“Ecuaciones diferenciales y cálculo numérico”

Tema 7. Introducción a la resolución numérica de ecuaciones no lineales.

(Grado en Ingeniería de Tecnologías de Telecomunicación)

- Queremos resolver (aunque sea de manera aproximada) ecuaciones de la forma

$$f(x) = 0, \tag{1}$$

siendo f una función para la que existan números reales pertenecientes a su dominio y en los que f se anule.

- Llamaremos *"raíces"* de f a las soluciones de (1).

Ejemplos

- $2 - \cos(x) = 0$ no tiene soluciones reales (pero complejas sí).
- $x^2 + 1 = 0$ no tiene soluciones reales (pero complejas sí).
- $x + e^{2x} = 0$ tiene una única solución real.
- $(x+1)^2(x-2)x^3 = 0$ tiene seis soluciones reales (una simple, una doble y una triple).

- Para polinomios de grado menor o igual que 4 son conocidas fórmulas que permiten calcular de manera exacta sus raíces (reales o complejas).
- Niels Henrik Abel demostró que, en general, no es posible encontrar fórmulas (que involucren radicales) para polinomios de grado mayor o igual que 5.

Teorema de Bolzano (condiciones suficientes de existencia de solución)

- Hipótesis: Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ una función continua tal que $f(a)f(b) < 0$.
- Tesis: $\exists c \in]a,b[$ tal que $f(c) = 0$.

Resultado (condición suficiente de unicidad de solución)

- Hipótesis: Sea $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ estrictamente monótona.
- Tesis: $f(x) = 0$ admite a lo sumo una solución (real).

Ejemplos

1) $f(x) = x + e^{2x}$ tiene una única raíz.
  - $f(-1)f(0) = \left(-1 + \frac{1}{e^2}\right) \cdot 1 < 0 \Rightarrow$ Existe solución.
  - $f'(x) = 1 + 2e^{2x} > 0,\ \forall x \in \mathbb{R} \Rightarrow f(x)$ es estrictamente creciente $\Rightarrow$ Existe solución única.

2) $f(x) = e^x$ es estrictamente creciente pero no tiene raíces (reales).

- Es el método más simple para buscar soluciones de una ecuación.
- Es consecuencia directa del Teorema de Bolzano.

Algoritmo

- Supongamos que $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ es una función continua tal que $f(a)f(b)<0$.
- Supongamos que $f(a)<0$ (si $f(a)>0$ el proceso es similar).
- Tomamos $I_0=[a_0,b_0]=[a,b]$ y definimos $c_0=\frac{a_0+b_0}{2}$.
- Entonces puede ocurrir que
  - $f(c_0)=0\Rightarrow$ Tenemos una raíz de f.
  - $f(c_0)>0\Rightarrow$ Tomamos $I_1=[a_1,b_1]=[a_0,c_0]$ como nuevo intervalo.
  - $f(c_0)<0\Rightarrow$ Tomamos $I_1=[a_1,b_1]=[c_0,b_0]$ como nuevo intervalo.
- Repetimos el proceso anterior y construimos $I_2,I_3,I_4\dots$ hasta obtener
  - una solución exacta de $f(x)=0$ (esto no será lo más frecuente);
  - una aproximación lo "suficientemente buena" de una solución exacta de $f(x)=0$.

Ejemplo (bisección)

- Vamos a resolver la ecuación $x + e^{2x} = 0$.
- La función correspondiente es $f(x) = x + e^{2x}$, $\forall x \in [-1, 0]$.
- $f(-1) \approx -0.864664716 < 0$, $f(0) = 1 > 0$.
- Aplicando bisección obtenemos la siguiente tabla

n	I_n	c_n	$f(c_n)$
0	[-1,0]	-0.5	-0.1321205588285577
1	[-0.5,0]	-0.25	0.3565306597126334
2	[-0.5,-0.25]	-0.375	0.0973665527410147
3	[-0.5,-0.375]	-0.4375	-0.0206379803214916
4	[-0.4375,-0.375]	-0.40625	0.0374973100810799
5	[-0.4375,-0.40625]	-0.421875	0.0082196406400623
6	[-0.4375,-0.421875]	-0.4296875	-0.0062608587147372
7	[-0.4296875,-0.421875]	-0.42578125	0.0009663675926629

- En este momento podemos asegurar que f tiene una raíz de la forma $-0.42\ldots$, es decir, conocemos las dos primeras cifras decimales de la raíz. Por lo tanto cometemos un error menor que una centésima.

