

Capítulo 2

Raíces de ecuaciones no lineales

2.1. Introducción

El problema matemático que tratamos en este capítulo es el siguiente: dada una función continua $f(x)$, encontrar el valor x_0 de x , para el cual $f(x_0) = 0$. Suponemos que tanto x como $f(x)$ son reales, aunque algunos de los algoritmos que veremos son válidos para funciones complejas analíticas de variable compleja. Los valores x_0 para los que se cumple

$$f(x_0) = 0$$

se denominan raíces de la ecuación.

2.2. Método de bisección

El método de bisección se basa en la aplicación directa del Teorema de Bolzano: Si tenemos una función continua $f(x)$ y dos puntos a y b tales que $f(a) \cdot f(b) < 0$, entonces existe un punto $c \in [a, b]$ tal que $f(c) = 0$. Para aplicar el método de la bisección hace falta encontrar dos puntos en los que la función tome valores opuestos, lo cual se consigue en general mediante exploración de la función mediante, por ejemplo, un programa de representación gráfica. El acotamiento de la raíz entre dos puntos donde la función toma valores opuestos se denomina *horquillado* de la raíz. Una vez que estos dos valores se conocen, se elabora en siguiente método iterativo: Se define $x_0 = a$, $x_1 = b$ y

$$x_2 = \frac{a + b}{2}$$

es decir, x_2 es el punto medio del intervalo. Ahora se hace la siguiente redefinición: Si $f(x_0) \cdot f(x_2) < 0$, $x_2 \rightarrow x_1$ y en caso contrario $x_1 \rightarrow x_0$ y $x_2 \rightarrow x_1$ donde la flecha indica que el segundo símbolo toma el valor del primero. Es decir, nos quedamos con un nuevo par de puntos x_0, x_1 en los cuales la función toma valores opuestos. El intervalo inicial tiene una longitud igual a $|a - b|$. Si por casualidad $f(x_2) = 0$, dentro de la precisión numérica de nuestro ordenador (es decir todos los bits de $f(x_2)$ son nulos), entonces se toma x_2 como la raíz. En caso

contrario, se realiza una nueva iteración. Vemos que este procedimiento lo que hace es definir una sucesión $x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n$ que cumple que la distancia entre dos puntos sucesivos es $|x_n - x_{n-1}| = |a - b|/2^n$ y que converge a la raíz α , en la cual $f(\alpha) = 0$, salvo que la encontremos accidentalmente en una de las iteraciones y la sucesión se pare. Cuando este procedimiento lo realizamos mediante un programa de ordenador debemos de definir criterios que nos digan cuando debemos parar el cálculo de términos de la sucesión. Un primer criterio es parar las iteraciones cuando la distancia a la raíz sea menor que una tolerancia preestablecida δ . Es decir, si $|x_n - x_{n-1}| < \delta$, paramos el cálculo y aceptamos x_n como el valor de la raíz. Un segundo criterio, que puede ser necesario establecer simultáneamente con el primero, o como único criterio, es que el valor de la función sea menor que una determinada tolerancia ε , es decir $|f(x_n)| < \varepsilon$. Si lo que nos interesa es que esta función se anule, este último será el criterio a seguir. El método de la bisección permite determinar, sin necesidad de calcular las aproximaciones sucesivas a la raíz, el número de iteraciones necesario para alcanzar la tolerancia δ ; este número n_{max} viene dado por la solución de la ecuación

$$\delta = \frac{|a - b|}{2^{n_{max}}}$$

que es

$$n_{max} = \frac{1}{\ln 2} \ln \left(\frac{|a - b|}{\delta} \right)$$

El método de la bisección es un método robusto, que converge en todos los casos. Sin embargo, no es un método eficiente. Ello es debido a que no utiliza ninguna información sobre el comportamiento de la función.

Por último, el método de bisección necesita relativamente pocas precauciones en su programación. Una de ellas es evitar cálculos innecesarios de la función cuando se verifica el cumplimiento de la condición $f(x_0) \cdot f(x_2) < 0$. Para ellos, debemos almacenar los valores $f(x_0)$, $f(x_1)$ y $f(x_2)$ en variables f_0 , f_1 y f_2 .

2.3. Método de la regla falsi.

El método de bisección no tiene en cuenta el comportamiento de la función $f(x)$ a la hora de calcular el punto x_2 . El método de la *régula falsi* determina x_2 como el punto de corte con el eje de abscisas de la recta que pasa por los puntos $(x_0, f(x_0))$ y $(x_1, f(x_1))$. Esta recta, que es la secante a la curva que pasa por estos dos puntos, la escribimos como $y = mx + p$, y los parámetros m y p vienen determinados por las condiciones

$$\begin{aligned} f(x_0) &= mx_0 + p \\ f(x_1) &= mx_1 + p \end{aligned}$$

que da como solución

$$\begin{aligned} m &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \\ p &= \frac{f(x_0)x_1 - f(x_1)x_0}{x_1 - x_0} \end{aligned}$$

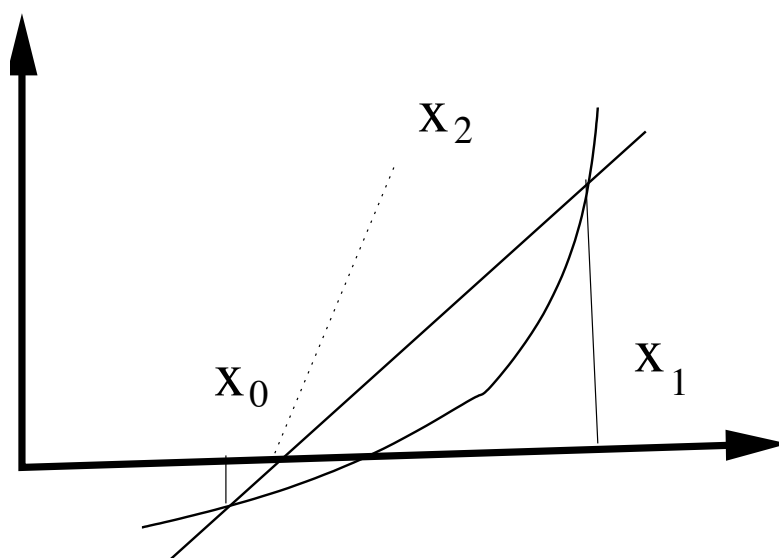


Figura 2.1: Ilustración del método de la regla falsi

el punto de corte se obtiene de la ecuación $mx_2 + p = 0$, que da como resultado

$$x_2 = -\frac{p}{m} = \frac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1}{f(x_1) - f(x_0)} = \frac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1 + f(x_1)x_1 - f(x_1)x_1}{f(x_1) - f(x_0)} = x_1 - \frac{f(x_1)}{f(x_1) - f(x_0)}(x_1 - x_0)$$

El método de la regla falsi exige mantener el horquillado a lo largo del proceso iterativo, es decir, si $f(x_2) \cdot f(x_1) < 0$, $x_2 \rightarrow x_1$ y $x_1 \rightarrow x_0$; en caso contrario $x_2 \rightarrow x_1$ y $x_0 \rightarrow x_2$. El proceso se repite iterativamente hasta alcanzar convergencia. El método de la regla falsi converge usualmente mucho más rápido que el método de bisección.

