

Comparação Numérica entre Métodos Iterativos para Problemas Não Lineares

Elienai Alves de Souza¹

Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia, UFF, Volta Redonda, RJ

Gustavo Benitez Alvarez²

Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia, UFF, Volta Redonda, RJ

Diomar Cesar Lobão³

Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia, UFF, Volta Redonda, RJ

Resumo. Neste trabalho, são apresentados alguns métodos iterativos clássicos e outros mais recentes para a resolução de sistemas de equações não lineares. Os dez métodos iterativos estudados estão implementados na linguagem MATLAB[®], sendo aplicados na resolução de quatro diferentes sistemas não lineares cujas soluções são previamente conhecidas. Utilizando como aproximação inicial uma malha 1000×1000 no intervalo $[-2, 2] \times [-2, 2]$ em \mathbb{R}^2 , são obtidos dados sobre o desempenho e as bacias de atração de cada método para cada sistema não linear. Além dos métodos iterativos, implementou-se algoritmos para gerar as imagens das bacias de atração e de seus respectivos conjuntos de Julia, para assim calcular o raio de convergência local para cada raiz e a dimensão fractal de cada conjunto de Julia pelo método *Box-Counting*. Desta forma, obteve-se dados que foram organizados em imagens e tabelas para auxiliar na análise comparativa.

Palavras-chave. Métodos Iterativos, Sistema de Equações Não Lineares, Dimensão Fractal.

1 Introdução

De acordo com Taylor [1], ao contrário dos problemas lineares, a maioria dos problemas não lineares não têm solução analítica. Assim, nos últimos anos, com o desenvolvimento de computadores digitais cada vez mais eficientes e rápidos, a investigação de problemas não lineares e de métodos numéricos na resolução destes tem aumentado drasticamente. Considere o sistema de equações não lineares

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \Rightarrow F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}, \quad (1)$$

¹profelienai.vr@gmail.com

²benitez.gustavo@gmail.com

³lobaodiomarcasar@yahoo.ca

sendo f_1, \dots, f_n funções não lineares de n variáveis e F uma função vetorial em $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$.

Solucionar este sistema consiste em determinar os \mathbf{x} que satisfaçam (1), sendo possível em raros casos obter soluções exatas. Em geral, é possível obter soluções aproximadas utilizando métodos iterativos do tipo $\mathbf{x}_{k+1} = \Phi(\mathbf{x}_k)$, onde \mathbf{x}_k é a solução aproximada na k -ésima iteração.

2 Métodos Iterativos para Sistemas Não Lineares

Os dez métodos iterativos aqui tratados são do tipo $\mathbf{x}_{k+1} = \Phi(\mathbf{x}_k)$. Estes fornecem uma sequência de vetores $\{\mathbf{x}_k\}_{k=0}^{\infty}$, sendo k o índice do passo (ou iteração) e \mathbf{x}_k a aproximação da solução na k -ésima iteração. A partir de uma estimativa inicial \mathbf{x}_0 , esta sequência poderá divergir ou convergir para uma i -ésima raiz $\mathbf{x}^{*,i}$ do sistema $F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

- Método de Newton (Nw) [2]:
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k). \quad (2)$$

- Método de Broyden (Br) [3]:
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - B^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k), \quad (3)$$

onde

$$B_k = B_{k-1} + (\mathbf{y}_k - B_{k-1}\mathbf{s}_{k-1}) \frac{\mathbf{s}_{k-1}^T}{\mathbf{s}_{k-1}^T B_{k-1} \mathbf{s}_{k-1}} \quad (4)$$

para $k > 0$, sendo $\mathbf{y}_k = F(\mathbf{x}_k) - F(\mathbf{x}_{k-1})$, $\mathbf{s}_{k-1} = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_{k-1}$ e $B_0 = J(\mathbf{x}_0)$. Uma melhoria considerável pode ser incorporada através do emprego da fórmula de inversão matricial de Sherman e Morrison [4]:

$$B_k^{-1} = B_{k-1}^{-1} - \frac{(B_{k-1}^{-1}\mathbf{y}_k - \mathbf{s}_{k-1})\mathbf{s}_{k-1}^T B_{k-1}^{-1}}{\mathbf{s}_{k-1}^T B_{k-1}^{-1} \mathbf{y}_k}. \quad (5)$$

- Método de Steffensen (St) [5]: aproximando a Jacobiana pelo método das diferenças divididas $J(\mathbf{x}_k) \approx [\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_k + F(\mathbf{x}_k); F]$ no método de Newton (2), obtém-se o método de Steffensen dado pela equação

