
CÁLCULO NUMÉRICO

ApuntsFME

BARCELONA, OCTUBRE 2018

Última modificación: 2 de octubre de 2018.

This work is licensed under a [Creative Commons](#) “[Attribution-NonCommercial-ShareAlike 4.0 International](#)” license.



Contenidos

| | |
|--|-----------|
| 1. Ceros de funciones | 1 |
| 1.1. Métodos clásicos | 1 |
| 1.1.1. Método de la bisección | 1 |
| 1.1.2. Método de Newton | 1 |
| 1.1.3. Método de la secante | 2 |
| 1.2. Consistencia y convergencia | 2 |
| 1.2.1. Análisis del método de Newton | 5 |
| 1.2.2. Gráficos de convergencia | 6 |
| 1.2.3. Criterios prácticos de convergencia | 6 |
| 1.3. Métodos híbridos | 7 |
| 2. Sistemas de ecuaciones no lineales | 9 |
| 2.1. Método de Newton-Raphson | 9 |
| 2.2. Métodos casi-Newton | 9 |
| 2.2.1. Método de Broyden | 10 |
| Índice alfabético | 11 |

Tema 1

Ceros de funciones

Los métodos numéricos nos proporcionan aproximaciones sucesivas de una raíz (α) de una función. Comenzaremos con una aproximación inicial x^0 y el método nos proporcionará x^1 . Más generalmente, dado un x^k , el método nos proporcionará x^{k+1} .

1.1. Métodos clásicos

1.1.1. Método de la bisección

El método está basado en el teorema de Bolzano. Consiste en tomar un intervalo (a, b) con $f(a)f(b) < 0$. Una vez encontrado este intervalo inicial, vamos dividiendo sucesivamente el intervalo por la mitad y tomando el subintervalo que cumpla la condición de que sus extremos tengan distinto signo. Reduciendo el error a la mitad.

Este método tiene la ventaja de ser muy robusto y nos permite calcular la raíz con una precisión arbitraria. El inconveniente principal de este método es la velocidad: es un método muy lento.

1.1.2. Método de Newton

Dada una aproximación de la raíz x^k , calcularemos la siguiente aproximación x^{k+1} como el cero de la recta tangente a f en x^k , es decir, aproximaremos $f(x) \approx f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k)$ y x^{k+1} será el 0 de esta función aproximada:

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)}.$$

La ventaja de este método es la velocidad (tiene convergencia cuadrática para raíces simples). El inconveniente principal es que no es tan robusto: necesita una aproximación inicial suficientemente buena. Además, este método requiere de conocer la derivada $f'(x)$, lo cual puede ser costoso o imposible.

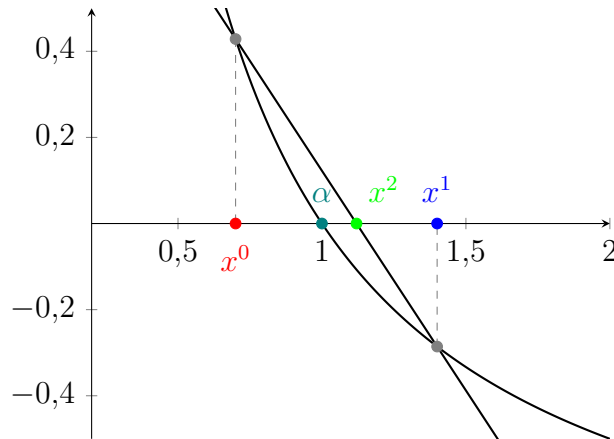


1.1.3. Método de la secante

Este método parte de dos aproximaciones iniciales x^0 y x^1 , tomaremos x^2 como el cero de la recta que pasa por x^0 y x^1 (substituye la derivada por la recta secante). Es decir, dados x^k y x^{k-1} ,

$$x^{k+1} = x^k - f(x^k) \frac{x^k - x^{k-1}}{f(x^k) - f(x^{k-1})}.$$

Las ventajas e inconvenientes de este método son casi idénticas a las del método de Newton. Este método es un poco más lento que el de Newton, aunque converge bastante rápidamente y, igual que el de Newton, el punto flaco es que no es tan robusto como el de la bisección.



