Cálculo Numérico I

Cálculo de ceros de funciones

El objetivo de la presente sección es el de resolver la ecuación $f(x) = 0$, siendo f una función continua, con una precisión prefijada. Generalmente esta precisión se medirá por medio del error relativo en el valor obtenido.

5 Teorema de la aplicación contractiva

El problema de hallar la solución de la ecuación $f(x) = 0$ puede transformarse en el de hallar la solución de una ecuación de la forma $F(x) = x$. Esta última ecuación se obtendrá transformando de alguna manera la ecuación original, por ejemplo $f(x) + x = x$ o más generalmente $k(x)f(x) + x = x$ para una función arbitraria k. Una buena elección de la función $k(x)$ podría garantizar la existencia del punto fijo buscado y a la vez proporcionar un método de aproximación a la solución.

Las condiciones suficientes se explicitan en el siguiente teorema.

Teorema 1 (Teorema de la Aplicación Contractiva). *Sea $E = [a, b]$ un intervalo cerrado de $\mathbb{R}$ y sea F una aplicación de E con valores en E que verifica la siguiente propiedad: existe c, $0 < c < 1$ tal que para cualesquiera x, y de E se tiene que*

$$|F(x) - F(y)| \leq c\,|x - y|. \tag{5.1}$$

Entonces existe un único punto $\bar{x}$ de E tal que $F(\bar{x}) = \bar{x}$.

Demostración. Sea x_0 un punto cualquiera de E. Se define la sucesión (x_n) por medio de la ley de recurrencia $x_{n+1} = F(x_n)$. Obsérvese que

$$|x_n, x_{n+1}| \leq c{\cdot}|x_{n-1} - x_n| \leq \cdots \leq c^n{\cdot}|x_0 - x_1|$$

y que por tanto

$$\begin{aligned}
|x_{n+k} - x_n| &\leq \sum_{j=1}^{k} |x_{n+j} - x_{n+j-1}| \\
&\leq |x_1 - x_0| \sum_{j=1}^{k} c^{n+j-1} \\
&\leq |x_1 - x_0| c^{n-1}
\end{aligned}$$

Tomando n suficientemente avanzado $|x_{n+k} - x_n|$ se hará arbitrariamente pequeño independientemente de k, y por tanto la sucesión (x_n) será de Cauchy. Sea $\bar{x}$ su límite, dado que E es compacto, $\bar{x} \in E$. Se tiene en primer lugar que, por continuidad de F —la condición F continua es consecuencia de (5.1)—, $\bar{x}$ es punto fijo de F. En segundo lugar, por la contractividad (5.1) de la función, este punto fijo será único. □

6 Métodos iterativos

La demostración del teorema anterior sugiere que para calcular aproximadamente el valor del punto fijo de la aplicación F puede recurrirse al siguiente proceso. Se parte de un punto cualquiera x_0 de E e iterativamente se van calculando los términos x_n de la sucesión por medio de la regla $x_n = F(x_{n-1})$. Tras cada cálculo se estima si la aproximación que x_n proporciona de $\bar{x}$ es suficiente; en caso afirmativo se detiene el proceso; en caso negativo se prosigue.

Si la función F está definida sobre un intervalo $[a, b]$ con valores en $[a, b]$ y además tiene derivada que verifica $|F'| \leq c < 1$ entonces es contractiva en $[a, b]$. Si además F' es continua entonces el error en x_{n+1} puede estimarse por medio de

$$\frac{(x_n - x_{n+1})^2}{x_{n+1} - 2x_n - x_{n-1}}.$$

Este resultado es consecuencia de la siguiente proposición (véase también la Sección 9 en la página 6).