2.4. Método de la secante

El método de la secante es en cierta forma similar al método de la regla falsi, en el sentido de que calcula la sucesión

$$x_{r+1} = x_r - \frac{f(x_r)}{f(x_r) - f(x_{r-1})}(x_r - x_{r-1})$$

a partir de dos valores iniciales x_0 y x_1 . La diferencia esencial es que no se requiere horquillado, simplemente se calcula la sucesión hasta que se alcanza la convergencia. Frecuentemente el método de la secante es más rápido que el método de la regla falsi, aunque algo menos robusto. Esto sucede en particular cuando hay un cambio brusco de pendiente a uno de los lados de la raíz. La convergencia es más rápida si todos los puntos de la sucesión x_r están en la zona de mayor pendiente de la función $f(x)$. En determinadas ocasiones el método de la secante converge rápidamente mientras que el de la regla falsi converge lentamente. En otras, el método de la secante puede diverger, lo que no ocurre nunca con el método de la regla falsi.

2.5. Método de Müller

El método de la regla falsi toma como raíz de la función $f(x)$ la raíz de una función que pasa por dos puntos de la misma, es decir la raíz de la secante. El método de Müller aproxima la raíz de la función por la raíz del polinomio de segundo grado que pasa por tres puntos de dicha función. Tomemos dos puntos, x_0 y x_1 que horquillen la raíz, y determinemos x_2 por un método cualquiera, como por ejemplo bisección o preferentemente regla falsi. La raíz del polinomio que pasa por los tres puntos x_0 , x_1 y x_2 se toma como una nueva aproximación a la raíz. Si escribimos este polinomio interpolador como

$$P(x) = a(x - x_2)^2 + b(x - x_2) + c$$

la nueva aproximación a la raíz viene dada por la solución de $P(x_3) = 0$, dada por

$$x_3 - x_2 = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

Tomamos el signo que haga la diferencia $x_3 - x_2$ más pequeña en valor absoluto. El procedimiento se repite iterativamente, redenominando $x_3 \rightarrow x_2$, $x_2 \rightarrow x_1$ y $x_1 \rightarrow x_0$. Los coeficientes a , b y c se determinan de las condiciones $P(x_0) = f(x_0)$, $P(x_1) = f(x_1)$, $P(x_2) = f(x_2)$ que dan como resultado

$$\begin{aligned} a &= \frac{(x_1 - x_2)[f(x_0) - f(x_2)] - (x_0 - x_2)[f(x_1) - f(x_2)]}{(x_0 - x_2)(x_1 - x_2)(x_0 - x_1)} \\ b &= \frac{(x_0 - x_2)^2[f(x_1) - f(x_2)] - (x_1 - x_2)^2[f(x_0) - f(x_2)]}{(x_0 - x_2)(x_1 - x_2)(x_0 - x_1)} \\ c &= f(x_2) \end{aligned}$$

como se puede verificar fácilmente de forma directa o por los métodos de interpolación del capítulo 6.

El método de Müller converge bastante rápidamente. Además, se puede utilizar en el caso de raíces complejas. Para evitar overflows cuando a es muy pequeño, es conveniente escribir $x_3 - x_2$ como

$$x_3 - x_2 = \frac{2c}{-b \mp \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

tomando el signo que haga máximo el módulo del denominador. El método de Müller puede tomar como valores de comienzo números complejos, en cuyo caso sirve para obtener raíces complejas. El uso de la clase *complex* del C++ facilita mucho la programación del álgebra compleja.

Ejemplo: Vamos a comparar los métodos de bisección, regla falsi, secante y Müller para la ecuación $x - e^{-x} = 0$. La raíz, con 7 cifras decimales exactas es $\alpha = 0,5671433$. Tomando $[0,1]$ como intervalo inicial, los diferentes métodos dan los resultados siguientes

Método Bisección

iteracion	x	f(x)
1	0.5	-0.1065307
2	0.75	0.2776334
3	0.625	0.08973857
4	0.5625	-0.007282825
5	0.59375	0.04149755
6	0.578125	0.01717584
7	0.5703125	0.00496376
8	0.5664062	-0.001155202
9	0.5683594	0.00190536
10	0.5673828	0.0003753492
11	0.5668945	-0.0003898588
12	0.5671387	-7.237912e-06
13	0.5672607	0.0001840599
14	0.5671997	8.841203e-05
15	0.5671692	4.058732e-05
16	0.5671539	1.667477e-05
17	0.5671463	4.718446e-06

Metodo secante

iteracion	x	f(x)
1	0.6126998	0.07081395
2	0.5638384	-0.005182355
3	0.5671704	4.241924e-05
4	0.5671433	2.538017e-08

Metodo Regula Falsi

iteracion	x	f(x)
1	0.6126998	0.07081395
2	0.5721814	0.007888273
3	0.5677032	0.000877392
4	0.5672056	9.757273e-05
5	0.5671502	1.085062e-05
6	0.5671441	1.206646e-06

Metodo Muller

iteracion	x	f(x)
1	0.6126998	0.07081395
2	0.5678311	0.001077767
3	0.5671426	-1.142242e-06
4	0.5671433	2.134071e-12

Tabla 2.1: Convergencia de $x_{r+1} = e^{-x_r}$

iteración	0	1	2	3	4	5	6	10	20	25
x_r	1		0.692201	0.500474	0.606244	0.545396	0.579612	0.568429	0.567148	0.567143

Vemos que el método de la secante y el método de Müller dan 7 cifras decimales exactas o más en 4 iteraciones, mientras que el método de la regla falsi necesita 6 iteraciones para alcanzar esa precisión y el método de la bisección necesita 17 iteraciones para dar 5 cifras decimales exactas. El método de Müller es el único que da 5 cifras decimales en la tercera iteración, y tres cifras decimales en la segunda iteración. También produce una mayor anulación de la función en una iteración dada que los otros métodos.