Observación. El coste computacional se mide en número de evaluaciones de $f(x)$ (i de $F'(x)$). El método de la secante necesita 1 evaluación por iteración y por lo tanto, necesita menos que el método de Newton.

1.2. Consistencia y convergencia

Definición 1.2.1. Diremos que un método $x^{k+1} = \phi(x^k)$ es consistente si las raíces son los únicos puntos fijos, es decir,

$$f(\alpha) = 0 \iff \phi(\alpha) = \alpha.$$

Ejercicio 1.2.2. Un ejemplo es el método de Newton.

Si α es una raíz simple,

$$f(\alpha) = 0 \implies \phi(\alpha) = \alpha - \frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)} = \alpha.$$

Por otro lado,

$$\phi(\alpha) = \alpha \implies \frac{f(\alpha)}{f'(\alpha)} = 0 \implies f(\alpha) = 0.$$

Con la raíz doble, no podemos evaluar el método de Newton en α , pero por la regla de l'Hôpital llegaríamos a la conclusión de que, tomando el límite de ϕ se sigue cumpliendo.

Análogamente, podemos deducir que el método de Newton es un método consistente para una raíz α de cualquier multiplicidad.

Definición 1.2.3. Diremos que un esquema es convergente si

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = \alpha.$$

Observación 1.2.4. Llamaremos error de la aproximación E^k a

$$E^k = |x^k - \alpha|$$

y es equivalente que el método sea convergente a que $\lim_{k \rightarrow \infty} E^k = 0$.

Definición 1.2.5. Diremos que un esquema tiene convergencia lineal si

$$|E^{k+a}| \leq \lambda |E^k|, \quad \lambda < 1.$$

Definición 1.2.6. Diremos que un esquema tiene convergencia de orden p si

$$|E^{k+1}| \leq \lambda |E^k|^p.$$

Definición 1.2.7. Diremos que un esquema tiene convergencia superlineal si

$$|E^{k+a}| \leq \lambda_k |E^k|, \quad \lambda_k \rightarrow 0$$

o bien

$$|E^{k+1}| \leq \lambda |E^k|^q, \quad q \in (1, 2).$$

Proposición 1.2.8. Para estudiar la convergencia, en general, necesitamos estudiar E^{k+1} en función de E^k . Para ello, podemos usar la siguiente fórmula:

$$E^{k+1} = \phi'(\alpha)E^k + \frac{1}{2}\phi''(\alpha)(E^k)^2 - \dots$$

o más generalmente

$$E^{k+1} = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} \phi^{(i)}(\alpha) (E^k)^i$$

Demostración. Tenemos que

$$E^{k+1} = x^{k+1} - \alpha = \phi(x^k) - \phi(\alpha)$$

Aproximando ahora por Taylor (centrado en α):

$$E^{k+1} = \cancel{\phi(\alpha)} + \cancel{\phi(\alpha)} + \phi'(\alpha)(x^k - \alpha) + \dots$$

substituyendo ahora $x^k - \alpha = E^k$, obtenemos la fórmula original. \square

Proposición 1.2.9. Si $\phi'(\alpha) \neq 0$ y $|\phi(\alpha)| < 1$, entonces el método converge linealmente.

Demostración. Veremos ahora que la convergencia es lineal:

$$|E^{k+1}| \leq |E^k| \left(|\phi'(\alpha)| + \underbrace{\left| \frac{1}{2} \phi''(\alpha) \right| E^k + \mathcal{O}\left((E^k)^2\right)}_{\leq \varepsilon} \right).$$

Consideramos ε tal que $|\phi'(\alpha)| + \varepsilon \leq 1$. Esto pasa si $|E^k|$ es suficientemente pequeño. Entonces

$$|E^{k+1}| \leq \lambda |E^k|,$$

con $\lambda = |\phi'| + \varepsilon < 1$. \square

Proposición 1.2.10. Si $\phi'(\alpha) = \dots = \phi^{(p-1)}(\alpha) = 0$ y $\phi^{(p)}(\alpha) \neq 0$. Tenemos que

$$E^{k+1} = \frac{1}{p!} \phi^{(p)}(\alpha) (E^k)^p + \frac{1}{(p+1)!} \phi^{(p+1)}(\alpha) (E^k)^{p+1} + \dots$$

Entonces, para E^k pequeño, se tiene que

$$|E^{k+1}| \approx \left| \frac{\phi^{(p)}(\alpha)}{p!} \right| (E^k)^p$$

y la convergencia es de orden p .