Proposición 2. *Sea $F : [a, b] \to [a, b] \in C^1$ tal que $|F'| \leq c < 1$. Si $x_0 \in [a, b]$ y la sucesión (x_n) está definida por $x_{n+1} = F(x_n)$ entonces se tiene que*

$$\lim_n \frac{\bar{x} - x_{n+1}}{\bar{x} - x_n} = \lim_n \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} = F'(\bar{x}).$$

donde $\bar{x}$ es el limite de la sucesión (x_n)

Demostración. Que $\bar{x}$ existe y pertenece a $[a, b]$ está garantizado por el teorema de la aplicación contractiva. El teorema del valor medio implica que

$$x_{n+1} - \bar{x} = F'(\xi_n)(x_n - \bar{x}), \quad \xi_n \in I(x_n, \bar{x}) \tag{6.2}$$

donde $I(x_n, \bar{x})$ representa el intervalo abierto con extremos x_n y $\bar{x}$. Se tiene por tanto que

$$\lim_n \frac{x_{n+1} - \bar{x}}{x_n - \bar{x}} = F'(\bar{x}).$$

Por otra parte

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} = \frac{(x_{n+1} - \bar{x}) - (x_n - \bar{x})}{(x_n - \bar{x}) - (x_{n-1} - \bar{x})} = \frac{(F'(\xi_n) - 1)(x_n - \bar{x})}{(x_n - \bar{x}) - \frac{\bar{x}_n - \bar{x}}{F'(\xi_{n-1})}}$$

donde en la última igualdad se ha utilizado dos veces (6.2) para valores de n consecutivos. Se obtiene entonces que

$$\lim_n \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} = \lim_n \frac{F'(\xi_n) - 1}{F'(\xi_{n-1}) - 1} F'(\xi_{n-1}) = F'(\bar{x}).$$

□

7 El método de Newton

Como ya se ha explicado más arriba, el problema de hallar la solución de la ecuación $f(x) = 0$ en un intervalo $[a, b]$ puede transformarse en el de hallar el único punto fijo de una aplicación contractiva F. Esta función F puede elegirse de distintas formas. Suponiendo que nuestra función de partida f es derivable, una condición suficiente para que la aplicación F sea contractiva en el intervalo $[a, b]$ es que $|F'| \leq c < 1$ en el mismo intervalo. Si elegimos

$$F(x) = x + k(x)f(x)$$

como se ha sugerido más arriba y tratamos que $|F'(x)|$ sea lo menor posible en un intervalo de $\bar{x}$, una posible elección sería aquella que anulara $|F'|$ en el punto $\bar{x}$. Dado que $f(\bar{x}) = 0$ se tiene que $F'(\bar{x}) = 1 + k(\bar{x})f'(\bar{x})$. Eligiendo $k(x) = -\frac{1}{f'(x)}$ se verifica esta condición. Se tendrá entonces $F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$, que por continuidad será una aplicación contractiva en un intervalo que contiene a $\bar{x}$. El método de Newton consiste en comenzar con un valor x_1 próximo a la solución (una solución aproximada) y mejorar su aproximación por medio de

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

el proceso se para cuando, para nuestros propósitos, no podamos distinguir la diferencia entre dos valores x_n consecutivos.

Ejemplo 7.1. Resuelve la ecuación $x^2 - x - 1 = 0$. Tiene una solución en el intervalo $[1, 2]$. La función de iteración será

$$F(x) = x - \frac{x^2 - x - 1}{2x - 1} = \frac{x^2 + 1}{2x - 1}.$$

Comenzamos la iteración con $x_1 = 1'5$. Obtenemos

1	1'500000
2	1'625000
3	1'618056
4	1'618034
5	1'618034

Ejemplo 7.2. Cálculo del inverso de un número (o como construir una máquina de dividir utilizando solamente sumas y productos). Dado $a > 0$ queremos hallar $1/a$. Resolvemos $x = 1/a$, equivalente a $a - 1/x = 0$. Aplicamos la regla de Newton a esta ecuación $x_{n+1} = x_n(2 - ax_n)$. Hagamos el cálculo para $a = 7$, comenzamos en $x_0 = 0'1$

0	0'1
1	0'13
2	0'1417
3	0'14284777
4	0'1428571422
5	0'14285714285714

Si observamos el número de dígitos que se estabiliza en cada paso vemos que aproximadamente se dobla, lo que significa —si pensamos que los dígitos estabilizados son correctos— que el error en cada paso es el cuadrado del error en el paso anterior. Veremos a continuación que este es el comportamiento esperado.

