Máster en Materiales y Sistemas Sensores para Tecnologías Medioambientales (Erasmus Mundus)

NOTAS DE CÁLCULO NUMÉRICO

Damián Ginestar Peiró

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA DEL DISEÑO

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA

Capítulo 1

Resolución de ecuaciones no lineales

Generalmente, no es posible encontrar expresiones explícitas para las soluciones de una ecuación de la forma $f(x) = 0$. Por ello, será interesante disponer de métodos que nos proporcionen aproximaciones de estas raíces. Pasaremos a discutir algunos métodos numéricos sencillos para el tratamiento de este problema.

1.1. Ecuaciones no lineales

1.1.1. Método de la bisección

Supongamos, por ejemplo, que se quiere calcular una solución de la ecuación

$$x^2 = 2 \ ,$$

sabiendo que la solución está en un intervalo $[a, b] = [1, 2]$. Probamos con un punto c que sea el punto medio del intervalo

$$c = \frac{a+b}{2} \ ,$$

calculamos $c^2 = (1{,}5)^2 = 2{,}25$. Como $c^2 > 2$, entonces tendremos que la raíz estará en un nuevo intervalo $[a', b'] = [a, c]$. Repitiendo esta estrategia se van obteniendo intervalos cada vez más pequeños que contienen la raíz buscada.

El siguiente código de Matlab resuelve el problema

```
M=2;
a=1;
b=2;
k=0;
tol=1.0e-5;
while (b-a) >tol
  x=(a+b)/2;
  if x^2>M
     b=x;
  else
     a=x;
  end
k=k+1;
end
sol=(a+b)/2
```

Éste es un método lento pero seguro para obtener una raíz de una ecuación del tipo

$$f(x) = 0 \ .$$

Si $f(x)$ es una función continua, sólo hace falta conocer un intervalo $[a, b]$ de forma que se satisfaga $f(a)f(b) < 0$.

1.1.2. Método del punto fijo

Definición 1.1 *Diremos que un punto p es un punto fijo de una función $\varphi(x)$ si se satisface $\varphi(p) = p$.*

Supongamos que se busca una raíz de una ecuación

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

el método del punto fijo consiste en reescribir esta ecuación de la forma

$$x = \varphi(x) \ ,$$

y construir una sucesión de la forma

$$\begin{aligned} x_1 &= \varphi(x_0) \\ x_2 &= \varphi(x_1) \\ &\vdots \\ x_{n+1} &= \varphi(x_n) \end{aligned} \tag{1.1}$$

Si existe un m tal que $x_{m+1} \approx x_m$, se cumplirá que $x_m \approx \varphi(x_m)$ y, por tanto, se podrá tomar como valor aproximado de la raíz x_m.

Ejemplo 1.1 *Suponemos que se quiere buscar una raíz de la función*

$$f(x) = x^3 + 4x^2 - 10$$

en $[1,2]$. *Se pueden hacer diferentes elecciones de la función* $\varphi(x)$, *por ejemplo,*

a) $\varphi_1(x) = x - x^3 - 4x^2 + 10$; *b)* $\varphi_2(x) = \left(\frac{10}{x} - 4x\right)^{1/2}$;
c) $\varphi_3(x) = \frac{1}{2}\left(10 - x^3\right)^{1/2}$; *d)* $\varphi_4(x) = (10/(4+x))^{1/2}$;
e) $\varphi_5(x) = x - \left(x^3 + 4x^2 - 10\right) / \left(8x + 3x^2\right)$

si tomamos como valor inicial $x_0 = 1{,}5$ *y construimos las sucesiones correspondientes a las distintas elecciones, se obtienen los valores de la tabla 3.1.*

Tabla 3.1.- *Resultado para la iteración del punto fijo* $x = \varphi(x)$.

n	a)	b)	c)	d)	e)
0	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
1	-0.875	0.8165	1.286953768	1.348399725	1.37333333
2	6.732	2.9969	1.402540804	1.367376372	1.365262015
3	-469.7	−	1.345458374	1.364957015	1.365230014
4	1.03 $\times 10^8$		1.375170253	1.365264748	1.365230013
5			1.360094193	1.365225594	
6			1.367846968	1.365230576	
7			1.363887004	1.365229942	
8			1.365916734	1.365230022	
9			1.364878217	1.365230012	
10			1.365410062	1.365230014	

Para obtener una solución por este método, es necesario que la sucesión $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ construida como en (1.1) sea convergente, y el límite de esta sucesión coincida con la raíz. Las condiciones necesarias para que esto ocurra se resumen en el siguiente teorema.

