Métodos Computacionales

Búsqueda de raíces

Agosto 7, 2024

S. Alexis Paz

Departamento de
QUÍMICA TEÓRICA
Y COMPUTACIONAL
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Nacional de Córdoba

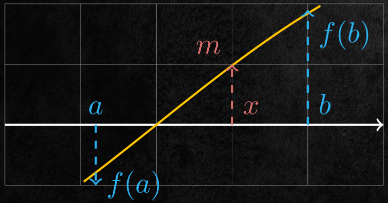
hecho con idiogram

¿L tal que $f(L) = 0$?

Si podemos determinar las raíces de una ecuación también podemos determinar máximos y mínimos, valores propios de matrices, resolver sistemas de ecuaciones lineales y diferenciales, etc...

Teorema del valor intermedio

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ continua en $[a, b]$ y $m \in \mathbb{R}$ tal que $f(a) < m < f(b)$, entonces existe $x \in (a, b)$ tal que $f(x) = m$.

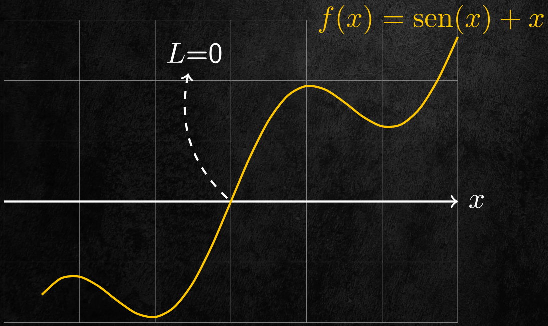


corolario

Si $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos, entonces f tiene una raiz $L \in (a, b)$.

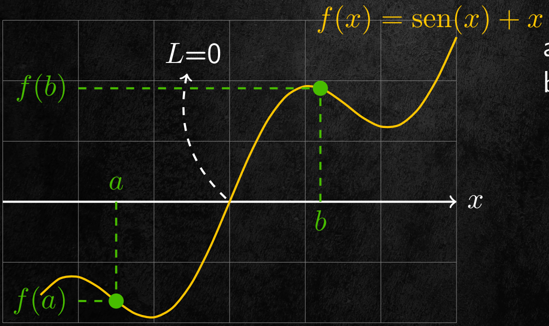
Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.

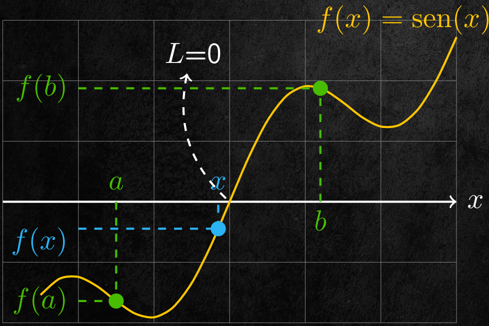


a=-1.5
b=1.2

1

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



a=-1.5
b=1.2

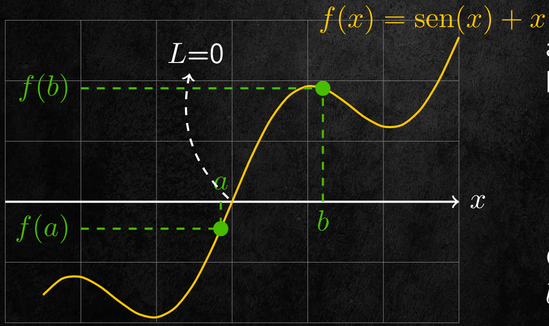
1

$x = -0.15$
$f(a)f(x) > 0$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$b - a = 2.7$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a + b)/2$.
3. Si $|b - a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



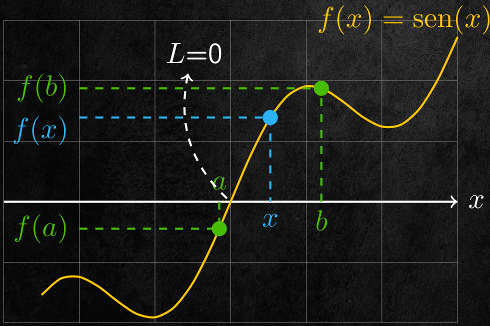
a=-0.15
b=1.2

2

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$b - a = 1.34999$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



a=-0.15
b=1.2

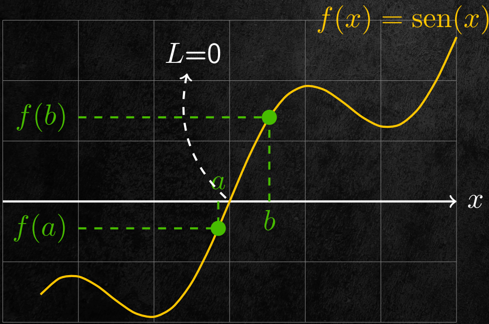
2

$f(a)f(x) < 0$
$x = 0.525$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$b - a = 1.34999$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