ORDEN DE CONVERGENCIA

Definición 1. Una sucesión (x_n) converge a $\bar{x}$ con orden p si $\lim_n x_n = \bar{x}$ y además $p > 0$ es el mayor número real para el que existe un número $K > 0$ tal que $\forall n \geq 1$, $|x_{n+1} - \bar{x}| \leq K|x_n - \bar{x}|^p$

Si el cero de f es simple entonces el método de Newton tiene orden de convergencia al menos *dos* (convergencia cuadrática). En efecto, dado que $f(\bar{x}) = 0$, y $f'(\bar{x}) \neq 0$, se obtiene que

$$F'(x) = 1 - \frac{f'(x)^2 - f''(x)f(x)}{f'(x)^2} \qquad \text{y entonces} \qquad F'(\bar{x}) = 0,$$

por tanto

$$|x_{n+1} - \bar{x}| = |F(x_n) - F(\bar{x})| = |F'(\bar{x})||x_n - \bar{x}| + \frac{1}{2}|F''(\xi)||x_n - \bar{x}|^2$$

de forma que si x_n y x_{n+1} están dentro de I, intervalo de convergencia del método,

$$|x_{n+1} - \bar{x}| \leq K|x_n - \bar{x}|^2 \qquad \text{donde} \quad K = sup\left\{\frac{1}{2}\left|F''(x)\right| |x \in I\right\}.$$

Esta propiedad explica el comportamiento de los iterados observado en los ejemplos anteriores.

Interpretación geométrica. El método descrito tiene una fácil interpretación geométrica, por la cual recibe también el nombre de *método de la tangente*. Si representamos gráficamente la función f, el problema que queremos resolver es el de hallar la intersección (o al menos una de ellas) de la gráfica con el eje x. Sea x_0 una aproximación de la solución. Para buscar una aproximación mejor hallamos el valor $f(x_0)$ y trazamos la recta tangente a la gráfica $y = f(x)$ en el punto $(x_0, f(x_0))$. En vez de tomar como solución la intersección de la gráfica con el eje x, tomamos como nueva aproximación x_1 a la solución la intersección de la recta tangente con el eje x. Un sencillo cálculo produce

MÉTODO DE LA TANGENTE

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

es decir, la misma fórmula obtenida anteriormente.

8 El método de la secante

Una vez vista la interpretación geométrica del método de Newton podemos plantearnos el utilizar un método geométricamente parecido en el cual en vez de utilizar como aproximación a la gráfica de $y = f(x)$ su tangente en un punto próximo al cero buscado, utilicemos la secante que pasa por dos de sus puntos también próximos a este cero.

Supongamos que el intervalo $[a, b]$ aísla el cero buscado, que es un cero simple, y por tanto $f(a)f(b) < 0$. Utilizando los valores a y b como aproximaciones al cero buscado esperamos que una mejor aproximación será la intersección de la recta que pasa por los puntos $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$ con el eje X. El valor de esta abscisa será

$$c = b - \frac{f(b)}{f(b) - f(a)}(b - a)$$

Al igual que en el caso anterior este procedimiento puede iterarse tratando de mejorar la aproximación dada por c. Sin embargo en este caso cada iteración está basada no solamente en la última aproximación obtenida sino en las dos últimas. La regla que define la sucesión de iterados a partir de los dos primeros valores x_0 y x_1 es la siguiente:

$$\bar{x}_{n+1} = x_n - \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} f(x_n).$$

Obsérvese que, en comparación con el método de Newton, aquí no necesitamos evaluar f'. Habrá que evaluar la función f en dos puntos distintos; sin embargo en cada paso es suficiente conservar la última evaluación del paso anterior.

