Computação Científica I
Lista 1: Newton e Secante, Simetrias e Análise

Professor: Bernardo Costa
Monitor: Gabriel Bastianello Lima

14 de outubro de 2022... para 24 de Outubro

*"[...] about 97% of the time[,] premature optimization is the root of all evil.
Yet we should not pass up our opportunities in that critical 3%."*
Donald E. Knuth, 1974

A primeira parte desta lista é uma preparação. Ela contém algumas considerações comuns a todos os métodos que exploram, de alguma forma, a primeira (e implicitamente, a segunda) derivada da função. Em seguida, analisamos as iterações do método de Newton e da secante, mostrando que, em determinadas circunstâncias, os pontos são gerados entre o atual e a raiz.

As questões marcadas com "**(NB)**" devem ser entregues num notebook Jupyter.

1 Simetrias e sinais das derivadas

A maior parte dos métodos vai usar, implícita ou explicitamente, as derivadas de f - se não na construção da recorrência, no mínimo ao fazer a análise de convergência do método. Assim, para simplificarmos a nossa vida, vamos reduzir todos os problemas a uma mesma "situação padrão".

Para ficar mais concreto, vamos analisar o método de Newton. Seja z uma raiz de f; para evitar casos extremos, supomos ao longo de toda a lista que a derivada $f'(z)$ não se anula.

1. Seja $g(x) = -f(x)$. Mostre que o método de Newton para g e para f produz a mesma sequência de pontos. Conclua que podemos supor que a derivada de f em sua raiz z é positiva.

2. Mais geralmente, o que acontece com o método de Newton se $g(x) = Cf(x)$, para uma constante C? Conclua que também podemos supor que $f'(z) = 1$. (Lembre que supomos $f'(z) \neq 0$.)

3. **(NB)** A segunda derivada, em z, só tem três possibilidades: pode ser maior, igual ou menor do que zero. Supondo $f'(z) = 1$, faça um esboço de três funções polinomiais, cada uma delas numa das situações acima.

Faça também o esboço de três funções transcendentes (usando seno, exponencial, logaritmo, ...), para cada uma das situações acima.

4. Mostre que o método de Newton é "invariante por translação". Ou seja, se $g(x) = f(x+b)$ (ou seja, g é uma translação de f), os pontos obtidos pela iteração de Newton para g são transladados dos iterados para f.

5. **(NB)** Ilustre a situação acima, com um gráfico, indicando a translação e a sequência dos pontos gerados para f e g.

6. Se z é uma raiz de f, que translação produz uma função g com raiz em zero? Conclua que podemos supor, ao analisar o método de Newton, que a raiz é $z = 0$.

7. Supomos $z = 0$ do caso anterior. Seja $g(x) = -f(-x)$. Mostre que $z = 0$ ainda é uma raiz de g, e que a derivada de g neste ponto tem o mesmo sinal que a de f. Agora, mostre que o sinal da segunda derivada de g é oposto ao da segunda derivada de f. Enfim, explique qual é a relação entre o método de Newton aplicado a g e a f.

8. De forma mais geral, considere a mudança de variáveis e funções dada por $g(x) = Cf(ax+b)$. Se z é uma raiz de f, e $f''(z) \neq 0$, como escolher a, b e C para que $g(0) = 0$, $g'(0) = 1$ e $g''(0) = 1$?

9. **(NB)** Como relacionar a iteração de Newton para f com a de g? Faça novamente uma ilustração para esta situação mais geral.

10. A mesma modificação pode ser usada para a bisseção, e o método da secante. Como cada um deles se comporta?

2 Análise local

Depois de "reduzir" o nosso estudo à situação padrão dada ao final da seção anterior, em que $f(0) = 0$, $f'(0) = 1$ e $f''(0) = 1$, podemos começar a analisar a convergência dos métodos com mais facilidade!

Vamos supor que $f \in \mathcal{C}^2$ é duas vezes derivável, com segunda derivada contínua. Denotamos por $N_f(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ o ponto gerado por um passo do método de Newton.

1. **(NB)** Faça um desenho desta situação, com o gráfico de f, a tangente em $(x, f(x))$ e o ponto $N_f(x)$. As contas abaixo buscam justificar que "o desenho está certo": a posição dos pontos é de fato a que você vê.

2. Use a continuidade das derivadas de f para mostrar que existe um intervalo $I = (-\varepsilon, \varepsilon)$ onde $1/2 < f'(x) < 3/2$ e $1/2 < f''(x) < 3/2$ para todo x no intervalo I.

3. Suponha agora que $0 < x < \varepsilon$ está neste intervalo. Mostre que $f(x) > 0$ e conclua que $N_f(x) < x$.

4. Calcule $f(x)$ pelo Teorema Fundamental do Cálculo, e mostre que, para x no intervalo $(0, \varepsilon)$, temos $xf'(x) - f(x) \geq 0$. (Use os sinais das derivadas) Conclua que a iteração de Newton gera um ponto entre 0 e x, e portanto também no intervalo.

5. Calcule $f(z)$ usando a fórmula de Taylor em x, e mostre que $N_f(x) = \frac{f''(\xi)}{2f'(x)}x^2$ para algum $\xi \in (0, x)$. Que estimativa podemos usar para a velocidade de convergência do método de Newton, nestas condições?

6. **(NB)** Aplique este método para duas funções (uma polinomial, uma transcendente) que satisfazem as condições $f(0) = 0$, $f'(0) = 1$ e $f''(0) = 1$. A estimativa da velocidade de convergência condiz com o resultado obtido?

7. **Método da secante.**

   Suponha que ambos os pontos iniciais estão no intervalo $(0, \varepsilon)$. Para fixar a notação, suponha portanto $0 < x < y < \varepsilon$. Mostre que, analogamente, o método vai gerar sempre pontos positivos, cada vez mais próximos da raiz.

   Comece mostrando que $S_f(x, y) = x - \frac{f(x)}{f'(\xi)}$, para algum $x < \xi < y$.

8. **Bônus: Newton do outro lado.**

   Mostre que o método de Newton, partindo de $-\varepsilon$, gera um ponto entre 0 e ε.

   Para isso, use que $N_f(a) = \frac{f'(a)a - f(a)}{f'(a)}$, e escreva $f(a) = \int_0^a f'(u)du$. Como f' é monótona em $(-\varepsilon, \varepsilon)$ (porquê?), e $f'(0) = 1$, mostre que $N_f(-\varepsilon) \leq \frac{\int_{-\varepsilon}^0 \left[1 - f'(-\varepsilon)\right]dt}{f'(-\varepsilon)}$. Agora, use que $f' > 1/2$ e conclua.

9. **Bônus: Pontos alternantes no método da secante.**

   Mostre que, se $-\varepsilon < x < 0 < y < \varepsilon$, o próximo ponto será $z \in (x, 0)$. Deduza que os pontos serão gerados com período 3 para “maior” ou “menor” do que zero.