Métodos Numéricos

Resolución de Ecuaciones No Lineales y Sistemas de EnL

Diego Passarella

Universidad Nacional de Quilmes

1er Cuatrimestre de 2016

Definiciones

Sea $f(x) \subset C(a, b)$. Se dice que $\alpha \in (a, b)$ es una raíz (o cero) de $f(x) \Leftrightarrow f(\alpha) = 0$.

Una vez que se localizan los intervalos donde hay por lo menos una raíz, se utilizan métodos iterativos consistentes para generar una sucesión que converja a α. $\left\{x^{(k)}\right\}_{k\to\infty} \to \alpha \Rightarrow f(x^{(k)}) \to 0$.

Si $f(x)$ es suficientemente derivable en α, se dice que α es una raíz de multiplicidad m (m ≥ 1, entero) si

$$f(\alpha) = f'(\alpha) = \cdots = f^{(m-1)}(\alpha) = 0 \quad \text{y} \quad f^{(m)}(\alpha) \neq 0$$

Raíces - Separación

- Si α es raíz de $f(x)$, se dice separada en (a, b) si α es la única raíz en (a, b).
- La separación de raíces de una ecuación es muy importante para identificar los intervalos donde buscarlas. Debe realizarse antes de comenzar la búsqueda de la raíz.
- Para localizar los intervalos donde hay raíces separadas se pueden utilizar métodos gráficos o teoremas del cálculo infinitesimal.

Orden de Convergencia

Una sucesión $\{x^{(k)}\}$ generada por un método numérico se dice que converge a α con orden $p \geq 1$ si $\exists C > 0/$:

$$\frac{|x^{(k+1)} - \alpha|}{|x^{(k)} - \alpha|^p} \leq C, \qquad \forall k \geq k_0$$

donde k_0 es un entero convenientemente grande. Si esta relación se cumple, se dice que el método converge con orden p.
Nótese que si $p = 1$, para el que método converja, es necesario que $C < 1$.

Método de Bisección

Estrategia:

Generar una sucesión de intervalos $I^{(k)} = \left[a^{(k)}, b^{(k)}\right]$, cada uno de longitud la mitad del anterior y con la condición de que cada intervalo contenga a α.

Este algoritmo siempre converge.

Solamente es necesario que la función sea continua y posea una única raíz en el intervalo inicial.

Método de Bisección

Algoritmo:

$k = 1$

Proponer $[a^{(0)}, b^{(0)}]$ tal que $f(a^{(0)})f(b^{(0)}) < 0$

Iterar mientras $(|I^{(k)}| > \varepsilon)$ & $(k \leq Nmax)$

$x^{(k)} = (a^{(k)} + b^{(k)})/2$

Si $f(a^{(k)})f(x^{(k)}) < 0$

$a^{(k+1)} = a^{(k)}; \qquad b^{(k+1)} = x^{(k)}$

Si no,

$a^{(k+1)} = x^{(k)}; \qquad b^{(k+1)} = b^{(k)}$

$k = k + 1$

Convergencia

El error absoluto en la $k-$ésima iteración es:

$$e^{(k)} = |x^{(k)} - \alpha| \leq \frac{1}{2}|I^{(k)}| = \frac{1}{2^k}|I^{(0)}|$$

Si se pide $|x - \alpha| < \varepsilon$ como criterio de terminación del algoritmo, vemos que el número mínimo de iteraciones para alcanzarlo dependerá del tamaño inicial del intervalo de búsqueda.

$$e^{(k)} \leq \frac{1}{2^k}|I^{(0)}| < \varepsilon$$

$$2^k > \frac{|I^{(0)}|}{\varepsilon} \quad \rightarrow \quad k > \frac{\log(|I^{(0)}|) - \log(\varepsilon)}{\log(2)}$$

Método de la Secante

Estrategia:

Consta en aproximar a α por medio de la raíz correspodiente a la recta que une dos puntos consecutivos de la sucesión.
Ecuación de la recta:

$$\frac{y - y_2}{x - x_2} = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$$

por lo que tomando los pares de puntos $(x^{(k)}, f(x^{(k)}))$ $(x^{(k-1)}, f(x^{(k-1)}))$ queda:

$$y = \frac{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})}{x^{(k)} - x^{(k-1)}}(x - x^{(k)}) + f(x^{(k)})$$

Método de la Secante

Algoritmo:

$k = 1$

Proponer $[x^{(0)}, x^{(1)}]$ tal que $f(x^{(0)})f(x^{(1)}) < 0$

Iterar mientras $(|x^{(k)} - x^{(k-1)}| > \varepsilon)$ & $(k \leq Nmax)$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{x^{(k)} - x^{(k-1)}}{f(x^{(k)}) - f(x^{(k-1)})} f(x^{(k)})$$