9 El método de extrapolación de Aitken

Sea $F : [a, b] \to [a, b]$ una función diferenciable tal que

$$\sup_{x \in [a,b]} |F'(x)| = M < 1$$

Por el teorema de la aplicación contractiva implica $\exists! \bar{x}$ tal que $F(\bar{x}) = \bar{x}$. Además, para todo $x \in [a, b]$, $\lim_n F^n(x) = \bar{x}$.
Fijamos x_0 y sea $x_n = F^n(x_0)$, entonces

$$\lim_n \frac{\bar{x} - x_n}{\bar{x} - x_{n-1}} = F'(\bar{x})$$

Si $F'(\bar{x}) = 0$ entonces la convergencia de la sucesión (x_n) hacia $\bar{x}$ es cuadrática. Sin embargo, si $F'(\bar{x}) \neq 0$ la convergencia será solamente lineal. Veamos un método que nos permite acelerar la convergencia a partir de los iterados calculados. Más concretamente, corregiremos el valor de la aproximación x_{n+1} por medio de los valores x_{n-1}, x_n, y el propio x_{n+1}.
Estudiamos el cociente

$$d_n = \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} = \frac{(\bar{x} - x_n) - (\bar{x} - x_{n+1})}{(\bar{x} - x_{n-1}) - (\bar{x} - x_n)} =$$

$$= \frac{\bar{x} - x_n}{\bar{x} - x_{n-1}} \frac{1 - \dfrac{\bar{x} - x_{n+1}}{\bar{x} - x_n}}{1 - \dfrac{\bar{x} - x_n}{\bar{x} - x_{n-1}}} = F'(\xi_{n-1}) \frac{1 - F'(\xi_n)}{1 - F'(\xi_{n-1})} \qquad (9.3)$$

donde los puntos ξ_k caen en los intervalos que unen los puntos $\bar{x}$ y x_k según el teorema del valor medio.
Si tomamos el límite de la última fracción obtenemos, por continuidad de F',

$$\lim_n d_n = F'(\bar{x}).$$

La fracción 9.3 puede utilizarse entonces como aproximación de la derivada F' cerca del punto $\bar{x}$, por tanto

$$d_n = \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} \approx F'(\bar{x}),$$

y entonces

$$\bar{x} - x_{n+1} = (\bar{x} - x_n) + (x_n - x_{n+1}) \approx \frac{\bar{x} - x_{n+1}}{d_n} + (x_n - x_{n+1})$$

$$(1 - \frac{1}{d_n})(\bar{x} - x_{n+1}) = x_n - x_{n+1}$$

$$\bar{x} - x_{n+1} \approx \frac{d_n}{d_n - 1}(x_n - x_{n+1})$$

De esta última expresión obtenemos la aproximación

$$c \approx x_{n+1} + \frac{d_n}{1 - d_n}(x_{n+1} - x_n)$$

que es la llamada fórmula de extrapolación de Aitken. Este método nos da a partir de los iterados (x_n) las correcciones $(\hat{x}_n)$; una vez substituidas las d_n obtenemos

$$\hat{x}_{n+1} = x_{n+1} - \frac{(x_{n+1} - x_n)^2}{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}} = \frac{x_{n+1}x_{n-1} - {x_n}^2}{x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}}.$$

10 Tratamiento de raíces dobles por el método de Newton

Como hemos visto, el método de Newton tiene orden de convergencia *dos* cuando el cero al que converge es simple. Sin embargo, cuando el cero es múltiple la convergencia es lineal. La razón es la siguiente. Si c es un cero de orden $m \geq 2$ de f entonces $f(x) = (x - \bar{x})^m g(x)$ donde $g(\bar{x}) \neq 0$. Por tanto,

$$\begin{aligned}
F(x) &= x - (x - \bar{x})\frac{g(x)}{mg(x) + (x - \bar{x})g'(x)} \\
F'(x) &= \\
&\quad 1 - \frac{g(x)}{mg(x) + (x - \bar{x})g'(x)} - (x - \bar{x})\frac{d}{dx}\left(\frac{g(x)}{mg(x) + (x - \bar{x})g'(x)}\right) \\
F'(\bar{x}) &= 1 - \frac{1}{m} \neq 0
\end{aligned} \tag{10.4}$$

por tanto la convergencia es lineal.

