, o passo de uma regra de Newton-Cotes é definido de modo a garantir que o método iterativo t_n , construído a partir dessa regra, possua ordem de convergência superior ao da função iteradora t_{n-1} , sendo o processo recursivo de construção de funções iteradoras iniciado com a função t_0 , que assumimos de convergência supralinear.

É universalmente reconhecido que entre os métodos iterativos para equações não lineares avulta o método de Newton, o qual é considerado um método de eleição para aproximar uma raiz simples z da equação $f(x) = 0$, visto que, sob as hipóteses usuais de regularidade da função f , podemos garantir a convergência supralinear local deste método. Todavia, nas aplicações, é por vezes vantajoso dispor de métodos de ordem de convergência superior à do método de Newton, particularmente quando se pretende usar aproximações iniciais para as quais o método de Newton falha.

Seja p a ordem de convergência local do método gerado por t_0 . Assumimos em primeiro lugar que a ordem de convergência deste método é $p \geq 2$

(correspondente ao caso de zeros simples da função) e introduziremos depois modificações adequadas para lidarmos com o caso de zeros múltiplos, de modo que possamos assumir que a função iteradora de base, t_0 , possui ordem de convergência local $p \geq 2$).

Partindo de uma função iteradora t_0 , de convergência supralinear, provamos que qualquer membro da família de funções iteradoras t_n , para $n \geq 1$ possui convergência supralinear (Proposição 2.1). O mesmo resultado é generalizável para o caso $d \geq 2$, ou seja, para sistemas de equações não lineares.

Dado que a expressão da função iteradora inicial que usamos pode ser obtida por aplicação da regra de quadratura conhecida pela designação de *regra do retângulo* (à esquerda), designamos t_0 por função de Newton, ou por *função iteradora de Newton-rectângulo*.

A regra dos trapézios será a seguir utilizada com um determinado passo $h_1(x)$, definido à custa de $t_0(x)$. A aplicação $t_1(x)$ daí resultante, será designada por *iteradora de Newton-trapézios* (ver parágrafo 3.2). Estabelecemos depois, no parágrafo 3.3, uma relação entre a iteradora de Newton-trapézios e o célebre método de Halley [12]. Para simplificar, as funções iteradoras que assim construímos serão também designadas pelos nomes por que são conhecidas as regras de quadratura que lhes dão origem.

Definindo seguidamente um passo $h_2(x)$, dependente da aplicação $t_1(x)$, obtemos a função $t_2(x)$, designada por *função iteradora de Simpson* por resultar de uma aplicação da regra de Simpson, com passo $h_2(x)$ (ver parágrafo 3.4).

Um esquema de recursividade análogo ao anteriormente referido é igualmente utilizado para se definir a iteradora $t_n(x)$, para $n \geq 3$, resultante da aplicação da correspondente regra de Newton-Cotes com $n + 1$ nós e passo $h_n(x)$, sendo este passo definido recursivamente a partir da função iteradora anterior t_{n-1} (ver Definição 2.1).

Deixamos para outro trabalho a consideração de métodos iterativos baseados em regras de quadratura abertas, ou regras interpolatórias de grau de exactidão superior ao das regras de Newton-Cotes. De igual modo, o tratamento detalhado de sistemas de equações não lineares não será discutido aqui. Note-se que, pelo menos do ponto de vista formal, as funções iteradoras que construímos são imediatamente generalizáveis a \mathbb{R}^d , para $d \geq 2$.

Na Secção 4 damos alguns exemplos numéricos de aplicação dos métodos fechados de Newton-Cotes. Comparando com o método de Newton, os métodos dos trapézios, t_1 e de Simpson, t_2 , permitem-nos obter aproximações

precisas de uma raiz efectuando apenas algumas iterações das iteradoras t_1 e t_2 . Métodos de ordem de convergência superior a 4 são igualmente testados em exemplos para os quais o método de Newton falha.

A família de funções iteradoras t_n que obtivemos pode ser obviamente alargada por mera composição. Por exemplo, a partir das funções iteradoras dos trapézios e de Simpson, apresentamos exemplos numéricos aplicando a função iteradora composta, designada por t_{23} , de ordem de convergência pelo menos 12. Todavia, comparações sistemáticas com outros métodos de ordem elevada, aplicados a baterias de funções de testes (ver por exemplo [18]), estão fora dos objectivos do presente trabalho. Sublinhe-se, porém, que entre outras aplicações, os métodos de ordem de convergência elevada aqui desenvolvidos podem encontrar um campo de aplicação fundamental na área de optimização sem restrições.

A adopção de programação *Mathematica* dinâmica [23] facilita a consideração de expressões exactas de funções iteradoras de ordem de convergência elevada, bem como combinações dessas expressões, como é o caso da nossa função iteradora t_{76} , correspondente a um método de ordem de convergência pelo menos 56, iteradora baseada na composição de dois métodos resultando de quadraturas de Newton-Cotes, que designamos por t_6 e t_7 . Tais métodos permitem obter aproximações muito precisas de um zero z de uma função, usando apenas duas ou três iterações, e partindo de uma aproximação inicial afastada de z , aproximação esta para a qual o método de Newton é frequentemente inútil (ver Secção 4).

2 Relação entre o cálculo de uma raiz e métodos de quadratura

Dada uma equação de variável real $f(x) = 0$, seja z uma raiz simples, isto é, $f(z) = 0$ e $f'(z) \neq 0$. Suponhamos que a função f é suficientemente regular numa certa vizinhança de z . Pelo teorema fundamental do cálculo, sabemos que

$$\int_x^z f^{(1)}(t) dt = f(z) - f(x) = -f(x). \quad (1)$$

Fixado um inteiro não negativo n , considere-se uma regra interpolatória de quadratura com $n + 1$ nós, aplicada à função derivada $f^{(1)}$, denotada por $Q_n(f^{(1)})$, a qual será usada para aproximar o integral em (1). A regra

$Q_n(f^{(1)})$ pode sempre escrever-se na forma

$$Q_n(f^{(1)}) = \frac{z-x}{c_n} B_n(x). \quad (2)$$

A função $B_n(x)$ em (2) é caracterizada pelos pesos A_i e pelos “nós” $\xi_i(x) \in [x, z]$, tendo como expressão

$$B_n(x) = A_0 f^{(1)}(\xi_0(x)) + A_1 f^{(1)}(\xi_1(x)) + \cdots + A_n f^{(1)}(\xi_n(x)). \quad (3)$$

Nas regras interpolatórias a constante c_n em (2) satisfaz a igualdade

$$c_n = \sum_{i=0}^n A_i, \quad (4)$$

uma vez que, por construção, a regra é exacta quando aplicada á função $f(x) \equiv 1$ ¹.

Supomos ainda que os nós $\xi_i(x)$ são tais que no intervalo $[x, z]$ a função $f^{(1)}$ está definida, e que a função $B_n(x)$ é finita e possui inverso aritmético, isto é,

$$B_n(t) \neq 0 \quad \forall t \in [x, z]. \quad (5)$$

Assumimos também que os nós de quadratura $\xi_i(x)$, no ponto $x = z$, satisfazem as seguintes igualdades,

$$\xi_i(z) = z, \quad \text{para } i = 0, 1, \dots, n. \quad (6)$$

As funções $\xi_i(x)$ que servem de nós de quadratura na expressão (3), serão fixadas adiante na Secção 3, ao particularizarmos $B_n(x)$ adoptando as regras de quadratura de Newton-Cotes fechadas ([7], Ch. 3). Os processos iterativos que iremos construir para cálculo aproximado de zeros de funções herdarão, portanto, certas propriedades das regras de quadratura adoptadas, propriedades estas que aparecerão reflectidas na demonstração de alguns resultados adiante provados. Regras de Newton-Cotes abertas serão usadas noutro trabalho.

No caso da função f ser multivariada, isto é, para $d \geq 2$, a função $f^{(1)}$ deve entender-se como sendo a matriz jacobiana de f , admitindo-se ainda, em vez

¹Estamos a admitir que o comprimento do intervalo onde se aplica a quadratura é c_n , sendo este o menor número para o qual todos os pesos A_i são inteiros. Para considerarmos a integração num intervalo de comprimento diferente, todos os pesos deverão ser multiplicados por uma certa constante, razão por que aparece o factor $(z-x)/c_n$ na fórmula (2).

de (5), que a matriz $B_n(x)$ é invertível numa vizinhança de um zero simples de $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$.

Substituindo (2) em (1), obtém-se

$$z - x \simeq -c_n B_n^{-1}(x) f(x). \quad (7)$$

A aproximação obtida em (7) sugere-nos o processo iterativo gerado pela função t_n definida a seguir.

