Cálculo Numérico

Ecuaciones no lineales

Nazareno Faillace
03/06

Departamento de Matemática - FCEyN - UBA

Ecuaciones no lineales

En esta parte de la materia veremos métodos para resolver problemas del tipo:

$$\text{Dada } f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, \text{ hallar } r \in \mathbb{R} \text{ tal que } f(r) = 0$$

Al tratarse de métodos iterativos, uno tiene que elegir al menos uno de los siguientes criterios de parada:

- Tolerancia de error: para un ε dado, el programa para cuando $f(x_n) < \varepsilon$.
- Número de iteraciones

Motivación

Calcular $\frac{1}{\sqrt{x}}$ es utilizado para normalizar vectores. Esto es muy común, por ejemplo en el sombreado 3D en videojuegos: la normalización de vectores juega un rol muy importante en calcular cómo incide la luz y cómo se refleja.

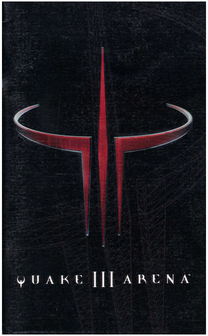
- Mientras uno corre un videojuego, por segundo el CPU debe hacer miles de millones de cálculos $\rightarrow$ una pequeña mejora en la eficiencia tiene un gran impacto

Motivación

Calcular $\frac{1}{\sqrt{x}}$ es utilizado para normalizar vectores. Esto es muy común, por ejemplo en el sombreado 3D en videojuegos: la normalización de vectores juega un rol muy importante en calcular cómo incide la luz y cómo se refleja.

- Mientras uno corre un videojuego, por segundo el CPU debe hacer miles de millones de cálculos $\to$ una pequeña mejora en la eficiencia tiene un gran impacto

1999:



Motivación

- Se implementó una rutina para calcular $\frac{1}{\sqrt{x}}$ que resultó ser cuatro veces más rápida que ejecutar simplemente *`1/sqrt(x)`*

Motivación

- Se implementó una rutina para calcular $\frac{1}{\sqrt{x}}$ que resultó ser cuatro veces más rápida que ejecutar simplemente `1/sqrt(x)`
- Básicamente la idea es aprovechar la representación binaria en la mantisa para hallar un muy buen punto inicial para el método de Newton-Raphson.Luego se realiza una sola iteración y se obtiene una muy buena apoximación de $\frac{1}{\sqrt{x}}$

Motivación

- Se implementó una rutina para calcular $\frac{1}{\sqrt{x}}$ que resultó ser cuatro veces más rápida que ejecutar simplemente `1/sqrt(x)`
- Básicamente la idea es aprovechar la representación binaria en la mantisa para hallar un muy buen punto inicial para el método de Newton-Raphson.Luego se realiza una sola iteración y se obtiene una muy buena apoximación de $\frac{1}{\sqrt{x}}$
- La idea y la implementación se le atribuyen principalmente a Gary Tarolli (aunque él mismo no está seguro de haber sido quien la ideó)

Motivación

- Se implementó una rutina para calcular $\frac{1}{\sqrt{x}}$ que resultó ser cuatro veces más rápida que ejecutar simplemente *1/sqrt(x)*
- Básicamente la idea es aprovechar la representación binaria en la mantisa para hallar un muy buen punto inicial para el método de Newton-Raphson.Luego se realiza una sola iteración y se obtiene una muy buena apoximación de $\frac{1}{\sqrt{x}}$
- La idea y la implementación se le atribuyen principalmente a Gary Tarolli (aunque él mismo no está seguro de haber sido quien la ideó)
- Para quien le interese leer más al respecto: *http://www.lomont.org/papers/2003/InvSqrt.pdf*

Bisección

Se apoya fuertemente en el Teorema de Bolzano. La idea es la siguiente:

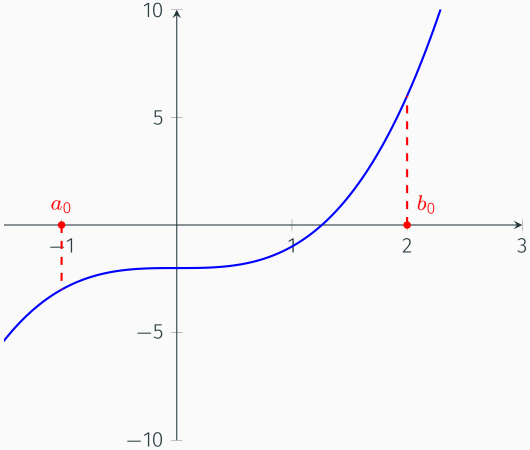
1. elegir un intervalo $[a, b]$ tal que $f(a)$ y $f(b)$ tengan distinto signo
2. mientras no se cumpla el criterio de parada:
   2.1 calcular $x = \frac{b+a}{2}$
   2.2 Si $f(x) == 0$, terminar.
   2.3 Si $sg(f(x)) == sg(f(a))$: tomar $a = x$
   2.4 Si $sg(f(x)) == sg(f(b))$: tomar $b = x$
3. devolver x

Es decir, para cada $n \in \mathbb{N}$, $x_n = \frac{b_n+a_n}{2}$.

Así, generamos una sucesión de intervalos $[a_n, b_n]$ tal que $b_n - a_n = \left(\frac{b-a}{2^n}\right)$. Notar que $b_n - a_n \xrightarrow{n\to+\infty} 0$, por lo que el método eventualmente siempre converge.

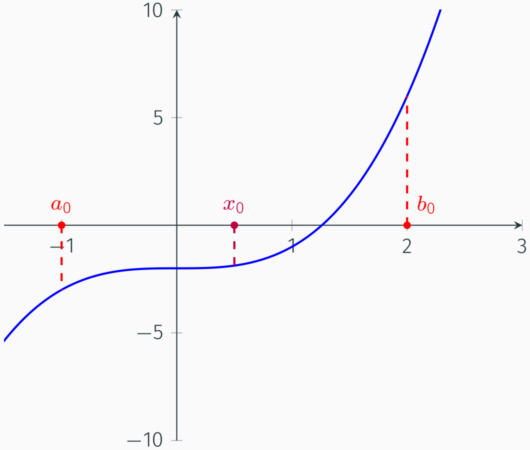
Bisección

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_0 = -1,\ b_0 = 2$$



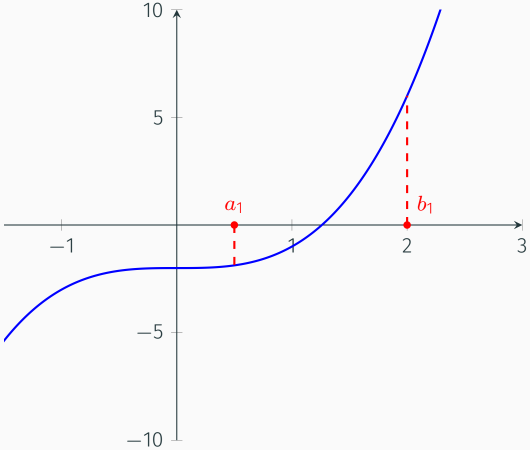
Bisección

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_0 = -1,\ b_0 = 2,\ x_0 = \frac{b_0+a_0}{2} = 0{,}5$$



