Raíces de ecuaciones Métodos abiertos y mixtos

Dr. Pablo Alvarado Moya

CE3102 Análisis Numérico para Ingeniería Área de Ingeniería en Computadores Tecnológico de Costa Rica

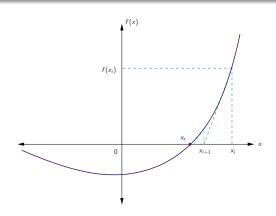
II Semestre 2017



Contenido

- Métodos abiertos
 - Método de Newton-Raphson
- Métodos Mixtos
 - Método de Brent
- Raíces de polinomios

Método de Newton-Raphson Concepto



- Encontrar x_r tal que $0 = f(x_r)$
- $f'(x_i) \approx \frac{f(x_i)}{x_i x_{i+1}}$ \Rightarrow $x_{i+1} = x_i \frac{f(x_i)}{f'(x_{i+1})}$

Método de Newton-Raphson Derivación

Se desea encontrar el valor x_r para la función y = f(x) que hace

$$0=f(x_r)$$

Considere la expansión de primer orden de Taylor

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \underbrace{\frac{f''(\xi)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2}_{\text{Resíduo}}$$

con $\xi \in [x_i, x_{i+1}]$, donde se desea que x_{i+1} corresponda a la raíz x_r .

◄□▶
□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶
4□▶

Método de Newton-Raphson Derivación

La aproximación de primer orden se utiliza para encontrar la raíz:

$$0 \stackrel{!}{=} f(x_{i+1}) \approx f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$

de donde se despeja

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

que es la iteración del método Newton-Raphson.

Obsérvese que este método requiere tanto f(x) como f'(x).

P. Alvarado

Estimación del error Método de Newton-Raphson

Con la serie de Taylor completa, para la raíz x_r se debe cumplir:

$$0 = f(x_i) + f'(x_i)(x_r - x_i) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x_r - x_i)^2$$

y restando el resultado anterior que establece:

$$0 = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i)$$

se obtiene

$$0 = f'(x_i)(x_r - x_{i+1}) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x_r - x_i)^2$$



Estimación del error Método de Newton-Raphson

Con $E_{t,i} = x_r - x_i$ y $E_{t,i+1} = x_r - x_{i+1}$ se tiene entonces

$$0 = f'(x_i)E_{t,i+1} + \frac{f''(\xi)}{2!}E_{t,i}^2$$

Finalmente se reordena el error para obtener

$$E_{t,i+1} = -\frac{f''(\xi)}{2f'(x_i)}E_{t,i}^2$$

lo que indica que si el método converge, lo hace con orden **cuadrático**: el número de cifras significativas decimales se duplica (aproximadamente) en cada iteración.

El método en general converge si

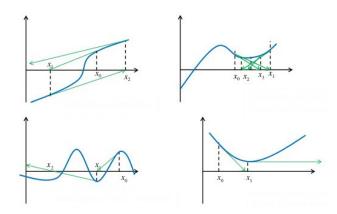
$$\left|\frac{f''(\xi)}{2f'(x_i)}\right|<1$$



Problemas del método de Newton-Raphson

- Debido a que en la iteración aparece la derivada en el denominador, el método se inestabiliza si pasos intermedios caen cerca de máximos o mínimos locales.
- Otra posibilidad es que el método oscile sin converger cuando hay puntos de inflexión (f''(x) = 0) cerca de la raíz.
- No hay un criterio de convergencia general para este método:
 - Depende de la naturaleza de la función
 - Depende de la elección del punto inicial x_0 .
- Método puede converger a puntos que no son la raíz: debe confirmarse al final del proceso iterativo que $f(x_r) \approx 0$.

Problemas del método de Newton-Raphson



Método de la secante

 Equivale al método de Newton-Raphson sustituyendo la derivada por su aproximación hacia atrás:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}$$

• La iteración se convierte entonces en:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)}$$

- Se requieren dos iteraciones anteriores: x_{i-1} y x_i
- No es necesario encerrar a x_r



Método de la secante

• Similitud con método de interpolación lineal (o falsa posición).