Bisección: estimación del número de iteraciones

- Una de las ventajas de bisección es que, fijado el máximo error absoluto permitido, podemos conocer a priori el número de iteraciones necesarias para aproximar la raíz.
  - Sea $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ función continua tal que $f(a)f(b)<0$. Sea $\alpha\in]a,b[$ una raíz de f.
  - Consideramos $I_0=[a_0,b_0]=[a,b]$ y definimos $c_0=\frac{a_0+b_0}{2}$ como la aproximación inicial. El máximo error absoluto cometido es
$$|\alpha-c_0|<\frac{|b_0-a_0|}{2}=\frac{|b-a|}{2}.$$
  - En el siguiente paso de bisección el máximo error absoluto cometido será
$$|\alpha-c_1|<\frac{|b_1-a_1|}{2}=\frac{1}{2}\frac{|b_0-a_0|}{2}=\frac{|b-a|}{2^2}.$$
  - Al aplicar el $n-$ésimo paso, el máximo error absoluto cometido es
$$|\alpha-c_n|<\frac{|b_n-a_n|}{2}=\frac{1}{2}\frac{|b_{n-1}-a_{n-1}|}{2}=\frac{1}{2}\frac{|b-a|}{2^n}=\frac{|b-a|}{2^{n+1}}.$$
- Por consiguiente, si queremos que el máximo error absoluto cometido sea menor o igual que ε, entonces

$$\frac{b-a}{2^{n+1}}\le\varepsilon\Leftrightarrow\frac{b-a}{\varepsilon}\le 2^{n+1}\Leftrightarrow\ln(2^{n+1})\ge\ln\left(\frac{b-a}{\varepsilon}\right)\Leftrightarrow n+1\ge\frac{\ln\left(\frac{b-a}{\varepsilon}\right)}{\ln(2)}.$$

Bisección: ejemplo y conclusiones

Ejemplo

- Consideremos el ejemplo visto en la página 6.
- Si queremos calcular la solución con un error absoluto máximo menor o igual que 10^{-10}, el número de iteraciones necesarias será

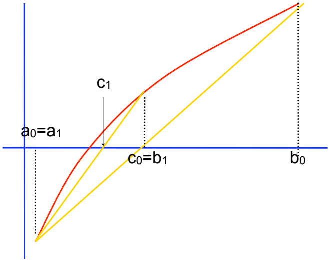
$$n+1 \geq \frac{\ln\left(\frac{0-(-1)}{10^{-10}}\right)}{\ln(2)} = \frac{10\ln(10)}{\ln(2)} \approx 33.2 \Leftrightarrow n \geq 32.2$$

- Por tanto, necesitamos 33 iteraciones.

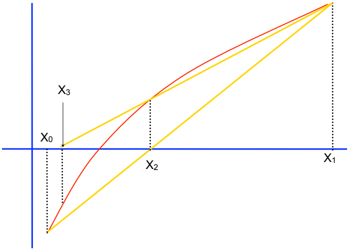
Conclusiones

- El método de bisección
  - siempre converge a una raíz;
  - siempre tenemos localizada una raíz;
  - podemos determinar a priori el número de iteraciones necesarias para alcanzar el máximo error absoluto permitido;
  - sin embargo es un método lento.

- En el método de bisección sólo hemos usado el signo de la función en los extremos de los sucesivos intervalos.
- Ahora vamos a utilizar los valores de la función en los extremos de los sucesivos intervalos.
- Geométricamente la idea es ir calculando el único cero de la recta que pasa por los puntos $(a_i, f(a_i))$ y $(b_i, f(b_i))$, con $i = 0, 1, 2, \ldots$.