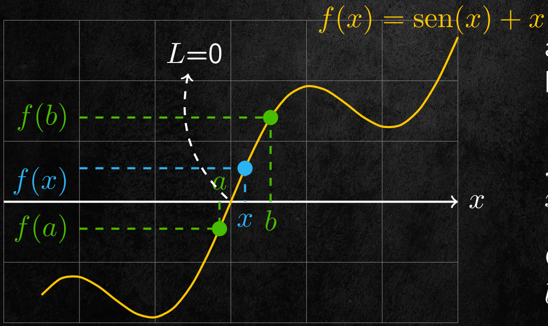
a=-0.15
b=0.525

3

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$b - a = 0.67499$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a + b)/2$.
3. Si $|b - a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



a=-0.15
b=0.525

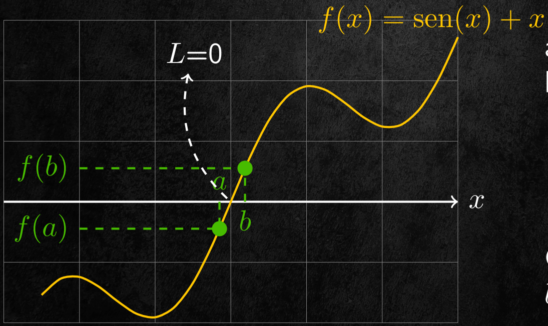
3

$f(a)f(x) < 0$
$x = 0.1875$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$b - a = 0.67499$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



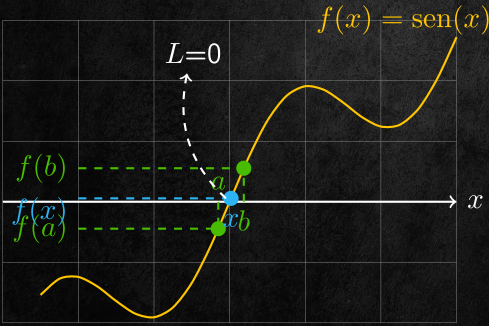
a=-0.15
b=0.1875

4

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$b - a = 0.3375$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.



a=-0.15 4
b=0.1875

$f(a)f(x) < 0$
$x = 0.01875$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$b - a = 0.3375$

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a + b)/2$.
3. Si $|b - a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ enton
5. Volver al paso 2.

```python
import numpy as np

f = lambda x : np.sin(x)+x

a=-1.5; b=1.2; et=0.4
x=(a+b)/2

while b-a>et:
    if f(a)*f(x)<=0:
        b=x
    else:
        a=x
    x=(a+b)/2

print(x)
```

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T.
2. Calcula $x \Leftarrow (a + b)/2$.
3. Si $(b - a) < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x.
4. Si $f(a)f(x) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x$, sino $a \Leftarrow x$.
5. Volver al paso 2.

¿Error?

¿Convergencia?

Bisección

1. Elige $[a, b]$ tal que $f(a)f(b) < 0$ y una tolerancia ϵ_T. $n \Leftarrow 0$
2. Calcula $x_n \Leftarrow (a + b)/2$.
3. Si $|b - a| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es x_n.
4. Si $f(a)f(x_n) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x_n$, sino $a \Leftarrow x_n$.
5. Volver al paso 2. $n \Leftarrow n + 1$

¿Error?

¿Convergencia?

Bisección

1. Elige $[a,b]$ tal que $f(a)f(b)<0$ y una tolerancia ϵ_T. $n \Leftarrow 0$
2. Calcula $x_n \Leftarrow (a+b)/2$.
3. Si $|b-a|<\epsilon_T$, terminar. La raíz es x_n.
4. Si $f(a)f(x_n) \leq 0$ entonces $b \Leftarrow x_n$, sino $a \Leftarrow x_n$.
5. Volver al paso 2. $n \Leftarrow n+1$

¿Error?

