Resolución numérica de ecuaciones no lineales

María González Taboada

Departamento de Matemáticas

Abril de 2006

Esquema:

Conceptos previos

- Una ecuación escalar numérica es una expresión de la forma
$$f(x) = 0$$
donde $f \colon A \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

- Cualquier número $\alpha \in A$ que verifica $f(\alpha) = 0$ se llama raíz, cero o solución de la ecuación.

- Si la función f es suficientemente derivable en α, se dice que α es una raíz de multiplicidad m ($m \geq 1$ entero) si
$$f(\alpha) = f'(\alpha) = \ldots = f^{(m-1)}(\alpha) = 0 \qquad f^{(m)}(\alpha) \neq 0$$
- Si $m = 1$, entonces α es una raíz simple.
- Si $m = 2$, entonces α es una raíz doble.

Separación de raíces

- Una raíz α de la ecuación $f(x) = 0$ se dice separada en un subconjunto B de A si es la única raíz de la ecuación en B.
- La separación de las raíces de un ecuación es importante. En general, se realiza antes de aproximarlas.
- Tipos de métodos de separación de raíces:
  - **Métodos gráficos:**
    La observación de la gráfica de la función f permite determinar de forma aproximada intervalos en los que hay una única raíz.
  - **Métodos analíticos:**
    Se basan en resultados de cálculo infinitesimal, como el Teorema de Bolzano y el Teorema de Rolle.

Métodos analíticos de separación de raíces

Teorema:

*(**Bolzano**) Si* $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ *es continua en* $[a, b]$ *y* $f(a)\, f(b) < 0$*, entonces existe al menos un valor* $c \in (a, b)$ *tal que* $f(c) = 0$*.*

Teorema:

Si $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ *es continua en* $[a, b]$ *y* $f(a)\, f(b) < 0$*, entonces:*

1. *La ecuación* $f(x) = 0$ *tiene al menos una raíz* $\alpha \in (a, b)$*.*
2. *Si* f *es estrictamente monótona en* $[a, b]$*, la ecuación* $f(x) = 0$ *tiene una única raíz* $\alpha \in (a, b)$*.*

Métodos analíticos de separación de raíces

Teorema:

*(**Rolle**) Si $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ es continua en $[a, b]$ y derivable en (a, b), entonces:*

- *Si $f(a) = f(b)$, existe al menos un valor $c \in (a, b)$ tal que $f'(c) = 0$.*
- *Si $f'(x) \neq 0, \forall\, x \in (a, b)$, entonces f es estrictamente monótona en $[a, b]$.*

Métodos analíticos de separación de raíces

Teorema:

Si $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ *es continua en* $[a,b]$ *y derivable en* (a,b)*, entonces:*

- *Si* $f(a) = f(b)$*, entonces* f' *tiene al menos un cero en* (a,b)*.*
- *Si* $f'(x) \neq 0, \forall\, x \in (a,b)$*, entonces la ecuación* $f(x) = 0$ *tiene a lo sumo una raíz en* (a,b)*.*

Métodos analíticos de separación de raíces

Otros resultados importantes son:

1. Entre dos raíces consecutivas de f', existe a lo sumo una raíz de f.
2. Si f es suficientemente derivable, el número de ceros de f en (a, b) (contados tantas veces como su multiplicidad) es:
   - impar, si $f(a)\,f(b) < 0$;
   - par o cero, si $f(a)\,f(b) > 0$.

Método de bisección o dicotomía

- El método de bisección o dicotomía se basa en el Teorema de Bolzano.
- En lo que sigue, suponemos que $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ es continua en $[a, b]$ y que $f(a)\, f(b) < 0$.
- En cada paso del método de bisección:
  - Se divide un intervalo dado a la mitad.
  - Se toma como aproximación de la raíz el punto medio del intervalo.
  - Si no hay convergencia, se repite el proceso con la mitad del intervalo en la que, según el Teorema de Bolzano, hay al menos una raíz.

