Instituto de Estadística
Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

Computación Estadística III

Búsqueda de raíces y Métodos Multivariados tipo Newton

Daira Velandia[1] M. & Juan Zamora O.[2]
[1]daira.velandia , [2]juan.zamora *@pucv.cl*

4 de septiembre de 2018

Búsqueda de raíces

El problema de resolver una ecuación no lineal de la forma:

$$f(x) = 0$$

consiste en encontrar el o los valores de x que la anulan. A éstos se les denomina raíces, ceros o soluciones de la función (reales o complejas).

Clasificación de los problemas de búsqueda de raíces:

1. Determinación de las raíces reales de ecuaciones algebraicas y trascendentes. Los métodos numéricos utilizados para resolver este tipo de problemas sólo permiten determinar el valor de una sola raíz.
2. Determinación de todas las raíces reales y complejas de polinomios. Los métodos numéricos en este rubro determinan sistemáticamente todas las raíces del polinomio.

1 Método gráfico: Consiste en graficar la función y observar dónde cruza el eje de las x. Este valor es donde $f(x) = 0$, por lo tanto es la raíz. **Este método es poco preciso, pero puede utilizarse como punto de partida para otros métodos más sofisticados.**

Ejemplo 1

Sea $f(x) = x^3 + 1$, encuentre la raíz de f.

2 Método de prueba y error: Consiste en elegir un valor de x y evaluar si $f(x)$ es cero. Si no es así se elige otro valor y se evalúa nuevamente. El proceso se repite hasta que se obtenga un valor que proporcione una $f(x)$ igual o cercano a cero bajo determinada tolerancia prestablecida.

Ejemplo 2

Sea $f(x) = x^2 + x - 0{,}3$, encuentre la raíz de f.

3 **Métodos iterativos**: Con base en un algoritmo específico y un valor inicial supuesto para la raíz, x_0 se construye una sucesión de números reales $\{x\}_{n=0}^{\infty} = \{x_0, x_1, \ldots\}$ convergente a la solución x^* de la ecuación. Si el método es adecuado se cumplirá que: $|x_n - x^*| \rightarrow 0$ cuando $n \rightarrow \infty$, en cuyo caso se dice que el método converge a la solución, de lo contrario el método diverge.

4 **Métodos indirectos**: Proporcionan la solución mediante un número finito de operaciones elementales. Por ejemplo, la conocida ecuación para calcular las raíces de un polinomio de segundo grado:

$$f(x) = ax^2 + bx + c = 0 \rightarrow x^* = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Ejemplo 3

Sea $f(x) = x^2 + x - 0{,}3$, encuentre la raíz de f.

Método de la falsa posición

Se puede dar la situación que $f(x_a)$ esté más próxima a cero que $f(x_b)$, entonces la raíz se encuentra más cerca de x_a, esta información es ignorada al aplicar el método de bisección, pues se divide siempre el intervalo a la mitad sin considerar las magnitudes de $f(x_a)$ y $f(x_b)$, de tal manera que la nueva estimación de la raíz en algunas iteraciones puede aproximarse más a la solución, y en otras alejarse, por la cual el método converge lentamente hacia la solución.

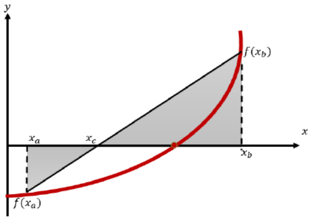
Un método que sí utiliza la información que se va generando en cada iteración al momento de evaluar la función en los valores extremos del intervalo de búsqueda, es el método de la falsa posición, la regla falsa, la cuerda, o también referido como de interpolación lineal.

Método de la falsa posición

- Unir $f(x_a)$ y $f(x_b)$ con una recta.
- La intersección de esta línea con el eje de las abcisas (punto x_c) representa una mejor aproximación a la solución.

$$x_c = x_b - \frac{f(x_b)(x_a - x_b)}{f(x_a) - f(x_b)}$$

- El valor calculado de x_c reemplazará al valor inicial de x_b si se cumple que $f(x_c)f(x_b) > 0$, en caso contrario, sustituye al valor inicial de x_a.
  De esta manera, los valores x_a y x_b siempre encierran a la raíz verdadera.



