Estudio de los métodos de continuación homotópica en la solución de sistemas de ecuaciones

Fabián Quevedo* , Camilo Rozo† , Santiago Quintero‡
Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Matemáticas

5 de diciembre de 2022

Resumen

En este documento se hace una revisión teórica de

1. Introducción

El área de la topología algebraica busca usar herramientas algebraicas para contestar preguntas en topología. La idea inicial es definir invariantes algebraicas de los espacios topológicos que nos permiten diferenciar espacios entre sí, que serán objetos que se asignan a cada espacio topológico, con la propiedad que las invariantes asignadas a espacios homeomorfos son isomorfas.

La equivalencia homotópica será la justificación que permita la aplicación de estas herramientas diseñadas en el área de la topología para resolver distintos problemas relacionados con la obtención de raíces de funciones que no son posibles de hallar por métodos iterativos como Newton-Raphson o métodos cuasi-newton, lo que determina el desarrollo y la motivación de la creación de los métodos de continuación.

*fquevedo@unal.edu.co
†crozol@unal.edu.co
‡saquinterot@unal.edu.co

2. Marco Teórico

2.1. Método de Newton-Raphson

2.1.1. Obtención de la recursión

El método de Newton-Raphson, permite hallar una raíz de una ecuación no-lineal siempre y cuando se parta de una buena estimación inicial de la misma. El esquema iterativo de Newton puede derivarse del desarrollo de Taylor de la función alrededor de la estimación inicial de la raíz x_0,

$$f(r) = 0 = f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \mathcal{O}(h^2)$$

Con r la raíz de la función. Ahora bien, la recta tangente a la función, que pasa por el punto $(x_0, f(x_0))$, se encuentra definida por la siguiente expresión [1]

$$g(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

Y siendo x_1 la raíz de $g(x)$ se tiene que

$$\begin{aligned} 0 &= f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) \\ -f(x_0) &= f'(x_0)(x_1 - x_0) \\ \frac{-f(x_0)}{f'(x_0)} &= x_1 - x_0 \\ x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} &= x_1 \end{aligned}$$

De donde, por inducción, se puede obtener la expresión que representa el método iterativo como sigue

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{1}$$

Por lo que también la convergencia del método se ve condicionada por la escogencia del punto inicial y no se puede utilizar cuando $f'(x_n) = 0$ para algún n.

2.1.2. Algoritmo

```
input x_0, M, δ, ε
v ← f(x_0)
output 0, x_0, v
if |v| < ε then stop
for k = 1, 2, ..., M do
    x_1 ← x_0 − v/f'(x_0)
    v ← f(x_1)
    output k, x_1, v
    if |x_1 − x_0| < δ or |v| < ε then stop
    x_0 ← x_1
end
```

Donde se incluyeron los parámetros iniciales x_0, M, δ y ε que indican el punto inicial, el número de iteraciones, la tolerancia de cercanía entre los puntos y la tolerancia de error de la respuesta respectivamente [2].

Análisis del error

El análisis correspondiente al método de Newton se verá englobado por el siguiente teorema:

2.1.3 **Teorema:** Sea f'' continua y r un cero simple de f. Entonces existe una vecindad de r y una constante C tales que si el método de Newton inicia en esta vecindad, entonces los puntos se acercan a r y satisfacen

$$|x_{n+1} - r| \leq C(x_n - r)^2$$

D/. Observando las cantidades $e_n = x_n - r$, veamos que si se asume que f'' es continua y r es un cero simple de f, de modo que $f(r) = 0 \neq f'(r)$, se tiene que de la ecuación (1),

$$e_{n+1} = x_{n+1} - r = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} - r = e_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} = \frac{e_n f'(x_n) - f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{2}$$

Y como por expansión en Taylor se tiene que

$$0 = f(r) = f(x_n - e_n) = f(x_n) - e_n f'(x_n) + \frac{1}{2} e_n^2 f''(\xi_n)$$