Método de bisección o dicotomía

- **Algoritmo:**

1. Sean $k = 0$, $a_k = a$ y $b_k = b$.
2. Calculamos $x_k = \frac{a_k + b_k}{2}$ y $f(x_k)$.
3. Si $f(x_k) = 0$, entonces x_k es una raíz. Parar.
4. En caso contrario:
    - Si $f(a_k)\,f(x_k) < 0$, hacemos $a_{k+1} = a_k$ y $b_{k+1} = x_k$.
    - Si no, hacemos $a_{k+1} = x_k$ y $b_{k+1} = b_k$.
5. Hacer $k = k + 1$ y volver al paso 2.

* El proceso se repite hasta que se encuentra una aproximación satisfactoria de la raíz o se alcanza un número máximo de iteraciones.

Criterios de parada

- Basado en el error absoluto:

$$|x_k - x_{k-1}| < \epsilon$$

- Basado en el error relativo:

$$|x_k - x_{k-1}| < \epsilon\,|x_k|$$

- Basado en el residuo:

$$|f(x_k)| < \epsilon$$

Método de bisección o dicotomía

- **Convergencia:**

Teorema:

Si $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ es continua en $[a, b]$ y $f(a)\,f(b) < 0$, entonces la sucesión $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ generada por el método de dicotomía converge a una raíz α de la ecuación $f(x) = 0$:

$$x_k \to \alpha \qquad f(\alpha) = 0$$

Método de bisección o dicotomía

- **Estimación del error:**

Teorema:

$$|x_k - \alpha| \leq \frac{b-a}{2^{k+1}}$$

- Fijada una tolerancia de error ϵ, podemos determinar el número máximo de iteraciones necesarias para que el error absoluto sea inferior a ϵ:

$$k = E[\log_2 \frac{b-a}{\epsilon}]$$

Para este valor de k, $|x_k - \alpha| < \epsilon$.

Método de bisección o dicotomía

- Fácil de implementar en el ordenador.
- Bajo las hipótesis del Teorema de Bolzano, el método es convergente y puede predecirse el número máximo de iteraciones necesarias para aproximar la raíz con una determinada precisión.
- La convergencia, en general, es bastante lenta y pueden desecharse buenas aproximaciones intermedias.
- Suele usarse para obtener buenas aproximaciones iniciales para otros métodos más rápidos.

Método de *regula falsi*

- El método de *regula falsi* también se basa en el Teorema de Bolzano.
- En cada iteración, se toma como aproximación de la raíz el punto de corte con el eje de abscisas de la recta que une los extremos de la gráfica de f en el intervalo considerado.
- En lo que sigue, suponemos que
  - $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ es continua en $[a, b]$
  - $f(a)\, f(b) < 0$.
  - α es una raíz separada en $[a, b]$.

Método de *regula falsi*

- En la iteración k, partimos de un intervalo $[a_k, b_k]$ tal que

$$f(a_k)\, f(b_k) < 0$$

- Se toma como aproximación de la raíz el punto de corte con el eje de abscisas de la recta que pasa por los puntos $(a_k, f(a_k))$ y $(b_k, f(b_k))$:

$$x_k = a_k - f(a_k)\frac{b_k - a_k}{f(b_k) - f(a_k)}$$

Método de *regula falsi*

- **Algoritmo:**

1. Sean $k = 0$, $a_k = a$ y $b_k = b$.
2. Calcular
$$x_k = a_k - f(a_k)\frac{b_k - a_k}{f(b_k) - f(a_k)}$$
y $f(x_k)$.
3. Test de parada: si se verifica, parar.
4. En caso contrario:
   - Si $f(a_k)\,f(x_k) < 0$, hacemos $a_{k+1} = a_k$ y $b_{k+1} = x_k$.
   - Si no, hacemos $a_{k+1} = x_k$ y $b_{k+1} = b_k$.
5. Hacer $k = k + 1$ y volver al paso 2.