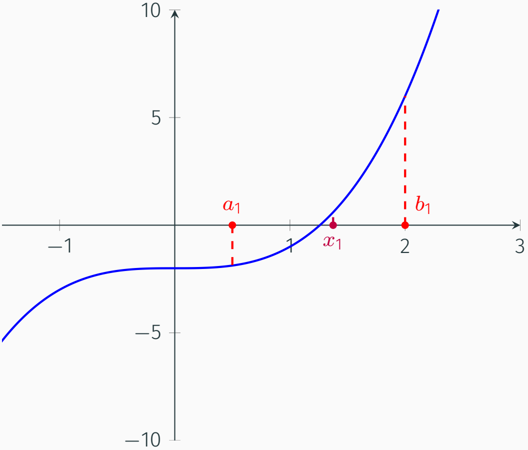
Bisección

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_1 = 0{,}5,\ b_1 = 2$$



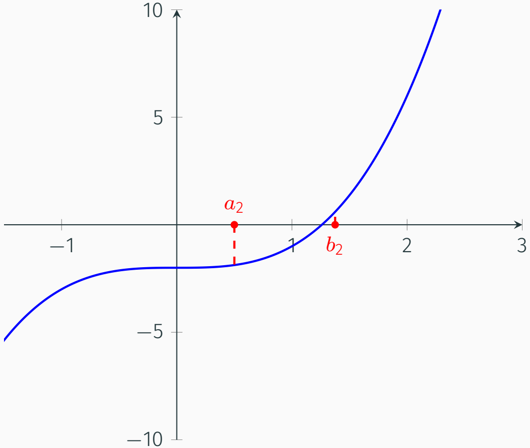
Bisección

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_1 = 0{,}5,\ b_1 = 2,\ x_1 = \frac{b_1 + a_1}{2} = 1{,}375$$



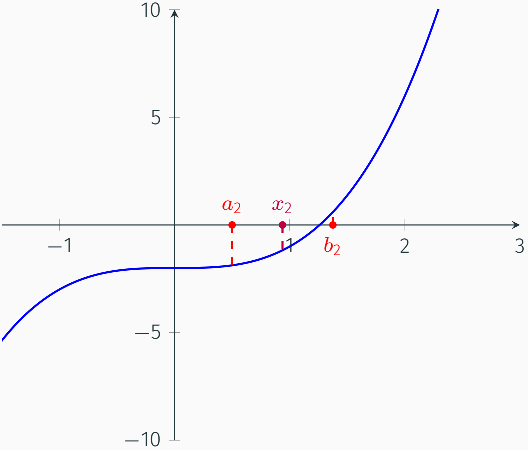
Bisección

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_2 = 0{,}5,\ b_2 = 1{,}375$$



Bisección

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_2 = 0{,}5,\ b_2 = 1{,}375\ x_2 = \frac{b_2+a_2}{2} = 0{,}9375$$



Teorema

Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ continua, $f(a)f(b) < 0$. Entonces el método de bisección genera una sucesión $\{x_n\}_{n\geq 0}$ que converge a una raíz r de f y el error es $e_n = |x_n - r| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}}$

Ejemplo: sea $f(x) = xe^{-x}$, determinar el número de iteraciones que debe realizar el método de bisección en el intervalo $[-2, 1]$ para garantizar que el error sea menor que 10^{-6}.

Por el teorema, tenemos que $e_n \leq \frac{b-a}{2^{n+1}} = \frac{3}{2^{n+1}}$, luego basta hallar n tal que $\frac{3}{2^{n+1}} < 10^{-6}$.

$$\frac{3}{2^{n+1}} < 10^{-6} \iff 2^{n+1} > 3 \cdot 10^{6} \iff n+1 > log_2\left(3 \cdot 10^{6}\right) \approx 21{,}51653107$$

Entonces, se requieren 21 iteraciones para garantizar que el error sea menor que 10^{-6}.

Para un intervalo $[a,b]$ cualquiera, necesitaríamos n iteraciones, con n tal que $n > log_2\left((b-a)10^{6}\right) - 1$

Bisección

Ventajas:

- Si arranco con un intervalo $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$, me garantiza la convergencia.
- No usa valores de f', entonces lo podemos usar para funciones continuas que no sean derivables en todos los puntos.

