Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.
Métodos Numéricos

Tarea 02

José Miguel Saavedra Aguilar

Resumen

1. Introducción

En múltiples métodos numéricos surge la necesidad de encontrar x_0 tal que $f(x_0) = 0$ para alguna función $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. En esta tarea, abordaremos dos algoritmos para funciones $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, el Método de la Bisección y el Método de Newton. Es importante recordar los siguientes teoremas, que son utilizados por los algoritmos presentados en esta tarea, y que pueden ser consultados en [1].

Teorema 1 (Teorema de Bolzano)**.** *Sea $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ una función continua en $[a, b]$. Si $f(a)f(b) < 0$, entonces existe $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = 0$.*

Teorema 2 (Teorema de Taylor)**.** *Sea $n \in \mathbb{N}$, $I := [a, b]$ y $f : I \to \mathbb{R}$ tal que f y sus derivadas $f', f'', \ldots, f^{(n)}$ son continuas en I y que $f^{(n+1)}$ existe en (a, b). Si $x_0 \in I$, luego, para cualquier $x \in I$ existe un punto c entre x y x_0 tal que*

$$\begin{aligned} f(x) = & f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 \\ & + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1} \end{aligned}$$

Definición 1. *Se dice que una sucesión convergente (x_k) de un espacio normado con límite x es convergente de orden $p \geq 1$ si existe $C > 0$ tal que:*

$$\|x - x_{k+1}\| \leq C \|x - x_k\|^p, \qquad k = 1, 2, \ldots$$

2. Metodología

2.1. El Método de la Bisección

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. En el Método de la Bisección, iniciamos con a_0, b_0 tales que f es continua en $[a_0, b_0]$ y que se cumple $f(a_0)f(b_0) < 0$. Por el Teorema de Bolzano, existe $x \in (a_0, b_0)$

una raíz de f. Ahora, consideramos $c_0 = \frac{a_0+b_0}{2}$ una aproximación de x_0. En caso que $f(x_0)$ sea una raíz de f, termina el algoritmo. En otro caso, elegimos $a_1 = c_0$ y $b_1 = b_0$, o $a_1 = a_0$ y $b_1 = c_0$ de forma que se cumpla $f(a_1)f(b_1) < 0$. En general, se tiene a_k, b_k tales que $f(a_k)f(b_k) < 0$ y se toma $c_k = \frac{a_k+b_k}{2}$, se evalúa $f(c_k)$ y, en caso que c_k no sea raíz, c_k sustituye a a_k o b_k en la siguiente iteración, de forma que $f(a_{k+1})f(b_{k+1}) < 0$.

El Método de la bisección es convergente a una raíz x^* de f para f tal que en la primera iteración se cumplan las condiciones del Teorema de Bolzano, pues en cada iteración se siguen cumpliendo las condiciones del Teorema de Bolzano, es decir, para cada $I_k = [a_k, b_k]$, existe una raíz $x_k \in I_k$ de f. Además, notamos que $b_k - a_k = \frac{a_0-b_0}{2^k}$, por lo que $I_k \xrightarrow[k\to\infty]{} \{x^*\}$ con $f(x^*) = 0$.
Si en $[a_0, b_0]$ hay únicamente una raíz x^* de f, es fácil verificar $|x^* - c_{k+1}| \leq \frac{1}{2}|x^* - c_k|$, es decir, tiene convergencia lineal. Sin embargo, el Método de la Bisección requiere de un cambio de signo, por lo que si consideramos una función con al menos una raíz y sin cambios de signo, por ejemplo, $f(x) = x^2$, será necesario utilizar otros algoritmos.

2.2. El Método de Newton-Raphson

El Método de Newton-Raphson tiene base en el Teorema de Taylor, con $n = 1$. Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ y $x \in \mathbb{R}$, tal que f es continua, y que f' exista en una vecindad de x. Para todo x_0 en esta vecindad de x, existe c entre x y x_0 tal que:

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

Ahora, si $x_0 \approx x$, podemos aproximar f por la siguiente función lineal:

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

Si x además es una raíz de f y $f'(x_0) \neq 0$, obtenemos la siguiente ecuación:

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

El método de Newton-Raphson para una función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ continuamente diferenciable tal que $f'(x) \neq 0$ está definido en [2] por el esquema iterativo:

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)} \tag{1}$$

La convergencia del Método de Newton-Raphson no está asegurada en general, sin embargo, existen condiciones que garantizan la convergencia de (x_k) a x^* una raíz de f. Estas condiciones pueden ser consultadas en [2] sin embargo nos limitaremos al siguiente resultado[2]:

Teorema 3 (Convergencia cuadrática del Método de Newton-Raphson)**.** *Sea $f : (a, b) \to \mathbb{R}$ dos veces continuamente diferenciable y x^* una raíz de f tal que $f'(x^*) \neq 0$. Entonces, el método de Newton-Raphson definido en 1 es localmente convergente a x^*. Además, (x_k) tiene convergencia cuadrática.*

En resumen, el Método de Newton-Raphson tiene una mejor convergencia que el Método de la Bisección, y no requiere un cambio de signo, pero f tiene condiciones más fuertes para asegurar convergencia.

3. Resultados

Algoritmo 1: Método de la Bisección

Entrada: f, a_0, b_0, n, tol
Salida: c_k
para $k \in \{0, \ldots, n\}$ **hacer**
  $c_k \leftarrow \frac{a_k+b_k}{2}$;
  si $|f(c_k)| < tol$ **entonces parar**;
  si no, si $f(a_k)f(c_k) > 0$ **entonces**
    $a_{k+1} \leftarrow c_k$;
    $b_{k+1} \leftarrow b_k$;
  fin
  en otro caso
    $a_{k+1} \leftarrow a_k$;
    $b_{k+1} \leftarrow c_k$;
  fin
fin

Algoritmo 2: Método de Newton-Raphson

Entrada: f, f', x_0, n, tol
Salida: x_k
$k \leftarrow 0$;
mientras $k < n$ ***y*** $|f(x_k)| > tol$ **hacer**
  $x_{k+1} \leftarrow x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$;
  $k \leftarrow k + 1$;
fin

Es posible aproximar $f'(x)$ numéricamente, por ejemplo, por una diferencia centrada:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \tag{2}$$

Donde $h > 0$, $h \approx 0$, así podemos plantear el Método de Newton-Raphson sin derivadas.

Algoritmo 3: Método de Newton-Raphson sin derivadas

Entrada: f, x_0, n, tol, h
Salida: x_k
$k \leftarrow 0$;
mientras $k < n$ ***y*** $|f(x_k)| > tol$ **hacer**
  $x_{k+1} \leftarrow x_k - \frac{2hf(x_k)}{f(x_k+h)-f(x_k-h)}$;
  $k \leftarrow k + 1$;
fin

3.1. Ejercicios de la tarea

a)

Para $f(x) = x^3 - 21x^2 + 120x - 100 = (x-1)(x-10)^2$ se tienen dos raíces, $x_1^* = 1$, $x_2^* = 10$, sin embargo, solamente hay un cambio de signo en x_1^*, por lo que el Método de la Bisección no podrá determinar x_2^*. Se resolvió $f(x) = 0$ con los algoritmos 1, 2 y 3 con $a_0 = 0.0$, $b_0 = 5.0$ en el caso del Método de la Bisección, $x_0 = 0.0$ para x_1^* y $x_0 = 9.0$ para x_2^*. Para los tres algoritmos tomamos $n = 100$, $tol = 10^{-6}$, y, para aproximar la derivada, $h = 10^{-8}$.

Algoritmo	e_r	Iteraciones	$f(x_1)$	e_r	Iteraciones	$f(x_2)$
1	5.96046×10^{-8}	25	-4.82798×10^{-6}	-	-	-
2	1.27846×10^{-11}	5	-1.03554×10^{-9}	2.15835×10^{-4}	13	4.19254×10^{-7}
3	1.27938×10^{-11}	5	-1.03630×10^{-9}	2.15065×10^{-4}	13	4.16266×10^{-7}

Nótese que $f'(x) = (x-10)(x-4)$ tiene dos raíces, por lo que el Método de Newton-Raphson asegura la convergencia a x_1^* para $x_0 < 4$, pero no podemos asegurar convergencia a x_2^*, sin embargo, si lo hace para $x_0 > 4$, pues $\lim_{x \to 10} \frac{f(x)}{f'(x)} = 0$.