ABSOLUTO: $\epsilon_n = |x_n - L|$

RELATIVO: $\tilde{\epsilon}_n = |x_n - L| / x_n$

¿Convergencia?

$$\lim_{n\to\infty} x_n = L$$

$$\epsilon_{n+1} = C\epsilon_n^p \quad ; \quad n \to \infty$$

$p \to$ ORDEN

$C \to$ VELOCIDAD

Teorema de Taylor

forma de Peano

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función diferenciable k veces en el punto $a \in \mathbb{R}$. Entonces existe $R_k : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ tal que

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \cdots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k + h_k(x)(x-a)^k$$

con $\lim_{x\to a} h_k(x) \quad = \quad 0.$

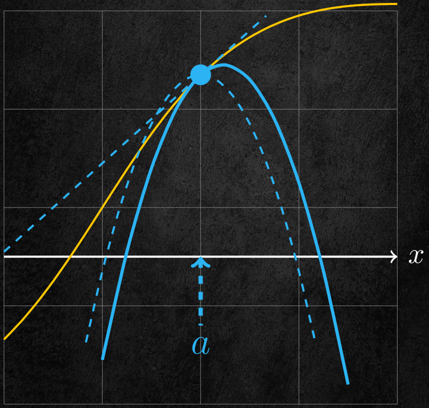
forma de Lagrange

Sea $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ una función diferenciable $k+1$ veces en el intervalo abierto y $f^{(k+1)}$ en el cerrado entre a y x. Entonces

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \cdots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k + \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}(x-a)^{k+1}$$

con ξ entre x y a.

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \cdots + \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k + \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!}(x-a)^{k+1}$$



Newton-Rapshon

1. Elige x_n y una tolerancia ϵ_T para el resultado. $n = 0$.
2. Calcula $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$.
3. Si $|x_{n+1} - x_n| < \epsilon_T$, terminar. La raíz es: x_{n+1}.
4. Volver al paso 2, $n \Leftarrow n + 1$.

