Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 3, N. 1, 2015.
Trabalho apresentado no XXXV CNMAC, Natal-RN, 2014.

Método de Chebyshev em Sistemas Não Lineares Singulares

Roberto Andreani, **Sandra A. Santos**,
Depto de Mat. Aplicada, IMECC, UNICAMP,
15054-000, Campinas, SP
E-mail: andreani@ime.unicamp.br, sandra@ime.unicamp.br,

Wesley V. I. Shirabayashi **Emerson V. Castelani**,
Depto de Matemática - UEM
88040-900, Maringá, PR
E-mail: wvishirabayashi@uem.br, evcastelani@uem.br.

Resumo: *Vários autores mostraram que, sob certas condições, o método de Newton gera uma sequência linearmente convergente para uma solução quando a matriz Jacobiana é singular nesta solução. Neste trabalho temos por objetivo estender um resultado de convergência do método de Newton em sistemas não lineares singulares, para o método de Chebyshev. Através da análise de alguns exemplos conjecturamos a razão de convergência para o método de Chebyshev em sistemas singulares*

Palavras-chave: *Método de Newton, Método de Chebyshev, Sistemas não lineares singulares*

Exposição do Problema

Considere um sistema não linear da forma:

$$F(x) = 0, \tag{1}$$

onde $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$.

Existem vários trabalhos sobre a convergência do método de Newton quando a solução do problema (1) é um ponto de singularidade da matriz Jacobiana de F, $F'(x)$, por exemplo [2, 3, 4, 5]. Nos baseamos nos resultados de [2] para obter um resultado de convergência para o método de Chebyshev. Para mais detalhes sobre o método de Chebyshev ver [1, 6, 7].

Para prosseguir a análise vejamos algumas notações: Seja x_* uma solução de (1) tal que $F'(x_*)$ seja singular e suponha que $F'(x)$ seja inversível em

$$\mathcal{V}_\delta = \{x \mid 0 < \|x - x_*\| < \delta\}, \tag{2}$$

para algum $\delta > 0$. Sejam também N o núcleo de $F'(x_*)$, X tal que $\mathbb{R}^n = N \oplus X$, P_N o projetor em N paralelo a X e $P_X = I - P_N$ o projetor em X paralelo a N.

Observação 1. *Note que X não é necessariamente o complemento ortogonal de N, apenas um subespaço que completa N como soma direta para o $\mathbb{R}^n$.*

Vamos utilizar as seguintes hipóteses:
H1: A função $F \in C^3$;
H2: O sistema $F(x) = 0$ tem uma solução x_*;
H3: Existe $\delta > 0$ tal que $F'(x)$ é não singular na vizinhança $\mathcal{V}_\delta$, definida em (2);
H4: Existe uma constante c positiva tal que para todo $s \in N$ e $x \in \mathbb{R}^n$ vale a desigualdade:

$$\|F''(x_*)sx\| \geq c\|s\| \cdot \|x\|.$$

H5: $F'(x_*)X = X$, isto é, o subespaço X é invariante pela ação do operador $F'(x_*)$.
Notação: No decorrer do texto usaremos as seguintes notações:

$$F_k = F(x_k), \;\; F'_k = F'(x_k), \;\; F''_k = F''(x_k),$$
$$F_* = F(x_*), \;\; F'_* = F'(x_*), \;\; F''_* = F''(x^*).$$

Formulação Utilizada

O método de Newton para resolver (1) é definido iterativamente por:

$$x_{k+1} = x_k + d_N,$$

onde d_N é solução de:

$$F'_k d_N = -F_k.$$

De outro modo:

$$x_{k+1} = G(x_k),$$

onde

$$G(x) = \begin{cases} x - [F'(x)]^{-1}F(x), & \text{se } x \neq x_* \\ x_*, & \text{se } x = x_* \end{cases} \tag{3}$$

é chamada função de iteração do método de Newton. Observe que no caso singular a primeira expressão para G não vale em x_*, por isso definimos $G(x_*) = x_*$, posteriormente mostraremos que desse modo a aplicação G é contínua.