El proceso se repite hasta que se encuentra una aproximación satisfactoria de la raíz o se alcanza un número máximo de iteraciones.

Método de *regula falsi*

- Habitualmente, se denota $x_0 = a$, $x_1 = b$ y se calculan las aproximaciones a partir de x_2.
- Para detener el algoritmo, puede usarse cualquiera de los criterios de parada que hemos visto.
- La fórmula

$$x_k = \frac{a_k\, f(b_k) - b_k\, f(a_k)}{f(b_k) - f(a_k)}$$

  es menos estable para los cálculos.

  Pueden surgir problemas cuando $f(a_k) \approx f(b_k)$.

Método de *regula falsi*

- **Convergencia:**

Teorema:

Si $f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ *es continua en* $[a,b]$ *y* $f(a)\,f(b) < 0$, *entonces la sucesión* $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ *generada por el método de regula falsi converge a una raíz* α *de la ecuación* $f(x) = 0$*:*

$$x_k \to \alpha \qquad f(\alpha) = 0$$

Métodos de iteración funcional o de punto fijo

- Sea $g\colon [a,b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
- Se dice que $x \in [a,b]$ es un punto fijo de la función g si

$$g(x) = x$$

- Una técnica útil para resolver ecuaciones no lineales consiste en reescribir la ecuación como un problema de punto fijo, es decir, determinar una función g tal que

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow x = g(x)$$

Métodos de iteración funcional o de punto fijo

- **Algoritmo:**
  1. Se parte de una aproximación inicial, x_0, a la raíz.
  2. Para $k \geq 1$,
  $$x_k = g(x_{k-1})$$

- El proceso se repite hasta que se encuentra una aproximación satisfactoria de la raíz o se alcanza un número máximo de iteraciones.

- Para que el algoritmo esté bien definido, la función g debe estar definida en todas las aproximaciones x_k, $k \geq 0$.

Métodos de iteración funcional o de punto fijo

- Se dice que $g\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ es contractiva en $[a,b]$ si existe una constante $\gamma \in [0,1)$ tal que

$$|g(x) - g(y)| \leq \gamma |x - y| \qquad \forall\, x, y \in [a,b]$$

  - Si g es contractiva en $[a,b]$, la distancia entre las imágenes es menor que la distancia entre los originales.
  - La constante γ se llama constante de contractividad.

- Si g es contractiva en $[a,b]$, entonces es continua en $[a,b]$.
- Sin embargo, g puede ser contractiva en $[a,b]$ y no ser derivable en (a,b).

Métodos de iteración funcional o de punto fijo

Teorema:

Si $g\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ *es continua en* $[a,b]$ *y derivable en* (a,b)*, entonces las afirmaciones siguientes son equivalentes:*

1. *La función* g *es contractiva en* $[a,b]$ *con constante de contractividad* γ*.*
2. *Existe una constante* $\gamma \in [0,1)$ *tal que*

$$|g'(x)| \leq \gamma \qquad \forall\, x \in (a,b)$$

Métodos de iteración funcional o de punto fijo

- **Convergencia (global):**

Teorema:

Si $g\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ *es una función tal que:*

1. *Para cualquier* $x \in [a,b]$, $g(x) \in [a,b]$.
2. *La función* g *es contractiva en* $[a,b]$ *con constante de contractividad* γ.

Entonces:

- *La función* g *tiene un único punto fijo* α *en* $[a,b]$.
- *La sucesión* $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ *generada por el algoritmo de iteración funcional converge a* α, *para cualquier* $x_0 \in [a,b]$.

Métodos de iteración funcional o de punto fijo

- **Estimación del error:**

Teorema:

Si $g\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ verifica las hipótesis del Teorema anterior, entonces

$$|x_k - \alpha| \leq \frac{\gamma^k}{1-\gamma}|x_0 - x_1|$$

siendo α el único punto fijo de g en $[a,b]$.

