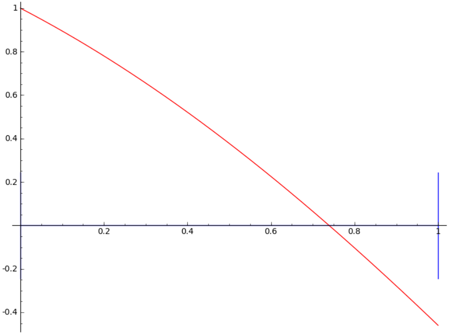
Cálculo de los ceros de una función

Cálculo Numérico y Estadística
Grado en Química y Grado en Enología

J.L. Bravo

Curso 2021-2022

Planteamiento del problema



Tenemos una función $f(x)$ **continua** en un intervalo $[a, b]$.

Se cumple que $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos en el intervalo.

Entonces el Teorema de Bolzano nos asegura la existencia de una raíz.

Los métodos de dos puntos tratan de reducir la anchura del intervalo manteniendo el cambio de signo.

Método de la bisección

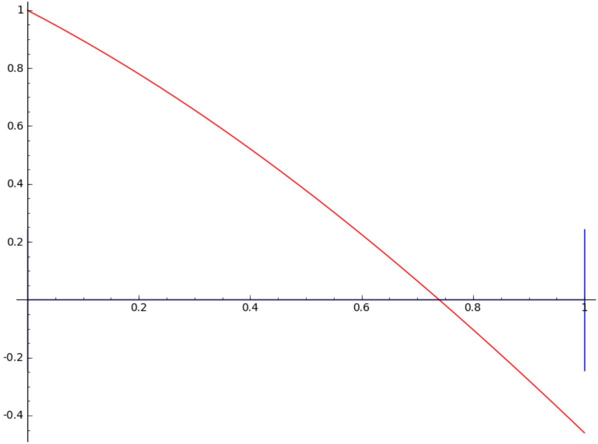
El algoritmo de la bisección es el siguiente:

1. Calculamos $c = \dfrac{a+b}{2}$, el punto medio del segmento $[a, b]$.
2. Calculamos $f(c)$ y lo comparamos con $f(a)$ y $f(b)$.
   - Si $f(a)$ y $f(c)$ tienen distinto signo, tomamos $[a, c]$ como nuevo segmento y volvemos al paso 1.
   - Si $f(c)$ y $f(b)$ tienen distinto signo, tomamos $[c, b]$ como nuevo segmento y volvemos al paso 1.
3. Repetimos el proceso tantas veces como sea necesario hasta estar en el margen de error fijado.
   - Podemos establecer un error máximo permitido (0.01, 0.005, 0.0001,...)
   - o bien una precisión de d cifras decimales (equivale a un error máximo de $0.5 \cdot 10^{-d}$).

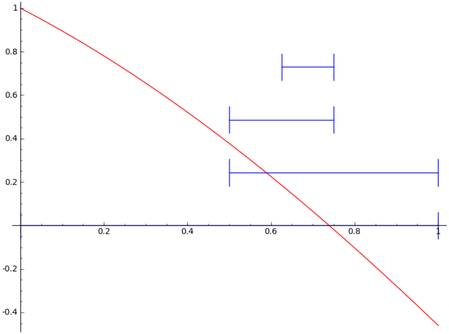
Método de la bisección

Ejemplo 1: $f(x) = -x + \cos(x)$, $[a, b] = [0, 1]$.

$f(a) = 1$, $f(b) = -0.459698$



Método de la bisección



Ejemplo 1: $f(x) = -x + \cos(x)$, $[a, b] = [0, 1]$.

$f(a) = 1$, $f(b) = -0.459698$

- c=0.5, $f(c) = 0.377582$
  $[a, b]$=[0.5,1].
- c=0.75, $f(c) = -0.018311$,
  $[a, b]$=[0.5,0.75].
- c=0.625, $f(c) = 0.185963$,
  $[a, b]$=[0.625,0.75].

Error del método de la bisección

- Si partimos de un intervalo $[a, b]$, el error que estamos cometiendo es $E_0 = b - a$.
- Tomamos $c = (a + b)/2$ y pasamos a uno de los intervalos $[a, c]$ ó $[c, b]$. En cualquier caso, el error es la mitad que el anterior: $E_1 = E_0/2 = \frac{b-a}{2}$.
- Si hacemos n iteraciones:

$$E_n = \frac{E_{n-1}}{2} = \frac{E_{n-2}}{2^2} = \ldots = \frac{E_0}{2^n}, \qquad \boxed{E_n = \frac{b-a}{2^n}}$$

De este modo, podemos calcular el número de iteraciones necesarias para conseguir cierta precisión T, imponiendo que $\dfrac{b-a}{2^n} \leq T$ y despejando n en función de T.