Teorema 1.1 (Teorema del punto fijo) *Sea* $\varphi : [a,b] \to [a,b]$ *una función continua en* $[a,b]$ *y derivable en* $]a,b[$, *y además que cumple que* $|\varphi'(x)| \leq k < 1$, $\forall x \in]a,b[$. *Entonces existe un único* $c \in]a,b[$ *tal que* $\varphi(c) = c$. *Además para todo* $x_0 \in]a,b[$, *la sucesión* $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ *obtenida de la forma* $x_0,\ x_n = \varphi(x_{n-1})$ *converge a* c.

Este teorema ayuda a elegir una función $\varphi(x)$ adecuada, por ejemplo para la opción d) del ejemplo anterior se tiene que

$$\begin{aligned}
\varphi_4(x) &= (10/(4+x))^{1/2}\,; \\
\varphi_4'(x) &= \sqrt{10}\,(-1/2)\,(4+x)^{-3/2}; \\
\left|\varphi_4'(x)\right| &= \sqrt{10}/2\left|(4+x)^{-3/2}\right| < \sqrt{10}/(2\cdot 5^{3/2}) = 0{,}141 < 1\ .
\end{aligned}$$

Luego la sucesión converge en $[1, 2]$.

1.1.3. Método de Newton-Raphson

Este método se basa en utilizar el desarrollo de Taylor para aproximar una función derivable en las proximidades de un punto.

Escribimos $x_1 = x_0 + \Delta x$, y usando el desarrollo de Taylor

$$f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0)\,\Delta x + o\left(\Delta x^2\right)\ ,$$

y suponiendo que $f(x_1) = 0$, queda

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

El método de Newton-Raphson se basa en esta ecuación y consiste en calcular los valores de una sucesión de la forma

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

Otro modo de obtener este método consiste en suponer que $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ es continua en $[a, b]$ y tal que $f''(x)$ no cambia de signo en $[a, b]$ con $f(a)f(b) < 0$. El proceso para encontrar un x tal que $f(x) = 0$ consiste en lo siguiente:

1) Fijamos $c = a$ ó b, tal que $f(c)f''(x) > 0$, $\forall x \in (a, b)$.

2) $x_0 = c$.

3) Hallamos la ecuación de la tangente que pasa por $(x_0, f(x_0))$ y el punto de corte de dicha tangente con el eje X. El proceso se repite hasta conseguir una sucesión de aproximaciones que converge a la raíz de $f(x) = 0$.

La ecuación de la recta tangente a la curva $y = f(x)$ en $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$ viene dada por

$$y = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x - x_{n-1}) \quad .$$

La abscisa del punto de intersección de la recta tangente con el eje X, viene dada por

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})} \quad ,$$

y mediante esta relación obtenemos una sucesión, $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ de aproximaciones al valor de la raíz buscada.

El error que se comete en la iteración n-ésima será

$$\mid r - x_n \mid < \frac{M}{2m} \mid x_n - x_{n-1} \mid ,$$

donde $0 < m \leq \mid f(x) \mid$ y $\mid f''(x) \mid \leq M$, $\forall x \in (a, b)$.

Ejemplo 1.2 *Se busca la solución de $y = \cos(x)$. Se construye la función*

$$f(x) = x - \cos(x) \ ,$$

utilizando la sucesión

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - \cos(x_n)}{1 + \operatorname{sen}(x_n)},$$

y el punto inicial $x_0 = 0{,}7$, se obtiene la siguiente tabla de valores

Tabla 3.2.- *Resultado de la iteración de Newton.*

n	x_n
1	*0.7393981635*
2	*0.7395361337*
3	*0.7390851781*
4	*0.7390851332*
5	*0.7390851332*

1.1.4. Método de la secante

Una de las desventajas del método de Newton para obtener las raíces de una ecuación de la forma

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

es que es necesario conocer la derivada $f'(x)$. En ocasiones esta derivada es difícil de calcular o no se dispone de la misma, y se utiliza una aproximación de la forma

$$s_n = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} \ ,$$

obteniendo el método de la secante, que se basa en iteraciones de la forma

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

El método de la secante hace uso de dos aproximaciones iniciales para la raíz.

1.2. Sistemas de ecuaciones no lineales

Los métodos anteriores se pueden generalizar para el caso de sistemas de ecuaciones. Consideraremos sólo sistemas de dos ecuaciones con dos incógnitas, la generalización para un número mayor de ecuaciones es sencilla.