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - [\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_k + F(\mathbf{x}_k); F]^{-1}F(\mathbf{x}_k). \quad (6)$$

- Método de Halley (Ha) [6]:
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \left[I - \frac{1}{2}L(\mathbf{x}_k) \right]^{-1} J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k), \quad (7)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_k &= J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k), \\ H(\mathbf{x}_k)\mathbf{a}_k &= \left[H(f_1(\mathbf{x}_k))\mathbf{a}_k \quad H(f_2(\mathbf{x}_k))\mathbf{a}_k \quad \cdots \quad H(f_n(\mathbf{x}_k))\mathbf{a}_k \right], \\ L(\mathbf{x}_k) &= J^{-1}(\mathbf{x}_k)[H(\mathbf{x}_k)\mathbf{a}_k]^T, \end{aligned}$$

$H(\mathbf{x}_k)$ é um tensor de terceira ordem que costuma ser chamado de matriz Hessiana [7] do sistema (1) e $H(f_i(\mathbf{x}_k))$ é uma matriz quadrada de ordem n formada pelas derivadas segundas de f_i e chamada matriz Hessiana da i -ésima função $f_i(\mathbf{x})$.

- Método de Chebyshev (Cbs) [6]:
$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \left[I + \frac{1}{2}L(\mathbf{x}_k) \right] J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k). \quad (8)$$

- Método super-Halley (sH) [8]:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - \left[I + \frac{1}{2}L(\mathbf{x}_k)(I - L(\mathbf{x}_k))^{-1} \right] J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k). \quad (9)$$

- Método de Potra-Pták (PP) [9]:
$$\mathbf{y}_k = \mathbf{x}_k - J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k), \quad (10)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - J^{-1}(\mathbf{x}_k)[F(\mathbf{x}_k) + F(\mathbf{y}_k)]. \quad (11)$$

- Métodos da Homotopia e Continuação (HC) [3]:

Os métodos da *homotopia e continuação* para sistemas não lineares introduzem o problema a ser resolvido dentro de um outro conjunto de problemas. Resumindo, através da homotopia de Newton Global [10] e aplicando o método da continuação, resolver o sistema $F(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ equivale ao problema de resolver o seguinte sistema de equações diferenciáveis

$$\frac{d\mathbf{x}(\beta)}{d\beta} = -J^{-1}(\mathbf{x}(\beta))F(\mathbf{x}(0)), \text{ para } 0 \leq \beta \leq 1, \quad (12)$$

com a condição inicial $\mathbf{x}(0)$. Neste trabalho, o sistema (12) é resolvido através do método de Runge-Kutta de quarta ordem com quatro passos.

- Método do Ponto-Médio (PM) [6]:
$$\mathbf{y}_k = \mathbf{x}_k - \frac{1}{2}J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k), \quad (13)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - J^{-1}(\mathbf{y}_k)F(\mathbf{x}_k). \quad (14)$$

- Método de Chun (Ch) [11]:

$$\mathbf{y}_k = \mathbf{x}_k - J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k), \quad (15)$$

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{x}_k) - 2J^{-1}(\mathbf{x}_k)F(\mathbf{y}_k) + [J^{-1}(\mathbf{x}_k)]^2 J(\mathbf{y}_k)F(\mathbf{y}_k). \quad (16)$$

3 Resultados

Para um domínio $D \subset \mathbb{R}^2$, inicia-se cada método iterativo fornecendo as estimativas iniciais $\mathbf{x}_0 \in D$. Para a geração das estimativas iniciais \mathbf{x}_0 , utilizou-se o domínio quadrado $D = [-2, 2] \times [-2, 2]$, sendo este discretizado em uma malha de 1000×1000 pontos. As raízes de todos os sistemas utilizados se encontram dentro do domínio D . Em cada processo iterativo empregou-se a tolerância $\varepsilon = 10^{-12}$ e o máximo de 80 iterações. O critério de parada usado foi $|f_i(\mathbf{x}_k)| < \varepsilon$ para $\forall i = 1, 2, \dots, n$. Se um processo iterativo alcançar a tolerância de 80 iterações, este é considerado divergente a partir da atual estimativa inicial \mathbf{x}_0 . Para maiores detalhes ver [12].

3.1 Sistemas Não Lineares

Para obtenção dos resultados, foram utilizados sistemas cujas raízes reais já eram previamente conhecidas, para assim validar as raízes fornecidas pelos métodos numéricos.