Error del método de la bisección

Ejemplo 1: *Queremos estimar el valor de la raíz de $f(x)$, con un error menor que* $5 \cdot 10^{-4}$. Imponemos entonces

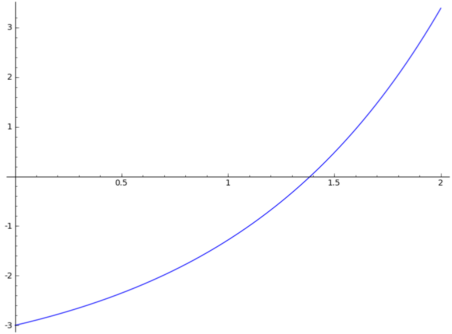
$$\frac{b-a}{2^n} \leq 0.5 \cdot 10^{-3} \rightarrow \ \frac{1}{2^n} \leq 0.0005$$

$$2^n \geq 1/0.0005 = 2000 \ \rightarrow n \geq 10.97 \ \rightarrow n = 11$$

Tenemos que hacer 11 iteraciones del algoritmo de bisección.
Otra forma de estimar el error que estamos cometiendo es ir calculando las diferencias entre los puntos medios de los intervalos: $E_0 = b - a = 1$,

$E_1 = 1/2 = 0.5$, $E_2 = 0.75 - 0.5 = 0.25$, $E_3 = 0.75 - 0.625 = 0.125$,...

Planteamiento del problema



Tenemos una función $f(x)$ **continua** y un punto inicial x_0.

Queremos calcular un cero de $f(x)$ próximo a x_0.

Los métodos de un punto tratan de obtener el cero utilizando información sobre la derivada.

Método de Newton-Raphson

Partimos de una función $f(x)$ y un punto inicial x_0.

Calculamos el siguiente punto x_1 como el punto en el que la tangente a la gráfica de $f(x)$ en el punto $(x_0, f(x_0))$ corta el eje x.

La ecuación de la tangente es:

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$$

Imponemos que corte el eje x:

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

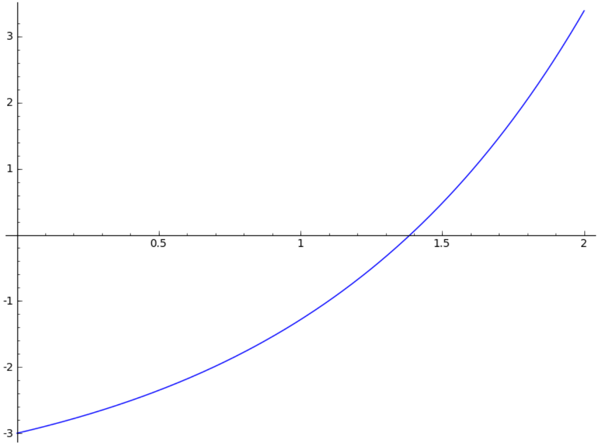
Despejando $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$.

Repitiendo el proceso, $x_2 = x_1 - f(x_1)/f'(x_1)$.

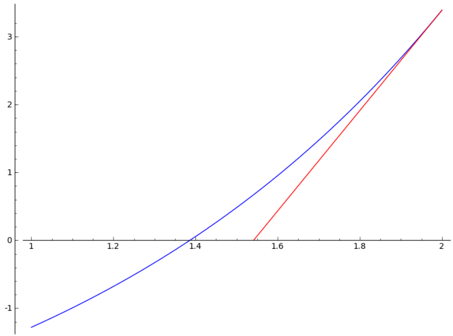
$$\boxed{x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)}$$

Método de Newton-Raphson: ejemplo

$f(x) = e^x - 4$, $x_0 = 2$



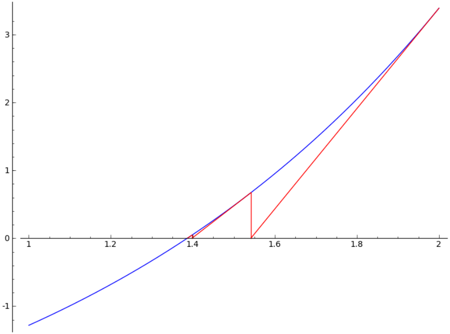
Método de Newton-Raphson: ejemplo



$f(x) = e^x - 4$, $x_0 = 2$.

- $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0) =$ 1.54134113294645

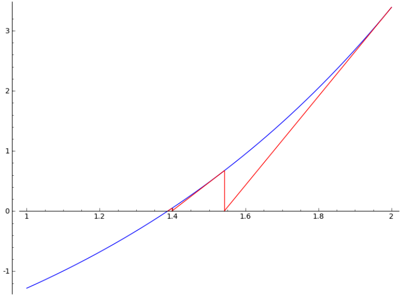
Método de Newton-Raphson



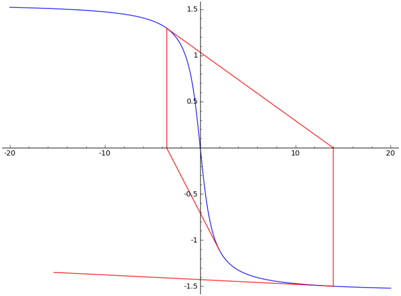
$f(x) = e^x - 4$, $x_0 = 2$.