O seguinte resultado refere-se a propriedades da função G e sua utilidade ficará clara mais a frente.

Proposição 2. *Suponha que $F \in C^2$. Para todo $x \in \mathcal{V}_\delta$, a aplicação $G(x)$ definida em (3) é diferenciável e $G'(x) = [F'(x)]^{-1}F''(x)[F'(x)]^{-1}F(x)$.*

Demonstração: Para $x \in \mathcal{V}_\delta$ temos $G(x) = x - [F'(x)]^{-1}F(x)$, então

$$F'(x)G(x) = F'(x)x - F(x).$$

Derivando com relação a x, obtemos:

$$F''(x)G(x) + F'(x)G'(x) = F''(x)x + F'(x)I - F'(x) = F''(x)x.$$

Assim, substituindo a expressão (3) e simplificando vem:

$$F'(x)G'(x) = F''(x)x - F''(x)G(x) = F''(x)[F'(x)]^{-1}F(x).$$

Portanto,

$$G'(x) = [F'(x)]^{-1}F''(x)[F'(x)]^{-1}F(x).$$

$\square$

O resultado a seguir, sobre a invariância dos iterandos do método de Newton por transformações não singulares, é bem conhecido e de simples demonstração, mas damos ênfase a ele pois ele também é válido para o método de Chebyshev.

Lema 3. *Os iterandos gerados pelo método de Newton são invariantes por transformações não singulares.*

O teorema de convergência será precedido por alguns lemas técnicos, que foram extraídos do desenvolvimento da prova de Cavanagh para simplificar a apresentação dos resultados.

O lema a seguir serve como base para a demonstração de um outro lema, enunciado posteriormente, o qual estabelece que mesmo $F'(x^*)$ sendo singular é possível obter um limitante para $[F'(x)]^{-1}$ quando x está próximo de x^*. Estes lemas também foram utilizados por Reddien [8].

Lema 4. *Suponha a validade de H1, H2, H3, H4 e H5. Então*
i) Existem $c_1 > 0$ e $\delta > 0$ tais que $\|F'(x)y\| \geq c_1\|y\|$ para todo $y \in X$ e $x \in \mathcal{V}_\delta$.
ii) Existem $c_2 > 0$ e $\delta > 0$ tais que $\|F'(x)s\| \geq c_2\|x - x_*\|\|s\|$ para todo $s \in N$ e $x \in \mathcal{V}_\delta$.

Lema 5. *Suponha a validade de H1, H2, H3, H4 e H5. Então, existem $c_3 > 0$ e $\delta > 0$ tais que para todo $x \in \mathcal{V}_\delta$*

$$\|(F'(x))^{-1}\| \leq \frac{1}{c_3\|x - x_*\|}.$$

O teorema a seguir é o resultado de Cavanagh [2, Teorema 2.7] com leves modificações. Essas modificações foram feitas apenas para simplificar a demonstração. Também vale observar que a correção sugerida por Cavanagh para restaurar a convergência quadrática é apenas teórica e não pode ser utilizada na prática, pois necessita de prévio conhecimento da solução.

Teorema 6. *Suponha a validade de H1, H2, H3, H4 e H5, e escolha um $\delta > 0$ de modo que os Lemas 4 e 5 sejam válidos.*

Então, x_* é um ponto atrator para o método de Newton, a convergência é linear,

$$P_X(x_k - x_*) \longrightarrow 0 \ \ \textit{superlinearmente}, \quad \frac{\|P_N(x_k - x_*)\|}{\|P_N(x_{k-1} - x_*)\|} \longrightarrow \frac{1}{2} \ \ \textit{e} \ \ \frac{1}{2}P_N = G'(x_*).$$

A convergência quadrática pode ser restaurada usando o seguinte processo iterativo:

$$x_{k+1} = x_k + d_N - \frac{1}{2}P_N(x_k - x_*).$$

O seguintes resultados são consequências diretas do Teorema 6:

Corolário 7. *A aplicação G como definida em (3) é contínua em $\mathcal{V}_\delta \cup \{x_*\}$.*

Corolário 8. *O operador $G'(x)$ definido por:*

$$G'(x) = \begin{cases} [F'(x)]^{-1}F''(x)[F'(x)]^{-1}F(x), & \textit{se } x \neq x_* \\ \frac{1}{2}P_N, & \textit{se } x = x_* \end{cases} \tag{4}$$

é contínuo em $\mathcal{V}_\delta \cup \{x_*\}$.