2.6. Métodos iterativos de un punto

Estos métodos se basan en escribir la ecuación $f(x) = 0$ como $x = g(x)$. Esto es siempre posible, pues podemos poner $x = x - f(x)$, con lo que $g(x) = x - f(x)$. La filosofía del método es que la ecuación

$$x = g(x) \quad (2.1)$$

que sólo se cumple para la raíz α , sirve para definir la serie

$$x_{r+1} = g(x_r)$$

partiendo de un punto inicial x_0 , que converge a la raíz. Por supuesto, esto sólo ocurre si $g(x)$ cumple una serie de condiciones. Sea α la raíz. Entonces $g(\alpha) = \alpha$. Las diferencias entre los elementos de la serie x_r y la raíz viene dada por:

$$x_r - \alpha = g(x_{r-1}) - g(\alpha) = g'(\xi)(x_{r-1} - \alpha)$$

donde, en el último paso, hemos aplicado el teorema del valor medio. Si $g'(\xi)$ es estrictamente menor que 1, es decir si $|g'(\xi)| \leq L < 1$, entonces se cumplirá

$$|x_r - \alpha| \leq L^r |x_0 - \alpha|$$

y como $L^r \rightarrow 0$ cuando $r \rightarrow \infty$, la serie converge. Por lo tanto, la derivada de la función $g(x)$ determina la convergencia del método. Con frecuencia, el método converge lentamente. Consideremos por ejemplo la ecuación $x = e^{-x}$. Si tomamos $x = 1$ como punto de partida, obtenemos los resultados de la tabla 2.1. Vemos que en este caso el método converge lentamente en comparación con los métodos de la secante, regla falsi y Müller, y su velocidad de convergencia es comparable al método de la bisección. Sin embargo, este método constituye una base teórica para la derivación de métodos de orden superior, por lo que vamos a estudiar sus propiedades en cierto detalle.

Tabla 2.2: Convergencia de la relación $x_{r+1} = \frac{3x_r + 5e^{-x_r}}{8}$

iteración r	0	1	2	3	4	5
x_r	1	0.604925	0.568169	0.567144	0.567143	0.567143

2.7. Métodos de aceleración

Hemos visto que para que el método converja, el requerimiento esencial es que $g'(x)$ sea pequeña cerca de la raíz. Un método de aceleración consiste en una transformación de la función $g(x)$ de forma que se cumpla este requerimiento. Para ello consideremos la siguiente transformación trivial de la ecuación 2.1

$$x + \lambda x = \lambda x + g(x)$$

que la podemos reescribir en la forma

$$x = \frac{1}{1 + \lambda}(\lambda x + g(x)) \equiv G(x)$$

La condición de convergencia es por lo tanto $G'(x) \simeq 0$, o lo que es lo mismo

$$\lambda + g'(x) \simeq 0$$

cerca de la raíz. Por lo tanto, debemos de tomar λ próximo a $-g'(\alpha)$. Consideremos el ejemplo de la tabla 2.1. Podemos tomar como próximo a la raíz $\lambda = 0,6$. Entonces tenemos la relación de recurrencia

$$x_{r+1} = \frac{1}{1,6}(0,6x_r + e^{-x_r}) = \frac{3x_r + 5e^{-x_r}}{8}$$

Esta relación converge mucho más rápidamente como se puede ver en la tabla 2.2. En sólo 5 iteraciones se ha alcanzado el resultado con 5 cifras decimales exactas, que necesita 25 iteraciones si no se emplea el método de aceleración.

2.7.1. Método de aceleración de Aitken

Este método, propuesto por Aitken en 1926, se basa en requerir condiciones equivalentes a $g'(\alpha) = 0$. La idea de partida es que $g(x)$ es aproximadamente lineal cerca de la raíz. Si $g'(x)$ es una constante Γ , $g(x) = a + \Gamma(x - \alpha)$ es una función lineal de x . De la relación

$$x_{r+1} - \alpha = g(x_r) - g(\alpha) = g'(\beta_r)(x_r - \alpha) = \Gamma(x_r - \alpha)$$

se cumple para el cociente de los errores $e_r = x_r - \alpha$ la relación

$$\frac{e_{r+1}}{e_r} = \frac{e_r}{e_{r-1}} = \Gamma$$

que proporciona una ecuación para α conocidos tres términos de la serie. El método de Aitken se basa en reemplazar la raíz α por un número x_{r+1}^* que cumpla la relación anterior. Este número será próximo a la raíz si la función G tiene un comportamiento suave cerca de la raíz, es decir no demasiado distinto de la forma lineal. Tendremos por lo tanto la relación

$$\frac{x_{r+1} - x_{r+1}^*}{x_r - x_{r+1}^*} = \frac{x_r - x_{r+1}^*}{x_{r-1} - x_{r+1}^*}$$

cuya solución proporciona para x_{r+1}^*

$$x_{r+1}^* = \frac{x_{r+1}x_{r-1} - x_r^2}{x_{r+1} - 2x_r + x_{r-1}} = x_{r+1} - \frac{(x_{r+1} - x_r)^2}{x_{r+1} - 2x_r + x_{r-1}}$$

La aplicación de esta transformación a los términos x_r de una sucesión proporcionada por un método iterativo que converge a la raíz, se conoce como método de aceleración de Aitken, quien lo publicó en 1926. En términos del operador diferencia regresiva $\nabla x_r = x_r - x_{r-1}$ podemos escribir la relación anterior como:

$$x_{r+1}^* = x_{r+1} - \frac{(\nabla x_{r+1})^2}{\nabla^2 x_{r+1}}$$

La manera más eficiente de utilizar este método es tomar x_{r+1}^* como nuevo punto de partida y realizar tres nuevas iteraciones a las que se vuelve a aplicar el método de aceleración. Este método, consistente en aplicar sistemáticamente el método de aceleración de Aitken cada tres iteraciones, converge en general muy rápidamente. En la figura 2.2 se presenta un diagrama de flujo del método de Aitken.

2.8. Métodos de orden superior

Cuando tenemos un método iterativo

$$x_{r+1} = g(x_r)$$

que converge a una raíz α , lo podemos escribir en función de los errores que separan la iteración x_r de la raíz. Escribimos

$$x_r = \alpha + e_r$$

con lo que nos queda para la anterior ecuación

$$e_{r+1} + \alpha = g(e_r + \alpha)$$

Desarrollando en serie de Taylor, obtenemos

$$e_{r+1} + \alpha = g(\alpha) + g'(\alpha)e_r + \frac{1}{2}g''(\alpha)e_r^2 + \cdots + \frac{1}{k!}g^{(k)}(\alpha)e_r^k + \frac{1}{(k+1)!}g^{(k)}(\xi)e_r^{k+1}$$