Demostración. Se tiene que

$$|E^{k+1}| \leq |E^k| \left(\left| \frac{\phi^{(p)}(\alpha)}{p!} \right| + \underbrace{\left| \frac{\phi^{(p+1)}(\alpha)}{(p+1)!} \right| (E^k) + \mathcal{O}\left((E^k)^2\right)}_{\leq \varepsilon} \right).$$

Con $|E^k|$ suficientemente pequeño

$$|E^{k+1}| \leq \left(|E^k| \right)^p \underbrace{\left(\frac{\phi^{(p)}(\alpha)}{p!} + \varepsilon \right)}_{\lambda}.$$

\square

Definición 1.2.11. Sea ϕ un método lineal, por lo tanto,

$$|E^{k+1}| \leq \lambda |E^k|.$$

Llamaremos factor asintótico de convergencia a λ .

1.2.1. Análisis del método de Newton

Para estudiar la convergencia, primero es conveniente, conocer las derivadas de la función ϕ , así pues, tenemos

$$\begin{aligned}\phi(x) &= x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \\ \phi'(x) &= \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2}, \\ \phi''(x) &= \frac{f''(x)}{f'(x)} - \frac{2f(x)f''(x)^2}{f'(x)^3} + \frac{f(x)f'''(x)}{f'(x)^2}.\end{aligned}$$

- Caso de una raíz simple, $f(\alpha) = 0$ y $f'(\alpha) \neq 0$. En este caso,

$$\begin{aligned}\phi'(\alpha) &= 0, \\ \phi''(\alpha) &= \frac{f''(\alpha)}{f'(\alpha)}.\end{aligned}$$

En general $\phi''(\alpha) \neq 0$, por lo tanto el método de Newton tiene, en general, convergencia de orden 2.

- Caso de una raíz doble $f(\alpha) = f'(\alpha) = 0$ y $f''(\alpha) \neq 0$. Observamos que $\phi'(\alpha)$ no está bien definido, pero podemos calcular el límite, teniendo

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow \alpha} \phi'(x) &= \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2} \stackrel{\text{R.H.}}{=} \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{f'(x)f''(x) + f(x)f'''(x)}{2f'(x)f''(x)} = \\ &= \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{f'(x)f''(x)}{2f'(x)f''(x)} + \frac{f(x)f'''(x)}{2f'(x)f''(x)} = \frac{1}{2} + \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{f(x)f'''(x)}{2f'(x)f''(x)} \stackrel{\text{R.H.}}{=} \\ &= \frac{1}{2} + \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{f'(x)f'''(x) + f(x)f^{(4)}(x)}{2f''(x)^2 + 2f'(x)f'''(x)} = \frac{1}{2}.\end{aligned}$$

Por lo tanto es lineal con factor asintótico de convergencia igual a $\frac{1}{2}$.

- El caso de multiplicidad p , es decir, $f(\alpha) = \dots = f^{(p-1)}(\alpha) = 0$ y $f^{(p)} \neq 0$. Para resolver este caso, aplicaremos $p - 2$ veces la regla de L'Hôpital

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow \alpha} \phi'(x) &= \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)f'(x)} \stackrel{\text{Leibniz}}{=} \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{\sum_{k=0}^{p-2} \binom{p-2}{k} f^{(2p-k)}(x) f^{(k)}(x)}{\sum_{k=0}^{p-2} \binom{p-2}{k} f^{(2p-1-k)}(x) f^{(k+1)}(x)} = \\ &= \lim_{x \rightarrow \alpha} \frac{\binom{2p-2}{p} \cancel{f^{(p)}(x)} \cancel{f^{(p)}(x)}}{\binom{2p-2}{p-1} \cancel{f^{(p)}(x)} \cancel{f^{(p)}(x)}} = \frac{\binom{2p-2}{p}}{\binom{2p-2}{p-1}} = \frac{(p-1)!(p-1)!}{p!(p-2)!} = \\ &= \frac{p-1}{p} = 1 - \frac{1}{p}.\end{aligned}$$

El método es lineal con F.A.C. igual a $1 - \frac{1}{p}$.