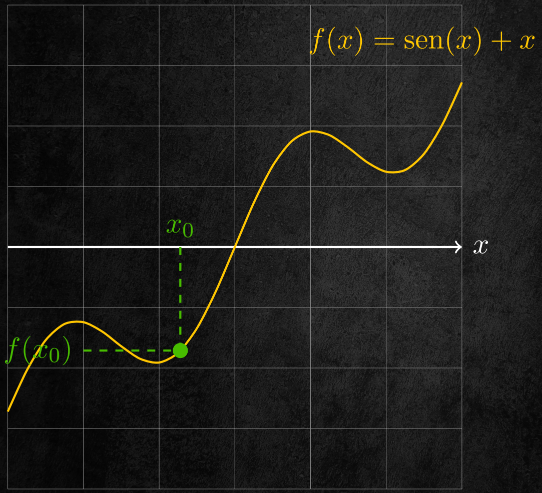
variante

3. Si $|x_{n+1} - x_n|/x_n < \epsilon_T$, terminar. La raíz es: x_{n+1}.

variante

3. Si $f(x_{n+1}) < \epsilon_T$, terminar. La raíz es: x_{n+1}.

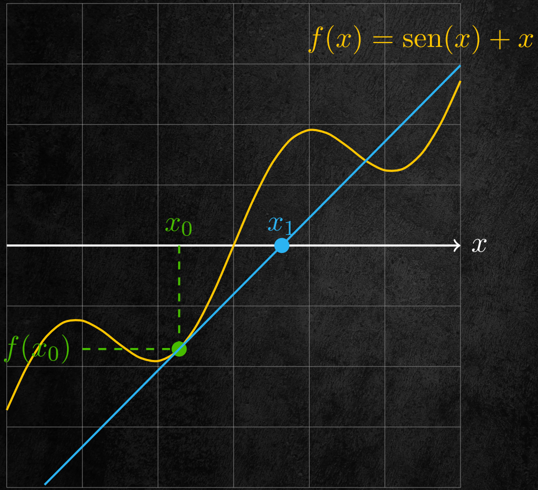
Newton-Raphson



1

$x_0 = -0.72$

Newton-Raphson



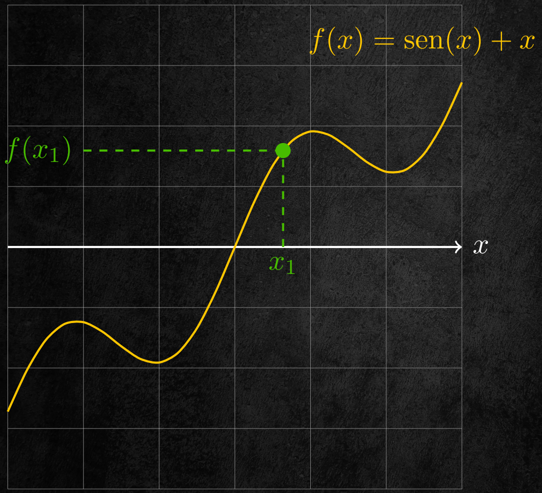
1

$x_0 = -0.72$

$x_1 = 0.6374$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$|x_0 - x_1| = 1.3574$

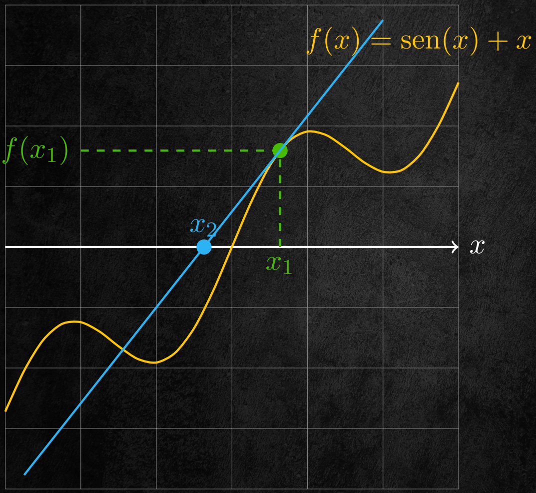
Newton-Raphson



2

$x_1 = 0.6374$

Newton-Raphson



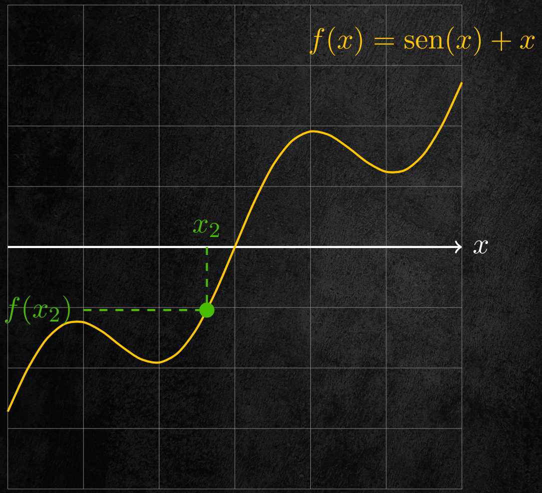
2

$x_1 = 0.6374$

$x_2 = -0.3693$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$|x_1 - x_2| = 1.0067$