Método de regula-falsi



Método de la secante

- Consideremos la recta que pasa por los puntos $(a_i, f(a_i))$ y $(b_i, f(b_i))$.
- La ecuación de dicha recta es

$$\frac{y - f(a_i)}{f(b_i) - f(a_i)} = \frac{x - a_i}{b_i - a_i} \;\Leftrightarrow\; y = (f(b_i) - f(a_i))\frac{x - a_i}{b_i - a_i} + f(a_i) \;\Leftrightarrow$$

$$y = \frac{f(b_i) - f(a_i)}{b_i - a_i}\, x + \frac{b_i f(a_i) - a_i f(b_i)}{b_i - a_i}\,.$$

- Si $f(a_i)f(b_i) < 0$, entonces la recta tiene una raíz que, además, es única (esto es, tiene un único cero).
- Dicha raíz viene dada por la expresión (tras tomar $y = 0$ y despejar x)

$$x = a_i - \frac{f(a_i)(b_i - a_i)}{f(b_i) - f(a_i)} \;\Leftrightarrow\; x = \frac{a_i f(b_i) - b_i f(a_i)}{f(b_i) - f(a_i)}\,.$$

- Teóricamente, cualquiera de las dos expresiones dadas permiten hacer los cálculos. En la práctica (con el ordenador) unas veces será mejor la primera y otras la segunda.

- Como en bisección, en cada paso se considera un intervalo $I_i = [a_i, b_i]$ tal que $f(a_i)f(b_i) < 0$.
- Sin embargo, en lugar de ser c_i el punto medio del intervalo $I_i = [a_i, b_i]$, se determina como el cero de la recta que pasa por los puntos $(a_i, f(a_i))$ y $(b_i, f(b_i))$.

Algoritmo

- Supongamos que $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ es una función continua tal que $f(a)f(b) < 0$.
- Supongamos que $f(a) < 0$ (si $f(a) > 0$ el proceso es similar).
- Tomamos $I_0 = [a_0, b_0] = [a, b]$ y definimos $c_0 = \frac{a_0 f(b_0) - b_0 f(a_0)}{f(b_0) - f(a_0)}$.
- Entonces puede ocurrir que
  - $f(c_0) = 0 \Rightarrow$ Tenemos una raíz de f.
  - $f(c_0) > 0 \Rightarrow$ Tomamos $I_1 = [a_1, b_1] = [a_0, c_0]$ como nuevo intervalo.
  - $f(c_0) < 0 \Rightarrow$ Tomamos $I_1 = [a_1, b_1] = [c_0, b_0]$ como nuevo intervalo.
- Repetimos el proceso anterior y construimos $I_2, I_3, I_4 \ldots$ hasta obtener
  - una solución exacta de $f(x) = 0$ (esto no será lo más frecuente);
  - una aproximación lo “suficientemente buena” de una solución exacta de $f(x) = 0$.

Ejemplo (regula-falsi)

- Vamos a resolver la ecuación $x + e^{2x} = 0$.
- La función correspondiente es $f(x) = x + e^{2x}$, $\forall x \in [-1, 0]$.
- $f(-1) \approx -0.864664716 < 0$, $f(0) = 1 > 0$.
- Aplicando regula-falsi obtenemos la siguiente tabla

n	I_n	c_n	$f(c_n)$
0	[-1,0]	-0.5362894417478770	-0.1941643637004177
1	[-0.5362894417478770,0]	-0.4490918152054460	-0.0417830036157873
2	[-0.4490918152054460,0]	-0.4310799980866960	-0.0088309578088325
3	[-0.4310799980866960,0]	-0.4273064726552365	-0.0018586418592458
4	[-0.4273064726552365,0]	-0.4265137363712736	-0.0003908346987059
5	[-0.4265137363712736,0]	-0.4263471051288963	-0.0000821690132453
6	[-0.4263471051288963,0]	-0.4263120754863191	-0.0000172745078141
7	[-0.4263120754863191,0]	-0.4263047112822529	-0.0000036316136970

- Al contrario de lo que ocurría en bisección, en este momento no podemos asegurar que hayamos aproximado la solución exacta con alguna cifra decimal correcta.
- Sin embargo, por los valores obtenidos, esperamos que una solución aproximada sea de la forma $-0.4263\ldots$, con un error menor que una diezmilésima.
- Se puede comprobar que la solución es -0.4263027510068628 (con un error absoluto menor que 10^{-16}), por lo que en este caso nuestra esperanza era acertada.