Definição 2.1. (*Função iteradora baseada em regra de quadratura*)

Fixado $n \geq 0$ e a função $B_n(x)$ associada à regra de quadratura (2), satisfazendo as condições (3)-(6), designamos por função iteradora baseada na regra de quadratura a função

$$t_n(x) = x - c_n B_n^{-1}(x) f(x). \quad (8)$$

Considerando a função auxiliar

$$H_n(x) = t_n(x) - x. \quad (9)$$

a função t_n pode também ser definida implicitamente pela relação

$$B_n(x) H_n(x) = -c_n f(x) \iff H_n(x) = -c_n B_n^{-1}(x) f(x). \quad (10)$$

Visto que para $n \geq 1$ apenas usaremos as regras de quadratura de Newton-Cotes fechadas, a correspondente função iteradora t_n em (8) será designada por *função iteradora de Newton-Cotes* (fechada) com $n + 1$ nós.

Começemos por provar a seguinte proposição relativa à convergência supralinear dos métodos iterativos gerados por (8), no caso de ser dada uma função f suficientemente regular numa vizinhança de um seu zero simples.

Proposição 2.1. (*Convergência supralinear das funções iteradoras*)

Uma raiz simples da equação $f(x) = 0$ é ponto fixo da função iteradora (8). Além disso, partindo de uma aproximação x_0 suficientemente próxima de z , a sucessão definida por $x_{k+1} = t_n(x_k)$ converge supralinearmente para z , para qualquer $n \geq 0$.

Demonstração. De (3) e atendendo às igualdades em (6), obtém-se

$$\begin{aligned} B_n(z) &= A_0 f^{(1)}(z) + A_1 f^{(1)}(z) + \dots + A_n f^{(1)}(z) \\ &= f^{(1)}(z) \sum_{i=0}^n A_i. \end{aligned}$$

Uma vez que, por hipótese, a soma dos pesos da regra de quadratura é igual à constante c_n , resulta

$$B_n(z) = c_n f^{(1)}(z), \quad (11)$$

donde se conclui que $B_n(z) \neq 0$, pois assumimos que z é zero simples da função f . Atendendo à definição (8), obtém-se

$$t_n(z) = z - c_n c_n^{-1} \left(f^{(1)}(z) \right)^{-1} \times f(z) = z.$$

Fica por conseguinte mostrado que um zero simples de f é ponto fixo da função iteradora t_n . Além disso, por (9), conclui-se que a função auxiliar H_n é nula no ponto fixo,

$$H_n(z) = 0. \quad (12)$$

Derivando ambos os membros de (10), resulta a expressão

$$B_n^{(1)}(x) H_n(x) + B_n(x) H_n^{(1)}(x) = -c_n f^{(1)}(x). \quad (13)$$

Assim, atendendo a (12), de (13) obtém-se a igualdade,

$$B_n(z) H_n^{(1)}(z) = -c_n f^{(1)}(z).$$

Substituindo na expressão anterior o valor de $B_n(z)$ dado em (11), vem

$$c_n f^{(1)}(z) H_n^{(1)}(z) = -c_n f^{(1)}(z),$$

ou seja, levando em consideração (9),

$$H_n^{(1)}(z) = -1 \Leftrightarrow t_n^{(1)}(z) - 1 = -1 \Leftrightarrow t_n^{(1)}(z) = 0.$$

A última igualdade implica que o processo iterativo gerado pela função t_n converge localmente para z e que a convergência é supralinear. \square

Adoptada uma função iteradora t_0 , de convergência supralinear, a Proposição 2.1 é fundamental porquanto nos permite construir funções iteradoras baseadas em regras de quadratura cuja ordem de convergência é pelo menos 2, ou seja com ordem de convergência pelo menos igual à do método de Newton para zeros simples. Além disso, uma vez definidos convenientemente os nós da regra de quadratura B_n , poderemos construir métodos baseados em funções iteradoras como na Definição 2.1, de ordem de convergência superior à do método de Newton. Acresce que uma modificação na função f , tal como indicado no parágrafo a seguir, nos permitirá inclusive lidar com o caso de um zero múltiplo, obtendo-se igualmente funções iteradoras t_n de ordem de convergência arbitrária, desde que se defina convenientemente a iteradora de base t_0 , de modo a garantirmos que esta converge supralinearmente para o zero z em causa.

2.1 Zeros múltiplos

Modificações de uma dada função f para a qual o método de Newton não dá resultados satisfatórios é uma técnica usada frequentemente (ver, por exemplo, [1], [9] e respectivas referências). Por exemplo, sendo t_0 a função de Newton aplicado a uma função f para a qual z é um zero múltiplo, considere-se

$$F(x) = t_0(x) - x = -\frac{f(x)}{f^{(1)}(x)}.$$

É fácil mostrar-se que o ponto z é zero simples para $F(x)$. Por conseguinte, a Proposição 2.1 é válida para o caso de zeros múltiplos desde que se comece por considerar o método de Newton t_0 actuando sobre a função F no lugar da função original f (ver Exemplo 4.3).

3 Funções iteradoras de Newton, trapézios e Simpson em \mathbb{R}

Nos parágrafos a seguir particularizamos as funções iteradoras t_0 , t_1 e t_2 , em \mathbb{R} , para regras de quadratura bem conhecidas. A primeira resulta imediatamente da regra do rectângulo à esquerda (única regra de Newton-Cotes aberta aqui considerada), a segunda de t_0 e da regra dos trapézios; finalmente a função iteradora t_2 depende de t_1 e da regra de Simpson. Note-se que o processo recursivo adoptado permite-nos garantir ordem de convergência pelo menos 3 para t_1 e ordem de convergência pelo menos 4, para t_2 , caso t_0 possua ordem de convergência $p \geq 2$.

Na Tabela 1 são dados os pesos A_i e a constante c_n usados na definição das funções iteradoras de Newton-Cotes t_n , para n desde 0 a 7, (não consideramos $n \geq 8$, pois os pesos A_i podem assumir valores negativos dando origem a fórmulas eventualmente numericamente instáveis (ver, por exemplo [4], p. 534).

3.1 Função iteradora de Newton-rectângulo

Para $n = 0$, a *regra do rectângulo à esquerda* utiliza como único nó o extremo inferior do intervalo de integração. Assim, esta regra aplicada a $\int_x^z f^{(1)}(t) dt$ escreve-se

$$Q_0(f^{(1)}) = (z - x) f^{(1)}(x).$$

n	A_0	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	$c_n = \sum_{i=0}^n A_i$
0	1								1
1	1	1							2
2	1	4	1						6
3	1	3	3	1					8
4	7	32	12	32	7				90
5	19	75	50	50	75	19			288
6	41	216	27	272	27	216	41		840
7	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751	17280

Tabela 1: $Q_n(f^{(1)}) = (z - x)/c_n \sum_{i=0}^n A_i f^{(1)}(\xi_i(x))$.

Neste caso a soma dos pesos da regra é $c_0 = 1$ e a função $B_0(x)$ dada por (3) tem a forma $B_0(x) = f^{(1)}(\xi_0(x)) = f^{(1)}(x)$. Sendo z um zero simples da função f , como $\xi_0(z) = z$, pela Proposição 2.1, o método iterativo gerado por

$$t_0(x) = x - c_0 B_0^{-1}(x) f(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)} \quad (14)$$

converge para um ponto fixo $t_0(z) = z$, e a convergência é localmente supra-linear. A aplicação $t_0(x)$ coincide com a função iteradora de Newton para funções reais.

3.2 Função iteradora de Newton-trapézios

Para $n = 1$, a *regra dos trapézios* utiliza como nós os extremos do intervalo de integração. Adoptemos a seguinte definição recursiva do passo $h_1(x)$,

$$h_1(x) = t_0(x) - x \Rightarrow h_1^{(1)}(x) = t_0^{(1)}(x) - 1, \quad h_1^{(2)}(x) = t_0^{(2)}(x), \quad (15)$$

onde $t_0(x) = x - (f^{(1)})^{-1} f(x)$. A regra dos trapézios aplicada a $\int_x^z f^{(1)}(t) dt$, com nós $\xi_0(x) = x$ e $\xi_1(x) = x + h_1(x)$, escreve-se

$$Q_1(f^{(1)}) = \frac{z - x}{c_1} B_1(x) = \frac{z - x}{2} [f^{(1)}(x) + f^{(1)}(x + h_1(x))].$$

Assim a função iteradora (8) tem a forma

$$\begin{aligned} t_1(x) &= x - c_1 B_1^{-1}(x)f(x) = x - \frac{2f(x)}{f^{(1)}(x) + f^{(1)}(x + h_1(x))} = \\ &= x - \frac{2f(x)}{f^{(1)}(x) + f^{(1)}\left(\frac{f(x)}{f^{(1)}(x)}\right)}. \end{aligned} \quad (16)$$

Note-se que a aplicação $t_1(x)$ é da forma

$$t_1(x) = x - \frac{f(x)}{\frac{f^{(1)}(x) + f^{(1)}\left(\frac{f(x)}{f^{(1)}(x)}\right)}{2}}. \quad (17)$$

A expressão (17) significa que o “passo” de $t_1(x)$, isto é $|H_1(x)| = |t_1(x) - x|$, se obtém através da média aritmética entre o declive da recta tangente ao gráfico de $y = f(x)$, no ponto x , e o declive da recta tangente ao mesmo gráfico, no ponto $\bar{x} = t_0(x) = x - f(x)/f^{(1)}(x)$, sendo \bar{x} resultado da aplicação da iteradora de Newton $t_0(x)$.