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)}$$
 M. secante
$$x_i = x_u - \frac{f(x_u)(x_l - x_u)}{f(x_l) - f(x_u)}$$
 M. interpolación lineal

• Convergencia es subcuadrática, orden $\approx 1,618$, es decir

$$E_{t,i+1} = \operatorname{const} \times E_{t,i}^{1,618}$$

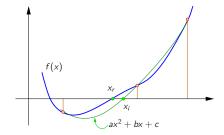


Diferencias Métodos de la secante y de interpolación lineal

- El método de interpolación lineal sustituye uno de los extremos $(x_u \circ x_l)$ por la última estimación de modo que siempre la raíz quede acorralada.
- El método de la secante reemplaza los valores en secuencia estricta, por lo que la raíz puede quedar fuera de los dos últimos valores utilizados.
 - Peligro: Esto no siempre lleva a convergencia.

Método de Brent

- O también método de van Wijngaarden-Dekker-Brent
- Garantiza convergencia si intervalo inicial encierra una raíz.
- Combina:
 - Método de bisección
 - Método de la secante
 - Método de interpolación inversa cuadrática



Dados tres puntos x_i , x_{i-1} y x_{i-2} y sus correspondientes valores $y_i = f(x_i)$, $y_{i-1} = f(x_{i-1})$ e $y_{i-2} = f(x_{i-2})$ se asume que se cumple

$$y_{i} = ax_{i}^{2} + bx_{i} + c$$

$$y_{i-1} = ax_{i-1}^{2} + bx_{i-1} + c$$

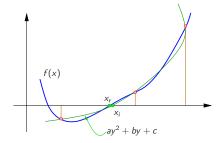
$$y_{i-2} = ax_{i-2}^{2} + bx_{i-2} + c$$

que en forma matricial

$$\begin{bmatrix} y_i \\ y_{i-1} \\ y_{i-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i^2 & x_i & 1 \\ x_{i-1}^2 & x_{i-1} & 1 \\ x_{i-2}^2 & x_{i-2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

se pueden despejar los coeficientes a, b y c.

Es posible que la parábola interpolada no interseque del todo al eje real. Pero, esto no ocurre si se utiliza interpolación inversa cuadrática



Interpolación inversa cuadrática

Dados de nuevo los tres puntos x_i , x_{i-1} y x_{i-2} y sus correspondientes valores $y_i = f(x_i), y_{i-1} = f(x_{i-1})$ e $y_{i-2} = f(x_{i-2})$ se asume ahora que se cumple

$$x_i = ay_i^2 + by_i + c$$

 $x_{i-1} = ay_{i-1}^2 + by_{i-1} + c$
 $x_{i-2} = ay_{i-2}^2 + by_{i-2} + c$

que en forma matricial

$$\begin{bmatrix} x_i \\ x_{i-1} \\ x_{i-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_i^2 & y_i & 1 \\ y_{i-1}^2 & y_{i-1} & 1 \\ y_{i-2}^2 & y_{i-2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix}$$

se pueden despejar los coeficientes a, b y c.

Interpolación inversa cuadrática

- Lo anterior funciona siempre y cuando no existan dos o más valores iguales de y, en cuyo caso el sistema de ecuaciones no tiene solución por existir varios valores x para un mismo y.
- En el método de Brent, si lo anterior es el caso entra en juego el método de la secante.

Interpolación inversa cuadrática

Se puede demostrar que la función buscada es

$$x = \frac{(y - y_{i-1})(y - y_i)}{(y_{i-2} - y_{i-1})(y_{i-2} - y_i)} x_{i-2} + \frac{(y - y_{i-2})(y - y_i)}{(y_{i-1} - y_{i-2})(y_{i-1} - y_i)} x_{i-1} + \frac{(y - y_{i-2})(y - y_{i-1})}{(y_i - y_{i-2})(y_i - y_{i-1})} x_i$$

y sabiendo que se busca la intersección con y = 0 se obtiene

$$x_{i+1} = \frac{y_{i-1}y_i}{(y_{i-2} - y_{i-1})(y_{i-2} - y_i)} x_{i-2} + \frac{y_{i-2}y_i}{(y_{i-1} - y_{i-2})(y_{i-1} - y_i)} x_{i-1} + \frac{y_{i-2}y_{i-1}}{(y_i - y_{i-2})(y_i - y_{i-1})} x_i$$

P. Alvarado

Algoritmo de Brent

- El método de Brent utiliza el método de interpolación cuadrática cuando sea posible,
- de otro modo utiliza el método de la secante
- si ese método conduce a error, utilice bisección.

TAREA

Implementar el algoritmo de Brent en C++ para funtores que sigan las definiciones para funtores unarios (ver definiciones de funtores en la STL).