Ahora, si perturbamos $f(x) = 0.99x^3 - 21x^2 + 120x - 100$, tenemos tres raíces, $x_1^* < x_2^* < x_3^*$, que no conocemos analíticamente, por lo que la comparación del error relativo será contra aquella que tenga el mínimo $f(x_i^*)$. Además, $f'(x)$ tiene dos raíces $r_1 < r_2$, que no son raíces de f, por lo que aseguramos convergencia para el Método de Newton-Raphson a x_1^* si $x_0 < r1$, a x_2^* si $r_1 < x_0 < x_2$, y a x_3^* si $x_0 > r_2$.
Para x_1^*, tomamos $a_0 = 0.0$, $b_0 = 5.0$ en el caso del Método de la Bisección, $x_0 = 0.0$ para los de Newton-Raphson. Para x_2^*, tomamos $a_0 = 5.0$, $b_0 = 10.0$ en el caso del Método de la Bisección, $x_0 = 9.0$ para los de Newton-Raphson. Para x_3^*, tomamos $a_0 = 10.0$, $b_0 = 15.0$ en el caso del Método de la Bisección, $x_0 = 11.0$ para los de Newton-Raphson.

Algoritmo	e_r	Iteraciones	$f(x_1)$	e_r	Iteraciones	$f(x_2)$	e_r	Iteraciones	$f(x_3)$
1	1.14104×10^{-7}	24	9.23856×10^{-6}	4.96160×10^{-8}	23	7.60439×10^{-6}	2.26356×10^{-8}	23	-4.83346×10^{-6}
2	4.26273×10^{-14}	5	-1.05481×10^{-9}	0	4	2.27374×10^{-13}	0	4	5.87932×10^{-7}
3	0	5	-1.05135×10^{-9}	2.75060×10^{-15}	4	3.41061×10^{-13}	6.82670×10^{-13}	4	5.88096×10^{-7}

Ahora, consideramos $f(x) = 1.01x^3 - 21x^2 + 120x - 100$, tenemos una raíz, x_1^*, que nuevamente no conocemos analíticamente. En este caso, $f'(x)$ tiene dos raíces $r_1 < r_2$, que no son raíces de f, por lo que aseguramos convergencia para el Método de Newton-Raphson a x_1^* si $x_0 < r1$, sin embargo, no podemos asegurar convergencia para $x_0 > r_1$, y mucho menos velocidad de convergencia.
Para x_1^*, tomamos $a_0 = 0.0$, $b_0 = 5.0$ en el caso del Método de la Bisección, $x_0 = 0.0$ para los de Newton-Raphson. Solamente con fines exploratorios, se consideró $x_0 = 9.0$ y $x_0 = 11.0$ para los Métodos de Newton-Raphson, teniendo convergencia a x_1^* en 8 y 21 iteraciones respectivamente.

Algoritmo	e_r	Iteraciones	$f(x_1)$
1	3.35183×10^{-8}	25	-2.71583×10^{-6}
2	1.22695×10^{-11}	5	-1.01664×10^{-9}
3	1.23733×10^{-11}	5	-1.02506×10^{-9}

b)

La función $f(x) = 2 - \frac{\ln(x)}{x}$ no tiene raíces reales, por lo que omitimos este inciso.

c)

Consideramos la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ al menos dos veces continuamente diferenciable, y su derivada f', dadas por:

$$
\begin{aligned}
f(x) &= \ln(x^2+1) - e^{0.4x}\cos(\pi x) \\
f'(x) &= \frac{2x}{x^2+1} - e^{0.4x}\left(0.4\cos(\pi x) - \pi\sin(\pi x)\right)
\end{aligned}
$$