Secante

- Al programar regula-falsi, en cada paso debemos hacer una comprobación de signos.
- La idea del método de la secante es suprimir dicha comprobación de signos.
- Para ello, no determinaremos intervalos. En su lugar, construiremos una sucesión de puntos a partir de dos iniciales y aplicando la expresión que determina el cero de una recta que pasa por dos puntos dados.

Algoritmo

- Supongamos que $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ es una función continua tal que $f(a)f(b) < 0$. (En este método esta condición no es necesaria para hacer los cálculos.)
- Tomamos $x_0 = a$, $x_1 = b$.
- Definimos la sucesión $\{x_0, x_1, x_2, x_3, \ldots\}$ mediante la expresión

  $$x_{i+2} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i+1} - x_i)}{f(x_{i+1}) - f(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots,$$

  o la expresión equivalente

  $$x_{i+2} = \frac{x_i f(x_{i+1}) - x_{i+1} f(x_i)}{f(x_{i+1}) - f(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, \ldots.$$

- Es de esperar que la sucesión $\{x_i\}$ converja a una raíz de f.

Ejemplo (secante)

- Vamos a resolver la ecuación $x + e^{2x} = 0$.
- La función correspondiente es $f(x) = x + e^{2x}$, $\forall x \in [-1,0]$.
- Aplicando secante obtenemos la siguiente tabla

n	x_n	$f(x_n)$
0	-1	-0.864664716
1	0	1
2	-0.5362894417478770	-0.1941643637004177
3	-0.4490918152054460	-0.0417830036157873
4	-0.4251822061621418	0.0020769988939228
5	-0.4263144503184451	-0.0000216740923086
6	-0.4263027570415408	-0.0000000111798776
7	-0.4263027510068302	0.0000000000000602
8	-0.4263027510068627	0.0000000000000001
9	-0.4263027510068627	0.0000000000000001

- Como en regula-falsi, no podemos asegurar que hemos aproximado la solución exacta con alguna cifra decimal correcta.
- Como -0.4263027510068628 es una solución de la ecuación dada (con un error absoluto menor que 10^{-16}), hemos alcanzado una buena aproximación de la misma.
- Por cierto, no podemos calcular la décima iteración porque dividiríamos por cero.

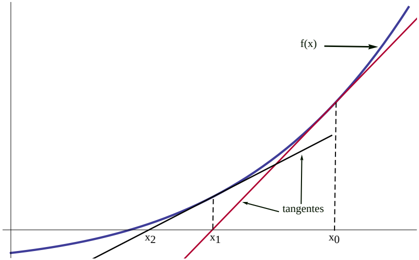
Regula-falsi y secante: conclusiones y resultado sobre convergencia

- El método de regula-falsi
  - siempre converge a una raíz;
  - siempre tenemos localizada una raíz;
  - es más rápido que bisección;
  - pero no podemos determinar a priori el número de iteraciones necesarias para alcanzar el máximo error absoluto permitido (¿cuándo paramos de hacer cuentas?).
- El método de la secante
  - no siempre converge a una raíz;
  - no tenemos localizada una raíz;
  - no podemos determinar a priori el número de iteraciones necesarias para alcanzar el máximo error absoluto permitido (¿cuándo paramos de hacer cuentas?);
  - pero es más rápido que bisección y menos costoso computacionalmente que regula-falsi.

Convergencia del método de la secante

- Hipótesis:
  - $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ es continua en $[a,b]$ con $f(a)f(b) < 0$.
  - f es derivable en $]a,b[$ con $f'(x) \neq 0$ en $]a,b[$.
  - f no cambia de convexidad en $[a,b]$ (si existe f'', esto equivale a que $f''(x)$ no cambie de signo en $]a,b[$).
- Tesis: el método de la secante converge a la única solución de la ecuación $f(x) = 0$.

- Geométricamente, en el método de la secante se utilizan rectas secantes a una curva.
- Geométricamente, en el método de Newton-Raphson se utilizan rectas tangentes a una curva.
- La idea es ir calculando el único cero de la recta que pasa por un punto $(x_i, f(x_i))$ con pendiente $f'(x_i)$, para $i = 0, 1, 2, \ldots$.