Tabela 1: Sistemas Não Lineares.

$F(\mathbf{x})$	Raízes
$\begin{cases} x^3 - 3xy^2 - 1 = 0 \\ 3x^2y - y^3 = 0 \end{cases} \quad (17)$	$\{(1, 0); (-1/2, \sqrt{3}/2); (-1/2, -\sqrt{3}/2)\}$
$\begin{cases} x^5 - 10x^3y^2 + 5xy^4 - 1 = 0 \\ 5x^4y - 10x^2y^3 + y^5 = 0 \end{cases} \quad (18)$	$\{(1, 0); ((\sqrt{5}-1)/4, \sqrt{(\sqrt{5}+5)/8}); ((-\sqrt{5}-1)/4, \sqrt{(5-\sqrt{5})/8}); ((\sqrt{5}-1)/4, -\sqrt{(\sqrt{5}+5)/8}); ((-\sqrt{5}-1)/4, -\sqrt{(5-\sqrt{5})/8})\}$
$\begin{cases} x^2 - y^2 - 1 = 0 \\ (x^2 + y^2 - 1)(x^2 + y^2 - 2) = 0 \end{cases} \quad (19)$	$\{(1, 0); (-1, 0); (\sqrt{6}/2, \sqrt{2}/2); (-\sqrt{6}/2, \sqrt{2}/2); (\sqrt{6}/2, -\sqrt{2}/2); (-\sqrt{6}/2, -\sqrt{2}/2)\}$
$\begin{cases} x^2 - y^2 - 1 = 0 \\ (x^2 + xy + y^2 - 1)(x^2 + xy + y^2 - 2) = 0 \end{cases} \quad (20)$	$\{(1, 0); (-1, 0); (2/\sqrt{3}, -1/\sqrt{3}); (-2/\sqrt{3}, 1/\sqrt{3}); (3\sqrt{(\sqrt{13}+5)/6} - 3\sqrt{((\sqrt{13}+5)/6)^3}, \sqrt{(\sqrt{13}+5)/6}); (3\sqrt{(5-\sqrt{13})/6} - 3\sqrt{((5-\sqrt{13})/6)^3}, \sqrt{(5-\sqrt{13})/6}); (3\sqrt{((\sqrt{13}+5)/6)^3} - 3\sqrt{(\sqrt{13}+5)/6}, -\sqrt{(\sqrt{13}+5)/6}); (3\sqrt{((5-\sqrt{13})/6)^3} - 3\sqrt{(5-\sqrt{13})/6}, -\sqrt{(5-\sqrt{13})/6})\}$

3.2 Bacias de Atração e Conjunto de Julia

É conhecido que as bacias de atração de alguns dos métodos da seção 2 apresentam uma estrutura fractal [13, 14], como se pode ver na Figura 1, onde tem-se um exemplo de bacias de atração e do conjunto de Julia do método da Homotopia e Continuação aplicado ao sistema não linear (17). Por meio das bacias de atração é possível analisar e visualizar o comportamento de convergência de um método e calcular o raio de convergência local

de cada raiz. O conjunto de Julia é definido como o contorno entre as bacias de atração, sendo responsável pela formação das imagens fractais. Assim, é mediante este conjunto que se calcula a *dimensão fractal* pelo método *Box-Counting* [15].

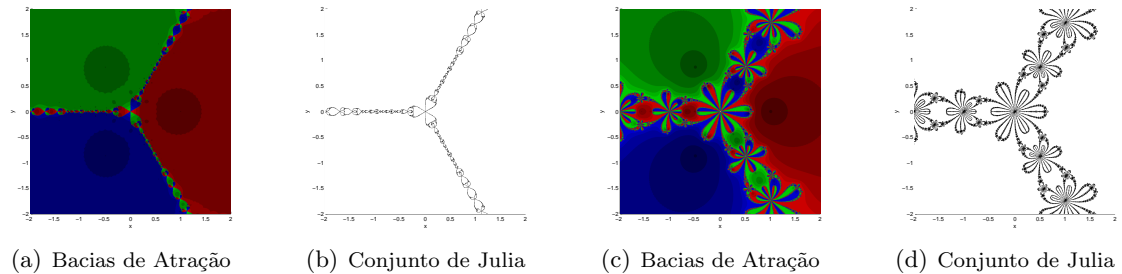


Figura 1: Bacias de Atração e Conjunto de Julia para o sistema (17) pelos métodos: (a)-(b) Homotopia e Continuação; (c)-(d) Potra-Pták.