- Cuanto menor es la constante de contractividad, más rápida es la convergencia.

Orden de convergencia

- Sea $(x_k)_k$ una sucesión convergente a cierto número α.
- Se dice que la sucesión $(x_k)_k$ converge a α con orden p si

$$\lim_{k \to +\infty} \frac{|x_k - \alpha|}{|x_{k-1} - \alpha|^p} = \lambda \neq 0$$

La constante λ se llama constante asintótica de error.

  - Cuando $p = 1$, se dice que la convergencia es lineal.
  - Cuando $p = 2$, se dice que la convergencia es cuadrática.

- Se dice que un método numérico es de orden p si genera una sucesión que converge a la solución del problema con orden p.

Orden de convergencia

- **Métodos de iteración funcional:**
  - En las condiciones del Teorema de convergencia global, el método de iteración funcional es al menos de orden 1.
  - Sea $g\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ una función de iteración con un punto fijo α en (a,b). Si $g \in \mathcal{C}^p([a,b])$, $p \geq 1$, y

$$g'(\alpha) = \ldots = g^{(p-1)}(\alpha) = 0 \quad g^{(p)}(\alpha) \neq 0$$

    entonces el método de iteración funcional asociado a la función g es de orden p.

Método de Newton-Raphson

- El método de Newton-Raphson es un método de punto fijo, con
$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$$
- Por tanto, puede analizarse usando los resultados de la sección anterior.
- Un primer requisito para la aplicación de este método es que la función f sea derivable, al menos en un entorno de la raíz.

Método de Newton-Raphson

- **Algoritmo:**

  1. Se parte de una aproximación inicial, x_0, a la raíz.
  2. Para $k \geq 1$,

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

- El proceso se repite hasta que se encuentra una aproximación satisfactoria de la raíz o se alcanza un número máximo de iteraciones.

Método de Newton-Raphson

- En la iteración k, la raíz se aproxima por el punto de corte con el eje de abscisas de la recta tangente a la gráfica de f en el punto $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$:
  - La ecuación de dicha recta tangente es:
  $$y - f(x_{k-1}) = f'(x_{k-1})(x - x_{k-1})$$
  - El punto de corte de esta recta con el eje de abscisas ($y = 0$) es:
  $$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$$

Método de Newton-Raphson

- **Convergencia (global):**

Teorema:

Si $f \in \mathcal{C}^2([a,b])$ *y verifica las propiedades siguientes:*

1. $f(a)\, f(b) < 0$
2. $f'(x) \neq 0 \quad \forall\, x \in [a,b]$
3. $f''(x) \geq 0$ *o* $f''(x) \leq 0 \quad \forall\, x \in [a,b]$
4. *Si* c *es el extremo del intervalo* $[a,b]$ *en el que el valor de* $|f'|$ *es menor, se cumple que*

$$\left|\frac{f(c)}{f'(c)}\right| \leq b - a$$

entonces la sucesión generada por el método de Newton-Raphson está bien definida y converge a la única raíz de f *en el intervalo* (a,b)*, cualquiera que sea* $x_0 \in [a,b]$.

Método de Newton-Raphson

- El método de Newton-Raphson solo puede usarse cuando conocemos la expresión de f' y $f'(x_k) \neq 0 \quad \forall k$.
- Si la raíz que se trata de aproximar no es simple ($f(\alpha) = f'(\alpha) = 0$), el algoritmo puede *explotar*.
- El método de Newton-Raphson es al menos de orden 2 *localmente*, si la raíz que se trata de aproximar es simple.