Desventajas:

- La convergencia está garantizada, pero puede ser muy lenta (esto se debe, en parte, a que no utiliza información sobre f').
- Falla cuando hay raíces múltiples: por ejemplo, si $f(x) = x^2$, no existen $a, b \in \mathbb{R}$ tales que $f(a)f(b) < 0$

Regula falsi

Comparte ideas del método de bisección (Bolzano) y del método de Newton-Raphson (usar información de la curvatura de f). La idea de este método es la siguiente:

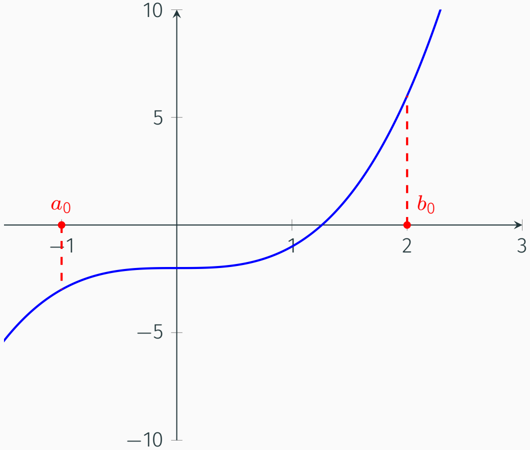
1. elegir un intervalo $[a, b]$ tal que $f(a)$ y $f(b)$ tengan distinto signo
2. mientras no se cumpla el criterio de parada:
   2.1 calcular $x = \frac{a \cdot f(b) - b \cdot f(a)}{f(b) - f(a)}$
   2.2 Si $f(x) == 0$, terminar
   2.3 Si $sg(f(x)) == sg(f(a))$: tomar $a == x$
   2.4 Si $sg(f(x)) == sg(f(b))$: tomar $b == x$
3. devolver x

Es decir, para cada $n \in \mathbb{N}$, $x_n = \dfrac{a_n f(b_n) - b_n f(a_n)}{f(b_n) - f(a_n)}$.

En este caso también estamos generando una sucesión de intervalos $[a_n, b_n]$ y se puede demostrar que el método converge siempre.

Regula Falsi

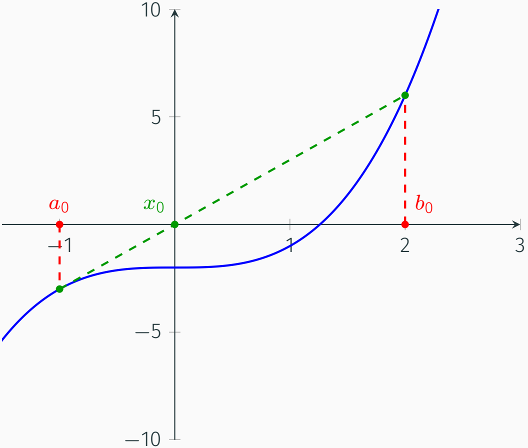
$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_0 = -1,\ b_0 = 2$$



Regula Falsi

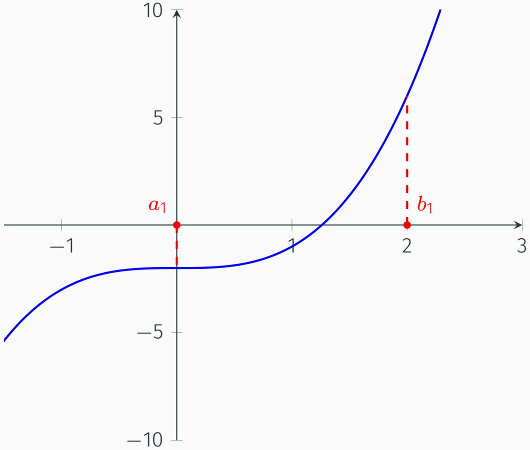
$$f(x) = x^3 - 2$$

$$a_0 = -1,\ b_0 = 2,\ x_0 = \frac{a_0 f(b_0) - b_0 f(a_0)}{f(b_0) - f(a_0)} = 0$$