Siendo ξ_n un número entre x_n y r, por el teorema de valor medio, entonces

$$e_{n+1} = \frac{1}{2}\frac{f''(\xi_n)}{f'(x_n)} e_n^2 \approx \frac{1}{2}\frac{f''(r)}{f'(r)} e_n^2 \leq C e_n^2 \tag{3}$$

Lo que muestra que e_{n+1} es casi una constante por e_n, lo que enseña que el método de Newton tiene **convergencia cuadrática**. Esto si se considera que la constante $C < 1$, donde C viene determinada por el máximo valor que toma la segunda derivada y la primera derivada en una vecindad de la raíz.

Notemos además que a pesar de que, como mencionamos anteriormente, no se puede garantizar la convergencia del método de Newton para cualquier punto inicial ni para cualquier función, si le podemos asignar ciertas condiciones a la función para garantizar su convergencia global y que se ven mostradas en el siguiente teorema [2].

2.1.4 **Teorema:** Si $f \in C^2(\mathbb{R})$, es creciente, convexa y tiene un cero, entonces el cero es único y la iteración de Newton convergerá desde un punto inicial arbitrario.

D/. Véase que si f es convexa se tiene que $f''(x) > 0$, así como siendo f creciente, $f'(x) > 0$ para todo x. De la ecuación (3), $e_{n+1} > 0$, por lo que $x_n > r$ para $n \geq 1$. Y de la monotonía de f se tiene que $f(x_n) > f(r) = 0$.

Siendo la primera como la segunda derivada positivas, entonces se tiene de (2) que $e_{n+1} < e_n$. De manera que las sucesiones (e_n) y (x_n) son decrecientes y acotadas inferiormente por 0 y r respectivamente. Por lo tanto son convergentes y existen

$$e^* = \lim_{n\to\infty} e_n \text{ y } x^* = \lim_{n\to\infty} x_n$$

Donde podemos identificar $x^* = r$. De la ecuación (3) se tiene que $e^* = e^* - f(r)/f'(r)$, de donde se concluye que $f(r) = 0$. La unicidad de la raíz viene del hecho de que f sea creciente.

2.2. Homotopía

Una de las nociones básicas de la topología es la de homotopía, que corresponde a la intuición de deformar continuamente una familia de funciones continuas $f_t : X \to Y$.

2.2.1. **Definición:** Una *homotopía* entre dos funciones continuas $f_0, f_1 : X \to Y$ definidas entre dos espacios topológicos, es una función suave $F = X \times [0,1] \to Y$ tal que $F(x,0) = f_0(x)$ y $F(x,1) = f_1(x)$. Si existe alguna homotopía entre f_0 y f_1, decimos que f_0 y f_1 son *homotópicas* y escribimos $f_0 \sim f_1$ [3].

De donde se ha obtenido lo que se buscaba, ya que si F es una homotopía, para cada $t \in I$, la función $f_t = F(x,t) : X \to Y$ es continua, de modo que F puede verse entonces como una familia de funciones continuas $X \to Y$ parametrizadas por t, las cuales interpolan entre f_0 y f_1.

2.2.2. **Ejemplo:** Sea X un espacio topológico cualquiera, y $\mathbb{R}^n$ con su topología habitual. Cualesquiera dos funciones continuas $f, g : X \to \mathbb{R}^n$ son homotópicas, usando la homotopía

$$F(x,t) = (1-t)f(x) + tg(x) \tag{4}$$

Este resultado se puede generalizar para dos funciones $f, g : X \to Y$, donde $Y \subseteq \mathbb{R}^n$ es un subespacio convexo. Esta homotopía se llama *homotopía lineal* [4].

2.2.3. **Proposición:** La relación de homotopía es una relación de equivalencia sobre el conjunto de funciones continuas $X \to Y$.