1.2.1. Método iterativo del punto fijo

Partimos de un sistema de la forma

$$\begin{aligned} f_1(x,y) &= 0 \ , \\ f_2(x,y) &= 0 \ , \end{aligned}$$

del que se pretende obtener la solución. Para utilizar el método del punto fijo, se reescribe el sistema de la forma

$$\begin{aligned} x &= g_1(x,y) \ , \\ y &= g_2(x,y) \ . \end{aligned}$$

Se construye la sucesión

$$(x_{n+1}, y_{n+1}) = (g_1(x_n, y_n), g_2(x_n, y_n))$$

que como ocurre en el caso escalar la eficiencia del método dependerá de la elección de las funciones g_1 y g_2.

Ejemplo 1.3 *Suponemos que se quiere buscar una solución del sistema*

$$\begin{aligned} x^2 - 10x + y^2 + 8 &= 0 \ , \\ xy^2 + x - 10y + 8 &= 0 \ , \end{aligned}$$

se eligen

$$
\begin{aligned}
x &= \frac{1}{10}\left(x^2+y^2+8\right) \ , \\
y &= \frac{1}{10}\left(xy^2+x+8\right) \ .
\end{aligned}
$$

Se parte de $(x,y)=(0,0)$ y, utilizando el método del punto fijo, se obtiene la sucesión mostrada en la tabla 3.3.

Tabla 3.3.- *Resultado de la iteración del punto fijo para el sistema.*

x_n	y_n
0	0
0.8000	0.8000
0.9414	0.9670
0.9821	0.9901
0.9945	0.9969
0.9983	0.9990
0.9995	0.9997
0.9998	0.9999
0.9999	1

1.2.2. Método de Newton-Raphson

Este método se basa en utilizar el desarrollo de Taylor para aproximar una función derivable en las proximidades de un punto en este caso de funciones de dos variables. Partimos de un sistema de la forma

$$
\begin{aligned}
f_1(x,y) &= 0 \ , \\
f_2(x,y) &= 0,
\end{aligned}
$$

del que se pretende obtener la solución. Se supone que

$$x = x_0 + \Delta x \text{ e } y = y_0 + \Delta y$$

luego

$$
\begin{aligned}
f_1(x_0+\Delta x, y_0+\Delta y) &= 0 \ , \\
f_2(x_0+\Delta x, y_0+\Delta y) &= 0 \ .
\end{aligned}
$$

Utilizando el desarrollo de Taylor alrededor de (x_0, y_0) y quedandonos con el primer orden, tenemos

$$\begin{aligned} f_1(x_0,y_0) + \frac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial f_1(x_0,y_0)}{\partial y}\Delta y &\approx 0 \ , \\ f_2(x_0,y_0) + \frac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial x}\Delta x + \frac{\partial f_2(x_0,y_0)}{\partial y}\Delta y &\approx 0 \ , \end{aligned}$$

si introducimos la notación $\vec{x} = (x, y)$, $\vec{F} = (f_1, f_2)$ y

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{bmatrix}$$

queda

$$\vec{F}\,(\vec{x_0}) + J\,(\vec{x_0})\,(\vec{x} - \vec{x_0}) \approx 0$$

entonces

$$\vec{x} = \vec{x_0} - J^{-1}\,(\vec{x_0})\,\vec{F}\,(\vec{x_0})$$

y el método de Newton consiste en calcular la sucesión

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - J^{-1}\,(\vec{x}_n)\,\vec{F}\,(\vec{x}_n)\,.$$

Dado que calcular explícitamente la matriz inversa del Jacobiano no es un proceso muy eficiente desde el punto de vista numérico, a la hora de implementar el método se hace en dos pasos:

1. se resuelve el sistema

$$J\,(\vec{x}_n)\,\Delta\vec{x}_{n+1} = -\vec{F}\,(\vec{x}_n) \ ,$$

2. se calcula

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n + \Delta\vec{x}_{n+1} \ .$$

Ejemplo 1.4 *Suponemos que se quiere buscar una solución del sistema*

$$\begin{aligned} f_1 &= x^2 - 10x + y^2 + 8 = 0 \\ f_2 &= xy^2 + x - 10y + 8 = 0 \end{aligned}$$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x - 10 & 2y \\ y^2 + 1 & 2xy - 10 \end{bmatrix}$$

y se parte de $(x, y) = (0, 0)$ *se obtiene la sucesión:*

Tabla 3.4.- *Resultado de la iteración del método. de Newton para el sistema*

i	*x*	*y*
1	*0*	*0*
2	*0.8*	*0.88*
3	*0.9918*	*0.9917*
4	*1*	*1*
5	*1*	*1*

como se observa la convergencia con este método es, en general, más rápida que con el método del punto fijo.