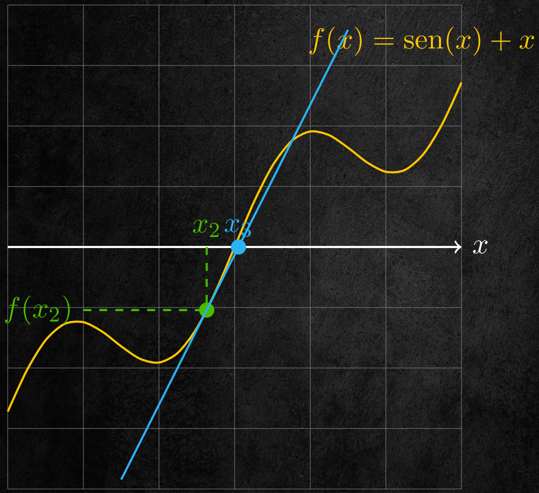
Newton-Raphson



3

$x_2 = -0.3693$

Newton-Raphson



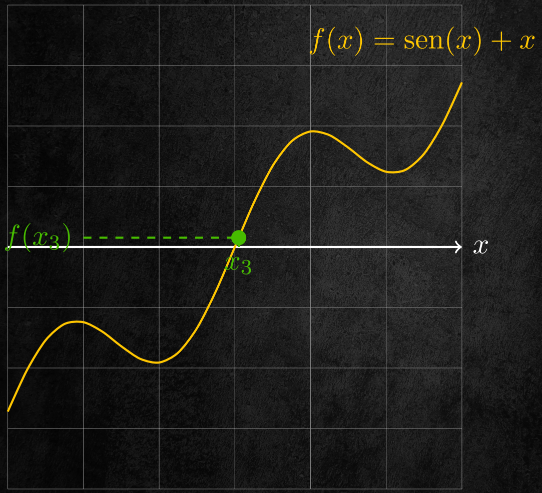
3

$x_2 = -0.3693$

$x_3 = 0.05132$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$|x_2 - x_3| = 0.42061$

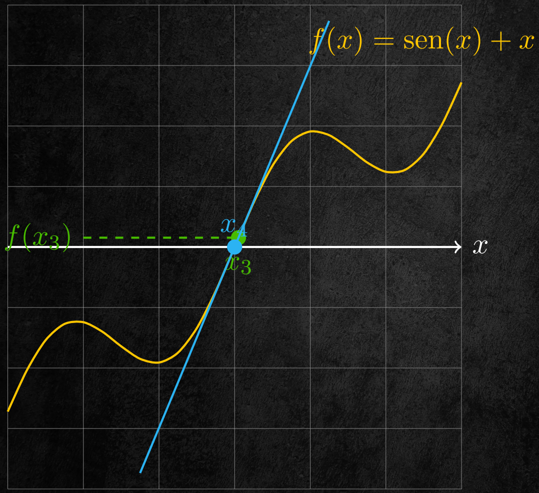
Newton-Raphson



4

$x_3 = 0.05132$

Newton-Raphson



4

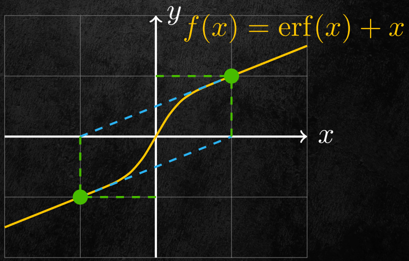
$x_3 = 0.05132$

$x_4 = -0.0001$

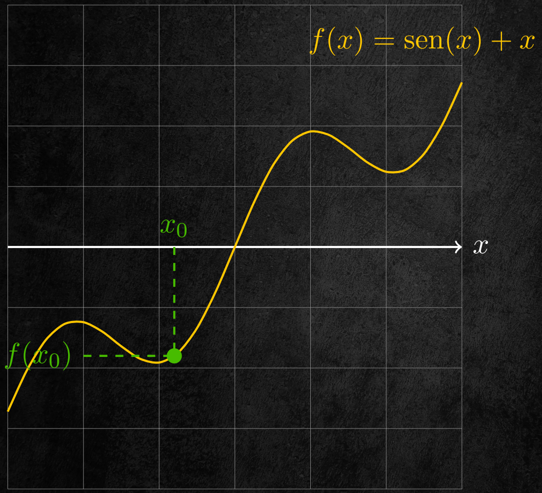
Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$|x_3 - x_4| = 0.05142$

- Necesitamos conocer la primera derivada de la funcion.
- Cuando converge, es más rápido que la bisección.
- Sin "encerramiento" de la solución.
- La convergencia no esta garantizada:

  1. La función varía demasiado en la región (*i.e.* empezamos "lejos" de la raiz).
  2. La derivada se hace cero en alguna iteración.
  3. Se puede encontrar un ciclo infinito.