D/. Veamos que como se debe demostrar que la relación es reflexiva, simétrica y transitiva, se tiene que

- (Reflexividad) Veamos que con la homotopía $F(x,t) = f(x)$ se tiene que $F(x,0) = f(x)$ y $F(x,1) = f(x)$, de donde $f \sim f$.
- (Simetría) Si se asume que $f \sim g$, entonces se tiene que existe una homotopía $F(x,t)$ donde $F(x,0) = f(x)$ y $F(x,1) = g(x)$. Notemos que definiendo $G(x,t) = F(x,1-t)$ se tiene que al ser F continua, G también lo es y además $G(x,0) = F(x,1) = g(x)$ y $G(x,1) = F(x,0) = f(x)$, de donde $G(x,t)$ sería una homotopía de g a f y se tiene así que $g \sim f$.
- (Transitividad) Asumiendo que $f \sim g$ y $g \sim h$, se tiene que existen homotopías A y B tal que $A(x,0) = f(x)$, $A(x,1) = g(x)$, $B(x,0) = g(x)$ y $B(x,1) = h(x)$. De esta manera, si se define

$$C(x,t) = \begin{cases} A(x,2t) & si \quad 0 \leq t < 1/2 \\ \\ B(x,2t-1) & si \quad 1/2 \leq t \leq 1 \end{cases}$$

  Que es continua para todo t ya que se cumple que $A(x,1) = g(x) = B(x,0)$ y cumple que $C(x,0) = A(x,0) = f(x)$ y $C(x,1) = B(x,1) = h(x)$, por lo que C es una homotopía de f a h y así $f \sim h$.

2.3. Métodos de continuación

La idea básica del método de continuación es encajar el problema a analizar ($f(x) = 0$) en una familia de modelos de un parámetro t que toma los valores del intervalo $[0,1]$. El planteamiento usual consiste en coincidir el problema a analizar en $t = 1$ y colocar una función de la que se conoce su solución en $t = 0$ [5]. De esta manera, se implementa usualmente una homotopía lineal como la que se presentó en la ecuación (4) siendo

$$H(x,t) = tf(x) + (1-t)g(x)$$

Donde se sabe la solución a la ecuación $g(x) = 0$. El siguiente paso consiste en realizar una partición del intervalo $[0,1]$, es decir, tomar puntos t_i con $i = 0, 1, ..., m$ de manera que

$$0 = t_0 < t_1 < \cdots < t_m = 1$$

Y se busca resolver las ecuaciones $H(x,t_i) = 0$. Una homotopía común a la hora de implementar el método de continuación es [2]

$$\begin{aligned} H(x,t) &= tf(x) + (1-t)[f(x) - f(x_0)] \\ &= f(x) + (t-1)f(x_0) \end{aligned} \tag{5}$$

Donde x_0 puede ser cualquier punto del dominio de $f(x)$ y se tiene que x_0 es una solución del problema homotópico planteado.

Si la ecuación $H(x,t) = 0$ tiene una única raíz para cada $t \in [0,1]$, entonces la raíz es función de t, por lo que se puede escribir como $x(t)$

3. Resultados

3.1. Homotopia a través del desplazamiento de la misma función

Al realizar una homotopia a través del desplazamiento de la función para la cual queremos hallar las raíces consideramos la ecuación (5), al calcular para diferentes funciones se tienen los resultados mostrados en la siguiente tabla; los cuales dan muestra de que el método funciona, más sin embargo el error no siempre es menor que en Newton, y también se puede observar que no siempre converge a la misma raíz.