Associado à função (16) registemos o processo iterativo

$$\begin{aligned} h_k &= t_0(x_k) - x_k = -f(x_k)/f^{(1)}(x_k) \\ x_{k+1} &= x_k - \frac{2f(x_k)}{f^{(1)}(x_k) + f^{(1)}(x_k + h_k)}, \quad k = 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (18)$$

o qual será designado por método de Newton-trapézios.

Proposição 3.1. *Supondo que a função real f é suficientemente regular numa vizinhança de um zero simples z , escolhida uma aproximação inicial x_0 suficientemente próxima de z , o método de Newton-trapézios (18) converge para z e a respectiva convergência é, pelo menos, de ordem 3.*

Demonstração. Os nós de quadratura são $\xi_0(x) = x$ e $\xi_1(x) = x + h_1(x) = t_0(x)$. Assim $\xi_0(z) = \xi_1(z) = z$. A Proposição 2.1 é aplicável, pelo que z é ponto fixo superatractor da função t_1 , isto é, $t_1(z) = z$ e $t_1^{(1)}(z) = 0$.

Atendendo a que

$$B_1(x) = f^{(1)}(x) + f^{(1)}(x + h_1(x)) = f^{(1)}(x) + f^{(1)}(t_0(x)) \implies B_1(z) = 2f^{(1)}(z),$$

tem-se

$$\begin{aligned} B_1^{(1)}(x) &= f^{(2)}(x) + f^{(2)}(x + h_1(x)) (1 + h_1^{(1)}(x)) \\ &= f^{(2)}(x) + f^{(2)}(t_0(x)) (1 + t_0^{(1)}(x) - 1). \end{aligned}$$

Assim, dado que $t_0^{(1)}(z) = 0$, obtém-se

$$B_1^{(1)}(z) = f^{(2)}(z).$$

A expressão (13) escreve-se,

$$B_1^{(1)}(x) H_1(x) + B_1(x) H_1^{(1)}(x) = -2 f^{(1)}(x),$$

donde,

$$B_1^{(2)}(x) H_1(x) + 2 B_1^{(1)}(x) H_1^{(1)}(x) + B_1(x) H_1^{(2)}(x) = -2 f^{(2)}(x).$$

Dado que para $x = z$ se tem $H_1(z) = 0$ e $H_1^{(1)}(z) = t_1^{(1)}(z) - 1 = -1$, resulta

$$-2 f^{(2)}(z) + 2 f^{(1)}(z) H_1^{(2)}(z) = -2 f^{(2)}(z).$$

Uma vez que z é um zero simples de f , obtém-se,

$$H_1^{(2)}(z) = 0 \iff t_1^{(2)}(z) = 0.$$

Por conseguinte o método (18) converge localmente para o zero z da função f , com ordem de convergência pelo menos cúbica. \square

3.3 Os métodos de Newton-trapézios e de Halley

Como vimos, a função de Newton-trapézios (16) recorre à função $B_1(x)$, a qual resulta da respectiva regra de quadratura,

$$\begin{aligned} B_1(x) &= f^{(1)}(x) + f^{(1)}(x + h_1(x)) \\ &= f^{(1)}(x) + f^{(1)}\left(x - f(x)/f^{(1)}(x)\right), \end{aligned} \quad (19)$$

já que usámos como “passo” $h_1(x) = t_0(x) - x = -f(x)/f^{(1)}(x)$. Tal como todos as funções t_n dadas por (8), a aplicação t_1 apenas usa informação sobre a função f e a sua primeira derivada. Nada impede todavia que possamos definir novas funções iteradoras baseadas nas quadraturas de Newton-Cotes, as quais usem informação suplementar envolvendo derivadas de ordem superior da função f . Por exemplo, se substituirmos a função $f^{(1)}(x + h_1(x))$ pelo seu desenvolvimento de Taylor, de primeira ordem, em torno do ponto x , obtém-se:

$$f^{(1)}(x + h_1(x)) \simeq f^{(1)}(x) + f^{(2)}(x) h_1(x).$$

Substituindo em (19), resulta a aproximação de $B_1(x)$,

$$\tilde{B}_1(x) = 2 f^{(1)}(x) + f^{(2)}(x) h_1(x).$$

A correspondente função iteradora é da forma

$$\begin{aligned}\tilde{t}_1(x) &= x - 2\tilde{B}_1^{-1}(x)f(x) = \\ &= x - \frac{2f(x)}{2f^{(1)}(x) - \frac{f^{(2)}(x)f(x)}{f^{(1)}(x)}}.\end{aligned}\quad (20)$$

A aplicação \tilde{t}_1 é a bem conhecida função iteradora do método de Halley [12], [15], [21], ([7], p. 257). Note-se que $\tilde{B}_1(z) = 2f^{(1)}(z)$. Consequentemente, os mesmos argumentos usados na prova da Proposição 3.1 podem ser invocados se substituirmos nessa prova a função $B_1(x)$ pela sua aproximação $\tilde{B}_1(x)$. Sob as hipóteses referidas na Proposição 3.1, conclui-se, portanto, que o método iterativo de Halley possui convergência local pelo menos cúbica, confirmando-se assim indirectamente, por via de regras de quadratura, um resultado bem conhecido sobre este célebre método.

Finalmente, embora tenhamos concluído anteriormente que ambos os métodos de Newton-trapézios e de Halley possuem ordem de convergência local pelo menos cúbica, note-se que o primeiro é computacionalmente mais vantajoso porquanto apenas faz intervir informação sobre a função f e a sua primeira derivada.

3.4 Função iteradora de Newton-Simpson

Para $n = 2$, a regra de Simpson aplicada a $\int_x^z f^{(1)}(t) dt$ escreve-se

$$\begin{aligned}Q_2(f^{(1)}) &= \frac{z-x}{c_2} B_2(x) = \\ &= \frac{z-x}{6} \left[f^{(1)}(x) + 4f^{(1)}(x+h_2(x)) + f^{(1)}(x+2h_2(x)) \right].\end{aligned}\quad (21)$$

Na expressão (21) o passo $h_2(x)$ é obtido recursivamente através da função iteradora de Newton-trapézios $t_1(x)$, definida em (16),

$$h_2(x) = \frac{t_1(x) - x}{n} = \frac{t_1(x) - x}{2}.\quad (22)$$

No ponto z são os seguintes os valores das derivadas de h_2 :

$$\begin{aligned}h_2^{(1)}(x) &= \frac{t_1^{(1)}(x) - 1}{2} \implies h_2^{(1)}(z) = -1/2 \\ h_2^{(2)}(x) &= \frac{t_1^{(2)}(x)}{2} \implies h_2^{(2)}(z) = 0.\end{aligned}\quad (23)$$

A aplicação

$$t_2(x) = x - c_2 B_2^{-1}(x) f(x) \quad (24)$$

recebe a designação de função iteradora de Newton-Simpson. O correspondente método iterativo, para $k = 0, 1, \dots$, escreve-se

$$h_2(x_k) = \frac{t_1(x_k) - x_k}{2} \quad (25)$$

$$x_{k+1} = x_k - \frac{6 f(x_k)}{f^{(1)}(x_k) + 4 f^{(1)}(x_k + h_2(x_k)) + f^{(1)}(x_k + 2 h_2(x_k))}.$$

Proposição 3.2. *Supondo que a função real f é suficientemente regular numa vizinhança de um zero simples z , escolhida uma aproximação inicial x_0 suficientemente próxima de z , o método de Newton-Simpson (25) converge para z e a respectiva convergência é, pelo menos, de ordem 4.*

Demonstração. Atendendo a (21), temos que $B_2(z) = c_2 f^{(1)}(z) \neq 0$ e

$$B_2^{(1)}(x) = f^{(2)}(x) + 4 f^{(2)}(x + h_2(x)) (1 + h_2^{(1)}(x)) + f^{(2)}(x + 2 h_2(x)) (1 + 2 h_2^{(1)}(x)) \quad (26)$$

Como $h_2(z) = 0$, de (23) obtém-se

$$B_2^{(1)}(z) = f^{(2)}(z) + 4 f^{(2)}(z) (1 - 1/2) + f^{(2)}(z) (1 - 1) = 3 f^{(2)}(z) = \frac{c_2}{2} f^{(2)}(z). \quad (27)$$

Derivando a expressão em (26), resulta

$$B_2^{(2)}(x) = f^{(3)}(x) + 4 \left[f^{(3)}(x + h_2(x)) (1 + h_2^{(1)}(x))^2 + f^{(2)}(x + h_2(x)) h_2^{(2)}(x) \right] + 2 f^{(3)}(x) h_2(x) (1 + 2 h_2^{(1)}(x))^2 + f^{(2)}(x + 2 h_2(x)) h_2^{(2)}(x). \quad (28)$$