El hecho de reemplazar la curva por una línea recta da una falsa posición de la raíz.

Algoritmo

Si en el intervalo $[x_a, x_b]$, se cumple que $f(x_a)f(x_b) < 0$, entonces hay una raíz en el mismo

1. Calcular
$$x_c = x_b - \frac{f(x_b)(x_a - x_b)}{f(a) - f(b)}$$

2. Evaluar $f(x_c)$. Si $f(x_c) < tol$, el proceso termina exitosamente.
3. $f(x_c)f(x_b) > 0$ entonces $x_a = x_c$; $f(x_a) = f(x_c)$.
   En caso contrario: $x_b = x_c$; $f(x_b) = f(x_c)$.
   regresar al punto 1.

Desventajas

- No puede estimarse a priori el número de iteraciones necesarias para satisfacer la tolerancia en los cálculos. Sin embargo, puede utilizarse la magnitud de la pendiente de la función como un indicador para saber qué tan alejada se encuentra la raíz de la aproximación actual. Si se cumple que $\frac{f(c)}{f'(c)}$ es ”pequeñaçomparada con el valor de c, entonces se está cerca de la raíz.
- En algunos casos puede presentar problemas de convergencia. Dependiendo de las características de la ecuación a resolver y del intervalo inicial seleccionado, puede ocurrir que uno de los valores iniciales permanezca fijo o estancado durante los cálculos, mientras que el otro converja lentamente (de manera lineal) hacia la raíz.

Método de Illinois

Para resolver los problemas de estancamiento, es común introducir un factor de aceleración (α) en la ecuación de recurrencia.

$$x_c = \alpha \left[x_b - \frac{f(b)(x_a - x_b)}{f(a) - f(b)} \right]$$

Una vez que se ha resuelto el problema, se retoma el método original de la falsa posición en las iteraciones siguientes.
Con la introducción del factor (α) es de esperar que el método sea más eficiente que el de bisección y el de la falsa posición original.

Se han propuesto diferentes alternativas para establecer el valor de alfa, una de éstas es $\alpha = 0{,}5$ Modificación de Illinois

Algoritmo

Una vez identificado un extremo estancado:

1. Calcular

$$x_c = \alpha \left[x_b - \frac{f(x_b)(x_a - x_b)}{f(x_a) - f(x_b)} \right]$$

   donde $\alpha = 0{,}5$
2. Evaluar $f(x_c)$. Si $f(x_c) < tol$, el proceso termina exitosamente.
3. $f(x_c)$ cambió de signo, regresar al método de falsa posición original.
4. Si $f(x_a)f(x_c) > 0$ entonces $x_a = x_c$; $f(x_a) = f(x_c)$. En caso contrario: $x_b = x_c$; $f(x_b) = f(x_c)$.
   regresar al punto 1.

Ejemplo 4

Usar el método de la falsa posición para aproximar la raíz de $f(x) = \frac{1}{2}x^3 + 2x + 1$ comenzando en el intervalo $[-1, 1]$ y hasta $\epsilon < 1\,\%$.

Sea f una función continua en $[a, b]$ y derivable en (a, b).

Si $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos, entonces existe al menos un cero en (a, b).

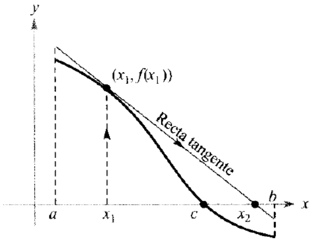
Teorema del valor intermedio

Sea f una función continua en $[a, b]$. Entonces $\forall u$ tal que $f(a) < u < f(b)$, existe al menos un $c \in (a, b)$ tal que $f(c) = u$.