Regula Falsi

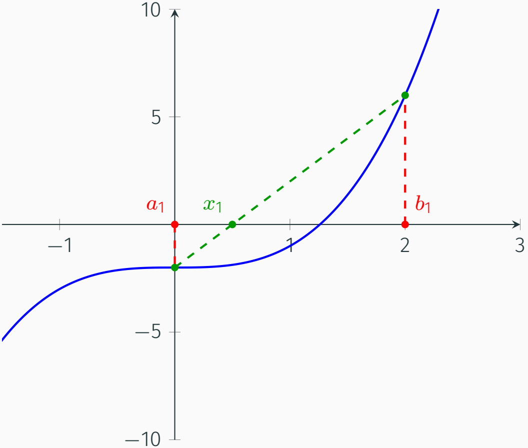
$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_1 = 0,\ b_1 = 2$$



Regula Falsi

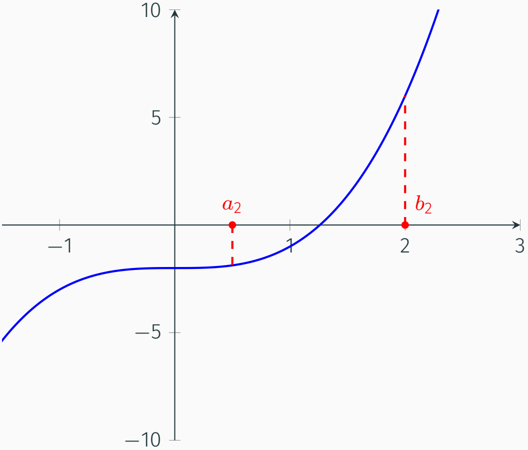
$$f(x) = x^3 - 2$$

$$a_1 = 0,\ b_1 = 2,\ x_1 = \frac{a_1 f(b_1) - b_1 f(a_1)}{f(b_1) - f(a_1)} = 0{,}5$$



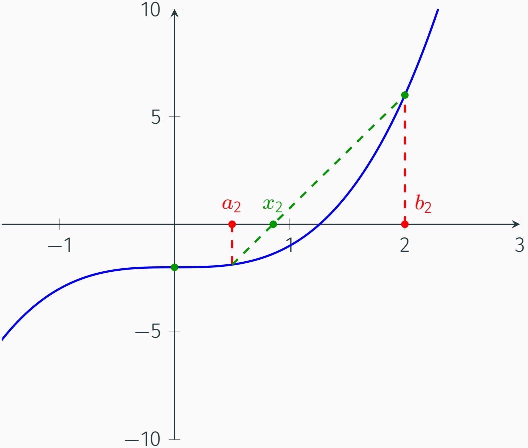
Regula Falsi

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_2 = 0{,}5,\ b_2 = 2$$



Regula Falsi

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$a_2 = 0{,}5,\ b_1 = 2,\ x_1 = \frac{a_2 f(b_2) - b_2 f(a_2)}{f(b_2) - f(a_2)} \approx 0{,}857$$



Regula Falsi

Ventajas:

- Igual que el método de bisección, si elijo un intervalo inicial $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$, está asegurada la convergencia.
- Al no usar información sobre f', lo podemos usar para funciones continuas que no sean derivables en todos los puntos.
- Suele ser más rápido que bisección.

Desventajas: similares a las de bisección.

Newton-Raphson

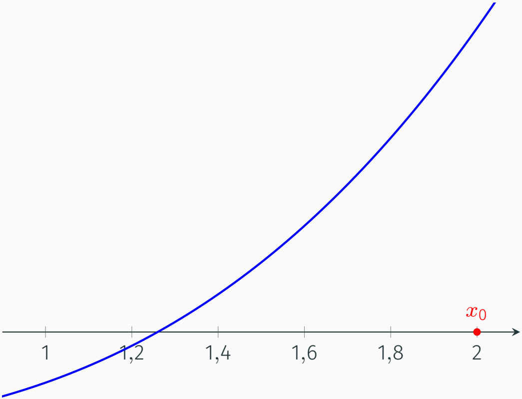
Este método utiliza información sobre f' para hallar una raíz. Consiste en elegir x_{n+1} como la raíz de la recta tangente a f en x_n. La idea del método es la siguiente:

1. Elegir x_0 un punto inicial
2. Mientras no se cumpla el criterio de parada:
    2.1 Calcular el siguiente término de la sucesión: $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
3. Devolver el último término calculado de la sucesión.