Como $h_2(z) = 0$, $h_2^{(1)}(z) = -1/2$ e $h_2^{(2)}(z) = 0$, obtém-se da expressão anterior,

$$B_2^{(2)}(z) = f^{(3)}(z) + 4 f^{(3)}(z) \times (1/4) = 2 f^{(3)}(z) = \frac{c_2}{3} f^{(3)}(z). \quad (29)$$

Considerando a função $H_2(x) = t_2(x) - x$, de (24) obtém-se,

$$B_2(x) H_2(x) = -c_2 f(x).$$

Derivando sucessivamente, tem-se

$$B_2^{(1)}(x) H_2(x) + B_2(x) H_2^{(1)}(x) = -c_2 f^{(1)}(x), \quad (30)$$

$$B_2^{(2)}(x) H_2(x) + 2 B_2^{(1)}(x) H_2^{(1)}(x) + B_2(x) H_2^{(2)}(x) = -c_2 f^{(2)}(x), \quad (31)$$

e

$$B_2^{(3)}(x) H_2(x) + 3 B_2^{(1)}(x) H_2^{(2)}(x) + 3 B_2^{(2)}(x) H_2^{(1)}(x) + B_2(x) H_2^{(3)}(x) = -c_2 f^{(3)}(x). \quad (32)$$

Dado que $H_2(z) = 0$ e $B_2(z) = c_2 f^{(1)}(z) \neq 0$, resulta de (30) que $H_2^{(1)}(z) = -1$, isto é, $t_2^{(1)}(z) = 0$, pelo que o respectivo método possui ordem de convergência pelo menos dois, como já sabemos pela Proposição 2.1.

De (31), obtém-se

$$2 B_2^{(1)}(z) H_2^{(1)}(z) + B_2(z) H_2^{(2)}(z) = -c_2 f^{(2)}(z),$$

ou seja,

$$-2 B_2^{(1)}(z) + B_2(z) H_2^{(2)}(z) = -c_2 f^{(2)}(z).$$

Atendendo a (27), resulta

$$-c_2 f^{(2)}(z) + B_2(z) H_2^{(2)}(z) = -c_2 f^{(2)}(z).$$

Dado que $B_2(z) \neq 0$, obtém-se $H_2^{(2)}(z) = 0$, isto é, $t_2^{(2)}(z) = 0$, o que significa ser o método (25) de ordem de convergência pelo menos três.

Finalmente, como $H_2^{(1)}(z) = t_2^{(1)} - 1 = -1$ e $H_2^{(2)}(z) = t_2^{(2)}(z) = 0$, pelo que de (32) resulta,

$$3 B_2^{(2)}(z) H_2^{(1)}(z) + B_2(z) H_2^{(3)}(z) = -c_2 f^{(3)}(z),$$

ou seja,

$$-3 B_2^{(2)}(z) + B_2(z) H_2^{(3)}(z) = -c_2 f^{(3)}(z).$$

Levando em consideração (29), obtém-se

$$-c f^{(3)}(z) + c f^{(1)}(z) H_2^{(3)}(z) = -c_2 f^{(3)}(z).$$

Por conseguinte, $H_2^{(3)}(z) = 0 \iff t_2^{(3)}(z) = 0$. Conclui-se, portanto, que o método (25) possui ordem de convergência local pelo menos quatro. \square

Para uma função multivariada $f : D \subset \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d$, a função iteradora do método de Newton-Simpson escreve-se

$$\begin{aligned} h_2(x) &= \frac{t_1(x) - x}{2}, & x \in \mathbb{R}^d \\ t_2(x) &= x - 6 [J_f(x) + 4J_f(x + h_2(x)) + J_f(x + 2h_2(x))]^{-1} f(x), \end{aligned} \quad (33)$$

onde t_1 é a função iteradora do método de Newton-trapézios em \mathbb{R}^d .

Observação 3.1. Deixa-se como exercício a verificação de que se em (22) usarmos a função iteradora t_0 na definição de $h_2(x)$, ou seja, se em vez de considerarmos $h_2(x) = (t_1(x) - x)/2$, fizermos $h_2(x) = (t_0(x) - x)/2$, o método daí resultante é apenas de terceira ordem de convergência e não de quarta ordem. Tal justifica a definição recursiva que adoptamos para o “passo” do método de Newton-Simpson e funções iteradoras subsequentes.

Para abreviar passamos a designar por método de Newton, método dos trapézios e método de Simpson, os métodos iterativos resultantes respectivamente de t_0 , t_1 e t_2 .

3.5 Ordem de convergência das funções iteradoras de Newton-Cotes em \mathbb{R}

Tal como nos casos dos métodos dos trapézios e de Simpson, no caso geral, a ordem de convergência de t_n , para $n \geq 1$, depende de n e da ordem de convergência de t_0 . Os lemas a seguir serão depois usados na prova do resultado principal, o Teorema 3.2, respeitando à ordem de convergência da função iteradora t_n .

Supomos que para $n \geq 1$, o ponto z é um zero simples da função real f , função esta diferenciável pelo menos até à ordem n numa vizinhança de z , sendo t_n a função iteradora de Newton-Cotes fechada $t_n(x) = x - c_n B_n(x)^{-1} f(x)$, tal que $B_n(x) = \sum_{i=0}^n A_i f^{(i)}(x + i h_n(x))$, onde $h_n(x)$ é o passo e a soma dos coeficientes da regra é designada por $c_n = \sum_{i=0}^n A_i$.

Lema 3.1. O passo $h_n(x) = \frac{t_{n-1}(x) - x}{n}$ da função iteradora $t_n(x)$, em $x = z$, satisfaz as igualdades,

$$\begin{aligned} (i) \quad & h_n(z) = 0 \\ (ii) \quad & h_n^{(1)}(z) = -1/n \\ (iii) \quad & h_n^{(j)}(z) = -\frac{t_{n-1}^{(j)}(z)}{n} \quad j = 2, 3, \dots, n. \end{aligned} \quad (34)$$

Demonstração. Da Proposição 2.1 sabemos que t_{n-1} possui convergência supralinear. Assim, $t_{n-1}(z) = z$ e $t_{n-1}^{(1)}(z) = 0$, donde se obtém imediatamente as igualdades (i) a (iii), atendendo à definição de h_n . \square

Os coeficientes A_i que entram na expressão da função $B_n(x)$ são pesos de uma regra de quadratura fechada de Newton-Cotes e, por isso, satisfazem as igualdades que constam do lema a seguir.

Lema 3.2. *Sendo A_0, A_1, \dots, A_n os nós de quadratura de uma regra de Newton-Cotes fechada, com $n + 1$ nós, são válidas as igualdades (i_1) a (i_n) seguintes:*

$$\begin{aligned} (i_1) \quad & \frac{A_1 + 2 A_2 + \dots + n A_n}{n} = \frac{c_n}{2} \\ (i_2) \quad & \frac{A_1 + 2^2 A_2 + \dots + n^2 A_n}{n^2} = \frac{c_n}{3} \\ & \vdots \\ (i_n) \quad & \frac{A_1 + 2^n A_2 + \dots + n^n A_n}{n^n} = \frac{c_n}{n+1}, \end{aligned} \tag{35}$$

onde $c_n = \sum_i^n A_i$.

Demonstração. Os pesos A_i de uma regra de quadratura interpolatória, como é o caso das regras de Newton-Cotes fechadas, são invariantes por mudança de intervalo de integração. Além disso, os pesos são simétricos, isto é $A_i = A_{n-i}$, para $i = 0, 1, \dots, n$.

Assim, se no intervalo $[0, n]$ e para os $n + 1$ nós equidistantes $x_i = i$, para $i = 0, 1, \dots, n$, aplicarmos o método dos coeficientes indeterminados (ver por exemplo, [10]), usando a base canónica dos polinómios de grau menor ou igual a n , os pesos de uma regra de Newton-Cotes fechada, no suporte considerado, $Q_n(\psi) = A_0 \psi(0) + A_1 \psi(1) + \dots + A_{n-1} \psi(n-1) + A_n \psi(n)$, são solução do sistema de equações lineares,

$$\begin{aligned} A_0 + A_1 + \dots + A_n &= n \\ A_1 + 2 A_2 + 3 A_3 + \dots + n A_n &= n^2/2 \\ A_1 + 2^2 A_2 + 3^2 A_3 + \dots + n^2 A_n &= n^3/3 \\ &\vdots \\ A_1 + 2^n A_2 + 3^n A_3 + \dots + n^n A_n &= n^{n+1}/(n+1). \end{aligned}$$

Igualando a c_n o membro direito da primeira equação do sistema anterior e substituindo nas equações seguintes, resultam sucessivamente as igualdades (i_1) a (i_n) em (35). \square

As igualdades em (35) são usadas na demonstração do seguinte lema.