Supongamos que estimamos su posición en

$$x = x_1 \text{ (primera estimación)}$$

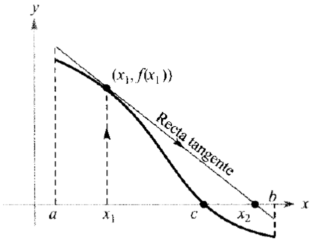
El método de Newton se basa en que la gráfica de f y la recta tangente en $(x_1, f(x_1))$ cruzan ambas el eje x aproximadamente por el mismo punto.



Se calcula la x-intersección de la recta tangente y se usa como segunda estimación (usualmente es mejor que la primera estimación).

La ecuación punto-pendiente de la recta tangente que pasa por en punto $(x_1, f(x_1))$ está dada por

$$y = f^{'}(x_1)(x - x_1) + f(x_1)$$



La derivada de una función $f(x)$, es una función $f^{'}(x)$ que puede ser utilizada para hallar la pendiente de la recta tangente en el punto $(x, f(x))$ de la gráfica de f.

Haciendo $y = 0$ y despejando x se tiene

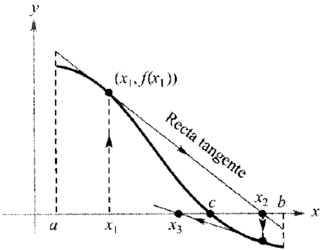
$$x = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

Así, de la primera estimación x_1 hemos pasado a una nueva estimación

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$

Podemos mejorar x_2 y calcular una tercera estimación

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)}$$



La aplicación repetida de éste proceso constituye el método de Newton.

Algoritmo

Sea $f(c) = 0$, donde f es derivable en un intervalo abierto que contiene a c. Para aproximar c pueden seguirse los siguientes pasos:

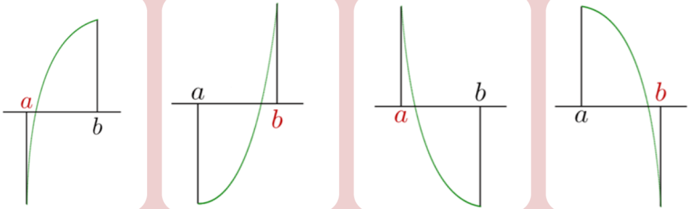
1. Hacer una estimación inicial x_1 "próxima a"c (una gráfica suele ser útil).
2. Determinar una nueva aproximación

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

3. SI $|x_n - x_{n+1}|$ está dentro de la precisión deseada, x_{n+1} sirve como aproximación final. De lo contrario, volver al paso 2 y calcular una nueva aproximación.

Cada repetición de éste proceso se llama iteración.

Escogencia del valor inicial



$f'(x) > 0$
$f''(x) < 0$
$x_0 = a$

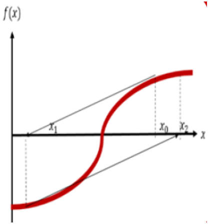
$f'(x) > 0$
$f''(x) > 0$
$x_0 = b$

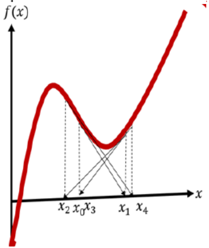
$f'(x) < 0$
$f''(x) > 0$
$x_0 = a$

$f'(x) < 0$
$f''(x) < 0$
$x_0 = b$

Ejemplos

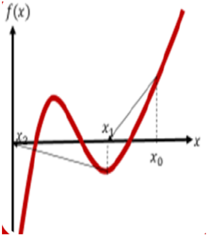
1. Calcular tres iteraciones del método de Newton para aproximar un cero de $f(x) = x^2 - 2$. Usar $x_1 = 1$ como estimación inicial.
2. Aproximar los ceros de $f(x) = x^4 - 10x^2 - 11$ usando el método de Newton, continuando el proceso hasta que dos aproximaciones sucesivas difieran en menos de $0{,}001$.

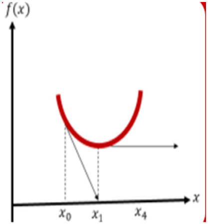




Cuando hay un punto de inflexión en la vecindad de una raíz, las iteraciones que empiezan con x_0 divergen progresivamente de la raíz.