3.3 Resultados Numéricos

O comparativo entre os métodos será realizado através dos resultados constantes nas Tabelas 2, 3, 4 e 5. Estas apresentam os seguintes resultados numéricos para cada um dos métodos da seção 2: ordem de convergência (Ord), índice de eficiência (IE), índice de eficiência computacional (IEC), dimensão fractal calculado pelo método *Box-Counting* (DF), média aritmética dos raios de convergência (\bar{r}), total de pontos divergentes (PD), taxa média de iterações por ponto (I/P), taxa média de pontos por segundo (P/s) e taxa média de iterações por segundo (I/s) [12]. O símbolo * indica que o resultado numérico não se encontra na bibliografia consultada.

Tabela 2: Resultados numéricos para o sistema não linear (17).

	Ord	IE	IEC	DF	\bar{r}	PD	I/P	P/s	I/s
Nw	2	1.414	1.0473	1.406	0.620	0	7.9	1165.1	9194.8
Br	1.618	1.618	1.0203	1.789	0.500	120095	27.4	452.0	12364.0
St	2	1.414	1.0336	1.877	0.181	760906	64.6	98.5	6363.0
Ha	3	1.442	1.0218	1.131	0.812	0	4.6	1266.9	5791.3
Cbs	3	1.442	1.0242	1.547	0.370	0	6.6	889.1	5883.0
sH	3	1.442	1.0202	1.250	0.739	0	4.1	1359.4	5570.1
HC	<i>Ord*</i>	<i>IE*</i>	<i>IEC*</i>	1.222	0.794	0	4.0	326.7	1293.6
PP	3	1.442	1.0449	1.611	0.333	66	7.6	942.3	7192.7
PM	3	1.442	1.0373	1.409	0.642	40930	8.0	882.9	7070.3
Ch	4	1.414	1.0362	1.661	0.308	712	8.0	684.2	5454.1

4 Conclusões

Analisando os resultados numéricos verifica-se que: o método HC apresentou o melhor resultado no cálculo da média dos raios de convergência local, tendo o maior valor em dois dos quatro testes; não houve pontos de divergência em todos os quatro testes para o método HC; em relação à quantidade de iterações por ponto, o método HC mostrou

Tabela 3: Resultados numéricos para o sistema não linear (18).

	Ord	IE	IEC	DF	\bar{r}	PD	I/P	P/s	I/s
Nw	2	1.414	1.0473	1.627	0.335	388	11.4	825.2	9387.1
Br	1.618	1.618	1.0203	1.758	0.262	474480	49.2	245.3	12072.5
St	2	1.414	1.0336	1.419	0.053	966632	77.8	77.2	6009.2
Ha	3	1.442	1.0218	1.251	0.447	0	9.1	582.9	5311.5
Cbs	3	1.442	1.0242	1.575	0.213	208356	26.7	202.2	5404.0
sH	3	1.442	1.0202	1.502	0.359	294	10.4	495.0	5165.2
HC	<i>Ord*</i>	<i>IE*</i>	<i>IEC*</i>	1.406	0.544	0	4.5	255.2	1156.2
PP	3	1.442	1.0449	1.735	0.184	54079	17.0	398.1	6752.7
PM	3	1.442	1.0373	1.561	0.369	130702	15.7	414.2	6513.7
Ch	4	1.414	1.0362	1.758	0.165	102119	20.0	253.5	5064.9

Tabela 4: Resultados numéricos para o sistema não linear (19).

	Ord	IE	IEC	DF	\bar{r}	PD	I/P	P/s	I/s
Nw	2	1.414	1.0473	1.361	0.135	264	10.5	946.1	9953.0
Br	1.618	1.618	1.0203	1.693	0.126	164567	28.8	430.4	12392.4
St	2	1.414	1.0336	1.721	0.080	636304	58.5	107.3	6279.3
Ha	3	1.442	1.0218	1.648	0.127	45843	12.5	484.3	6050.6
Cbs	3	1.442	1.0242	1.528	0.086	335304	32.5	154.2	5007.3
sH	3	1.442	1.0202	1.718	0.117	35786	12.5	468.7	5867.6
HC	<i>Ord*</i>	<i>IE*</i>	<i>IEC*</i>	1.520	0.130	0	5.3	232.8	1231.7
PP	3	1.442	1.0449	1.619	0.064	154420	20.0	296.4	5917.2
PM	3	1.442	1.0373	1.565	0.134	684	7.3	927.9	6805.4
Ch	4	1.414	1.0362	1.451	0.125	196736	22.3	221.2	4928.5

Tabela 5: Resultados numéricos para o sistema não linear (20).