Lema 3.3. Dado $n \geq 1$, seja z um zero simples da função real f , diferenciável pelo menos até à ordem n numa vizinhança de z , t_0 a função de Newton e t_n a função iteradora de Newton-Cotes fechada $t_n(x) = x - c_n B_n(x)^{-1} f(x)$, tal que $B_n(x) = \sum_{i=0}^n A_i f^{(1)}(x + i h_n(x))$, onde $h_n(x) = (t_{n-1}(x) - x)/n$ e $\sum_{i=0}^n A_i = c_n$.

Se t_{n-1} for de ordem de convergência pelo menos n , isto é,

$$t_{n-1}(z) = z \quad e \quad t_{n-1}^{(1)}(z) = t_{n-1}^{(2)}(z) = \dots = t_{n-1}^{(n-1)}(z) = 0, \quad (36)$$

então, a função B_n e as suas n primeiras derivadas, no ponto $x = z$, satisfazem respectivamente as igualdades

$$\begin{aligned} (i) \quad & B_n(z) = c_n f^{(1)}(z) \\ (ii) \quad & B_n^{(j)}(z) = \frac{c_n}{j+1} f^{(j+1)}(z), \quad \text{para } j = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (37)$$

Demonstração. Começemos por notar que

$$B_n(x) = B_n^{(0)}(x) = \sum_{i=0}^n A_i f^{(1)}(x + i h_n(x)).$$

Atendendo a que $h_n(z) = 0$ (ver (34)), conclui-se que

$$B_n(z) = \sum_{i=0}^n A_i f^{(1)}(z) = c_n f^{(1)}(z).$$

Fica assim provada a igualdade (i) em (37). Passemos à demonstração para qualquer j natural. Começemos por provar que

$$B_n^{(j)}(x) = \sum_{i=0}^n A_i \left[f^{(j+1)}(x + i h_n(x)) (1 + i h_n^{(1)}(x))^j + \dots \right], \quad j = 1, 2, \dots \quad (38)$$

onde os termos omitidos no segundo membro de (38) contêm derivadas de h_n de ordem superior à primeira.

Para $j = 1$, tem-se

$$B_n^{(1)}(x) = \sum_{i=0}^n A_i \left[f^{(2)}(x + i h_n(x)) (1 + i h_n^{(1)}(x)) \right].$$

Suponhamos que a igualdade (38) é verdadeira para $j = 1, \dots, k$. Mostremos a sua validade para $j = k + 1$. Aplicando a hipótese de indução anterior, resulta

$$B_n^{(k+1)}(x) = \left(B_n^{(k)}(x) \right)^{(1)} = \sum_{i=0}^n A_i \left[f^{(k+1)}(x + i h_n(x)) (1 + i h_n^{(1)}(x))^k + \dots \right]^{(1)}.$$

Ou seja,

$$B_n^{(k+1)}(x) = \sum_{i=0}^n A_i \left[f^{(k+2)}(x + i h_n(x))(1 + i h_n^{(1)}(x))^{k+1} + f^{(k+1)}(x + i h_n(x)) k(1 + i h_n^{(1)}(x))^{k-1} h_n^{(2)}(x) + \dots \right].$$

Uma vez que no segundo membro da expressão anterior o termo que contém $f^{(k+1)}$ inclui a segunda derivada de h_n , esse termo pode ser omitido, donde

$$B_n^{(k+1)}(x) = \sum_{i=0}^n A_i \left[f^{(k+2)}(x + i h_n(x))(1 + i h_n^{(1)}(x))^{k+1} + \dots \right]. \quad (39)$$

Por conseguinte, usando indução matemática, a igualdade (39) permite-nos concluir que a expressão (38) é válida para qualquer $j \in \mathbb{N}$.

Se na equação (38) considerarmos o limite, quando x tende para z , obtém-se

$$B_n^{(j)}(z) = \sum_{i=0}^n A_i f^{(j+1)}(z)(1 - i/n)^j, \quad (40)$$

já que $h_n(z) = 0$, $h_n^{(1)}(z) = -1/n$ e $h_n^{(j)}(z) = 0$, para $j \geq 2$.

Falta provar que

$$\sum_{i=0}^n A_i \left(1 - \frac{i}{n}\right)^j = \frac{c_n}{j+1}. \quad (41)$$

Rescrevendo (35) na forma

$$\sum_{i=0}^n A_i \left(\frac{i}{n}\right)^j = \frac{c_n}{j+1}, \quad j = 1, \dots, n,$$

e atendendo à simetria $A_{n-i} = A_i$, obtém-se

$$\sum_{i=0}^n A_i \left(\frac{n-i}{n}\right)^j = \frac{c_n}{j+1},$$

expressão equivalente à igualdade (41), que pretendíamos provar. Substituindo na equação (40), obtém-se (37) (ii) pelo que o lema fica demonstrado. \square

Teorema 3.1. *Seja z um zero simples da função real f , continuamente diferenciável até à ordem $p \geq 1$ e t_0 uma função iteradora inicial de ordem 2 de convergência local.*

Para $n \geq 1$, se a função iteradora de Newton-Cotes t_n , definida recursivamente a partir de t_0 , tiver ordem de convergência local $p \geq 2$, então a função iteradora imediata, isto é, t_{n+1} , possui ordem de convergência pelo menos $p + 1$.

Demonstração. Por hipótese tem-se,

$$t_n(z) = z, \quad t_n^{(1)}(z) = t_n^{(2)}(z) = \dots = t_n^{(p-1)}(z) = 0 \quad \text{e} \quad t_n^{(p)}(z) \neq 0.$$

Pretende-se mostrar que

$$t_{n+1}(z) = z, \quad t_{n+1}^{(j)}(z) = 0, \quad \text{para} \quad 1 \leq j \leq p.$$

Para a função iteradora $t_{n+1}(x) = x - c_{n+1} B_{n+1}^{-1}(x) f(x)$, seja $H_{n+1}(x) = t_{n+1}(x) - x$. Assim,

$$B_{n+1}(x) H_{n+1}(x) = -c_{n+1} f(x). \quad (42)$$

Dado que por hipótese z é um zero simples, $f^{(1)}(z) \neq 0$, e como por (37) (i) se tem $B_{n+1}(z) = c_{n+1} f^{(1)}(z)$, conclui-se de (42), visto que $B_{n+1}(z) \neq 0$,

$$H_{n+1}(z) = 0, \quad \text{logo} \quad t_{n+1}(z) = z, \quad (43)$$

e

$$\begin{aligned} (i) \quad & H_{n+1}^{(1)}(z) = t_{n+1}^{(1)}(z) - 1 \\ (ii) \quad & H_{n+1}^{(j)}(z) = t_{n+1}^{(j)}(z), \quad j \geq 2. \end{aligned} \quad (44)$$

Apliquemos à função H_{n+1} a regra de Leibniz para as derivadas de um produto. Para $1 \leq k \leq p$ são válidas as seguintes igualdades:

$$\begin{aligned} (i_1) \quad & B_{n+1}^{(1)} H_{n+1}(x) + B_{n+1}(x) H_{n+1}^{(1)}(x) = -c_{n+1} f^{(1)}(x) \\ (i_2) \quad & B_{n+1}^{(2)} H_{n+1}(x) + \binom{2}{1} B_{n+1}^{(1)}(x) H_{n+1}^{(1)}(x) + B_{n+1}(x) H_{n+1}^{(2)}(x) = -c_{n+1} f^{(2)}(x) \\ (i_3) \quad & B_{n+1}^{(3)} H_{n+1}(x) + \binom{3}{1} B_{n+1}^{(2)}(x) H_{n+1}^{(1)}(x) + \\ & + \binom{3}{2} B_{n+1}^{(1)}(x) H_{n+1}^{(2)}(x) + B_{n+1}(x) H_{n+1}^{(3)}(x) = -c_{n+1} f^{(3)}(x) \\ & \vdots \\ (i_p) \quad & \sum_{i=0}^p \binom{p}{i} B_{n+1}^{(p-i)}(x) H_{n+1}^{(i)}(x) = -c_{n+1} f^{(p)}(x). \end{aligned} \quad (45)$$

Ao substituírmos x por z , atendendo a (43), em (45) (i_1) a (i_p) são nulos os termos contendo $H_{n+1}(z)$. Ora, por (37) (i), sabemos que $B_{n+1}(z) = c_{n+1} f^{(1)}(z)$.

