SMROOT:MÉTODOS NUMÉRICOS PARA CALCULAR RAÍCES DE UNA FUNCIÓN

Juan Sebastián León
Maria Fernanda Garcés

13 de Noviembre 2018

1. Objetivo del Proyecto

Diseñar e implementar un paquete de R que permita la aplicación de métodos numéricos, específicamente Steffensen y Müller, para encontrar la raíz de una función alrededor de una vecindad de puntos dada.

2. Propuesta

Se propone la implementación de los métodos de Steffensen y Müller en el lenguaje de programación R. Estos serán anidados en una sola función llamada SMRoots. Adicionalmente se realizará el diseño pertinente de cada método explicando su funcionamiento, precondiciones, postcondiciones y sus resultados.

3. Métodos para implementar

- Método de Steffensen
- Método de Müller

4. Entradas de SMRoots

- La función SMRoots recibe como entradas:
- La función a la cual se le aplicara el método numérico
- Un valor de x inicial en el caso de Steffensen y un conjunto de 3 valores de x iniciales para el caso de Müller.
- La tolerancia o error del resultado obtenido.
- El numero máximo de iteraciones del método
- El nombre del método a utilizar.

5. Precondiciones de SMRoots

- Tanto la función a analizar como los valores iniciales son obligatorios.
- La función a la que se le aplicara el método debe ser de tipo function, el tipo expression no está soportado

- La tolerancia y el numero máximo de iteraciones debe ser un número mayor a 0.
- El nombre del método a utilizar debe ser "Steffensen" o "Müller". En caso de omitir este parámetro, se tiene "Müller" como predeterminado.

En caso de omitir la tolerancia, el valor predeterminado es de 10^-6. En el caso de que el numero máximo de iteraciones sea omitido, su valor predeterminado es de 100.

6. Salidas

Se retorna un contenedor con el resultado obtenido, el error y el numero de iteraciones realizadas.

7. Método de Steffensen

El método de Steffensen es un algoritmo creado por el matemático danés Johan Frederik Steffensen, utilizado para encontrar las raíces de una función a partir de un valor de x dado. En este método el error es propenso a aumentar si el valor de x_0 dado no es "lo suficientemente cercano.ª la solución, aun así, su convergencia es cuadrática.(Kumar, 2015).

Este método puede ser considerado como una combinación del método de punto fijo y del método de deltas cuadrados de Aitken.

El método de Newton se define como:

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

Teniendo en cuenta la definición de la derivada se tiene que,

$$f(x_i) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{2}$$

Donde:

$$h = f(x_i) \tag{3}$$

Reemplazando 3 en 2:

$$f(x_i) = \frac{f(x + f(x_i))}{f(x_i)} \tag{4}$$

Ahora, reemplazando 4 en 1:

$$x_{i+1} = x_n - \frac{[f(x_n)]^2}{f(x_n + f(x_n)) - f(x_n)} \tag{5}$$

7.1. Escenarios de Prueba

Para el escenario de prueba se utilizara la función $x^3 - x - 1$ con $x_0 = 2$. Analíticamente la función tiene tres raíces, dos complejas y una real. Para este escenario solo se tendrá en cuenta la solución real:

$$x_1 = \frac{(9-\sqrt{69})^{1/3} + (9+\sqrt{69})^{1/3}}{(2^{1/3} * 3^{2/3})} \approx 1{,}324717 \tag{6}$$

Utilizando el método de Steffensen de SMRoot se obtiene:

```
> f = function(x) x**3-x-1
> SMRoot(f,xo=2)
        Root        Error   Iterations
1.324718e+00 3.457924e-09 1.200000e+01
```

Figura 1: Prueba raíz real con el método Steffensen

8. Método de Müller

El método de Müller es un método numérico recursivo presentado por David E. Müller en 1956, el cual es utilizado para resolver ecuaciones de la forma $f(x) = 0$. Este puede ser utilizado para encontrar tanto raíces complejas como raíces reales. El método tiene una convergencia aproximada de 1,84 (Kumar, 2015).

El método es una generalización del Método de la secante, pero no requiere la derivada de la función. Además, en vez de tomar dos puntos para construir una línea en cada iteración, el método de Müller toma tres puntos y construye una parábola en cada iteración. Por esto el método recibe 3 valores iniciales. Cada iteración k del algoritmo utiliza 3 puntos, uno de cada iteración anterior.