Estudiaremos varios métodos para acelerar esta convergencia.

Un primer método consistirá en aplicar la extrapolación de Aitken a la sucesión de iterados de Newton.

Si pudiéramos determinar el valor de m entonces también podríamos recuperar la convergencia cuadrática modificando el método de Newton de la siguiente manera

$$F(x_{n+1}) = x_n - m\frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \tag{10.5}$$

ya que entonces, al repetir los cálculos de (10.4), obtendríamos

$$F'(\bar{x}) = 1 - \frac{m}{m} = 0.$$

O bien podríamos calcular el cero simple de $f^{(m-1)}$.

El valor de m se puede determinar experimentalmente por medio de la estimación de $F'(\bar{x})$ a partir de los iterados. Resulta que, como hemos visto anteriormente

$$\lim_n \frac{x_{n+1} - \bar{x}}{x_n - \bar{x}} = \lim_n \frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}} = F'(\bar{x}) = \frac{m-1}{m},$$

de forma que si al aplicar el método de Newton observamos que la convergencia (el número de cifras decimales que se estabilizan) es muy lenta, sospecharemos que estamos tratando de determinar un cero doble y trataremos de ver si los cocientes

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}}$$

se estabilizan cerca de un valor λ; en caso afirmativo determinamos el entero m por medio de $\frac{m-1}{m} = \lambda$.

Ejemplo 10.1. Cálculo de $\sqrt{2}$ como cero doble del polinomio $x^4 - 4x^2 + 4$ por diversos métodos.

$$\begin{aligned}
\text{Método de Newton:} \quad & F(x) = \frac{3x^4 - 4x^2 - 4}{4x^3 - 8x} \\
\text{Newton doble:} \quad & F(x) = \frac{x^4 - 4}{2x^3 - 4x} \\
\text{Newton derivada:} \quad & F(x) = \frac{2x^3}{3x^2 - 2} \\
\text{Aitken (sobre Newton):} \quad & \hat{x}_{k+1} = \frac{x_{k+1}x_{k-1} - x_k^2}{x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}}.
\end{aligned}$$

Iniciamos todos los métodos con $x_0 = 1'5$.

NEWTON	NEWTON DOBLE	NEWTON DER.	AITKEN
1'5	1'5	1'5	
1'458333333	1'416666667	1'421052632	
1'436607143	1'414225686	1'414262619	1'4129
1'425497619	1'414214593	1'414213565	1'413872357
1'419877922	1'414216893	1'414213565	1'414125283
1'417051391	1'414214181		1'414227626

Podemos observar que si sobre la columna de Newton simple calculamos los cocientes

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{x_n - x_{n-1}}$$

los tres primeros valores son: 0’5214, 0’5113, 0’5058; se estabilizan sobre el valor $\lambda = 0'5$ por tanto $m = 2$, como ya sabíamos.

11 El método de Muller

Consiste en sustituir la función f por un polinomio de segundo grado $P(x)$ en un intervalo que contenga la solución buscada y resolver $P(x) = 0$. Para ello se parte de tres puntos x_0, x_1, x_2 en dicho intervalo y se localiza la intersección de la cónica que pasa por $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, $(x_2, F(x_2))$ con el eje X: x_3. Se itera el proceso obteniéndose x_{n+1} con base en x_{n-2}, x_{n-1}, x_n.