Método de Newton-Raphson

- Consideremos la recta que pasa por el puntos $(x_i, f(x_i))$ con pendiente $f'(x_i)$.
- La ecuación de dicha recta es

$$y - f(x_i) = f'(x_i)(x - x_i).$$

- Si $f'(x_i) \neq 0$, entonces la recta tiene una raíz que, además, es única (esto es, tiene un único cero).
- Dicha raíz viene dada por la expresión (tras tomar $y = 0$ y despejar x)

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

- Como en el caso del método de la secante, construiremos una sucesión de puntos.
- Pero en Newton-Raphson consideramos un único punto inicial y aplicamos la expresión que determina el cero de una recta que pasa por un punto dado con pendiente dada.

Algoritmo

- Supongamos que $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ es una función continua tal que $f(a)f(b) < 0$. (En este método esta condición no es necesaria para hacer los cálculos.)
- Tomamos $x_0 \in [a,b]$ como aproximación inicial.
- Definimos la sucesión $\{x_0, x_1, x_2, x_3, \dots\}$ mediante la expresión

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \quad i = 0, 1, 2, \dots.$$

- Es de esperar que la sucesión $\{x_i\}$ converja a una raíz de f.

Ejemplo (Newton-Raphson)

- Vamos a resolver la ecuación $x + e^{2x} = 0$.
- La función correspondiente es $f(x) = x + e^{2x}$, $\forall x \in [-1, 0]$.
- Aplicando secante obtenemos la siguiente tabla

n	x_n	$f(x_n)$	$f'(x_n)$
0	0	1	3
1	-0.333333333333333	0.180083785699259	2.026834238065184
2	-0.42218311804546	0.00764656440131417	1.859659364893548
3	-0.426294927200225	$1.4494479413484918 \cdot 10^{-5}$	1.852618843359277
4	-0.426302750978692	$5.218986354194044 \cdot 10^{-11}$	1.852605502061763
5	-0.426302751006863	$-5.551115123125783 8\cdot 10^{-17}$	1.852605502013725
6	-0.426302751006863	$-5.5511151231257838 \cdot 10^{-17}$	1.852605502013726
7	-0.426302751006863	$-5.5511151231257838 \cdot 10^{-17}$	1.852605502013725
8	-0.426302751006863	$-5.5511151231257838 \cdot 10^{-17}$	1.852605502013726

- Como en regula-falsi y secante, no podemos asegurar que hemos aproximado la solución exacta con alguna cifra decimal correcta.
- Como -0.4263027510068628 es una solución de la ecuación dada (con un error absoluto menor que 10^{-16}), hemos alcanzado una buena aproximación de la misma.

Newton-Rapshon: conclusiones y resultado sobre convergencia

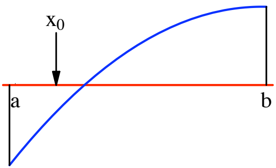
- El método de Newton-Rapshon
  - no siempre converge a una raíz;
  - no tenemos localizada una raíz;
  - no podemos determinar a priori el número de iteraciones necesarias para alcanzar máximo error absoluto permitido (¿cuándo paramos de hacer cuentas?);
  - necesitamos calcular derivadas;
  - pero es bastante más rápido que bisección, regula-falsi y secante.
  - Aunque hay un problema pendiente, ¿qué aproximación inicial debemos tomar?

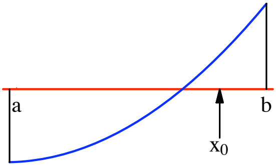
Convergencia del método de Newton-Rapshon

- Hipótesis:
  - $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ es continua en $[a,b]$ con $f(a)f(b) < 0$.
  - f es derivable en $]a,b[$ con $f'(x) \neq 0$ en $]a,b[$.
  - f no cambia de convexidad en $[a,b]$ (si existe f'', esto equivale a que $f''(x)$ no cambie de signo en $]a,b[$).
- Tesis:
  - la ecuación $f(x) = 0$ admite una única solución en $[a,b]$;
  - el método de Newton-Rapshon es convergente si tomamos, como aproximación inicial, cualquier $x_0 \in]a,b[$ tal que $f(x_0)f''(x_0) > 0$.