Raíces de polinomios

 Modelos de sistemas físicos se expresan por medio de ecuaciones diferenciales

- Modelos de sistemas físicos se expresan por medio de ecuaciones diferenciales
- Gran cantidad de sistemas (circuitos eléctricos lineales, sistemas de masas y resortes, sistemas neumáticos, térmicos, etc.) se expresan con ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes.

- Modelos de sistemas físicos se expresan por medio de ecuaciones diferenciales
- Gran cantidad de sistemas (circuitos eléctricos lineales, sistemas de masas y resortes, sistemas neumáticos, térmicos, etc.) se expresan con ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes.
- Transformada de Laplace permite mapear ecuación diferencial a polinomio en s

- Modelos de sistemas físicos se expresan por medio de ecuaciones diferenciales
- Gran cantidad de sistemas (circuitos eléctricos lineales, sistemas de masas y resortes, sistemas neumáticos, térmicos, etc.) se expresan con ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes.
- Transformada de Laplace permite mapear ecuación diferencial a polinomio en s
- Solución de dichas ecuaciones diferenciales requiere encontrar todas las raíces (reales y complejas) de polinomios.

- Modelos de sistemas físicos se expresan por medio de ecuaciones diferenciales
- Gran cantidad de sistemas (circuitos eléctricos lineales, sistemas de masas y resortes, sistemas neumáticos, térmicos, etc.) se expresan con ecuaciones diferenciales con coeficientes constantes.
- Transformada de Laplace permite mapear ecuación diferencial a polinomio en s
- Solución de dichas ecuaciones diferenciales requiere encontrar todas las raíces (reales y complejas) de polinomios.
- Encontrar raíces de un polinomio es un problema mal condicionado: cambios leves de los coeficientes pueden producir fuertes cambios en la posición de las raíces.

Evaluación de polinomios

La forma estándar de polinomios

$$f_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + \dots + a_nx^n$$

requiere n(n+1)/2 multiplicaciones y n sumas.

• La forma anidada (esquema de Horner):

$$f_n(x) = a_0 + x(a_1 + x(a_2 + x(\dots(a_{n-1} + a_n x)\dots)))$$

requiere n multiplicaciones y n sumas.

 Al requerir menos operaciones, la forma anidada produce menos errores de redondeo.



Implementación de forma anidada

Cálculo del polinomio

```
for (j=n,p=0; n>=0; --n) {
  p = p*x + a[j];
}
```

Cálculo del polinomio y su derivada

```
for (j=n,p=0,df=0; n>=0; ---n) {
  df = df*x + p;
  p = p*x + a[j];
}
```

Esto último es útil por ejemplo con métodos como el Newton-Raphson, que requiere tanto el valor de la función como de su derivada.

Deflación polinomial

- Deflación polinomial: proceso de reducir grado de polinomio dividiéndolo por $(x t_i)$, t_i raíz conocida del polinomio.
- Todo polinomio

$$\sum_{i=0}^n a_i x^i = a_n \prod_{i=1}^n (x - t_i)$$

con t_i , $i = 1 \dots n$ las n raíces del polinomio

 Las raíces pueden ser algunas o todas ser iguales; reales o complejas.

Algoritmo de deflación polinomial

Algoritmo para calcular la deflación polinomial:

- Si polinomio es divisible por $t \Rightarrow$ residuo r = 0.
- División polinomial necesaria para tratar el caso de pares de raíces complejas conjugadas, las cuales producen polinomios de segundo orden de coeficientes reales.

Proyecto 2 Primera parte

Plantear algoritmo de división polinomial



• Como raíces calculadas son aproximaciones, el método de deflación es sensible a los errores de redondeo.

- Como raíces calculadas son aproximaciones, el método de deflación es sensible a los errores de redondeo.
- El error de redondeo depende del orden de evaluación:

- Como raíces calculadas son aproximaciones, el método de deflación es sensible a los errores de redondeo.
- El error de redondeo depende del orden de evaluación:
 - En la deflación hacia **adelante** los coeficientes del polinomio tienen grado de potencias descendientes de x. En este caso se prefiere dividir primero por las raíces de valor absoluto pequeño.

- Como raíces calculadas son aproximaciones, el método de deflación es sensible a los errores de redondeo.
- El error de redondeo depende del orden de evaluación:
 - En la deflación hacia **adelante** los coeficientes del polinomio tienen grado de potencias descendientes de x. En este caso se prefiere dividir primero por las raíces de valor absoluto pequeño.
 - En la deflación hacia **atrás** los coeficientes del polinomio tienen grado de potencias ascendentes de x. En este caso se prefiere dividir primero por las raíces de valor absoluto grande.