1.2.2. Gráficos de convergencia

Definición 1.2.12. Definimos el error relativo como

$$r^k = \frac{E^k}{\alpha} = \frac{x^k - \alpha}{\alpha}.$$

Observación 1.2.13. x^k tiene q cifras significativas correctas si $|r^k| \leq \frac{1}{2}10^{-q}$.

Caso de convergencia lineal

$$\begin{aligned} |E^{k+1}| &\approx \lambda |E^k|, \lambda = F.A.C. \stackrel{x^{k+1}=\phi(x^k)}{=} |\phi'(\alpha)|, \\ \frac{|E^k|}{|\alpha|} &\approx \lambda^k \frac{|E^0|}{|\alpha|} \implies |r^k| \approx \lambda^k |r^0|. \end{aligned}$$

Si la convergencia es de orden $p \geq 2$,

$$\begin{aligned} |E^k| &\approx \lambda \left(|E^{k-1}| \right)^p \approx \lambda \left(\lambda |E^{k-2}|^p \right)^p = \lambda^{1+p} |E^{k-2}|^p \approx \lambda^{p+1} \left(\lambda |E^{k-2}|^p \right)^{p^2} = \dots \\ &\approx \lambda^{1+p+\dots+p^{k-1}} |E^0|^{p^k} \stackrel{\text{serie geométrica}}{=} \lambda^{\frac{p^k-1}{p-1}} |E^0|^{p^k}, \\ \frac{|E^k|}{|\alpha|} &\approx \lambda^{\frac{p^k-1}{p-1}} \frac{|E^0|^{p^k}}{|\alpha|^{p^k}} |\alpha|^{p^k-1}, \\ |r^k| &\approx A^{p^k} \cdot B, \\ \log |r^k| &\approx \log B + p^k \log A, \text{ donde } A = \lambda^{\frac{1}{p-1}} |r^0| |\alpha|, B = \lambda^{\frac{-1}{p-1}} |\alpha|^{-1}. \end{aligned}$$

Ejemplo 1.2.14. El error nos proporciona información sobre el tipo de convergencia.

| | Bisección (lineal $\lambda = 1/2$) | Newton (cuadrática) |
|---------|--|------------------------|
| $ r^0 $ | $0,1 \cdot 10^{-1}$ | $0,1 \cdot 10^{-1}$ |
| $ r^1 $ | $0,5 \cdot 10^{-2}$ | $0,1 \cdot 10^{-2}$ |
| $ r^2 $ | $0,25 \cdot 10^{-2}$ | $0,1 \cdot 10^{-4}$ |
| $ r^3 $ | $0,12 \cdot 10^{-2}$ | $0,1 \cdot 10^{-8}$ |

1.2.3. Criterios prácticos de convergencia

Si queremos q cifras significativas correctas (C.S.C.), pararemos el algoritmo cuando

$$\frac{1}{2}10^{-q} > |r^k| = \frac{|x^k - \alpha|}{|\alpha|} \stackrel{\alpha \approx x^{k+1}}{\approx} \frac{|x^k - x^{k+1}|}{|x^{k+1}|}.$$

En caso que $\alpha \approx 0$, podemos hacer una variación

$$|x^k - \alpha| < \varepsilon |x^k| + \varepsilon.$$

Conviene comprobar el error en el “residuo” $f(x)$. El criterio puede ser combinado

$$|x^k - \alpha| + |f(x^k)| < \varepsilon_f.$$

1.3. Métodos híbridos

Método de Brent: véase [Brent's method - Wikipedia](#).

Tema 2

Sistemas de ecuaciones no lineales

Dada $\vec{f}: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, queremos encontrar $\vec{\alpha} \in \mathbb{R}^n$ tal que $\vec{f}(\vec{\alpha}) = \vec{0}$.

2.1. Método de Newton-Raphson

Dada una aproximación $\vec{x}^k \approx \vec{\alpha}$, consideramos l'aproximación lineal de $\vec{f}(\vec{x})$ en \vec{x}^k

$$\begin{aligned}\vec{f}(\vec{x}) &\approx \vec{f}(\vec{x}^k) + \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{x}}(\vec{x}^{k+1} - \vec{x}^k) + \mathcal{O}(\|\vec{x} - \vec{x}^k\|^2) = 0, \\ \vec{x}^{k+1} &= \vec{x}^k - \left[\frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{x}}(\vec{x}^k) \right]^{-1} \vec{f}(\vec{x}^k), \text{ donde } J = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{x}} \text{ es la jacobiana.}\end{aligned}$$

Se puede ver que tiene convergencia cuadrática si $\det(J(x)) \neq 0$.