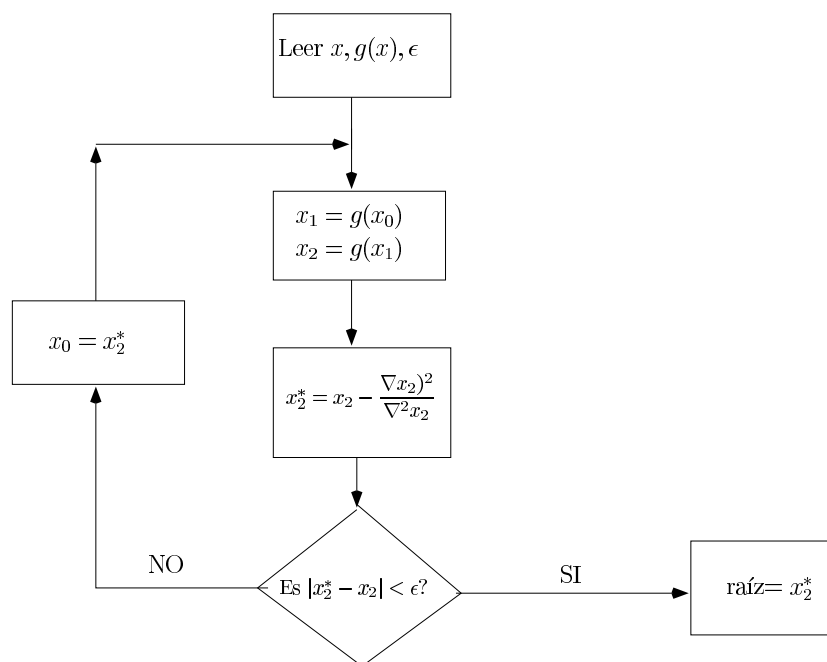


Figura 2.2: Diagrama de flujo del método de Aitken

de donde, teniendo en cuenta que $g(\alpha) = \alpha$, queda

$$e_{r+1} = g'(\alpha)e_r + \frac{1}{2}g''(\alpha)e_r^2 + \cdots + \frac{1}{k!}g^{(k)}(\alpha)e_r^k + \frac{1}{(k+1)!}g^{(k+1)}(\xi)e_r^{k+1}$$

Observamos que si las primeras $k-1$ derivadas se anulan,

$$e_{r+1} \simeq \frac{1}{k!}g^{(k)}(\alpha)e_r^k$$

para e_r pequeño. Decimos entonces que el método es de orden k . Un procedimiento de desarrollar métodos de orden superior es mediante la introducción de parámetros que se fijan de forma que las derivadas de la función $g(x)$ se anulen en la raíz.

2.9. Método de Newton

Vamos a desarrollar un método de segundo orden. Para ello escribimos la ecuación

$$f(x) = 0$$

como

$$x = x - f(x)$$

y le aplicamos el método de aceleración expuesto anteriormente, introduciendo un parámetro λ ,

$$x + \lambda x = \lambda x + x - f(x)$$

$$x = \frac{\lambda}{1+\lambda}x + \frac{1}{1+\lambda}(x - f(x)) = G(x) \quad (2.2)$$

Imponiendo que $G'(\alpha) = 0$ tenemos que el parámetro λ debe satisfacer:

$$\frac{\lambda}{1+\lambda} + \frac{1}{1+\lambda}(1 - f'(\alpha)) = 0 \quad (2.3)$$

$$\lambda = f'(\alpha) - 1$$

y sustituyendo este valor de λ en la ecuación 2.2 obtenemos la relación

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

que sugiere el método iterativo

$$x_{r+1} = x_r - \frac{f(x_r)}{f'(x_r)}$$

que es un método de segundo orden, ya que

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

cumple

$$G'(x) = 1 - \frac{f'(x)}{f'(x)} + \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2} = \frac{f(x)f''(x)}{[f'(x)]^2}$$

que se anula en la raíz α , ya que $f(\alpha) = 0$. Este método de segundo orden se conoce con el nombre de método de Newton, quien lo derivó de forma geométrica. Newton tomó el punto x_{r+1} como el punto en el que la tangente en $f(x_r)$ corta al eje de abscisas. Para comprobar que este requerimiento da la misma relación, escribimos la recta tangente a $f(x)$ en el punto x_0 como,

$$y = mx + b$$

con $m = f'(x_0)$. Como la recta tangente pasa por el punto $(x_0, f(x_0))$, la ordenada en el origen b viene dada por

$$b = f(x_0) - f'(x_0)x_0$$

El punto de intersección x_1 de la recta tangente con el eje de abscisas ($y = 0$), es la solución de la ecuación:

$$f'(x_0)x_1 + f(x_0) - f'(x_0)x_0 = 0$$

que viene dada por:

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

El método de Newton es muy utilizado debido a su rápida convergencia, aunque falla con facilidad, es decir no es un método robusto, ya que se deben de cumplir condiciones relativamente estrictas para que converja. El método de Newton converge si se cumplen las siguientes tres condiciones para la función $f(x)$:

Tabla 2.3: Convergencia del método de Newton para $f(x) = x - e^{-x}$

iteración	0	1	2	3
x_r	0	0.537882	0.566987	0.5671433
$f(x_r)$	0.6321	-0.04610	-0.00024	$-6.9 \cdot 10^{-9}$

- i. Existen dos puntos a y b en los que $f(a) \cdot f(b) < 0$.
- ii. $f''(x)$ no cambia de signo en $[a, b]$.
- iii. Las tangentes a $f(x)$ en a y b cortan al eje de abscisas en $[a, b]$.

Si no se cumplen estas condiciones, el método puede todavía converger, aunque no se puede garantizar nada. En particular, cuando $f'(x)$ se hace muy pequeña en el intervalo comprendido entre el punto de partida y la raíz, el punto dado por la iteración siguiente tiene un valor muy grande, puesto que la tangente es casi paralela al eje de abscisas, y en estos casos el método diverge. Debido a la rápida convergencia del método de Newton cuando converge, un algoritmo eficiente es comenzar con este método y continuar con otro más robusto, como bisección o regla falsi, si se produce una divergencia.

Notemos que el método de Newton se reduce al método de la secante si se reemplaza $f'(x_r)$ por

$$\frac{f(x_r) - f(x_{r-1})}{x_r - x_{r-1}}$$

Como la exactitud de esta substitución aumenta a medida que nos acercamos a la raíz, vemos que el método de la secante converge al de Newton.

En la tabla se dan las primeras tres iteraciones del método de Newton para nuestro caso test de la ecuación $x - e^{-x} = 0$. Vemos que el método converge más rápido que el método de Müller, y que proporciona 7 cifras exactas en tres iteraciones.