Función	x_0	Raiz Newton	Error	Raíz Homotopia	Error
$-e^{(}x^2) + \frac{x^3}{3} + 5$	1.0	1.3241398587329234	4.50e-12	1.3241398587325905	1.78e-15
$\sin(x) - \frac{x}{2}$	2.5	1.895494267033981	0.0	1.895494267033987	4.88e-15
$x^3/3 - x^2/2 - 6x + 1$	1.0	0.16465538573865884	2.22e-16	0.16465538573866126	1.50e-14
$3x^2 + 5x - 2$	1.0	0.3333333333333333	2.22e-16	0.3333333333333333	5.33-15
$\ln(x^2)$	2.5	1.0	0.0	0.999999999994205	1.16e-11
$\tanh(x^2 + 2x - 1)$	1.0	-2.414213562376884	1.07e-11	0.4142135623730951	0.0

3.2. Aplicación del método de Newton a la función homotopia

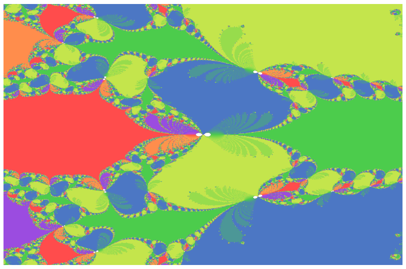
Si aplicamos la ecuación 4 escogiendo un punto inicial, una función auxiliar y un valor para el parámetro $t \to 1$ podemos aproximar a través del método de Newton la raíz deseada. Para este caso se ha escogido $t = 0.999999999$ y los resultados se muestran a continuación; de estos resultados es apreciable que se puede pasar de una divergencia en Newton a un valor de convergencia con la homotopia sin alterar el punto inicial, como se muestra en la tercer función.

Asimismo, surge la duda de como altera la función auxiliar los resultados de la raíz encontrada, para ello se calcularon las raíces de las funciones usando diferentes funciones auxiliares, los resultados a continuación dan muestra de que no se tiene convergencia para todas las funciones auxiliares, el error puede variar con esta escogencia. Asimismo para mismos puntos iniciales y diferentes funciones auxiliares la raíz a la que se converge puede variar, para ver este fenómeno es interesante ver los fractales de convergencia de Newton, para las 3 primeras funciones de la tabla esto se muestra en 1, 2 y 3.

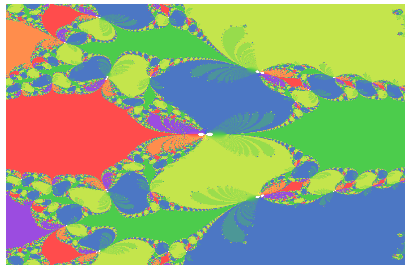
De esto es posible apreciar que a pesar de ciertas similitudes en el fractal de convergencia las raíces pueden variar para un punto inicial fijo y una función auxiliar diferente, siendo el caso más claro en 2, donde se puede ver estelas de una raíz que aparece para la función auxiliar 1 y la 3,

Función	g(x)	Raiz Newton	Error	Raíz Homotopia	Error
$-e^{(}x^2) + \frac{x^3}{3} + 5$	$e^x + x$	1.3241398587326	0.31	1.324139859108	5.08e-9
$\sin(x) - \frac{x}{2}$	$\sin(x) - x + 1$	1.895494267034	0.0	1.8954942670978	5.23e-11
$x^3/3 - x^2/2 - 6x + 1$	$x - 1$	Diverge	N/A	4.988049372826	3.99e-9
$3x^2 + 5x - 2$	$e^x + x$	0.3333333330863	1.73e-9	0.33333333333333	4.44e-16
$\ln(x^2)$	$\sin(x) - x + 1$	-0.9999999999964	7.28e-12	-0.9999999994171	1.17e-9
$\tanh(x^2 + 2x - 1)$	$x - 1$	-2.414213562377	3.42e-9	-2.4142135635840	3.42e-9