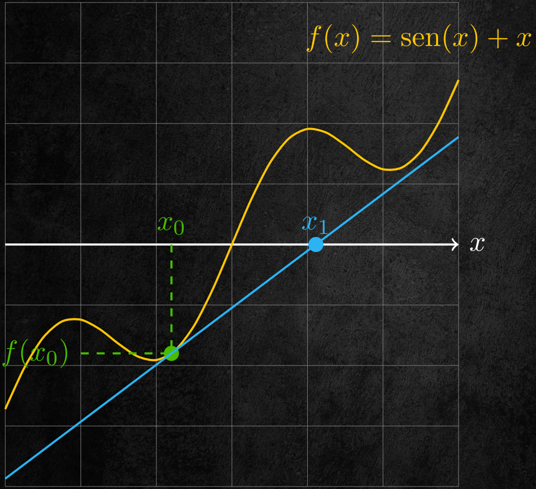
Newton-Raphson



1

$x_0 = -0.8$

Newton-Raphson



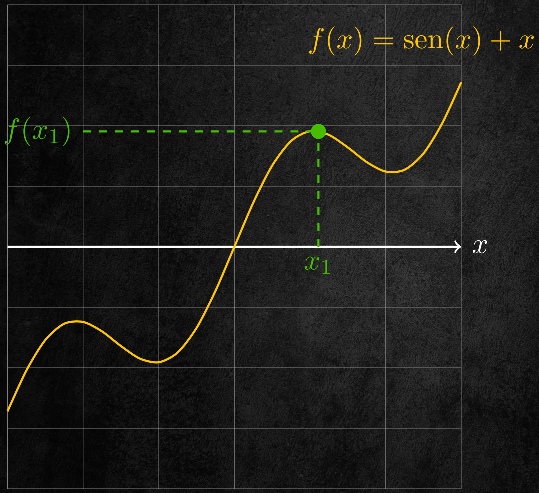
1

$x_0 = -0.8$

$x_1 = 1.11127$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$|x_0 - x_1| = 1.91127$

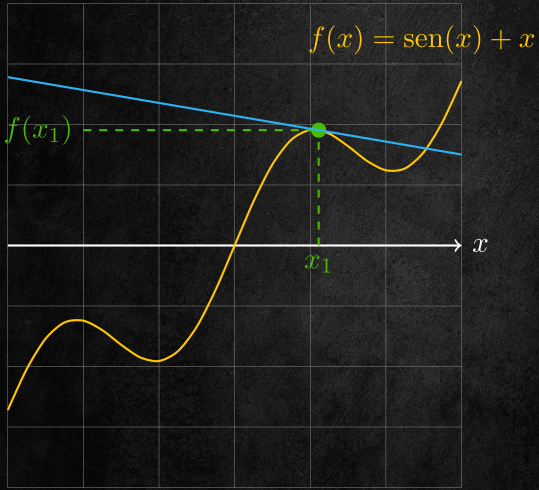
Newton-Raphson



2

$$x_1 = 1.11127$$

Newton-Raphson



2

$x_1 = 1.11127$

$x_2 = 10.0525$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$|x_1 - x_2| = 8.94124$

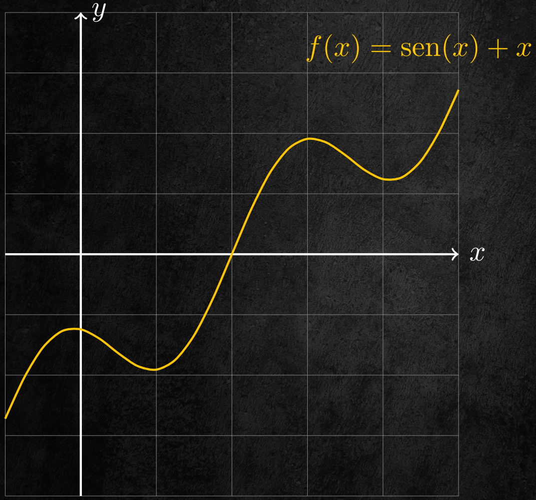
$$f'(x_n) = \lim_{x_{n-1}\to x_n} \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$$

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

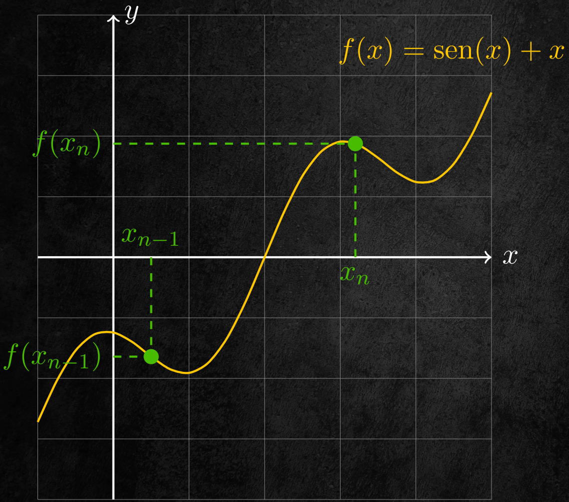
Secante

1. Elige x_n, x_{n-1} y una tolerancia ϵ_T para el resultado. $n = 0$.
2. Calcula $x_{n+1} = x_n - f(x_n)\dfrac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$.
3. Si $|x_{n+1} - x_n|/x_n < \epsilon_T$, terminar. La raíz es: x_{n+1}.
4. Volver al paso 2, $n \Leftarrow n + 1$.