Assim, substituindo em (45) (i_1) , obtém-se

$$c_{n+1} f^{(1)}(z) H_{n+1}^{(1)}(z) = -c_{n+1} f^{(1)}(z),$$

logo,

$$H_{n+1}^{(1)}(z) = -1, \quad (46)$$

e, atendendo a (44),

$$t_{n+1}^{(1)}(z) = 0. \quad (47)$$

Levando em consideração (46), a igualdade (45) (i_2) passa a ser

$$B_{n+1} H_{n+1}^{(2)}(z) = -c_{n+1} f^{(2)}(z).$$

Ora, por (37) (i), $B_{n+1}(z) = c_{n+1} f^{(1)}(z)$, logo atendendo a (46), obtém-se

$$-2 B_{n+1}^{(1)}(z) + c_{n+1} f^{(1)}(z) H_{n+1}^{(2)}(z) = -c_{n+1} f^{(2)}(z),$$

e, por (37) (ii),

$$-2 \frac{c_{n+1}}{2} f^{(2)}(z) + c_{n+1} f^{(1)}(z) H_{n+1}^{(2)}(z) = -c_{n+1} f^{(2)}(z).$$

Donde,

$$H_{n+2}^{(2)}(z) = 0. \quad (48)$$

logo,

$$t_{n+2}^{(2)}(z) = 0. \quad (49)$$

Assim, atendendo a (46) e (48), para $x = z$, a igualdade (45) (i_3) passa a ser

$$-3 B_{n+1}^{(2)}(z) + B_{n+1}(z) H_{n+1}^{(3)}(z) = -c_{n+1} f^{(3)}.$$

De (37) (ii) e (i), resulta

$$-3 \frac{c_{n+1}}{3} f^{(3)}(z) + c_{n+1} f^{(1)}(z) H_{n+1}^{(3)}(z) = -c_{n+1} f^{(3)}(z).$$

Logo,

$$H_{n+1}^{(3)}(z) = 0 \iff t_{n-1}^{(3)}(z) = 0. \quad (50)$$

De igual modo, atendendo a (50) e ao Lema 3.3 pode concluir-se usando argumentos idênticos aos anteriores que desde a quarta à última igualdade em (45), se tem

$$H_{n+1}^{(j)}(z) = 0 \iff t_{n-1}^{(j)}(z) = 0, \quad 4 \leq j \leq p.$$

Por conseguinte, a função iteradora t_{n+1} é de ordem de convergência pelo menos $p + 1$. \square

Teorema 3.2. *Fixado $n \geq 1$ a função iteradora de Newton-Cotes fechada, t_n , possui ordem de convergência pelo menos $2 + n$, sendo $p = 2$ a ordem de convergência da função iteradora de Newton.*

Demonstração. Seja z um zero múltiplo da função f e $q = 1$ a ordem de convergência local do método de Newton aplicado a f . Tal como se referiu no parágrafo 2.1, substituindo a função f pela função $F(x) = -[f^{(1)}(x)]^{-1} f(x)$, sabe-se que z é zero simples para esta função. Assumindo que se adopta para função inicial a função F e que a expressão respectiva de t_0 é $t_0(x) = x - [F^{(1)}(x)]^{-1} F(x)$, sabemos da Proposição 2.1 que a função iteradora t_0 possui convergência supralinear, isto é, a ordem de convergência p de t_0 é tal que $p \geq 2$.

De igual modo se conclui que caso z seja zero simples para a função f , e t_0 o método de Newton aplicado a essa função, se tem $p \geq 3$.

Recorrendo ao Teorema 3.1, sendo p_1 a ordem de convergência da função iteradora t_1 , tem-se $p_1 \geq p + 1 \geq 3$. Usando repetidamente o mesmo resultado, conclui-se por indução que a ordem de t_k satisfaz as desigualdades

$$p_k \geq p_{k-1} + 1 \geq k + 2, \quad \text{para } k = 1, 2, \dots,$$

e por conseguinte fica provada a afirmação do Teorema 3.2. \square

4 Exemplos

Processos iterativos de ordem de convergência local elevada podem ser úteis nos casos em que no método de Newton a escolha de valores iniciais x_0 “suficientemente próximos” da raiz z é muito restritiva. A título ilustrativo, apresentamos nomeadamente um exemplo onde é usada a função \tanh (Exemplo 4.1). O gráfico desta função assemelha-se a um “S” alongado, obrigando a que se escolham aproximações iniciais x_0 da solução num intervalo relativamente pequeno (fora desse intervalo a função possui derivada de módulo próximo de zero, inviabilizando o método de Newton). No entanto, para este caso, funções iteradoras como as de Newton-trapézios e de Newton-Simpson (de ordens de convergência local respectivamente 3 e 4), bem como outras iteradoras de Newton-Cotes de ordens de convergência superior, é possível escolher-se valores iniciais x_0 num intervalo mais alargado (valores iniciais esses para os quais o método de Newton nem sequer é convergente).

Exemplo 4.1. Na Figura 1 está representado, no intervalo $I = [-5, 6]$, o gráfico da função

$$f(x) = \tanh(x - 1).$$

A equação $f(x) = 0$ possui uma única raiz $z = 1$ nesse intervalo. A função f é continuamente diferenciável até à ordem que se quiser. Acontece que

devido à forma em “S” alongado do gráfico da função, por exemplo para $x \in A = [-5, -0.9]$ ou $x \in B = [2.9, 6]$, o passo do método de Newton $|f(x)/f'(x)| > 11$. Por conseguinte, se escolhermos uma aproximação inicial da raiz, $x_0 \in A$ ou $x_0 \in B$, as iteradas subsequentes do método de Newton escapam ao intervalo I .

Neste caso particular, acontece que para a função f a respectiva função iteradora de Newton possui ordem de convergência cúbica, uma vez que $t_0(1) = 1$, $t_0^{(1)}(1) = t_0^{(2)}(1) = 0$ e $t_0^{(3)}(1) \neq 0$, ou seja excepcionalmente a ordem de convergência do método de Newton é 3. Pode verificar-se que a ordem de convergência do método dos trapézios t_1 é $q = 3$, enquanto o método de Simpson t_2 possui ordem de convergência $q = 5$.

Entre outras, a função iteradora de Newton-Simpson, por ser de ordem de convergência superior ao método de Newton, permite-nos que escolhamos aproximações iniciais x_0 mais afastadas de z do que no caso do método de Newton.

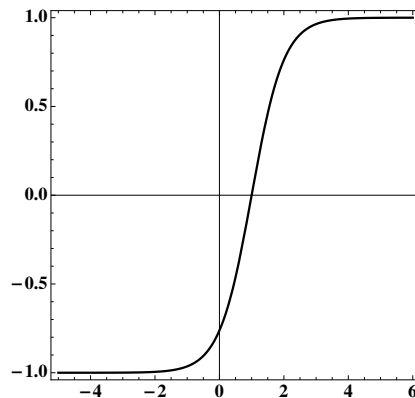


Figura 1: $f(x) = \tanh(x - 1)$, $-5 \leq x \leq 6$.

Na Tabela 2 comparam-se os valores das derivadas sucessivas de cada uma das funções iteradoras, no ponto fixo $z = 1$.

Na Figura 2 são mostrados os gráficos das funções $y = x$, $y = t_0(x)$ (Newton), $y = t_1(x)$ (trapézios) e $y = t_2(x)$ (Simpson). Note-se que apesar do método dos trapézios ser, neste caso, da mesma ordem de convergência que o método de Newton, o gráfico de t_1 numa vizinhança de $z = 1$, mantém-se

t_i	$t_i^{(0)}$	$t_i^{(1)}$	$t_i^{(2)}$	$t_i^{(3)}$	$t_i^{(4)}$	$t_i^{(5)}$	ordem
t_0	1	0	0	-4	0	-16	3
t_1	1	0	0	-1	0	14	3
t_2	1	0	0	0	0	82/3	5

Tabela 2: Comparação de ordens de convergência dos métodos de Newton (t_0), trapézios (t_1) e Simpson (t_2) (Exemplo 4.1).

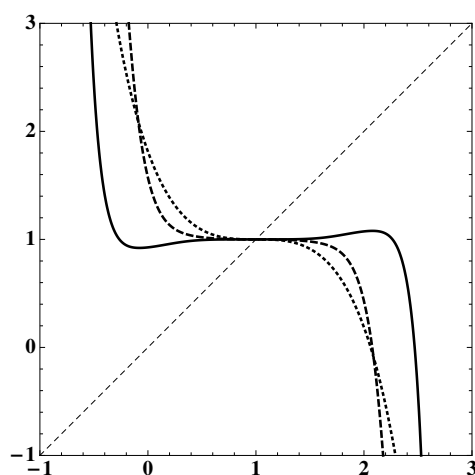


Figura 2: Exemplo 4.1: funções iteradoras t_0 (pontilhado), t_1 (tracejado), e t_2 (cheio).

“achatado”² até uma distância de z superior à do gráfico da iteradora de Newton t_0 .

Analogamente, visto que o gráfico de t_3 (a traço cheio) apresenta assíntotas verticais em posições mais afastadas do ponto fixo $z = 1$ do que no caso das restantes funções iteradoras, concluímos graficamente que podemos escolher aproximações iniciais x_0 mais afastadas de z do que as possíveis para o método de Newton, e com elas calcularmos aproximações precisas de z , efectuando um pequeno número de iterações de t_3 . Quer isto dizer que a “bacia de atracção” ([17], p. 43) do método de Simpson é maior do que a correspondente bacia do método de Newton. Note-se que métodos iterativos

²O termo “achatado” é aqui utilizado no sentido geométrico intuitivo, como sinónimo de “quase constante”. Deixamos para o futuro uma caracterização numérica mais precisa deste termo.

cuja bacia de atracção sejam maiores do que as do método de Newton poderão ser usados com vantagem, por exemplo, no contexto da optimização numérica sem restrições, assunto que abordaremos noutra trabalho.