$k = k + 1$

Método de Newton-Raphson

Serie de Taylor centrada en x:

$$f(x+\delta x) = f(x) + \sum_{r=1}^{\infty} f^{(r)}(x)\frac{(\delta x)^r}{r!}$$

Estrategia:

Utilizar el desarrollo de Taylor de primer orden de $f(x^{(k+1)})$ centrado en $x^{(k)}$ para buscar la raíz.

$$f(x^{(k+1)}) = f(x^{(k)}) + (x^{(k+1)} - x^{(k)})f'(x^{(k)})$$

Si se busca que $x^{(k+1)}$ sea cero, por lo tanto se tiene que:

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

Método de Newton-Raphson

- Este algoritmo, junto con el de la secante, dependiendo de $f(x)$, $x^{(0)}$ e $I^{(0)}$ puede llegar a no converger.
- Pueden utilizarse unas primeras iteraciones del método de bisección para acotar el intervalo de búsqueda y luego terminar la búsqueda con el método de Newton-Raphson.
- Posee orden 2 de convergencia, pero es más costoso computacionalmente dado que es necesario conocer $f'(x)$.
- Si α no es una raíz simple, el algoritmo degrada su convergencia a orden 1.
- Si la evaluación de $f'(x^{(k)})$ es muy costosa, puede actualizarse solamente cada $p-$pasos (o ninguno, versión simplificada).
- Si α es una raíz con multiplicidad m, el método recupera el orden 2 de convergencia al considerarse:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - m\frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}$$

Convergencia Absoluta

La convergencia del método de Newton-Raphson se puede garantizar de forma absoluta si se cumple:

Sea $f(x) \subset C^2[a,b]/$:

1. $f(a)f(b) < 0$
2. $f'(x) \neq 0 \quad \forall x \in [a,b]$
3. $f''(x) \leq 0$ ó $f''(x) \geq 0 \quad \forall x \in [a,b]$

Bajo estos supuestos, la convergencia del método se garantiza para todo x_0 que pertenezca a $[a,b]$

Iteración de Fijo Punto

Un punto fijo de la función $g(x) \in C[a,b] \to \mathbb{R}$ es el número α para el cual se cumple que:

$$g(\alpha) = \alpha$$

Si este número existe, se puede obtener por medio de la sucesión:

$$x^{(k+1)} = g(x^{(k)}), \qquad k \geq 0$$

Para la resolución de ecuaciones no lineales, este método se puede utilizar al reescribir $f(x)$ como una función con un punto fijo:

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

Siendo $g(x)$ la función de iteración del método.

Iteración de Fijo Punto

La definición de $g(x)$ no es única. Dependiendo de la elección de $g(x)$ el método puede llegar a no converger.

Convergencia:

Si la función de iteración $g(x)$ cumple las siguientes propiedades:

1. $g(x) \in [a, b] \quad \forall \quad x \in [a, b]$
2. $g(x) \subset C^1[a, b]$
3. $\exists K < 1 \quad / \quad |g'(x)| \leq K \quad \forall \quad x \in [a, b]$

Entonces $g(x)$ poseerá un único punto fijo α en $[a, b]$, al cual convergerá sin importar la elección del valor $x^{(0)}$ en $[a, b]$.

Convergencia

Si se cumplen todos los supuestos anteriores para $g(x)$, ocurre que:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{x^{(k+1)} - \alpha}{x^{(k)} - \alpha} = g'(\alpha)$$

Si además $g(x) \in C^2[a, b]$ con $g'(\alpha) = 0$ y $g''(\alpha) \neq 0$, el método converge como:

$$\lim_{k\to\infty} \frac{x^{(k+1)} - \alpha}{(x^{(k)} - \alpha)^2} = \frac{g''(\alpha)}{2}$$

Ejercicios EnL

Encontrar las raíces reales de las siguentes funciones:

$$f_1(x) = x + e^x + \frac{10}{1+x^2} - 5, \qquad \in [-2, 2]$$

$$f_2(x) = (x-1)\log_{10}(x), \qquad \in (0, 4]$$

$$f_3(x) = \frac{\log(x)}{x}, \qquad \in (0, 4]$$

$$f_4(x) = \cos^2(2x) - x^2, \qquad \in [-3, 3]$$

$$f_5(x) = \frac{1}{2} - \cos^6(6x) + \frac{3}{2}x^2, \qquad \in [-3, 3]$$

$$f_6(x) = x^3 - 4x^2 + 4x - 4, \qquad \in [0, 3]$$

SEnL - Definición del Problema

Sea $\vec{F}(\vec{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ formada por n funciones no lineales $f_i(\vec{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Se busca un $\vec{\alpha}$ tal que $\vec{F}(\vec{\alpha}) = \vec{0}$:

$$\vec{F}(\vec{x}) := \begin{cases} f_1(x_1, x_2, \cdots, x_n) & = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \cdots, x_n) & = 0 \\ \vdots & = \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \cdots, x_n) & = 0 \end{cases}$$