Observación 2.1.1. No calcularemos J^{-1} (porque es aproximadamente el coste de resolver n sistemas lineales).

Calculamos:

- i) $J(\vec{x}^k) \Delta \vec{x}^k = -\vec{f}(\vec{x}^k) \longrightarrow \Delta \vec{x}^k,$
- ii) $\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + \Delta \vec{x}^k.$

En Matlab: $x = x - (J \setminus f)$ resuelve el sistema.

Qué hacemos si no podemos calcular $J = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{x}}$? *Aproximación de las derivadas:*

$$\frac{\partial \vec{f}}{\partial x_i}(\vec{x}^k) \approx \frac{\vec{f}(\vec{x}^k + h e_i) - \vec{f}(\vec{x}^k)}{h} \text{ con } h \text{ pequeña.}$$

Observación 2.1.2. Si Newton converge pero no con convergencia cuadrática, hay que comprobar que $J = \frac{\partial \vec{f}}{\partial \vec{x}}$ en la implementación.

2.2. Métodos casi-Newton

- $\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k - [S^k]^{-1} \vec{f}(\vec{x}^k), \text{ donde } S^k \approx J(\vec{x}^k).$

- S^k se calcula a partir de S^{k-1} , con la *ecuación secante*:

$$S^k \Delta \vec{x}^k = \Delta \vec{f}^k, \text{ con } \begin{cases} \Delta \vec{x}^k = \vec{x}^k - \vec{x}^{k-1}, \\ \Delta \vec{f}^k = \vec{f}(\vec{x}^k) - \vec{f}(\vec{x}^{k-1}). \end{cases}$$

En una dimensión, es el método de la secante, $S^k (x^k - x^{k-1}) = f^k - f^{k-1}$, por lo tanto,

$$S^k = \frac{f^k - f^{k-1}}{x^k - x^{k-1}}.$$

En n dimensiones, la ecuación secante no determina de manera única S^k , se añaden otras condiciones que generan muchos métodos QN .

2.2.1. Método de Broyden

El método de Broyden es un método QN que impone

- i) $S^k \Delta \vec{x}^k = \Delta \vec{f}^k$ (ecuación secante),
- ii) $(S^k - S^{k-1}) \vec{\omega} = \vec{0}$, $\forall \vec{\omega} \perp \Delta \vec{x}^k$.

Podemos conseguir ii) con $S^k = S^{k-1} + \vec{u} (\Delta \vec{x}^k)^T$. Ahora imponemos i)

$$\Delta f^k = S^k \Delta \vec{x}^k = \left(S^{k-1} + \vec{u} (\Delta \vec{x}^k)^T \right) \Delta \vec{x}^k = -\vec{f}^{k-1} + \vec{u} \left\| \Delta \vec{x}^k \right\|^2.$$

De donde aislamos

$$\vec{u} \left\| \Delta \vec{x}^k \right\|^2 = \Delta \vec{f}^k + \vec{f}^{k-1} = \vec{f}^k \implies \vec{u} = \frac{\vec{f}^k}{\left\| \Delta \vec{x}^k \right\|^2}.$$

En resumen,

- Dado $\vec{x}^0 \in \mathbb{R}^n$, $S^0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$,
- Calcular $\vec{f}^0 = \vec{f}(\vec{x}^0)$,
- Para $k = 0, 1, \dots$,
 - Resolver $S^k \Delta \vec{x}^{k+1} = -\vec{f}^k$,
 - $\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + \Delta \vec{x}^{k+1}$,
 - Calculamos $\vec{f}^{k+1} = \vec{f}(\vec{x}^{k+1})$,
 - $S^{k+1} = S^k + \vec{f}^{k+1} \left(\frac{\Delta \vec{x}^k}{\left\| \Delta \vec{x}^k \right\|^2} \right)^T$.

Índice alfabético

convergencia

de orden p , [3](#)

lineal, [3](#)

superlineal, [3](#)

error relativo, [6](#)

factor asintótico de convergencia, [4](#)

método

consistente, [2](#)

convergente, [3](#)