Ejemplo 1.5 *Se tiene el equilibrio químico*

$$\begin{aligned} 2A + B &\xleftrightarrow{k_1} C \\ A + D &\xleftrightarrow{k_2} C \end{aligned}$$

con

$$\begin{aligned} k_1 &= C_C/\left(C_A{}^2 C_B\right) = 5 \cdot 10^{-4}, \\ k_2 &= C_C/\left(C_A C_D\right) = 4 \cdot 10^{-2} \end{aligned}$$

y las concentraciones iniciales:

$$C_{A,0} = 40,\ C_{B,0} = 15,\ C_{C,0} = 0,\ C_{D,0} = 10.$$

Si llamamos x a la concentración de B que ha reaccionado e y a la proporción de D que ha reaccionado, se tiene

$$\begin{aligned} C_A &= C_{A,0} - 2C_{B,0}x - C_{D,0}y = 40 - 30x - y \\ C_B &= (1-x)\,C_{B,0} = 15 - 15x \\ C_C &= C_{C,0} + C_{B,0}x + C_{D,0}y = 15x + 10y \\ C_D &= (1-y)\,C_{D,0} = 10 - 10y. \end{aligned}$$

Así, el sistema que se tiene que resolver será

$$\begin{aligned} \frac{15x + 10y}{(40 - 30x - 10y)^2\,(15 - 15x)} - 5 \cdot 10^{-4} &= 0\ , \\ \frac{15x + 10y}{(40 - 30x - 10y)\,(10 - 10x)} - 4 \cdot 10^{-2} &= 0\ . \end{aligned}$$

Este sistema se puede resolver numéricamente utilizano el método de Newton-Raphson.

Las siguientes funciones muestran una posible implementación en Matlab de este método.

```
function y=f(x)
% funcion para utilizar con newtonsi.m
y(1)=x(1)^2-10*x(1)+x(2)^2+8;
y(2)=x(1)*x(2)^2+x(1)-10*x(2)+8;

function df=jac(x)
% matriz jacobiana para usar con newtonsi.m
df(1,1)=2*x(1)-10;
df(1,2)=2*x(2);
df(2,1)=x(2)^2+1;
df(2,2)=2*x(1)*x(2)-10;


function [xr,k]=newtonsi(x,tol,imax)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%  Metodo de Newton para sistemas de ecuaciones
%  Uso: [xr,k]=newtonsi(x,tol,imax)
%
%  Input:
%x = vector x1,x2,...,xn inicial,
%tol=tolerancia
%
%  Se ha de disponer de las funciones:
%      f.m  funcion y=f(x) donde se define el sistema
%      jac.m funcion df=jac(x) donde se define la matriz
%     derivada del sistema.
%
%  Output: xr= raiz,  k= numero de iteraciones.
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
k=1;
epi=1;
x1=x;
while norm(epi)>tol
   x=x1;
   fxn=f(x);
   axn=jac(x);
   epi=axn\fxn';
   x1=x-epi';
```

```
   k=k+1;
   if k>imax
      disp('no converge')
      break
   end
end
xr=x1;
```

1.2.3. Método de Broyden

El método de Broyden generaliza el método de la secante para resolver ecuaciones no lineales par el caso de un sistema de ecuaciones.

Para el caso unidimensional de tomaba una aproximación de la derivada de $f(x)$

$$s_n = \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} \ ,$$

y se hacían iteraciones de la forma

$$x_{n+1} = x_n - s_n^{-1} f(x_n) \ .$$

Para el caso de un sistema, se ha de obtener una aproximación de la matriz derivada, S_n, que cumpla

$$S_n \left(x_n - x_{n-1}\right) = f\left(x_n\right) - f\left(x_{n-1}\right) \ .$$

Introducimos la siguiente notación

$$\begin{aligned} b_n &= x_{n+1} - x_n \ , \\ \Delta f_n &= f\left(x_{n+1}\right) - f\left(x_n\right) \ , \\ S_{n+1} &= S_n + C_n \ . \end{aligned}$$

Con lo que tenemos que

$$S_{n+1} \left(x_{n+1} - x_n\right) = f\left(x_{n+1}\right) - f\left(x_n\right) \ ,$$

o sea,

$$\left(S_n + C_n\right) b_n = \Delta f_n \ ,$$

y, por tanto,

$$C_n b_n = \Delta f_n - S_n b_n \ .$$

De este modo, dado un vetor w_n^T tal que $w_n^T b_n \neq 0$, podemos elegir

$$C_n = \frac{1}{w_n^T b_n} \left(\Delta f_n - S_n b_n\right) w_n^T \ ,$$

ya que

$$C_n b_n = \Delta f_n - S_n b_n \ .$$

Si elegimos $w_n^T = b_n$, se obtiene el primer método de Broyden, y si elegimos $w_n = S_n^T b_n$ se obtiene el segundo método de Broyden.