SEnL

Observaciones:

- Generalmente es difícil determinar la existencia y unicidad de la solución.
- Los métodos numéricos empleados requieren una muy buena aproximación inicial de la solución para poder converger (no hay algoritmo de bisección adecuado en $\mathbb{R}^n$).
- La resolución de SEnL es equivalente a resolver un proceso de optimización de una función objetivo $\phi(\vec{x}) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Método de Newton para SEnL

De forma similar para el caso de una $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, se construye una aproximación de $\vec{F}(\vec{x})$ por medio de un polinomio de Taylor de orden 1 en $\mathbb{R}^n$.

$$\vec{P}_1(\vec{x}^{(k+1)}) = \vec{F}(\vec{x}^{(k)}) + \mathcal{J}F(\vec{x}^{(k)}) \left(\vec{x}^{(k+1)} - \vec{x}^{(k)}\right) \approx \vec{0}$$

A partir de esta construcción se genera una sucesión que, si el problema está bien condicionado y el iterante inicial es una buena aproximación, convergerá a una solución.

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - \mathcal{J}F(\vec{x}^{(k)})^{-1}\vec{F}(\vec{x}^{(k)})$$

Método de Newton para SEnL

Matriz Jacobiana:

$$\mathcal{J}F(\vec{x}^{(k)}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1(\vec{x})}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2(\vec{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\vec{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2(\vec{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n(\vec{x})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n(\vec{x})}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n(\vec{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Resolución de la sucesión:

$$\mathcal{J}F(\vec{x}^{(k)})\delta\vec{x}^{(k+1)} = -\vec{F}(\vec{x}^{(k)})$$

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + \delta\vec{x}^{(k+1)}$$

Es importante que el condicionamiento de $\mathcal{J}F(\vec{x}^{(k)})$ sea bajo en cada iteración.

Algoritmo

Propongo iterante inicial x

$F(x)$

$k = 0$

Mientras $(norm(F(x)) > Tol)$ & $(k \leq Nmax)$

Resolver $\mathcal{J}F(\vec{x}^{(k)})\delta\vec{x}^{(k+1)} = -\vec{F}(\vec{x}^{(k)})$

$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + \delta\vec{x}^{(k+1)}$

$k = k + 1$

$\vec{F}(\vec{x}^{(k)})$

Incluir todos los mensajes de error y verificaciones pertinentes.

Método de Newton para SEnL

Comentarios Generales:

- La convergencia no está garantizada.
- Es muy conveniente comenzar a iterar cerca de una solución (en entornos donde $\vec{P}_1(\vec{x})$ sea una buena aproximación de $\vec{F}(\vec{\alpha}) = \vec{0}$).
- Si el problema está condicionado y $\vec{F}(\vec{x})$ es suficientemente regular, el método converge con orden 2.
- Es necesario conocer la matriz Jacobiana y poder evaluarla (complicado para n grandes, ¿Cálculo simbólico?).
- Para simplificar el problema, la matriz Jacobiana puede evaluarse cada $s-$iteraciones ($s \geq 2$). Esto degrada el orden de convergencia. Conveniente por la factorización.

SEnL como un Problema de Optimización

Problema de Optimización:

Encontrar un $\vec{\alpha} \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^n$ tal que:

$$\phi(\vec{\alpha}) \leq \phi(\vec{x}), \qquad \forall \vec{x} \in \mathcal{D}$$

(el problema es equivalente si se plantea $\geq$)
Este problema se puede plantear como encontrar un $\vec{x}$ tal que:

$$\vec{g}(\vec{x}) = \nabla\phi(\vec{x}) = \vec{0}$$

con ∇ el vector gradiente, resultando:

$$\nabla\phi(\vec{x}) = \left(\frac{\partial\phi(\vec{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial\phi(\vec{x})}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial\phi(\vec{x})}{\partial x_n}\right)^t$$

Ejercicios Propuestos

Encontrar la/s solución(es) de:

$$F(x) = \begin{cases} x_1^2 + x_2^2 - 1 \\ 2x_1 + x_2 - 1 \end{cases} \quad (S1)$$

$$F(x) = \begin{cases} x_1^2 + x_2^2 - 1 \\ \sin\left(\frac{\pi}{2}x_1\right) + x_2^3 \end{cases} \quad (S2)$$

Proponer un método para generar aproximaciones iniciales adecuadas para el método de Newton.