El método de Newton es ampliamente utilizado para diseñar algoritmos para procesadores matemáticos. Vamos a considerar aquí el algoritmo de obtención de la raíz cuadrada de un número. Este problema es equivalente al de encontrar la raíz de la ecuación no lineal

$$x^2 - c = 0$$

El método de Newton conduce a la serie iterativa

$$x_{r+1} = x_r - \frac{x_r^2 - c}{2x_r} = \frac{1}{2} \left(\frac{x_r^2 + c}{x_r} \right) = \frac{1}{2} \left(x_r + \frac{c}{x_r} \right)$$

Para aumentar la eficiencia del algoritmo se tiene en cuenta que cualquier número c se puede poner en la forma $c = 4^n s$, con $1/4 \leq s < 1$. Puesto de esta forma, que implica sólo dividir por 4 hasta que lleguemos a un valor de s adecuado, tenemos que la raíz viene dada por

$$\sqrt{c} = 2^n \sqrt{s}$$

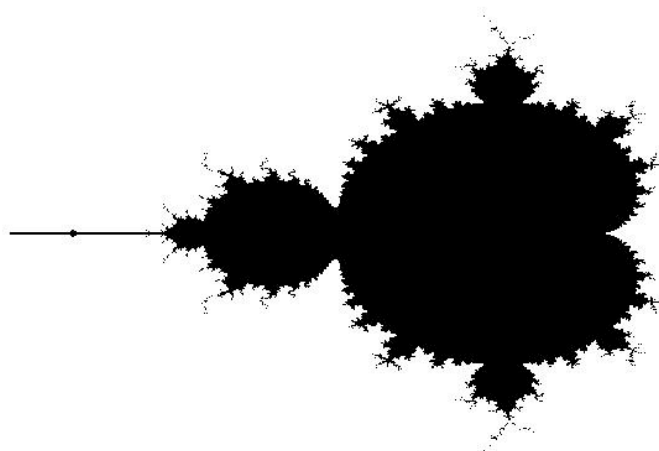


Figura 2.3: Conjunto de Mandelbrot. Los límites de la figura son -2.25 y 0.75 en el eje x, y -1.5 y 1.5 en el eje y.

Por lo tanto basta aplicar el método al intervalo $[1/4, 1]$. Como punto de partida x_0 se toma una aproximación a \sqrt{x} en este intervalo. Una aproximación adecuada es

$$x_0 = \frac{2}{3}s + \frac{17}{48}$$

obtenida por el método de ajuste conocido como minimax, y que cumple $|x_0 - s| \leq \frac{1}{48}$ en $[1/4, 1]$.

El método de Newton se puede aplicar a raíces complejas; para ello hay que dar un punto de partida en el plano complejo. De hecho, la aplicación del método de Newton a raíces complejas ha sido muy fructífero en el campo de los fractales. Si existen varias raíces, el plano complejo se puede dividir en zonas de convergencia a las raíces y en zonas de divergencia. Las fronteras entre las zonas de convergencia y divergencia exhiben un comportamiento *fractal*, caracterizado por patrones que se repiten indefinidamente cuando se disminuye la escala de observación, al estilo de las muñecas rusas. El célebre conjunto de Mandelbrot, mostrado en la figura 2.3, no es otra cosa que la zona de convergencia en el plano de c de la ecuación iterativa $z_{n+1} = z_n^2 + c$, comenzando en $z_0 = 0$. Esto es equivalente al conjunto de puntos c del plano complejo para los que de la ecuación $z - z^2 - c = 0$ es soluble por el método iterativo de un punto $z = g(z)$, con $g(z) = z^2 + c$, partiendo del valor inicial $z_0 = 0$. En la figura 2.4 se muestra el conjunto de Mandelbrot coloreando las zonas de divergencia según la velocidad de divergencia.

Otras ecuaciones muy simples producen figuras de asombrosa complejidad. Por ejemplo, al aplicar el método de Newton a ecuaciones de la forma $z^n - 1 = 0$, representando cada punto del plano de un color, según que cuando se parte de este punto se obtenga convergencia o divergencia, se obtienen figuras de asombrosa complejidad, como la mostrada en la figura 2.9. En esta figura,

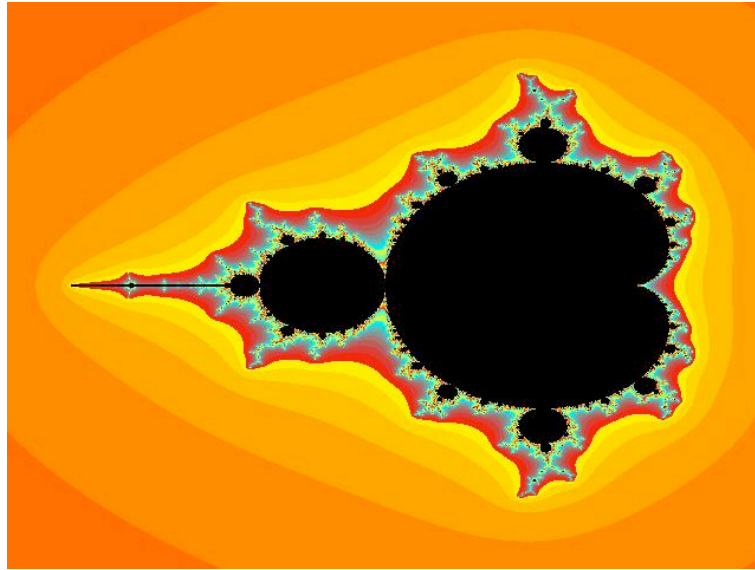


Figura 2.4: Conjunto de Mandelbrot coloreando las zonas de divergencia según la velocidad de divergencia.

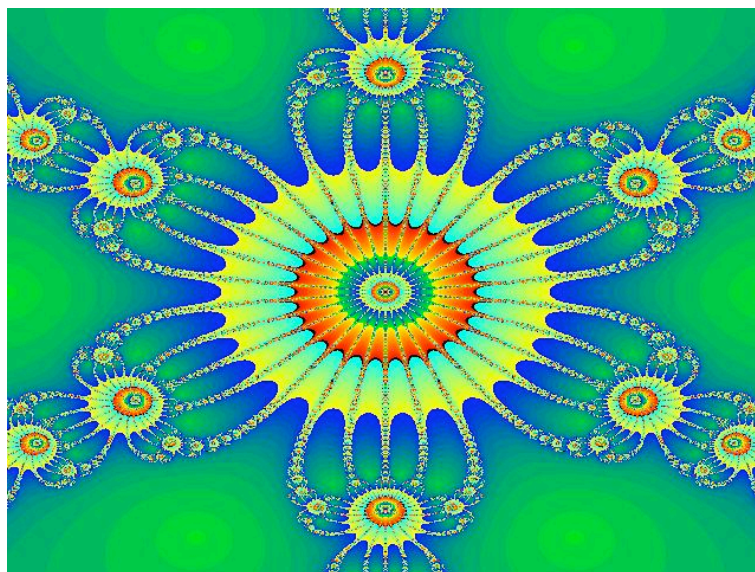


Figura 2.5: Zonas de convergencia según el punto de partida z_0 , para la solución de la ecuación $z^6 - 1 = 0$ por el método de Newton, coloreadas según el número de iteraciones necesario para la convergencia. La zona azul celeste corresponde a la convergencia y la rojiza es la que diverge más rápido. Los límites de la figura son -1 y 1 en ambos ejes. Los brazos corresponden a cada una de las seis raíces de la ecuación.

el patrón central aparece repetido en cada uno de los brazos, a cualquier nivel de escala.