	Ord	IE	IEC	DF	\bar{r}	PD	I/P	P/s	I/s
Nw	2	1.414	1.0473	1.401	0.174	550	8.9	1070.3	9521.0
Br	1.618	1.618	1.0203	1.675	0.182	97834	21.6	559.1	12071.3
St	2	1.414	1.0336	1.679	0.111	528608	48.2	129.7	6256.2
Ha	3	1.442	1.0218	1.563	0.173	23659	8.7	648.4	5609.2
Cbs	3	1.442	1.0242	1.605	0.134	398866	35.7	130.7	4664.0
sH	3	1.442	1.0202	1.635	0.158	19	8.1	675.5	5438.6
HC	<i>Ord*</i>	<i>IE*</i>	<i>IEC*</i>	1.435	0.200	0	4.0	287.4	1162.2
PP	3	1.442	1.0449	1.626	0.122	144532	17.5	325.2	5685.4
PM	3	1.442	1.0373	1.576	0.184	1806	4.9	1232.5	6064.3
Ch	4	1.414	1.0362	1.480	0.175	179508	19.9	238.6	4752.3

o menor índice nos quatro testes, apontando assim para uma convergência global mais eficiente; na quantidade de pontos processados por segundo, o método de Newton (Nw) teve o melhor desempenho, sendo o maior índice em dois dos quatro testes; em relação ao número de iterações processadas por segundo, o método de Broyden (Br) foi superior aos outros, apresentando o maior índice nos quatro testes realizados, ficando em segundo lugar o Método de Newton (Nw).

Desta forma, dentro dos testes realizados, destaca-se o método de Newton por sua maior eficiência temporal no processamento das iterações, visto que este processou mais pontos por segundo nos quatro testes. Já com relação à convergência, o método que mais se destacou foi o método da Homotopia e Continuação, enfatizando-se o fato deste ter apresentado 100% de pontos convergentes nos quatro testes realizados.

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES pelo auxílio financeiro.

Referências

- [1] J. R. Taylor. *Classical Mechanics*. University Science Books, 2005.
- [2] S. D. Conte and C. De-Boor. *Elementary Numerical Analysis, an Algorithmic Approach*. McGraw-Hill Book Company, São Paulo, 1980.
- [3] R. L. Burden and J. D. Faires. *Numerical Analysis*. Cengage Learning, Canada, 2011.
- [4] C. G. Broyden. On the discovery of the “good broyden” method. *Mathematical Programming*, 87(2):209–213, 2000.
- [5] J. A. Ezquerro and M. A. Hernández-Verón. Increasing the applicability of steffensen’s method. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 418(2):1062–1073, 2014.
- [6] M. Frontini and E. Sormani. Third-order methods from quadrature formulae for solving systems of nonlinear equations. *Appl. Math. Comput.*, 149(1):771–782, 2004.
- [7] T. Park, J. Ji, and K. Hee-Ko. A second order geometric method for ray/parametric surface intersection. *Computer Aided Geometric Design*, 30(8):795–804, 2013.
- [8] T. Steihaug and S. Suleiman. Rate of convergence of higher order methods. *Applied Numerical Mathematics*, 67(1):230–242, 2013.
- [9] F. A. Potra and V. Ptak. Nondiscrete Induction and Iterative Processes. *Research Notes in Mathematics*, 103, 1984.
- [10] E. L. Allgower and K. Georg. *Computational Solution of Nonlinear Systems of Equations*. American Mathematical Society, 1990.
- [11] C. Chun. A new iterative method for solving nonlinear equations. *Applied Mathematics and Computation*, 178(2):415–422, 2006.
- [12] E. A. Souza. Métodos iterativos para problemas não lineares. Dissertação de Mestrado, PPG-MCCT/UFF, 2015.
- [13] M. G. Eptropakis and M. N. Vrahatis. Studying the basin of convergence of methods for computing periodic orbits. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 21(08):2079–2106, 2011.
- [14] W. C. Rheinboldt. *Nonlinear Systems and Bifurcations*. John Wiley & Sons, Ltd, 2004.
- [15] G. Gonzato. A practical implementation of the box counting algorithm. *Computers & Geosciences*, 24(1):95–100, 1998.