Secante



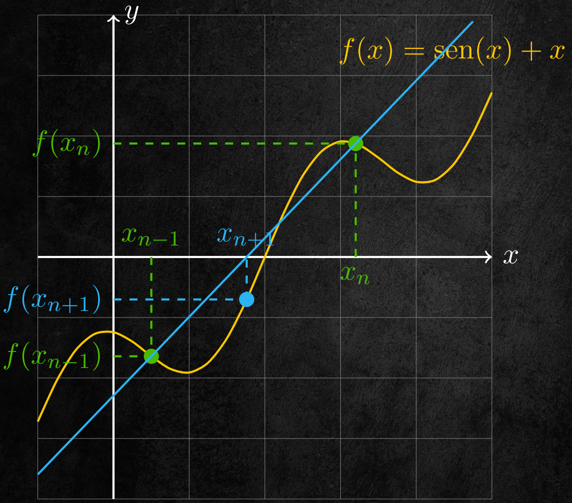
Secante



1

$x_{n-1} = -1.5$
$x_n = 1.2$

Secante



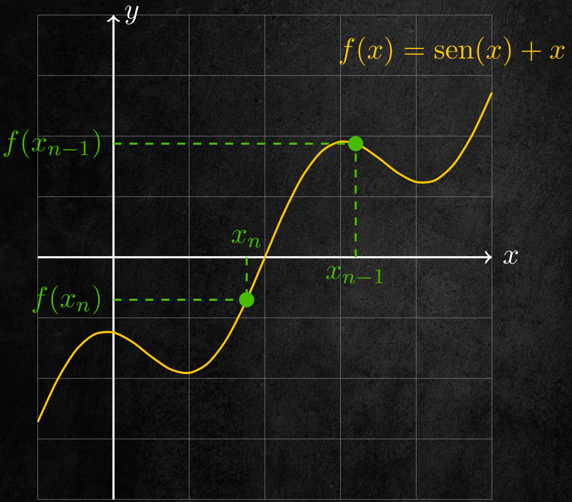
1

$x_{n-1} = -1.5$
$x_n = 1.2$

$x = -0.24$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$x_n - x_{n-1} = 2.7$

Secante

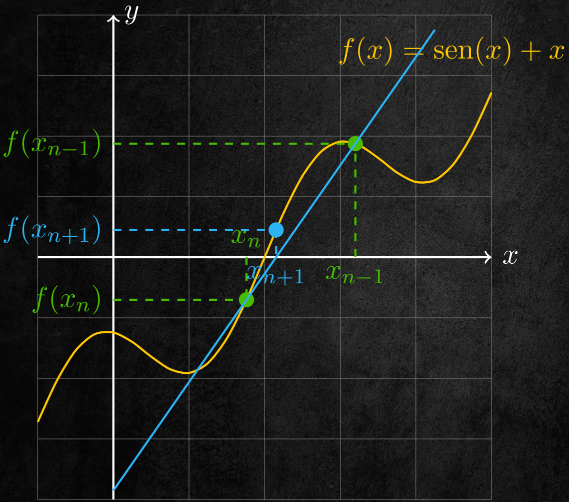


2

$x_{n-1} = 1.2$
$x_n = -0.24$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$x_n - x_{n-1} = -1.44$

Secante



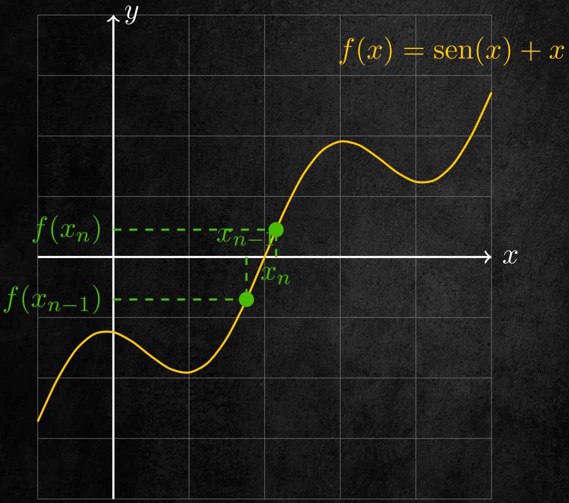
2

$x_{n-1} = 1.2$
$x_n = -0.24$

$x = 0.1521$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$x_n - x_{n-1} = -1.44$