Una parábola $y_i(x)$ se construye con los puntos $(x_{i-1}, f(x_{i-1})), (x_{i-2}, f(x_{i-2})), (x_{i-3}, f(x_{i-3}))$:

$$y_i(x) = f(x_{i-1}) + (x - x_{i-1})f[x_{i-1}, x_{i-2}] + (x - x_{i-1})(x - x_{i-2})f[x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3}] \tag{7}$$

Donde $[a, b]$ es una diferencia dividida. Esto debe ser reescrito como:

$$y_i(x) = f(x_{i-1}) + z(x - x_{i-1}) + f[x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3}](x - x_{i-1})^2 \tag{8}$$

donde

$$z = f[x_{i-1}, x_{i-2}] + f[x_{i-1}, x_{i-3}] + f[x_{i-2}, x_{i-3}] \tag{9}$$

Se desea encontrar la raíz de la parábola construida en cada iteración, para esto se utiliza una fórmula equivalente a la cuadrática:

$$\frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}} \tag{10}$$

Donde:

$$c = f(x_{i-1}) \tag{11}$$

$$a = f[x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3}] \tag{12}$$

$$b = w \tag{13}$$

Entonces reemplazando 11,12 y 13 en 10 y restando con el resultado de la iteración anterior se tiene que:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{-2f(x_{i-1})}{w \pm \sqrt{w^2 - 4f(x_{i-1})f[x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3}]}} \tag{14}$$

El signo se escoge de manera que el denominador sea lo mas grande posible en términos de magnitud.

8.1. Diferencias Divididas

Una diferencia dividida de Newton se denota como $[y_0, y_1]$ y se define de la siguiente manera:

$$[y_0, y_1] = \frac{y_1 - y_2}{x_1 - x_2} \tag{15}$$

8.2. Escenarios de Prueba

Con el fin de demostrar la funcionalidad del método de Müller se encontrara una raíz real y una compleja.

8.2.1. Raíz Real

Para el caso de la raíz real, se utilizó la función $x^3 - x - 1$ con $x_0 = (2, 2{,}1, 2{,}2)$, cuya raíz real ya fue mencionada en la sección 7.

```
> f = function(x) x**3-x-1
> SMRoot(f,xo=c(2,2.1,2.2),method="muller")
       Root       Error  Iterations
1.324718+0i 0.000000+0i 6.000000+0i
```

Figura 2: Prueba raíz real con el método Müller

8.2.2. Raíz Compleja

Para el caso de la raíz compleja, se tomo la función $x^3 + 10x^2 + 169x$ con $x_0 = (10, 11, 12)$. Analíticamente la función tiene tres raíces, dos complejas y una real. Para este escenario solo se tendrá alguna de las dos raíces complejas:

$$x_1 = -5 - 12\imath \tag{16}$$

$$x_2 = -5 + 12\imath \tag{17}$$

Aplicando SMRoot:

```
> fi = function(x) x**3+10*(x**2)+169*x
> SMRoot(fi,xo=c(10,11,12),method="muller")
     Root      Error Iterations
-5-12i  0+ 0i  9+ 0i
```

Figura 3: Prueba raíz compleja con el método Müller

9. Conclusiones

A partir de los escenarios de prueba es posible concluir que:

- A pesar de que la convergencia del método de Steffesen sea mayor a la de Müller (2>1.84), el método de Müller converge en menos iteraciones. En el caso de la función $x^3 - x - 1$ se evidencia que Steffesen, cuya convergencia es 2, toma 12 iteraciones para converger con un error cercano a cero, por otro lado, Müller toma 6 iteraciones para converger con un error de 0.

- En términos generales el método de Müller resulta ser mas practico y útil que el método de Steffensen. Esto se debe a que Müller es mucho mas flexible, ya que permite encontrar soluciones complejas y reales de funciones que no son polinomios únicamente. De esta misma manera, la solución en el caso de Müller no se encuentra afectada de gran manera por la "distancia"del conjunto de valores iniciales a la solución, a diferencia de Steffesen en el cual la variación mas insignificante del valor de x_0 ocasiona un crecimiento considerable del error.