- $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0) = 1.5413411329464$5
- $x_2 = x_1 - f(x_1)/f'(x_1) = 1.39771625526465$
- $x_3 = x_2 - f(x_2)/f'(x_2) = 1.38635934331094$
- En este caso, podemos calcular la solución exacta: $x_4 = \log(4) = 1.38629436111989$

Convergencia del método



Convergente



No convergente

Convergencia

Teorema

Sea $f \in \mathcal{C}^2([a,b])$ *(segunda derivada continua en* $[a,b]$*), de la cual sabemos que posee una raíz* r *en* $[a,b]$*.*

Si $f'(r) \neq 0$*, entonces existe un intervalo centrado en* r *tal que la sucesión* $\{x_n\}$ *del método de Newton-Raphson converge a la raíz, siempre que el punto inicial* x_0 *se encuentre dentro de dicho entorno.*

Proposición

Sea $f \in \mathcal{C}^2([a,b])$*, con una raíz* r *en* $[a,b]$*.*

Si $f'(r) > 0$*,* $f''(x) > 0$ *(*f *es estrictamente creciente en* r *y convexa) para todo* $x \in [a,b]$*, entonces la sucesión* $\{x_n\}$ *converge a* r *para todo valor inicial* $x_0 > r$*.*

Analogamente si $f'(r) < 0$ *y/o* $f''(x) < 0$ *para todo* $x \in [a,b]$ *(*f *estrictamente decreciente y cóncava).*

Error

¿Cuál es el error del método?

Supongamos que

1. $\bar{x}$ es la única raíz de $f(x)$ en un intervalo $[a, b]$.
2. x_n es la sucesión dada por el método de Newton-Raphson.
3. $\bar{x}, x_i \in [a, b]$ para todo $i \leq n$.

Entonces

$$|\bar{x} - x_n| \leq \frac{M}{2m}|x_n - x_{n-1}|^2,$$

donde

$$M = \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|, \quad m = \min_{x\in[a,b]} |f'(x)|.$$

Método de la secante

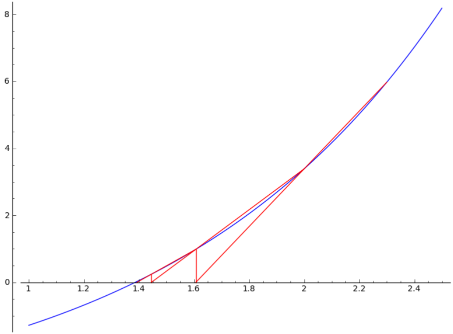
Partimos de una función $f(x)$ y de dos puntos iniciales x_0, x_1. Calculamos el siguiente punto x_2 como el punto en el que la recta (secante) determinada por los puntos $(x_0, f(x_0))$ y $(x_1, f(x_1))$ corta el eje X.
La ecuación de la secante es:

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

Imponemos que corte el eje X: $0 - f(x_0) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x_2 - x_0)$
Despejando,
$x_2 = x_0 - f(x_0)\frac{x_1-x_0}{f(x_1)-f(x_0)} = \frac{x_0 f(x_1) - x_1 f(x_0)}{f(x_1)-f(x_0)}$
Repitiendo el proceso,

$$\boxed{x_{n+2} = \frac{x_n f(x_{n+1}) - x_{n+1} f(x_n)}{f(x_{n+1}) - f(x_n)}}$$

Método de la secante



$f(x) = e^x - 4$, $x_0 = 2.3$, $x_1 = 2$.

- $x_2 = \dfrac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1}{f(x_1) - f(x_0)} = 1.606705$
- $x_3 = \dfrac{f(x_2)x_1 - f(x_1)x_2}{f(x_2) - f(x_1)} = 1.445250$
- $x_4 = \dfrac{f(x_3)x_2 - f(x_2)x_3}{f(x_3) - f(x_2)} = 1.392496$
- Recordemos la solución exacta: $\bar{x} = \log(4) = 1.38629436111989$

Criterio de parada

¿Cuándo paramos? Algunos criterios utilizados son:

1. $|f(x_n)|$ pequeño.
2. $|x_n - x_{n-1}|$ pequeño.
3. Criterio de Aitken: Una estimación del error es

$$|\bar{x} - x_n| \approx \frac{|\lambda_n|}{|1-\lambda_n|}|x_n - x_{n-1}|, \quad \lambda_n = \frac{x_n - x_{n-1}}{x_{n-1} - x_{n-2}}.$$