Se mantiene oscilando alrededor de un mínimo o máximo local. Tales oscilaciones pueden persistir o, alcanzar una pendiente cercana a cero, después de lo cual la solución se aleja del área de interés.





Un valor inicial cercano a una raíz salta a una posición varias raíces más lejos. Esta tendencia a alejarse del área de interés se debe a que se encuentran pendientes cercanas a cero.

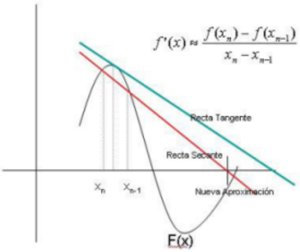
Una pendiente cero causa una división entre cero en la fórmula de Newton, esto significa que la solución se dispara horizontalmente y jamás toca al eje x.

Método de la secante

La forma funcional de $f(x)$ dificulta en ocasiones el cálculo de la derivada, por lo cual resulta inapropiado aplicar el método de Newton para encontrar los ceros de la función.

Una solución es, en lugar de tomar la derivada de la función, aproximarla por una recta secante a la curva, cuya pendiente es aproximadamente igual a la derivada en el punto inicial.

$$f'(x) \approx \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$



Entonces se deben conocer dos puntos de la función para poder generar dicha recta.

Teniendo ya una aproximación de la derivada, podemos reemplazarla en

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \text{ (paso 2. algoritmo de Newton)}$$

y obtener

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

Debido a que no se necesita que $f(x)$ cambie de signo entre los valores dados, este método se clasifica como un método abierto.

Algoritmo

Sea $f(x)$ una función con x_n y x_{n-1} dos valores iniciales

1. Calcular $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)(x_{n+1} - x_n)}{f(x_{n+1}) - f(x_n)}$
2. Si $f(x_{n+1}) < tol$, entonces el procedimiento termina de manera exitosa.
3. De no cumplirse el criterio de paro, tomar $x_{n+1} = x_n$ y $x_n = x_{n-1}$ y regresar al paso 1.

Ejemplo

Aproximar los ceros de $f(x) = Sen(\frac{x}{2}) - 5e^{-x}$ usando el método de la secante, continuando el proceso hasta que dos aproximaciones sucesivas difieran en menos de $0{,}001$.

Métodos Multivariados tipo Newton

Determinar los valores $x_1, x_2, \ldots, x_n$ que en forma simultánea satisfacen un sistema de ecuaciones no lineales

$$f(\mathbf{x}) = 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{r} f_1(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \end{array} \right\}$$

Para dos variables

$$f(\mathbf{x}) = 0 \rightarrow \left\{ \begin{array}{r} f_1(x, y) = 0 \\ f_2(x, y) = 0 \end{array} \right\}$$

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= x^k + h \\ y^{k+1} &= y^k + h \end{aligned}$$

Para los valores de h y j se resuelve el siguiente sistema de ecuaciones lineales, donde h y j son las incognitas

$$\frac{\partial f_1}{\partial x} h + \frac{\partial f_1}{\partial y} j = -f_1(x^k, y^k)$$
$$\frac{\partial f_2}{\partial x} h + \frac{\partial f_2}{\partial y} j = -f_2(x^k, y^k)$$

También se puede usar

$x^{k+1} = x^k - \frac{f_1 \frac{\partial f_2}{\partial y} - f_2 \frac{\partial f_1}{\partial y}}{\frac{\partial f_1}{\partial x}\frac{\partial f_2}{\partial y} - \frac{\partial f_1}{\partial y}\frac{\partial f_2}{\partial x}}$

$y^{k+1} = y^k - \frac{f_2 \frac{\partial f_1}{\partial y} - f_1 \frac{\partial f_2}{\partial y}}{\frac{\partial f_1}{\partial x}\frac{\partial f_2}{\partial y} - \frac{\partial f_1}{\partial y}\frac{\partial f_2}{\partial x}}$ El denominador es el determinante del Jacobiano.

Para el termino de error se puede utilizar

$$|x^{k+1} - x^k| < tol$$