Resultados sobre o Método de Chebyshev

O método de Chebyshev é um dos mais conhecidos métodos tensoriais para se resolver sistemas não lineares. Gundersen e Steihaug, em [6], mostraram que este método pode ser definido do seguinte modo:

$$x_{k+1} = x_k + d_N + d_C, \tag{5}$$

no qual d_N e d_C são soluções dos seguintes sistemas lineares:

$$F'_k d_N = -F_k, \qquad\qquad F'_k d_C = -\frac{1}{2}F''_k d_N d_N. \tag{6}$$

Mostraremos que o Teorema 6 vale também para (5)-(6), ou seja, o método de Chebyshev gera uma sequência convergente para uma solução do problema (1). A ordem de convergência também é linear, mas o passo corretor, d_C, nos dá uma melhora com relação ao método de Newton. Mostraremos que a direção corretora, d_C, tem uma estreita relação com a correção sugerida por Cavanagh em [2]. As hipóteses são as mesmas do Teorema 6.

Teorema 9. *Suponha a validade das hipóteses H1, H2, H3, H4 e H5 para $F : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Então, uma sequência gerada pelo método de Chebyshev converge para x_* e $d_C \longrightarrow \frac{1}{4}P_N(x_k - x_*)$.*

DOI: 10.5540/03.2015.003.01.0043

Demonstração: Da relação (5) e da expansão de Taylor de segunda ordem para F em torno de $x_k \in \mathcal{V}_\delta$ vem:

$$\begin{aligned}
x_{k+1} - x_* &= x_k - x_* - (F'_k)^{-1}F_k - \frac{1}{2}(F'_k)^{-1}F''_k d_N d_N \\
&= (F'_k)^{-1}\left[-F_k + F'_k(x_k - x_*) - \frac{1}{2}F''_k d_N d_N\right] \\
&= (F'_k)^{-1}\left[\frac{1}{2}F''_k(x_k - x_*)(x_k - x_*) + O(\|x_k - x_*\|^3) - \frac{1}{2}F''_k d_N d_N\right] \\
&= (F'_k)^{-1}\left[\frac{1}{2}F''_k(x_k - x_* + d_N)(x_k - x_* - d_N) + O(\|x_k - x_*\|^3)\right]. \qquad (7)
\end{aligned}$$

Vejamos estimativas para os termos que aparecem na equação (7):

- $x_k - x_* + d_N = O(\|x_k - x_*\|)$

De fato, pela expansão de Taylor temos:

$$F_* = F_k + F'_k(x_* - x_k) + O(\|x_k - x_*\|^2).$$

Como $F_* = 0$, segue que:

$$-F_k + F'_k(x_k - x_*) = O(\|x_k - x_*\|^2).$$

Assim, do Lema 5 vem:

$$\begin{aligned}
x_k - x_* + d_N &= x_k - x_* - (F'_k)^{-1}F_k \\
&= (F'_k)^{-1}[-F_k + F'_k(x_k - x_*)] \\
&= (F'_k)^{-1}O(\|x_k - x_*\|^2) \\
&= O(\|x_k - x_*\|).
\end{aligned}$$