- Como raíces calculadas son aproximaciones, el método de deflación es sensible a los errores de redondeo.
- El error de redondeo depende del orden de evaluación:
 - En la deflación hacia **adelante** los coeficientes del polinomio tienen grado de potencias descendientes de x. En este caso se prefiere dividir primero por las raíces de valor absoluto pequeño.
 - En la deflación hacia **atrás** los coeficientes del polinomio tienen grado de potencias ascendentes de x. En este caso se prefiere dividir primero por las raíces de valor absoluto grande.
- Pulir raíces es el proceso de, luego de la deflación y obtener nuevas raíces, utilizar éstas como puntos iniciales en la búsqueda de raíces pero con el polinomio original.



Aplicabilidad de métodos anteriores

- Todos los métodos cerrados y abiertos descritos anteriormente se pueden utilizar, siempre y cuando las raíces buscadas sean reales.
- A pesar de lo anterior, encontrar el intervalo o valor inicial es un problema complejo.
- Nuevos métodos son necesarios si raíces son complejas

Método de Müller

El método de Müller es similar al método de la secante, pero utiliza interpolación cuadrática, como se ilustró anteriormente, para encontrar la siguiente estimación de la raíz.

La aproximación cuadrática centrada en x_i :

$$\tilde{f}(x) = a(x - x_i)^2 + b(x - x_i) + c$$

a partir de tres puntos x_{i-2} , x_{i-1} y x_i tiene con

$$h_{i-2} = x_{i-1} - x_{i-2}$$

$$h_{i-1} = x_i - x_{i-1}$$

$$\delta_{i-2} = \frac{f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{x_{i-1} - x_{i-2}}$$

$$\delta_{i-1} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

coeficientes dados por:

$$a = \frac{\delta_{i-1} - \delta_{i-2}}{h_{i-1} - h_{i-2}}$$
$$b = ah_{i-1} + \delta_{i-1}$$
$$c = f(x_i)$$

Estimación de la raíz

- La estimación de la raíz se realiza con la fórmula cuadrática alternativa
- Permite reducir el error de redondeo potencial:

$$x_{i+1} - x_i = \frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}$$
$$x_{i+1} = x_i - \frac{2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

- Raíces pueden ser complejas.
- Nótese error aproximado dado por primera ecuación.



Problema del método de Müller

- Problema del método: produce dos raíces.
- Método establece elijir signo que coincida con el signo de b, para obtener la raíz estimada más cercana a x_i .

Iteración de algoritmo de Müller

La iteración del algoritmo de Müller depende si se buscan raíces puramente reales, o se permiten además raíces complejas.

- Si se buscan raíces reales únicamente, se elijen los dos valores de $\{x_i, x_{i-1}, x_{i-2}\}$ más cercanos a la nueva raíz estimada x_{i+1}
- ② Si se buscan también raíces complejas, se utiliza el método puramente secuencial (como en el método de la secante), y se usan $\{x_i, x_{i-1}\}$ junto a la nueva raíz x_{i+1} .

Proyecto 2 Segunda parte

Implemente los métodos de Müller y de Laguerre (Numerical Recipes) y compare sus convergencias en la búsqueda de las raíces, iniciando desde 0, para el polinomio

$$(x-2)(x^2+4)(x+1)$$

Deben encontrarse todas las raíces, por lo que se requiere hacer deflación.

Utilize functores y plantillas de C++, y evalúe además los efectos de utilizar precisiones simples o dobles.



Resumen

- Métodos abiertos
 - Método de Newton-Raphson
- Métodos Mixtos
 - Método de Brent
- Raíces de polinomios

Este documento ha sido elaborado con software libre incluyendo LATEX, Beamer, GNUPlot, GNU/Octave, XFig, Inkscape, LTI-Lib-2, GNU-Make y Subversion en GNU/Linux



Este trabajo se encuentra bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-LicenciarIgual 3.0 Unported. Para ver una copia de esta Licencia, visite http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/ o envíe una carta a Creative Commons, 444 Castro Street, Suite 900, Mountain View, California, 94041, USA.

© 2005-2017 Pablo Alvarado-Moya Área de Ingeniería en Computadores Instituto Tecnológico de Costa Rica