En síntesis, la sucesión viene definida por $x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

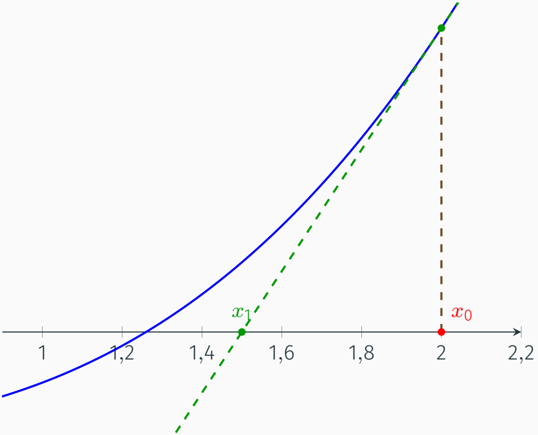
Newton-Raphson

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$x_0 = 2$$



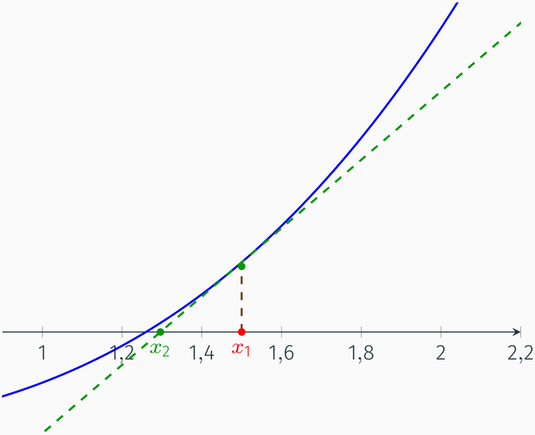
Newton-Raphson

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$x_0 = 2$$



Newton-Raphson

$$f(x) = x^3 - 2$$
$$x_1 = \frac{3}{2}$$



Newton-Raphson

Ventajas:

- Generalmente, más rápido que bisección y que regula falsi, pues utiliza información sobre f'
- Generalizable a sistemas de ecuaciones no lineales y a la búsqueda de raíces complejas
- Puede aplicarse a funciones con raíces múltiples (como $f(x) = x^2$)

Desventajas:

- La convergencia depende de la elección de x_0 y encontrar un x_0 adecuado no siempre es trivial.
- Es preferible que $f'(r) \neq 0$
- No lo podemos utilizar si f no es derivable en todo punto.

Newton-Raphson - Convergencia

Teorema 1

Sea $f \in C^1(\mathbb{R})$ y $\{x_n\}_{n\geq 1}$ una sucesión construida con el método de Newton-Raphson, si $x_n \to r$, entonces $f(r) = 0$

Teorema 2

Sea $f \in C^2([a,b])$ y r un cero simple de f. Sean $I = [r-\alpha, r+\alpha]$ y δ, M positivos tales que:

- $|f'(x)| \geq \delta \quad \forall\, x \in I$
- $|f''(x)| \leq M \quad \forall\, x \in I$

Sea $\{x_n\}_{n\geq 1}$ una sucesión construida con este método y $e_n = x_n - r$. Entonces existe $\varepsilon > 0$ tal que $I_\varepsilon = [r-\varepsilon, r+\varepsilon] \subset I$ y $|e_n| \to 0$ si $x_0 \in I_\varepsilon$. Más aún:

$$|e_{n+1}| \leq \frac{1}{2}\frac{M}{\delta}|e_n|^2$$

Teorema 3

Si $f \in C^2(\mathbb{R})$ con $f'' > 0$, cambia de signo y f no alcanza su mínimo en x_0, entonces el método de Newton-Raphson comenzando en x_0 converge.