Partindo de $x_0 = 2.0$, efectuaram-se 4 iterações dos métodos de Newton, trapézios e Simpson. Na Figura 3 compara-se graficamente o erro de cada uma das iteradas (cálculos realizados no sistema *Mathematica* em precisão máquina, isto é, com aproximadamente 16 dígitos decimais significativos). Note-se que, logo a partir da primeira iteração, o erro absoluto do método de Simpson diminui muito mais rapidamente do que nos outros dois métodos.

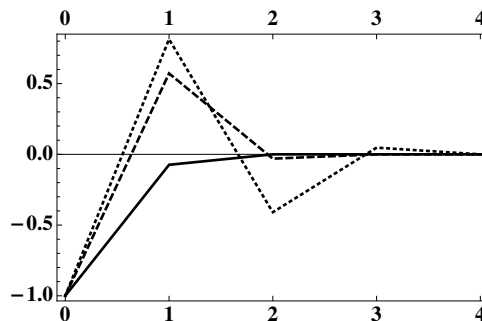


Figura 3: $x_0 = 2.0$ (Exemplo 4.1), erro para 4 iterações de t_0 (ponteados), t_1 (tracejado), e t_2 (cheio).

Para melhor se apreciar o ganho de precisão de uma função iteradora de ordem 5 de convergência, como é o caso da função de Newton-Simpson, por comparação com t_0 e t_1 , mostra-se na Figura 4 o número s de algarismos significativos aproximados (isto é, $s = -\log_{10}(|z - x_k|)$) para as duas primeiras iteradas de cada um dos métodos mencionados, para $x_0 = 2.0$. Ganhos de precisão ainda mais dramáticos podem ser obtidos com funções iteradoras de Newton-Cotes de ordens de convergência superior. Por exemplo, para t_4 , de ordem de convergência $q = p + n = 3 + 4 = 7$ (pode verificar-se que a primeira derivada não nula é $t_4^{(7)}(1) \simeq -4.9$), definida por

$$\begin{aligned} h_4(x) &= (t_3(x) - x)/4 \\ B_4(x) &= 7 f^{(1)}(x) + 32 f^{(1)}(x + h_4(x)) + 12 f^{(1)}(x + 2 h_4(x)) + \\ &\quad + 32 f^{(1)}(x + 3 h_4(x)) + 7 f^{(1)}(x + 4 h_4(x)) \\ t_4(x) &= x - 90 B_4^{-1}(x) f(x). \end{aligned}$$

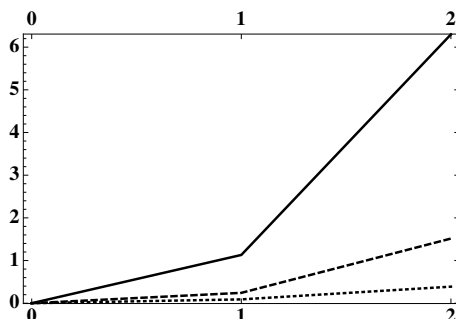


Figura 4: $x_0 = 2.0$ (Exemplo 4.1), número de algarismos significativos (aproximados) para 2 iterações de t_0 (pontead), t_1 (tracejado), e t_2 (cheio).

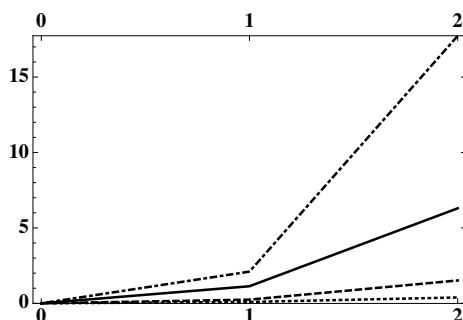


Figura 5: Exemplo 4.1: $x_0 = 2.0$, número de algarismos significativos para 2 iterações de t_0 (pontead), t_1 (tracejado), t_2 (cheio) e t_4 (tracejado-pontead).

a segunda iterada do método iterativo correspondente possui mais de 17 dígitos significativos (ver Figura 5).

É interessante observarmos numericamente o efeito de *uma única iteração* de cada um dos métodos iterativos de Newton-Cotes, t_0 a t_7 , e de alguns métodos $t_{ij} = t_i(t_j(x))$, que resultam da composição dos métodos considerados. Para o efeito, escolheu-se um ponto inicial $x_0 = 1.1$, o qual podemos considerar “suficientemente próximo” de $z = 1$, no sentido de que a distância a z é 10^{-1} e todos os métodos t_0 a t_7 convergem para z . O ganho de precisão após um iterada é descrito na Tabela 3, onde é discriminado o número s de algarismos significativos do resultado e a ordem q teórica de cada um dos métodos.

t_i	t_0	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7
s	3.2	3.8	5.6	7.8	10.2	11.1	13.5	14.5
q	3	3	5	5	7	7	9	9

Tabela 3: 1 iteração com $x_0 = 1.1$ (Exemplo 4.1). s = número aproximado de dígitos significativos. $q = 3 + n - 1$ (n ímpar) ou $q = 3 + n$ (n par).

t_{ij}	t_{21}	t_{32}	t_{43}	t_{54}	t_{65}	t_{76}
s	19.5	30.8	57.5	75.2	104.7	127.3
q	15	25	35	49	63	81

Tabela 4: 1 iteração com $x_0 = 1.1$ (Exemplo 4.1). s = aprox. número de dígitos significativos. $q(t_{ij}) = \text{ordem } t_i \times \text{ordem } t_j$.

t_{ij}	t_{12}	t_{23}	t_{34}	t_{45}	t_{56}	t_{67}
s	17.7	39.5	53.4	80.9	98.8	135.4
q	15	25	35	49	63	81

Tabela 5: 1 iteração com $x_0 = 1.1$ (Exemplo 4.1). s = aprox. número de dígitos significativos. $q(t_{ij}) = \text{ordem } t_i \times \text{ordem } t_j$.

Nas Tabelas 4 e 5 são comparados os valores de s para as funções iteradoras compostas aí indicadas. Constata-se que o número de algarismos significativos após uma iteração de t_{ij} é distinto do número correspondente da iteração t_{ji} .

Note-se que usámos programação dinâmica no código *Mathematica* das funções de Newton-Cotes. Assim, uma vez calculados os valores $x_1 = t_6(x_0)$, o valor de $t_{76}(x_0) = t_7(x_1)$ é obtido com um pequeno esforço computacional. Porém, o ganho de precisão no resultado é enorme porquanto passamos de 14.5 dígitos de precisão de x_1 (ver Tabela 3), para os 127.3 dígitos de $t_{76}(x_0)$ (ver Tabela 4).

Exemplo 4.2. Um caso extremo de “mau comportamento” do método de Newton ocorre quando, para um qualquer valor inicial $x_0 \neq z$, as sucessivas iteradas $x_{k+1} = t_0(x_k)$ se afastam do ponto fixo z . Trata-se, portanto de um ponto fixo *repulsor*, como por exemplo o zero real (único) $z = 0$ da função [1], [20],

$$f(x) = x^{1/3}.$$

A função derivada $f^{(1)}$ não está definida em $z = 0$ e

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} f^{(1)}(x) = +\infty.$$

Dado que $t_0(x) = x - f(x)/f^{(1)}(x) = -2x \implies t_0^{(1)}(0) = -2$, o ponto fixo $z = 0$ é repulsor.

Tal como sugerido no parágrafo 2.1, basta começarmos por considerar a equação equivalente $F(x) = 0$, com $F(x) = t_0(x) - x = -3x$, para que as correspondentes funções iteradoras t_i produzam a solução exacta, isto é $t_i(x) = 0, \forall x \in \mathbb{R}$, para $i \geq 0$. Tal significa que se passou de uma função f extremamente “mal comportada” (se a ela aplicarmos as iteradoras de Newton-Cotes), para uma função F extremamente “bem comportada” se usarmos esta função como *input* das aplicações t_i para $i \geq 0$, já que $t_i(x_0) = z, \forall x_0 \in \mathbb{R}$.