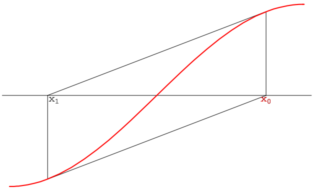
    (Necesitamos que f sea dos veces derivable o poder “ver” su convexidad.)

- El resultado de convergencia se puede representar en los dos siguientes dibujos.





- Algunas veces se puede dar un fenómeno de oscilación y no llegar a la solución.



- Por ejemplo, en la ecuación $x^3 - 9x^2 + 24x - 18 = 0$, si empezamos con $x_0 = 3 + \sqrt{\frac{3}{5}}$, obtenemos una sucesión en la que se alternan los valores $3 + \sqrt{\frac{3}{5}}$ y $3 - \sqrt{\frac{3}{5}}$.

- En los métodos iterativos se transforma la ecuación original $f(x) = 0$ en una ecuación de punto fijo $g(x) = x$, de forma que ambas son equivalentes, es decir, ambas tienen las mismas soluciones.
- En lugar de buscar α tal que $f(\alpha) = 0$, buscaremos α de manera que $g(\alpha) = \alpha$.
- Si $g(\alpha) = \alpha$, se dice que α es un punto fijo de g.

Ejemplo: Newton-Raphson

- El método de Newton-Raphson es un método de punto fijo pues

$$f(x) = 0 \Leftrightarrow x = g(x),$$

donde

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

- El método de la secante no se puede considerar un método de punto fijo pues en el cálculo de cada iteración se emplean las dos iteraciones inmediatamente anteriores.

Teorema del punto fijo (para una función derivable y contractiva)

- Hipótesis:
  - $g:[a,b]\to\mathbb{R}$ es continua en $[a,b]$ y derivable en $]a,b[$.
  - $g([a,b])\subseteq[a,b]$.
  - $\max_{x\in[a,b]}|g'(x)|<1$.
- Tesis:
  - la ecuación $g(x)=x$ admite una único punto fijo $\alpha\in[a,b]$;
  - para cualquier $x_0\in[a,b]$ que elijamos, la sucesión $\{x_n\}$ generada por la iteración $x_{n+1}=g(x_n)$ converge a α.

Definición: orden de convergencia

- Sea la ecuación de punto fijo $g(x)=x$ con punto fijo α.
- Sea $\{x_n\}$ una sucesión de puntos generada por la iteración $x_{n+1}=g(x_n)$ que converge a α.
- Decimos que $\{x_n\}$ converge a α con *orden de convergencia r* si existen constantes reales positivas K,r tales que

$$\lim_{n\to+\infty}\frac{|\alpha-x_{n+1}|}{|\alpha-x_n|^r}=K.$$

Orden de convergencia (sigue)

- En la práctica interesa que $r \geq 1$.
- Si $r = 1$, entonces $-\frac{1}{\log(K)}$ es una estimación del número de iteraciones necesarias para ganar una cifra significativa de exactitud en la aproximación a la solución.
- Si $r > 1$, entonces en cada iteración el número de cifras significativas exactas se múltiplica (aproximadamente) por r.

Resultado: determinación del orden de convergencia

- Hipótesis:
  - Sea $g \in C^r([a,b])$ tal que $g(\alpha) = \alpha$.
  - Supongamos que $g'(\alpha) = g''(\alpha) = \cdots = g^{(r-1)}(\alpha) = 0$ y que $g^{(r)}(\alpha) \neq 0$.
- Tesis:
  - El método iterativo $x_{n+1} = g(x_n)$ (convergente a α) tiene orden de convergencia igual a r.

Ejemplos

- El método de Newton-Raphson tiene convergencia cuadrática.
  (Se comprueba aplicando directamente el resultado anterior.)
- Aunque no son métodos iterativos, bisección tiene convergencia lineal; secante y regula-falsi tienen convergencia superlineal $\left(r = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.61803\right)$.

- J.M. Sanz-Serna. “Diez lecciones de cálculo numérico (Segunda edición)”. Universidad de Valladolid (Secretariado de Publicaciones e Intercambio Editorial), 2010.

Apuntes de clase elaborados por Aureliano M. Robles Pérez.