2.10. Método de Newton para funciones de varias variables

El método de Newton se puede extender fácilmente al caso de funciones de varias variables. Consideraremos aquí el caso de un sistema de m ecuaciones no lineales con n incógnitas:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ f_2(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ f_m(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n) &= 0 \end{aligned}$$

que podemos escribir en notación vectorial como:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$$

donde $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ es un vector de m dimensiones y \mathbf{x} un vector de n dimensiones. La solución de este sistema de ecuaciones implica encontrar un vector \mathbf{x} al que la función $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ lo aplique en el vector nulo. Llamemos $\vec{\alpha}$ a esta raíz. Si tenemos una aproximación \mathbf{x}_r a la raíz, desarrollando en serie de Taylor alrededor de la raíz, y denominando $\mathbf{e}_r = \mathbf{x}_r - \vec{\alpha}$, podemos escribir :

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_r) = \mathbf{f}(\vec{\alpha}) + \nabla \mathbf{f}(\vec{\alpha}) \cdot \mathbf{e}_r + \dots$$

Si nos quedamos en primer orden, y dado que no conocemos $\vec{\alpha}$, podemos suponer que la igualdad

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}_r) = \nabla \mathbf{f}(\mathbf{x}_r) \cdot (\mathbf{x}_r - \mathbf{x}_{r+1})$$

define un vector \mathbf{x}_{r+1} más próximo a la raíz que \mathbf{x}_r . Hemos utilizado $\mathbf{f}(\vec{\alpha}) = 0$ y reemplazado la raíz por \mathbf{x}_{r+1} en \mathbf{e}_r . El término $\nabla \mathbf{f}(\mathbf{x}_r)$ es una matriz $m \times n$, que denotamos por \mathbf{J} , conocida con el nombre de Jacobiana de la función $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, y que viene dada por:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$

De la anterior igualdad, multiplicando por la matriz inversa por la izquierda de \mathbf{J} (hemos supuesto que en principio \mathbf{J} no es cuadrada), \mathbf{J}^{-1} , que es una matriz de dimensiones $n \times m$, obtenemos la relación:

$$\mathbf{x}_{r+1} = \mathbf{x}_r - \mathbf{J}^{-1} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_r)$$

que es la generalización del método de Newton para n variables. Esta relación proporciona una relación de recurrencia a partir de un vector de partida \mathbf{x}_0 , que converge a la raíz si \mathbf{x}_0 se encuentra en el atractor de ésta (como se denomina a la zona de convergencia), y si además, la matriz inversa de la Jacobiana existe (\mathbf{J} es no singular, en el caso de una matriz cuadrada). Veremos en

el próximo capítulo que es más fácil resolver un sistema de ecuaciones lineales que calcular la inversa de la matriz de los coeficientes. Por lo tanto, desde el punto de vista práctico, el método de Newton multidimensional conviene escribirlo como:

$$\mathbf{J} \cdot \mathbf{x}_{r+1} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{x}_r - \mathbf{f}(\mathbf{x}_r)$$

donde \mathbf{J} es la matriz jacobiana calculada en el punto \mathbf{x}_r . Cada iteración consiste en resolver un sistema de ecuaciones lineales y utilizar la solución encontrada para calcular la nueva matriz de coeficientes y el nuevo vector de términos independientes (que supone la evaluación de $(n+1)m$ funciones). En general, lo que se hace es actualizar el valor de \mathbf{x}_r por un valor $\delta\mathbf{x}_r$, de forma que $\mathbf{x}_{r+1} = \mathbf{x}_r + \delta\mathbf{x}_r$. Podemos escribir la anterior ecuación como una ecuación para $\delta\mathbf{x}_r$:

$$\mathbf{J} \cdot \delta\mathbf{x}_r = -\mathbf{f}(\mathbf{x}_r) \quad (2.4)$$

que resolveremos en cada iteración para actualizar \mathbf{x}_r , parando cuando $\|\delta\mathbf{x}_r\| < \varepsilon$.

2.11. Un método de tercer orden

Para obtener un método de tercer orden debe de cumplirse que $g'(\alpha) = g''(\alpha) = 0$. Para que se cumplan estas dos condiciones hay que introducir dos parámetros adicionales. Si tenemos la ecuación $f(x) = 0$, podemos escribir, por ejemplo, la ecuación

$$x + \lambda_1 x = x + \lambda_1 x - f(x) + \frac{1}{2} \lambda_2 f(x)^2$$

que es válida en la raíz. Obviamente, hay una infinidad de posibilidades diferentes de elegir estos dos parámetros. Esta forma de $G(x)$ es la más sencilla en el sentido que es cuadrática en $f(x)$. La anterior igualdad la podemos reescribir como,

$$x = x - \frac{1}{1 + \lambda_1} f(x) + \frac{\lambda_2}{2(1 + \lambda_1)} f(x)^2 \equiv G(x)$$

que define la función $G(x)$. Obtenemos de esta forma el método iterativo $x_{r+1} = G(x_r)$ con

$$G(x) = x - \frac{1}{1 + \lambda_1} f(x) + \frac{\lambda_2}{2(1 + \lambda_1)} f(x)^2$$

Las condiciones $G'(\alpha) = G''(\alpha) = 0$ dan las siguientes dos ecuaciones:

$$\begin{aligned} 1 - \frac{1}{1 + \lambda_1} f'(\alpha) + \frac{\lambda_2}{(1 + \lambda_1)} f(\alpha) f'(\alpha) &= 0 \\ -\frac{1}{1 + \lambda_1} f''(\alpha) + \frac{\lambda_2}{(1 + \lambda_1)} (f'^2(\alpha) + f(\alpha) f''(\alpha)) &= 0 \end{aligned}$$

Teniendo en cuenta que $f(\alpha) = 0$, se obtienen las soluciones:

$$\begin{aligned}\lambda_2 &= \frac{f''(\alpha)}{f'^2(\alpha)} \\ \lambda_1 &= f'(\alpha) - 1 \\ G(x) &= x - \frac{f(x)}{f'(\alpha)} + \frac{f''(\alpha)}{2f'^3(\alpha)} f(x)^2\end{aligned}$$