Variantes del método de Newton

- A veces, la evaluación de la función derivada es costosa.
- En estos casos, pueden usarse variantes del método de Newton-Raphson, que consisten en conservar el valor $f'(x_{k-1})$ fijo durante p iteraciones consecutivas ($p \geq 2$ entero).
- En el método de Newton de paso p,

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{rp})} \qquad rp+1 \leq k \leq (r+1)p \qquad r = 0, 1, \ldots$$

- En el método de Newton simplificado, la derivada solo se evalúa en la primera aproximación ($p = \infty$), es decir,

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_0)} \qquad \forall\, k \geq 1$$

Modificación de Schröder

- Sea α una raíz de multiplicidad m.
- Para valores de m grandes, la convergencia del método de Newton-Raphson puede ser muy lenta.
- Para aumentar el orden de convergencia, puede usarse la modificación propuesta por Schröder en 1870:

$$x_k = \begin{cases} x_{k-1} - m\,\frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} & \text{si } f'(x_{k-1}) \neq 0 \\ x_{k-1} & \text{si } f'(x_{k-1}) = 0 \end{cases}$$

Modificación de Schröder

- **Convergencia local:**

Teorema:

- *Si* f *es de clase* m *en un entorno de* α*, entonces la modificación de Schröder converge a* α *si* x_0 *es suficientemente próximo a la raíz.*
- *Si además* f *es de clase* $m+1$ *en un entorno de* α *y* $f^{(m+1)}(\alpha) \neq 0$*, entonces la convergencia es al menos de orden* 2*.*

Métodos de aceleración de la convergencia

- Supongamos que un método numérico construye una sucesión, $(x_k)_k$, que converge a la solución de cierto problema.
- A continuación, presentamos una técnica que permite acelerar la convergencia de esta sucesión, esto es, construir una nueva sucesión, $(\tilde{x}_k)_k$, que converge a la solución más rápido que la sucesión original $(x_k)_k$.

Método de aceleración de Aitken

- Para $k = 0, 1, 2, \ldots$, denotamos

$$\Delta x_k = x_{k+1} - x_k$$

$$\Delta^2 x_k = \Delta(\Delta x_k) = x_{k+2} - 2\, x_{k+1} + x_k$$

- Definimos la sucesión $(\tilde{x}_k)_k$ como sigue:

$$\tilde{x}_k := x_k - \frac{(\Delta x_k)^2}{\Delta^2 x_k} = x_k - \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{x_{k+2} - 2\, x_{k+1} + x_k}$$

- Si la sucesión $(x_k)_k$ converge a α, entonces la sucesión $(\tilde{x}_k)_k$ converge a α más rápido que la sucesión $(x_k)_k$, es decir,

$$\lim_{k \to +\infty} \frac{|\tilde{x}_k - \alpha|}{|x_k - \alpha|} = 0$$

Método de aceleración de Steffensen

- El método de aceleración de Steffensen se puede utilizar para acelerar la convergencia de métodos de iteración funcional.

- Para calcular los términos de la nueva sucesión, $(\tilde{x}_k)_k$, se utiliza la fórmula de la aceleración de Aitken, pero aplicada a la propia sucesión *acelerada*, es decir,

$$\tilde{x}_k := \tilde{x}_{k-1} - \frac{(g(\tilde{x}_{k-1}) - \tilde{x}_{k-1})^2}{g(g(\tilde{x}_{k-1})) - 2\,g(\tilde{x}_{k-1}) + \tilde{x}_{k-1}}$$

- En la práctica se consiguen resultados comparables a los del método de Newton sin evaluar derivadas. A cambio, se realizan dos evaluaciones de la función g por iteración.

Referencias

1. R.L. Burden y J.D. Faires, *Análisis Numérico*, Thomson Learning, 7ª edición, 2002.
2. J.F. Epperson, *An introduction to numerical methods and analysis*, Wiley, 2002.
3. E. Isaacson y H.B. Keller, *Analysis of numerical methods and analysis*, Wiley, 1966.
4. J.M. Viaño, *Lecciones de Métodos Numéricos. Resolución de ecuaciones numéricas*, Tórculo Edicións, 1997.