- $x_k - x_* - d_N = O(\|x_k - x_*\|)$

Primeiro note que:

$$\begin{aligned}
(F'_k)^{-1}F_k &= (F'_k)^{-1}[F'_*(x_k - x_*) + O(\|x_k - x_*\|^2)] \\
&= (F'_k)^{-1}F'_*(P_X + P_N)(x_k - x_*) + (F'_k)^{-1}O(\|x - x_*\|^2)] \\
&= (F'_k)^{-1}F'_*P_X(x_k - x_*) + (F'_k)^{-1}O(\|x - x_*\|^2)].
\end{aligned}$$

Então, aplicando o Lema 5, obtemos:

$$\|d_N\| = \|(F'_k)^{-1}F_k\| \le c_6\|x_k - x_*\|,$$

para $x_k \in \mathcal{V}_\delta$ e c_6 uma constante positiva.
Assim,

$$\|x_k - x_* - d_N\| \le \|x_k - x_*\| + \|d_N\| \le c_7\|x_k - x_*\|.$$

Ou seja,

$$x_k - x_* - d_N = O(\|x_k - x_*\|).$$

Retornando a (7),

$$\begin{aligned}
x_{k+1} - x_* &= \frac{1}{2}(F'_k)^{-1}F''_k O(\|x_k - x_*\|)O(\|x_k - x_*\|) + (F'_k)^{-1}O(\|x_k - x_*\|^3) \\
&= O(\|x_k - x_*\|) + O(\|x_k - x_*\|^2) = O(\|x_k - x_*\|).
\end{aligned}$$

A última afirmação do enunciado segue de observar que,

$$d_C = -\frac{1}{2}(F_k')^{-1}F_k''d_Nd_N = \frac{1}{2}G_k'd_N.$$

□

De certo modo, a direção d_C aproxima a correção teórica sugerida por Cavanagh $[\frac{1}{2}P_N(x_k - x_*)]$. Nos seguintes exemplos unidimensionais vemos a melhora obtida pelo método de Chebyshev em comparação com Newton.

Exemplo 10. *Considere $F(x) = x^2$, $x \in \mathbb{R}$. Vejamos como se comportam as sequências geradas pelos métodos de Newton e Chebyshev para resolver $F(x) = 0$.*

Temos, $F'(x) = 2x$ e $F''(x) = 2$. Todas as hipóteses dos Teoremas 6 e 9 são satisfeitas.

- *Newton*

$$x_{k+1} = \frac{1}{2}x_k, \quad ou\ seja, \quad \frac{x_{k+1}}{x_k} = \frac{1}{2}.$$

- *Chebyshev*

$$x_{k+1} = \frac{3}{8}x_k, \quad ou\ seja, \quad \frac{x_{k+1}}{x_k} = \frac{3}{8}.$$

Exemplo 11. *Considere agora $F(x) = x^3 + cx^2$, $x \in \mathbb{R}$ e c uma constante real não nula. Façamos a mesma análise do exemplo anterior:*

Temos, $F'(x) = 3x^2 + 2cx$ e $F''(x) = 6x + 2c$. Neste caso a equação $F(x) = 0$ tem duas raízes, a saber, $x_* = -c$ e $x_* = 0$, no entanto estamos interessados no caso em que $F'(x) = 0$, ou seja, $x_* = 0$. As hipóteses dos Teoremas 6 e 9 são satisfeitas.

- *Newton*

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^3 + cx_k^2}{3x_k^2 + 2cx_k}.$$

E temos que:

$$\frac{x_{k+1}}{x_k} \longrightarrow \frac{1}{2} \quad quando \quad x_k \longrightarrow x_*.$$

- *Chebyshev*

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^3 + cx_k^2}{3x_k^2 + 2cx_k} - \frac{x_k(3x_k + c)(x_k + c)^2}{(3x_k + 2c)^3}.$$

Neste caso temos:

$$\frac{x_{k+1}}{x_k} \longrightarrow \frac{3}{8} \quad quando \quad x_k \longrightarrow x_*.$$

Comentário 12. *Estes exemplos nos levam a conjecturar que a razão de convergência do método de Chebyshev é $\frac{3}{8}$.*