Reemplazando α por x_r , el método queda como la siguiente relación iterativa:

$$x_{r+1} = x_r - \frac{f(x_r)}{f'(x_r)} + \frac{f''(x_r)}{2f'^2(x_r)} \left(\frac{f(x_r)}{f'(x_r)} \right)^2$$

Vemos que el precio a pagar por la convergencia en tercer orden es la aparición de la derivada segunda en el método, lo cual lo hace menos robusto e implica cálculos tediosos si $f(x)$ es complicada. De hecho, desde el punto de vista numérico, tenemos que calcular tres funciones por iteración (la función y sus dos primeras derivadas), con lo que el método no suele ser ventajoso desde el punto de vista de volumen de cálculo, sin contar con el hecho de que, incluso para funciones relativamente simples, la segunda derivada resulta tediosa y larga de calcular. Si las derivadas deben de ser calculadas numéricamente, los errores implicados hacen que los métodos de orden superior sean desaconsejables.

2.12. Raíces de Polinomios

Cualquiera de los métodos que hemos visto sirven para obtener raíces reales de polinomios. El método de Müller permite obtener raíces complejas a partir de puntos de partida reales, mientras que el método de Newton permite obtener raíces complejas a partir de puntos de partida complejos. Si el polinomio es real, los complejos conjugados de las raíces complejas son también raíces. Una vez que hemos obtenido una raíz α_n , se procede a dividir el polinomio por $(x - \alpha_n)$ para obtener un polinomio de grado inferior $P_n(x) = (x - \alpha_n)P_{n-1}(x)$. Este procedimiento se conoce como *deflación*. Se procede seguidamente a calcular una nueva raíz del polinomio $P_{n-1}(x)$. Sin embargo esta raíz se calcula sólo de forma aproximada, y se refina aplicando el método de Newton al polinomio completo. Esto se hace para evitar problemas de redondeo y propagación de errores en los coeficientes del polinomio. Si la raíz es compleja y el polinomio real, sabemos que la compleja conjugada es también una raíz, por lo que se divide el polinomio por el factor cuadrático $(x - \alpha)(x - \alpha^*) = x^2 - 2\text{Re}\alpha + |\alpha|^2$. El método se prosigue hasta encontrar todas las raíces.

2.12.1. Método de Bairstow

El método de Bairstow permite encontrar pares de raíces complejas. Se basa en escribir

$$P_n(x) = Q_{n-2}(x)(x^2 + px + q) + rx + s \quad (2.5)$$

donde los coeficientes r y s se suponen funciones de p y q . Variamos p y q hasta que r y s se anulan. Se parte de valores iniciales aproximados de p y q , con lo que Q_{n-2} , r , y s se obtienen dividiendo $P_n(x)$ por el factor cuadrático $C(x) = x^2 + px + q$. La idea es aplicar el método de Newton para funciones de dos variables, suponiendo la dependencia $r(p, q)$ y $s(p, q)$ y variando p y q de forma que r y s se anulen. La ecuación 2.4 queda como

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial r}{\partial p} & \frac{\partial r}{\partial q} \\ \frac{\partial s}{\partial p} & \frac{\partial s}{\partial q} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta p \\ \delta q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -r \\ -s \end{pmatrix}$$

Lo más interesante del método de Bairstow es que las derivadas parciales de la matriz jacobiana se obtienen mediante una simple división polinomial, al igual que r y s . Tomando derivadas parciales con respecto de p y q en la ec. 2.5, y teniendo en cuenta que $P_n(x)$ es un polinomio que no depende ni de p ni de q , obtenemos

$$\begin{aligned} 0 &= Q_{n-2}(x)x + (x^2 + px + q) \frac{\partial Q_{n-2}}{\partial p} + \frac{\partial r}{\partial p}x + \frac{\partial s}{\partial p} \\ 0 &= Q_{n-2}(x) + (x^2 + px + q) \frac{\partial Q_{n-2}}{\partial q} + \frac{\partial r}{\partial q}x + \frac{\partial s}{\partial q} \end{aligned} \quad (2.6)$$

La segunda de las ecuaciones nos dice que si dividimos Q_{n-2} por $x^2 + px + q$ y tenemos como resto $r_1x + s_1$, entonces

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial q} &= -r_1 \\ \frac{\partial s}{\partial q} &= -s_1 \end{aligned}$$

con lo que determinar la segunda columna de la matriz Jacobiana implica sólo una división polinomial. Si x_1 y x_2 son las dos soluciones de $x^2 + px + q = 0$, de la segunda de las ecuaciones 2.6 tenemos que $Q_{n-2}(x_{1,2}) = r_1x_{1,2} + s_1$. Introduciendo cada uno de los valores particulares de x_1 y x_2 en la primera de las ecuaciones 2.6, tenemos las dos ecuaciones

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial p}x_1 + \frac{\partial s}{\partial p} &= -x_1(r_1x_1 + s_1) \\ \frac{\partial r}{\partial p}x_2 + \frac{\partial s}{\partial p} &= -x_2(r_1x_2 + s_1) \end{aligned} \quad (2.7)$$

Multiplicando la primera por x_2 y la segunda por x_1 , y teniendo en cuenta que $x_1 + x_2 = -p$ y $x_1x_2 = q$, obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial p}q + \frac{\partial s}{\partial p}x_2 &= -q(r_1x_1 + s_1) \\ \frac{\partial r}{\partial p}q + \frac{\partial s}{\partial p}x_1 &= -q(r_1x_2 + s_1) \end{aligned}$$

Sumando ambas ecuaciones obtenemos

$$2q \frac{\partial r}{\partial p} - p \frac{\partial s}{\partial p} = pqr_1 - 2qs_1 \quad (2.8)$$

Sumando las ecuaciones 2.7 y teniendo en cuenta que $x_1^2 + x_2^2 = p^2 - 2q$, obtenemos

$$-p \frac{\partial r}{\partial p} + 2 \frac{\partial s}{\partial p} = -r_1(p^2 - 2q) + ps_1 \quad (2.9)$$

De las dos ecuaciones anteriores, multiplicando la primera por p y la segunda por $2q$ y sumándolas, y luego, multiplicando la primera por 2 y la segunda por p y sumándolas, resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial p} &= pr_1 - s_1 \\ \frac{\partial s}{\partial p} &= qr_1 \end{aligned}$$

con lo que hemos obtenido los elementos restantes del Jacobiano. Vemos que la determinación del jacobiano implica sólo una división polinomial.