Exemplo 4.3. A função real

$$f(x) = \sin(x) - x,$$

possui um único zero real $z = 0$. No entanto, este zero é múltiplo, porquanto $f(0) = 0$ e $f^{(1)}(0) = 0$. Por conseguinte, o método de Newton possui ordem de convergência local $p = 1$. A Tabela 6 mostra que se efectuarmos

t_i	t_0	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7
s	1.18	1.27	1.28	1.35	1.41	1.45	1.49	1.52

Tabela 6: $f(x) = \sin(x) - x$. Uma iteração com $x_0 = 0.1$.

t_i	t_0	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_6	t_7
s	4.2	4.8	7.6	9.6	13.1	14.2	17.7	18.7
q	2	2	4	4	6	6	8	8

Tabela 7: $F(x) = \frac{x - \sin(x)}{1 - \cos(x)}$ (Exemplo 4.3). Uma iteração com $x_0 = 0.1$. Ordem de convergência teórica $q = 2 + n - 1$ (n ímpar) ou $q = 2 + n$ (n par).

uma iteração dos métodos t_0 a t_7 , partindo de $x_0 = 0.1$, os métodos de Newton-Cotes comportam-se aproximadamente como o método de Newton, não oferecendo por isso nenhuma vantagem computacional relativamente ao método de Newton. Tal como se indicou na Secção 2.1, se substituírmos a função f , pela função

$$F(x) = t_0(x) - x = -f(x)/f'(x) = \frac{x - \sin(x)}{1 - \cos(x)},$$

a qual pode prolongar-se continuamente ao ponto $x = 0$ (sendo $F(0) = 0$). Uma vez que $z = 0$ é *zero simples* de F , o método de Newton aplicado a esta função possui convergência quadrática, pois $F(0) = 0$, e

$$F^{(1)}(0) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{F(\delta) - F(0)}{\delta} = -\frac{1}{3} \neq 0.$$

Assim, se aplicarmos as funções iteradoras t_0 a t_7 , tomando F para função de teste, obtêm-se os resultados da Tabela 7.

Exemplo 4.4. Seja

$$f(x) = x^{11} + 4x^2 - 10.$$

Visto que na função polinomial f o termo em x^{11} é muito dominante, o gráfico da função sugere a existência de um zero múltiplo (ver Figura 6). Tal não é o caso, pois o polinómio anterior possui uma única raiz real positiva simples $z \simeq 1.1$, pelo que o método de Newton possui ordem de convergência local $p = 2$.

Na Figura 7 comparam-se os gráficos das funções iteradoras de Newton, t_0 , com as funções t_6 , t_7 e com a composta t_{76} . Esta última função apresenta um

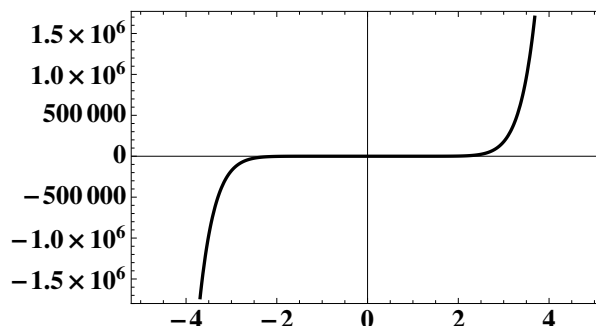


Figura 6: $f(x) = x^{11} + 4x^2 - 10$.

gráfico aproximadamente horizontal numa larga vizinhança do ponto fixo z , indicando que poderemos usar essa função iteradora partindo de um valor x_0 afastado de z , e calcular uma aproximação de z de alta precisão, efectuando apenas algumas iterações de t_{76} . Por exemplo, fazendo $x_0 = 2$, e efectuando três iterações do método de Newton, o resultado possui aproximadamente 0.5 dígitos significativos. No entanto, após o mesmo número de iterações, o resultado de t_{76} possui cerca de 2410 algarismos significativos (ver Tabela 8).

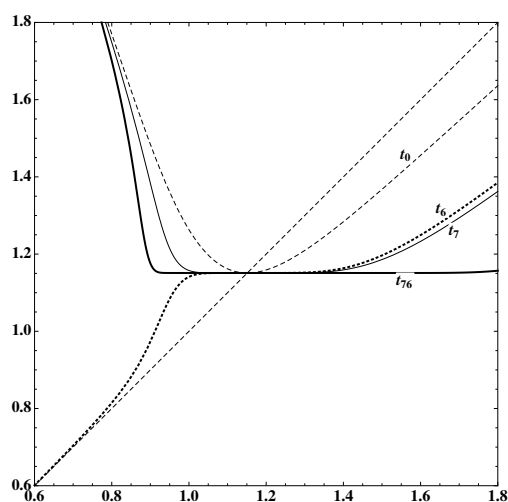


Figura 7: $f(x) = x^{11} + 4x^2 - 10$. Comparação de algumas funções iteradoras com a função iteradora t_{76} .

t_i	t_0	t_6	t_7	t_{76}
s	0.5	5.3	7.6	2410.6

Tabela 8: $x_0 = 2$ (Exemplo 4.4). Comparação do número de algarismos significativos após três iterações.

Observação 4.1. Sabe-se que para métodos de ordem de convergência supralinear, o erro da k -ésima iterada do método, $e_k = z - x_k$, pode ser bem aproximado pela diferença $x_{k+1} - x_k$. Por exemplo, o valor do número aproximado de algarismos significativos, s , inscrito na última coluna da Tabela 8, pode ser confirmado indirectamente através dos seguintes cálculos, a partir de $x_0 = 2$ e efectuando apenas mais uma iteração de t_{76} :

$$\begin{aligned} x_1 = t_{76}(x_0) &\implies e_0 \simeq x_1 - x_0 \simeq -0.799781 \\ x_2 = t_{76}(x_1) &\implies e_1 \simeq x_2 - x_1 \simeq -0.0491500 \\ x_3 = t_{76}(x_2) &\implies e_2 \simeq x_3 - x_2 \simeq -2.50444 \times 10^{-44} \\ x_4 = t_{76}(x_3) &\implies e_3 \simeq x_4 - x_3 \simeq -2.75873 \times 10^{-2411}. \end{aligned}$$

Referências

- [1] A. Ben-Israel, Newton's method with modified functions, *Contemporary Math.* 204, (1997), 39-50.
- [2] H. Brass and K. Petras, *Quadrature Theory: The Theory of Numerical Integration on a Compact Interval*, AMS, Washington, 2011.
- [3] A. Cordero and J. R. Torregrosa, Variants of Newton's method for functions of several variables, *Appl. Math. Comput.* 183, (2006), 199-208.
- [4] G. Dahlquist and Å. Björck, *Numerical Methods in Scientific Computing*, Volume I, SIAM, Philadelphia, 2008.
- [5] J. E. Dennis and J. J. Moré, A characterization of superlinear convergence and its application to quasi-Newton methods, *Mat. Comput.* 28, (1974), 549-560.
- [6] M. Frontini and E. Sormani, Third order methods for quadrature formulae for solving systems of nonlinear equations, *Appl. Math. Comput.* 149, (2004), 771-782.

-
- [7] W. Gautschi, *Numerical Analysis, An Introduction*, Birkhäuser, Boston, 1997.
- [8] E. Isaacson and H. B. Keller, *Analysis of Numerical Methods*, John Wiley and Sons, New York, 1966.
- [9] M. M. Graça, Removing multiplicities in C by double newtonization, *Appl. Math. Comput.* 215(2), (2009), 562-572.
- [10] M. M. Graça and M. E. Sousa-Dias, A unified framework for the computation of polynomial quadrature weights and errors, *arXiv:1203.4795v2*, (2012), March.
- [11] M. A. Hafiz and M. M. Bahgat, An efficient two-step iterative method for solving systems of nonlinear equations, *J. Math. Res.* 4, No. 4, (2012), 28-34.
- [12] E. Halley, A new exact and easy method for finding the roots of equations generally and without any previous reduction, *Phil. Roy. Soc. London* 18, (1964), 136-147.
- [13] C. T. Kelley, *Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations*, SIAM, Philadelphia, 1995.
- [14] V. I. Krylov, *Approximate Calculation of Integrals*, Dover, New York, 2005.
- [15] A. Melman, Geometry and convergence of Halley's method, *SIAM Rev.* 39 (4), (1997), 728-735.
- [16] N. A. Mir, N. Rafiq and N. Yasmin, Quadrature based three-step iterative method for nonlinear equations, *Gen. Math.* 18, No. 4, (2010), 31-42.
- [17] W. C. Rheinboldt, *Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations*, SIAM, 2nd ed., Philadelphia, 1998.
- [18] R. Thukral, New sixteenth-order derivative-free methods for solving nonlinear equations, *Amer. J. Comput. Appl. Math* 2(3), (2012), 112-118.
- [19] J. F. Traub, *Iterative Methods for the Solution of Equations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1964.

- [20] N. Ujević, A method for solving nonlinear equations, *Appl. Math. Comput.* *174*, (2006), 1416-1426.
- [21] L. Yau and A. Ben-Israel, The Newton and Halley Methods for Complex Roots, *Amer. Math. Monthly* *105*, (1998), 806-818.
- [22] S. Weerakoom and T. G. I. Fernando, A Variant of Newton's Method with Accelerated Third-Order Convergence, *Appl. Math. Lett.* *13*, (2000), 87-93.
- [23] S. Wolfram, *The Mathematica Book*, Wolfram Media, fifth ed., 2003.