Secante

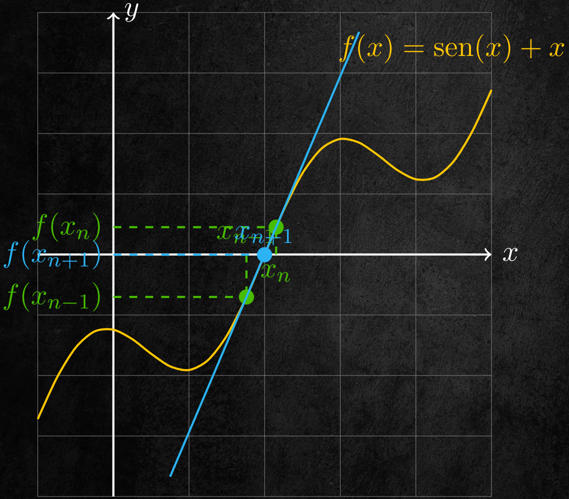


3

$x_{n-1} = -0.24$
$x_n = 0.1521$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$x_n - x_{n-1} = 0.3921$

Secante



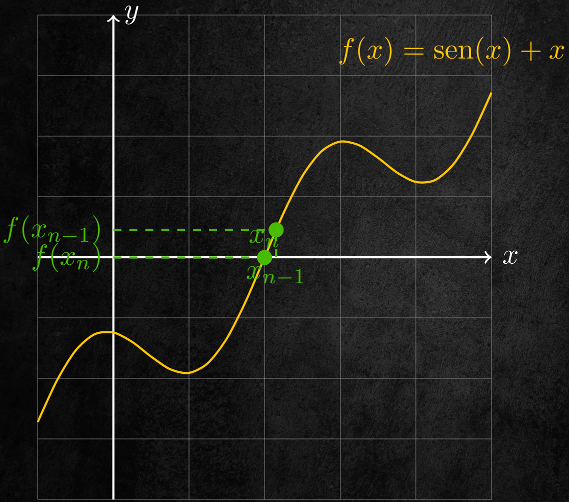
3

$x_{n-1} = -0.24$
$x_n = 0.1521$

$x = -0.00142$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$x_n - x_{n-1} = 0.3921$

Secante

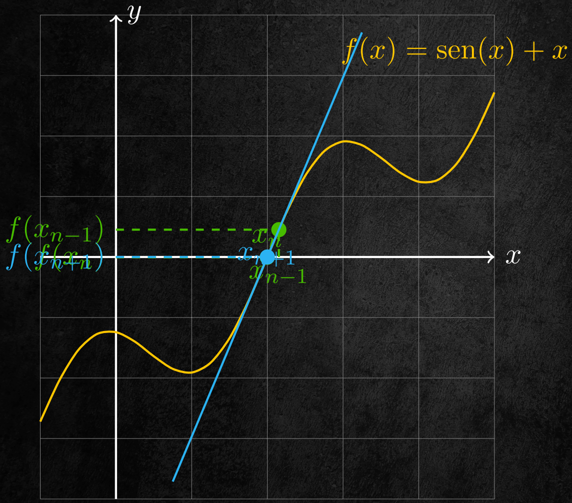


4

$x_{n-1} = 0.1521$
$x_n = -0.00142$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$x_n - x_{n-1} = -0.15352$

Secante



4

$x_{n-1} = 0.1521$
$x_n = -0.00142$

$x = 0.0$

Convergencia: $(\epsilon = 0.4)$
$x_n - x_{n-1} = -0.15352$

✓ ~~Necesitamos conocer la primera derivada de la funcion.~~

- Cuando converge, es más rápido que la bisección.
- Sin "encerramiento" de la solución.
- La convergencia no esta garantizada:

  1. La función varía demasiado en la región (*i.e.* empezamos "lejos" de la raiz).
  2. La derivada se hace cero en alguna iteración.
  3. ¿Se puede encontrar un ciclo infinito.?