En resumen, el método de Bairstow consiste en dividir $P(n, x)$ dos veces por el factor cuadrático aproximado $x^2 + px + q$ para obtener r y s del resto de la primera división y r_1 y s_1 del de la segunda la segunda, lo nos permite obtener todos los elementos del Jacobiano de las ecuaciones anteriores. Con esto, podemos aplicar una nueva iteración del método de Newton y calcular δp y δq y los nuevos valores de p y q .

Aunque podemos elaborar el algoritmo de Bairstow en la forma que acabamos de enunciar mediante una función de división de polinomios, en la práctica, la utilización de una función general de este tipo requiere más operaciones de las necesarias, ya que no estamos interesados en los polinomio cociente, sino sólo en los restos de ambas divisiones. Es más eficiente realizar la división directamente en este caso particular para obtener los coeficientes del resto y sus derivadas. Escribiendo

$$\begin{aligned} P_n(x) &= a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 \\ Q_{n-2}(x) &= b_n x^{n-2} + b_{n-1} x^{n-3} + \cdots + b_3 x + b_2 \\ rx + s &= b_1(x + p) + b_0 \end{aligned}$$

donde $P_n(x) = (x^2 + px + q)Q_{n-2}(x) + b_1(x + p) + b_0$, obtenemos que los coeficientes b_k del polinomio cociente $Q_{n-2}(x)$ satisfacen la relación de recurrencia:

$$\begin{aligned} a_0 &= qb_2 + pb_1 + b_0 \\ a_1 &= qb_3 + pb_2 + b_1 \\ &\vdots \\ a_k &= qb_{k+2} + pb_{k+1} + b_k \end{aligned}$$

donde la última ecuación es válida desde $k = 3$ hasta n , si definimos $b_{n+1} = b_{n+2} = 0$. Podemos escribir por lo tanto

$$b_k = a_k - pb_{k+1} - qb_{k+2} \quad (2.10)$$

para calcular b_k desde $k = n$ hasta 0, con $b_{n+2} = b_{n+1} = 0$.

Para las derivadas parciales de b_k podemos escribir las relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_k}{\partial p} &= -b_{k+1} - p \frac{\partial b_{k+1}}{\partial p} - q \frac{\partial b_{k+2}}{\partial p} \\ \frac{\partial b_k}{\partial q} &= -b_{k+2} - p \frac{\partial b_{k+1}}{\partial p} - q \frac{\partial b_{k+2}}{\partial p} \end{aligned}$$

que podemos reescribir, llamando $c_k = \frac{\partial b_k}{\partial p}$ y $d_k = \frac{\partial b_k}{\partial q}$, como:

$$\begin{aligned} c_k &= -b_{k+1} - pc_{k+1} - qc_{k+2} \\ d_k &= -b_{k+2} - pd_{k+1} - qd_{k+2} \end{aligned} \quad (2.11)$$

con las condiciones iniciales $d_{n+2} = c_{n+2} = d_{n+1} = c_{n+1} = 0$. Vemos que los primeros elementos no nulos son $c_{n-1} = d_{n-2} = b_n$ y que a partir de aquí $c_k = d_{k-1}$, ya que ambos términos satisfacen la misma relación de recurrencia, con las mismas condiciones iniciales. Iteramos esta relación de recurrencia hasta obtener c_0 y d_0 . Tenemos de la definición de b_k y d_k ,

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{\partial b_0}{\partial p} \\ c_1 &= \frac{\partial b_1}{\partial p} \\ d_0 &= \frac{\partial b_0}{\partial q} = c_1 \\ d_1 &= \frac{\partial b_1}{\partial q} = c_2 \end{aligned}$$

por lo que tenemos que iterar sólo la relación de recurrencia de los c_k para calcular c_0, c_1, c_2 . Obtenemos δp y δq , aplicando el método de Newton para obtener el cero de b_0 y b_1 ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_0}{\partial p} \delta p + \frac{\partial b_0}{\partial q} \delta q &= -b_0 \\ \frac{\partial b_1}{\partial p} \delta p + \frac{\partial b_1}{\partial q} \delta q &= -b_1 \end{aligned}$$

Utilizando las relaciones anteriores para b_0, b_1 y sus derivadas, estas ecuaciones quedan como,

$$\begin{aligned}c_0\delta p + c_1\delta q &= -b_0 \\c_1\delta p + c_2\delta q &= -b_1\end{aligned}$$

con lo que obtenemos finalmente

$$\begin{aligned}\delta p &= \frac{c_1b_1 - b_0c_2}{c_0c_2 - c_1^2} \\ \delta q &= \frac{c_1b_0 - b_1c_0}{c_0c_2 - c_1^2}\end{aligned}\tag{2.12}$$

Cada paso de iteración del método de Bairstow consiste en calcular los conjuntos b_k y c_k mediante las ecuaciones 2.10 y 2.11, y de aquí δp y δq de las ecuaciones 2.12. Seguidamente actualizamos $p \rightarrow p + \delta p$ y $q \rightarrow q + \delta q$. Paramos el proceso iterativo cuando b_1 y b_0 sean suficientemente pequeños o δp y δq sean inferiores a una tolerancia preestablecida.

2.12.2. Obtención de raíces de polinomios mediante diagonalización

Finalmente, mencionemos que el cálculo de los valores propios de una matriz es equivalente a calcular las raíces del polinomio característico. De hecho, los métodos de diagonalización de matrices son más eficientes que los métodos de cálculo de raíces de polinomios, por lo que los primeros son útiles para obtener todas las raíces de un polinomio. Para ello, basta simplemente notar que un polinomio arbitrario

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

es el polinomio característico de la matriz:

$$\begin{bmatrix} -\frac{a_{n-1}}{a_n} & -\frac{a_{n-2}}{a_n} & \cdots & -\frac{a_1}{a_n} & -\frac{a_0}{a_n} \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

por lo que para calcular las raíces del polinomio basta con diagonalizar la matriz. Este método calcula rápidamente todas las raíces de polinomios de orden de decenas o incluso centenares, a condición de que no existan problemas de mal condicionamiento en la matriz.

2.13. Minimización de funciones mediante cálculo de raíces

A menudo se presenta el problema de obtener el punto x para el que la función $f(x)$ es mínima. Esto es equivalente a encontrar el cero de la función $f'(x)$. Cuando la derivada se puede calcular analíticamente esto no presenta problemas. Sin embargo a menudo esto no es posible. Sin embargo siempre es posible calcular la derivada numérica, como veremos en el capítulo 7, y podemos calcular el cero de esta derivada numérica. A menudo, unas pocas iteraciones del método de la secante o de Müller son suficientes para obtener el mínimo con buena precisión. En el caso de funciones de varias variables, se puede utilizar el método de Newton de varias variables, estimando el Hessiano numéricamente cuando el cálculo analítico no es posible.