Así pues, el método de Broyden para sistemas parte de una aproximación inicial para la raíz, x_0, y una aproximación para la matriz derivada del sistema, S_0, y se basa en iteraciones de la forma

$$\begin{aligned}
&b_n = -S_n^{-1} f\left(x_n\right) \ , \\
&x_{n+1} = x_n + b_n \ , \\
&\Delta f_n = f\left(x_{n+1}\right) - f\left(x_n\right) \ , \\
&S_{n+1} = S_n + \frac{1}{w_n^T b_n} \left(\Delta f_n - S_n b_n\right) w_n^T \ .
\end{aligned}$$

1.3. Ejercicios

1. Supongamos que se tiene un objeto cayendo verticalmente a través del aire sujeto a una resistencia viscosa y a la fuerza de gravedad. Si suponemos que la altura inicial a la que se encuentra es S_0, la altura del objeto al cabo de t segundos es

$$S(t) = S_0 + \frac{mg}{k} t - \frac{m^2 g}{k^2} \left(1 - e^{-\frac{kt}{m}}\right) \ ,$$

donde $g = -9{,}81 \mathrm{m/s}^2$ y la constante k representa el coeficiente de resistencia del aire. Si tomamos $S_0 = 300\,\mathrm{m}$, $m = 0{,}25\,\mathrm{kg}$, y $k = 0{,}1\,\mathrm{kg\,s\,m}^{-1}$. Estima el tiempo que tardará el objeto en caer al suelo.

2. Una partícula parte del reposo y se desliza a lo largo de un plano inclinado cuyo ángulo de inclinación, θ, cambia con velociadad constante

$$\frac{d\theta}{dt} = \omega < 0 \ .$$

Después de t segundos la posición de la partícula viene dada por

$$x(t) = \frac{g}{2\omega^2} \left(\frac{e^{\omega t} - e^{-\omega t}}{2} - \operatorname{sen}\left(\omega t\right)\right) \ .$$

Supongamos que la partícula ha recorrido 1.7m en un segundo. Obtén una estimación de la velocidad ω a la que θ cambia. Emplea el valor $g = -9{,}8\text{m/s}^2$.

3. Una catenaria es la curva que forma un cable colgante. Supongamos que el punto más bajo coincide con el origen de coordenadas. Para este caso, la función que define la catenaria es de la forma

$$y = C \cosh\left(\frac{x}{C}\right) - C \ .$$

Para determinar la catenaria que pasa por los puntos $(\pm a, b)$, se debe obtener C de la ecuación

$$b = C \cosh\left(\frac{a}{C}\right) - C \ .$$

Obtened la catenaria que pasa por $(\pm 10, 6)$.

4. Verifica que la ecuación

$$x^4 + 2x^2 - x - 3 = 0 \ ,$$

se puede escribir como

a) $x = (3 + x - 2x^2)^{\frac{1}{4}}$ c) $x = \left(\frac{x+3}{x^2+2}\right)^{\frac{1}{2}}$,

b) $x = \left(\frac{x+3-x^4}{2}\right)^{\frac{1}{2}}$,

d) $x = \frac{3x^4+2x^2+3}{4x^3+4x-1}$.

Calcula 5 iteraciones del método del punto fijo para cada uno de los casos, tomando $x_0 = 1 + a$, donde a es un número aleatorio entre 0 y 1. ¿ Qué ocurre si para el caso b) se toma $x_0 = 2 + a$?. ¿ Qué ocurre si para el caso c) se toma $x_0 = -3 - a$. ¿ Qué ocurre si para el caso d) se toma $x_0 = 0{,}2367$?.

5. Dado el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} x_1 &= \sin(x_1 + x_2) \ , \\ x_2 &= \cos(x_1 - x_2) \ , \end{aligned}$$

tomando $(x_1^0, x_2^0) = (1, 1)$. Calcula dos iteraciones del método del punto fijo, y dos iteraciones del método de Newton.

6. Dado el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} x_1 &= \left(x_1^2 + x_2^2\right) \ , \\ x_2 &= (x_1 - x_2) \ , \end{aligned}$$

tomando $(x_1^0, x_2^0) = (1, 1)$. Calcula dos iteraciones del primer método de Broyden.