Consideremos la función $g(x) := -e^{0.4x}\cos(\pi x)$, y nótese que $z_k = k - \frac{1}{2}$ es raíz de g para todo $k \in \mathbb{Z}$. Además, nótese que $\frac{\ln(x^2+1)}{e^{0.4x}} - 1$ tiene una sola raíz, que podemos obtener con el Método de Newton-Raphson, $z = -0.98201229015336$, de forma que $e^{0.4x} > \ln(x^2+1)$ para toda $x > z$, y $e^{0.4x} < \ln(x^2+1)$ para toda $x < z$, además que $\lim_{x\to\infty} \frac{\ln(x^2+1)}{e^{0.4x}} = 0$. Así, para $x > 0$, f tendrá una cantidad numerable de raíces, x_k^*, $k \in \mathbb{N}$, y además $x_k^* \xrightarrow[k\to\infty]{} z_k$. Por otra parte, solamente tendremos una raíz negativa, x_0^*.
Es posible hacer un análisis similar para f', de donde resulta que para $x > 0$ tiene una cantidad numerable de raíces r_i para $i \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ que cumplen $x_k^* \xrightarrow[k\to\infty]{} k + \frac{\arctan(0.4/\pi)}{\pi}$, mientras que para $x < 0$, f' tiene 6 raíces, $r_{-6}, \dots, r_{-1}$. Una vez que f es continuamente diferenciable, por el teorema de Rolle se cumple $x_i \in I_i$ para $i \in \mathbb{N}\cup\{0\}$, donde $I_i = [r_{i-1}, r_i]$. Ahora, para encontrar los valores de x_k, idealmente buscamos en I_i por el Método de la Bisección, o en cualquier punto interior de I_i. Sin embargo, tampoco conocemos los valores de r_i, por lo que consideramos el intervalo de búsqueda de x_i^* como $[i - 1 + \frac{\arctan(0.4/\pi)}{\pi}, i + \frac{\arctan(0.4/\pi)}{\pi}]$.
Para los Métodos de Newton-Raphson, consideramos $x_i^0 = i - \frac{1}{2}$, pues sabemos que $k - \frac{1}{2} \xrightarrow[k\to\infty]{} x_k^*$. Para dar una demostración, en las tablas 1, 2 y 3 se hace una comparación para $i = 0, 1, 5, 20, 50$ con los algoritmos 1, 2 y 3.

i	x_i^*	e_r	Iteraciones	$f(x_i)$
0	-0.43414521620544066494	4.96986×10^{-6}	16	-2.71583×10^{-6}
1	0.45065461425781250249	4.01347×10^{-6}	17	-9.37144×10^{-6}
5	4.32264876044648627129	4.60246×10^{-8}	19	-1.02506×10^{-9}
20	19.50077493167775699590	3.28196×10^{-11}	27	-1.02506×10^{-9}
50	49.50000000625398399734	1.43544×10^{-16}	2	-8.18125×10^{-6}

Cuadro 1: Comparación para $i = 0, 1, 5, 20, 50$ con el Algoritmo 1

Así, notamos que los tres algoritmos convergen a x_i^* como nos indica la teoría, pues f cumple las condiciones del Teorema de Convergencia cuadrática del Método de Newton-Raphson para cada x_i^*, y $f\left(i - 1 + \frac{\arctan(0.4/\pi)}{\pi}\right) f\left(i + \frac{\arctan(0.4/\pi)}{\pi}\right) < 0$.

i	x_i^*	e_r	Iteraciones	$f(x_i)$
0	-0.43414305857310753201	0	3	3.81978×10^{-8}
1	0.45065674789059323446	2.09403×10^{-15}	4	2.88808×10^{-12}
5	4.32264895939446613937	8.21883×10^{-16}	5	3.17346×10^{-12}
20	19.50077493231776415428	0	3	-1.64291×10^{-10}
50	49.50000000625397689191	0	2	6.85625×10^{-7}

Cuadro 2: Comparación para $i = 0, 1, 5, 20, 50$ con el Algoritmo 2

i	x_i^*	e_r	Iteraciones	$f(x_i)$
0	-0.43414305857393181709	1.89865×10^{-12}	3	3.82005×10^{-8}
1	0.45065674789059229077	0	4	2.88392×10^{-12}
5	4.32264895939446258666	0	5	3.12239×10^{-12}
20	19.50077493231778547056	1.09310×10^{-15}	3	-3.27827×10^{-10}
50	49.50000000625397689191	0	2	6.85625×10^{-7}

Cuadro 3: Comparación para $i = 0, 1, 5, 20, 50$ con el Algoritmo 3

4. Conclusiones

Si bien los tres algoritmos cumplen con su función, en el caso que f sea dos veces diferenciable, siempre será preferible un método de Newton por la convergencia cuadrática. Si bien, en general es difícil tener una función que sea dos veces diferenciable, en la práctica se tienen aproximaciones por polinomios, polinomios trigonométricos, series de Fourier, series de Taylor, exponenciales, logarítmos, entre otras, que efectivamente son dos veces diferenciables.

Finalmente, si comparamos los resultados del Método de Newton-Raphson con y sin derivadas son equiparables, por lo que es preferible no calcular la derivada, pues puede resultar más costoso, además que en ocasiones no se conoce f', solo su existencia.

Referencias

[1] R. G. Bartle and D. R. Sherbert, *Introduction to Real Analysis.* John Wiley and Sons, Inc., 01 2011.

[2] R. Kress, *Numerical Analysis.* Springer New York, NY, 12 2012.