Newton-Raphson - Convergencia

Teorema 3

Si $f \in C^2(\mathbb{R})$ con $f'' > 0$, cambia de signo y f no alcanza su mínimo en x_0, entonces el método de Newton-Raphson comenzando en x_0 converge.

Ejemplo: mostrar que, para calcular $ln(2)$, Newton-Raphson aplicado a $f(x) = e^x - 2$ converge para todo punto inicial $x_0 \in \mathbb{R}$

$$f(x) = e^x - 2$$
$$f'(x) = e^x$$
$$f''(x) = e^x > 0 \quad \forall\, x \in \mathbb{R}$$

Además, $f(0) = -1$ y $lim_{x \to +\infty} f(x) = +\infty$, entonces f cambia de signo. Por otro lado, como f no alcanza mínimo, en particular no alcanza mínimo para $x_0 \in \mathbb{R}$. Entonces, por el tercer teorema, tenemos que Newton-Raphson converge para cualquier $x_0 \in \mathbb{R}$

Newton-Raphson - Convergencia

Observación:

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

Si hacemos Taylor en r centrado en x_n:

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

Luego:

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

$$\xRightarrow{(1)} e_{n+1} = \frac{1}{2} \frac{f''(\xi_n)}{f'(x_n)} e_n^2$$

Donde ξ_n es un punto entre r y x_n.

Newton-Raphson - Convergencia

Ejemplo: sea $f(x) = x^7 + 2x - 1$, probar que el método de Newton-Raphson converge $\forall\ x_0 > 0$.

Como f es continua, $f(0) = -1 < 0$ y $lim_{x \to +\infty} f(x) = +\infty$ entonces, por Bolzano, f tiene al menos una raíz $r \in (0, +\infty)$.

Como $f'(x) = 7x^6 + 2 > 0 \quad \forall\ x \in \mathbb{R}$, entonces f es estrictamente monótona creciente y r es única.

Observar también que $f''(x) = 42x^5$, entonces $f''(x) > 0 \quad \forall\ x \in (0, +\infty)$.

Escribamos la iteración de Newton-Raphson:

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

Hay dos posibilidades:

- $x_n < r \xRightarrow{f \text{ creciente}} f(x_n) < f(r) = 0 \xRightarrow{f' > 0} \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} < 0 \Rightarrow x_{n+1} > x_n$
- $x_n > r \xRightarrow{f \text{ creciente}} f(x_n) > f(r) = 0 \xRightarrow{f' > 0} \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} > 0 \Rightarrow x_{n+1} < x_n$

Luego, $\{x_n\}_n$ es monótona. Por otro lado, tenemos que:

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

Newton-Raphson - Convergencia

Entonces, a partir de x_1, $\{x_n\}_n$ es una sucesión decreciente y acotada inferiormente. Luego $\exists\ \ell \geq r$ tal que $x_n \to \ell$. Por el primer teorema, se tiene que $f(\ell) = 0$. Como vimos que r es la única raíz de f, entonces $\ell = r$.

Resumiendo:

1. Chequeamos que f tiene raíz en $(0, +\infty)$.
2. Analizamos f y sus derivadas
3. Vimos que $\{x_n\}_n$ es monótona decreciente y acotada inferiormente (entonces converge)
4. Usamos Teorema 1 para concluir que $\{x_n\}_n$ converge a r

Método de la secante

Básicamente es el método de Newton-Raphson, pero usamos diferencias divididas backward en vez de f'. Esto implica que para calcular x_{n+1} usemos x_n y x_{n-1}. La iteración viene dada por:

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

Para este método necesitamos dos puntos iniciales: x_0 y x_1

Ventajas:

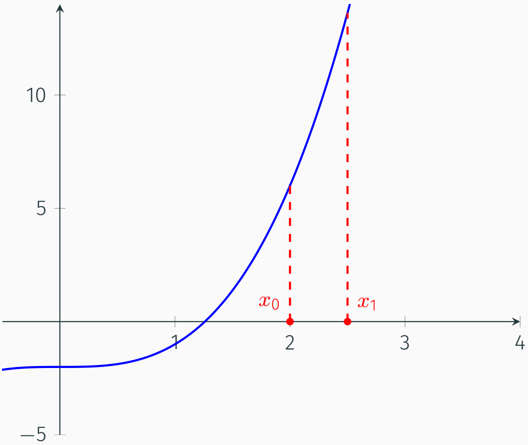
- Generalmente mas rápido que bisección y regula falsi, no tan rápido como Newton-Raphson.
- No necesitamos evaluar en f'

Desventajas:

- Podría no converger

Método de la secante

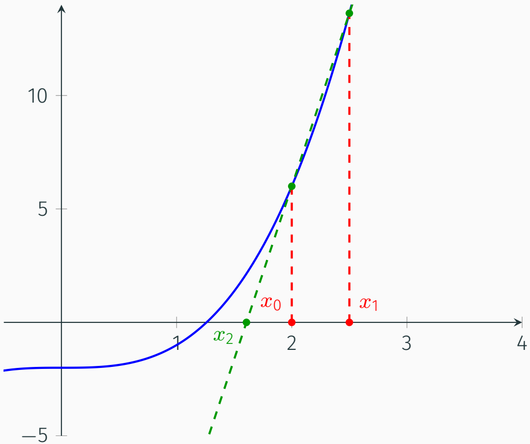
$$f(x) = x^3 - 2$$
$$x_0 = 2,\ x_1 = 2{,}5$$



Método de la secante

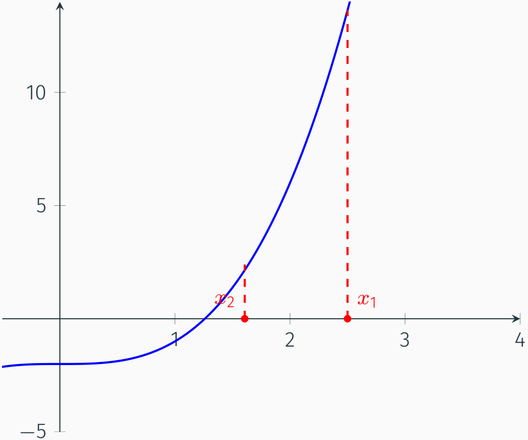
$$f(x) = x^3 - 2$$

$$x_0 = 2,\ x_1 = 2{,}5,\ x_2 = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{98}{61}$$



Método de la secante

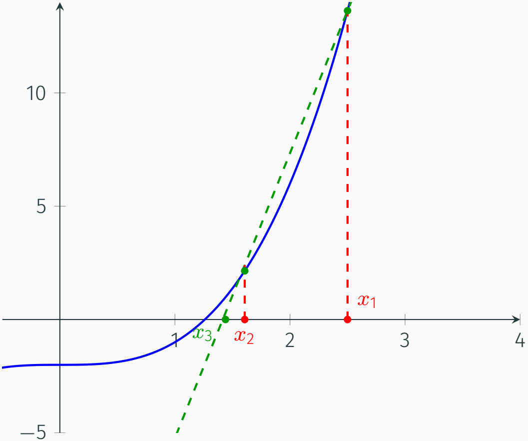
$$f(x) = x^3 - 2$$
$$x_1 = 2{,}5,\ x_2 = \tfrac{98}{61}$$



Método de la secante

$$f(x) = x^3 - 2$$

$$x_1 = 2{,}5,\ x_2 = \tfrac{98}{61},\ x_3 = \frac{x_1 f(x_2) - x_2 f(x_1)}{f(x_2) - f(x_1)} \approx 1{,}43947$$



Comparación de los métodos