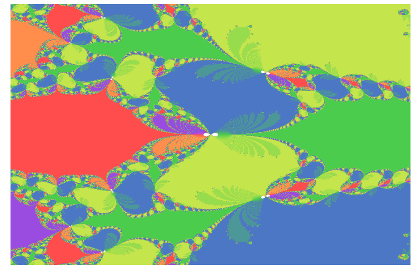
Función	$e^x + x$	**Error**	$\sin(x) - x + 1$	**Error**	$x - 1$	**Error**
$-e^(x^2) + \frac{x^3}{3} + 5$	1.324139859	5.08e-9	1.324139859	6.46e-10	1.3241398588	3.24e-10
$\sin(x) - \frac{x}{2}$	1.895494278	8.55e-9	1.89549426710	5.22e-11	1.89549426813	8.95e-10
$\frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} - 6x + 1$	Diverge	N/A	-3.65270475932	5.14e-9	4.9880493728	3.99e-9
$3x^2 + 5x - 2$	0.33333333309	1.73e-9	0.333333333191	9.94e-10	0.33333333343	6.67e-10
$\ln(x^2)$	-1.00000000031	6.25e-10	9.9999783256e8	1.17e-9	-1.000000026e9	1.99e-9
$\tanh(x^2 + 2x - 1)$	-2.4142135632	2.34e-9	-2.41421356141	2.74e-9	-2.4142135636	3.42e-9



(a) $g(x) = e^x + x$



(b) $g(x) = \sin(x) - x + 1$



(c) $g(x) = x - 1$

Figura 1: Fractales de convergencia para las homotopias de $f(x) = -e^(x^2) + \frac{x^3}{3} + 5$

pero que no se tiene para la 2; y el caso opuesto en 1 donde aparentemente la convergencia no cambia para esas 3 funciones auxiliares.

4. Conclusiones

Del análisis realizado de el método de continuación y homotopia se pudieron ver comportamientos importantes, de estos inferimos varios puntos importantes del método.

- Existe un amplio abanico de funciones auxiliares a escoger, sin embargo el comportamiento de convergencia de las raíces homotopia será diferente según cada una de ellas, por lo cual se debe asegurar escoger la mejor en función de la raíz que se busca.
- A pesar de que no siempre reduce el error del método de Newton presenta una alternativa útil para puntos de divergencia de este método, ya que vimos que cuándo el parámetro $t \neq 1$, pero $t \to 1$ si hay convergencia y se acerca a la raíz de la función original.

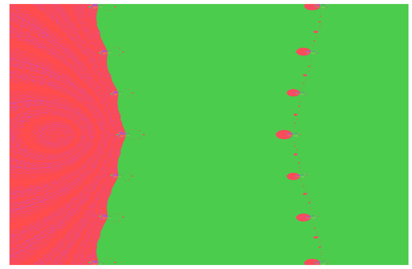
Referencias

[1] Facultad de Ingeniería U.N.M.D.P. Análisis numérico: Método de newton-raphson. http://www3.fi.mdp.edu.ar/analisis/temas/no_lineales_1/newtonRaphson. Accessed: 2022-11-23.

[2] David Kincaid and Ward Cheney. *Numerical Analysis: Mathematics of Scientific Computing.* (University of Texas) Brooks/Cole Publishing Company, 1991.

(a) $g(x) = e^x + x$

(b) $g(x) = \sin(x) - x + 1$



(c) $g(x) = x - 1$

Figura 2: Fractales de convergencia para las homotopias de $f(x) = \sin(x) - \frac{x}{2}$

(a) $g(x) = e^x + x$

(b) $g(x) = \sin(x) - x + 1$

(c) $g(x) = x - 1$

Figura 3: Fractales de convergencia para las homotopias de $f(x) = \frac{x^3}{3} - \frac{x^2}{2} - 6x + 1$

[3] Omar Camarena. Homotopía. https://www.matem.unam.mx/~omar/topodif/tema6.html. Accessed: 2022-11-21.

[4] Angélica M. Osorno. Invitación a la teoría de homotopía: Grupo fundamental y espacios recubridores. *Lecturas Matemáticas*, 39(1):29–48, 2018.

[5] S. Rahimian, F. Jalali, J. D. Seader, and R. E. White. A robust homotopy continuation method for seeking all real roots of unconstrained systems of nonlinear algebraic and transcendental equations. 50(15):8892–8900, 2011.