Uma modificação que fizemos no método de Chebyshev para melhorar a correção no sentido sugerido por Cavanagh foi adotar a sobrerelaxação $d_{Cm} = 2d_C$, o que chamamos de Chebyshev modificado. Neste caso, o processo iterativo torna-se:

$$x_{k+1} = x_k + d_N + 2d_C. \tag{8}$$

Assim temos $d_{Cm} \longrightarrow \frac{1}{2}P_{N_1}(x_k - x_*)$, e fazendo a mesma análise do Exemplo 10 obtemos:

$$x_{k+1} = \frac{1}{4}x_k \quad \text{e} \quad \frac{x_{k+1}}{x_k} = \frac{1}{4}.$$

Já para o Exemplo 11 obtemos:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k^3 + cx_k^2}{3x_k^2 + 2cx_k} - \frac{2x_k(3x_k + c)(x_k + c)^2}{(3x_k + 2c)^3}$$

e

$$\frac{x_{k+1}}{x_k} \longrightarrow \frac{1}{4} \text{ quando } x_k \longrightarrow x_*.$$

O próximo resultado é uma adaptação do Teorema 9 para o método definido por (8).

Teorema 13. *Suponha as mesmas hipóteses do Teorema 9. Então, se x_0 é tomado suficientemente próximo a x_*, o método definido por (8) gera uma sequência convergente a x_*.*

Demonstração: Utilizando a mesma técnica da prova do Teorema 9, segue de (8) que:

$$\begin{aligned} x_{k+1} - x_* &= x_k - x_* - (F_k')^{-1}F_k - (F_k')^{-1}F_k'' d_N d_N \\ &= (F_k')^{-1}[-F_k + F_k'(x_k - x_*)] - (F_k')^{-1}F_k'' d_N d_N. \end{aligned}$$

Agora usando o Lema 5 e os seguintes fatos, já mostrados:

$$-F_k + F_k'(x_k - x_*) = O(\|x_k - x_*\|^2), \quad d_N = O(\|x_k - x_*\|),$$

obtemos,

$$x_{k+1} - x_* = O(\|x_k - x_*\|).$$

□

Conclusões

Neste trabalho apresentamos um resultado de convergência local do método de Newton em sistemas singulares, originalmente feito por Cavanagh em [2], e estendemos tal resultado para o método de Chebyshev. Também modificamos os iterandos do método de Chebyshev obtendo um novo método, chamado por nós de método de Chebyshev modificado. Pela análise de alguns exemplos conjecturamos que o método de Chebyshev tem razão de convergência $\frac{3}{8}$ e o método de Chebyshev modificado tem razão de convergência $\frac{1}{4}$. Uma possibilidade de trabalho futuro é tentar mostrar que essa conjectura é verdadeira.

Referências

[1] V. Candela, A. Marquina, Recurrence relations for rational cubic methods II: the Chebyshev method. *Computing*, 45 (1990) 355-367.

[2] R.C. Cavanagh, “ Difference equations and iterative process”, Thesis, Computer Sci. Dept., Univ. of Maryland, College Park, 1970.

[3] D.W. Decker, H.B. Keller, C.T. Kelley, Convergence rates for Newton's method at singular points. *SIAM J. of Numer. Anal.*, 20 (1983) 296-314.

[4] D.W. Decker, C.T. Kelley, Newton's method at singular points, I. *SIAM J. of Numer. Anal.*, 17 (1980) 66-70.

[5] A. Griewank, M.R. Osborne, Newton's method for singular problems when the dimension of the null space is > 1. *SIAM J. of Numer. Anal.*, 18 (1981) 145-149.

[6] G. Gundersen, T. Steihaug, On large scale unconstrained optimization problems and higher order methods. *Opt. Methods and Software*, 25 (2010) 337-358.

[7] M.A. Hernández, M.A. Salanova, A family of Chebyshev-Halley type methods. *Intern. J. of Computer Math.*, 47 (1993) 59-63.

[8] G.W. Reddien, On Newton's method for singular problems. *SIAM J. of Numer. Anal.*, 15 (1978) 993-996.

