Asociación Argentina de Mecánica Computacional

Mecánica Computacional Vol XXVIII, págs. 2649-2655 (artículo completo)
Cristian García Bauza, Pablo Lotito, Lisandro Parente, Marcelo Vénere (Eds.)
Tandil, Argentina, 3-6 Noviembre 2009

GENERALIZACIÓN DEL CONCEPTO DE DEFLACIÓN EN LA RESOLUCIÓN DE ECUACIONES NO LINEALES

Adair Martins [a]***, Claudia Allan*** [a]***, Susana Parra*** [a] ***y Roberto Laurent*** [b]

[a] *Departamento de Ciencias de la Computación, Facultad de Economía y Administración, Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400, Neuquén, Argentina amartins@uncoma.edu.ar*

[b] *Departamento de Electrotecnia, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Comahue, Buenos Aires 1400, Neuquén, Argentina, roberto_laurent@yahoo.com.ar*

Palabras clave: Ecuaciones No Lineales, Deflación, Newton Raphson, Algoritmo, Programación.

Resumen: El concepto de deflación de polinomios es bien conocido desde los primeros años de las carreras de ciencias e ingeniería. La deflación consiste en disminuir el grado de un polinomio al obtenerse una raíz de tal forma que el polinomio reducido ya no posee esta raíz, facilitando así la obtención progresiva de todas las raíces. En este trabajo se propone una metodología para la generalización del concepto de deflación para funciones no lineales trascendentes. Después de que se encuentra por el método iterativo de Newton una raíz r la nueva función $F(x) = f(x)/(x\text{-}r)^m$ tendrá todas las raíces de $f(x)$ excepto la raíz r de multiplicidad m. El aporte principal de la metodología propuesta consiste en la predicción numérica de la multiplicidad durante el proceso iterativo con tres beneficios fundamentales: cada raíz múltiple es obtenida en un único proceso iterativo, con el conocimiento de la multiplicidad el método de Newton recupera la convergencia cuadrática y pierde importancia la combinación de indeterminación y discontinuidad que se produce en la cercanía de una raíz. El funcionamiento de la metodología fue ilustrado mediante experimentos numéricos con un caso de aplicación.

1 INTRODUCCION

En ciencias e ingeniería muchos problemas prácticos involucran la resolución mediante métodos numéricos de ecuaciones no lineales que no son polinómicas (Akai, 1994; Chapra y Canale, 2003). De los cursos de Álgebra de los primeros años de diversas carreras es bien conocido el concepto de deflación de polinomios, la obtención de una nueva raíz permite disminuir el grado del polinomio simplificando progresivamente la obtención de las restantes. El conocimiento de los métodos numéricos iterativos para resolución de ecuaciones no lineales permite aplicar el concepto de deflación en la obtención computacional de todas las raíces de un polinomio utilizando la división sintética con el método de Horner. Una vez que se encuentra una primera raíz, como se muestra mediante un residuo bastante pequeño, normalmente se procede a determinar raíces adicionales a partir del polinomio reducido, cuyos coeficientes están en la tercera fila de la tabla de la división sintética.

En el caso general de funciones no lineales, los métodos iterativos como Newton-Raphson, Müller o de la Secante permiten obtener sólo una raíz a la vez (Akai, 1994; Burden y Faires, 2004; Chapra y Canale, 2003; Gerald y Wheatley, 2000, 2003; Mathews y Fink, 1999; Nakamura, 1997). Por lo tanto, es interesante observar que la técnica de la función reducida puede utilizarse para todo tipo de función, permitiendo hallar no sólo una raíz si no todas ellas. Después de que se encuentra una raíz r de $f(x) = 0$, la nueva función $F(x) = f(x)/(x-r)$ poseerá todas las raíces de $f(x)$ excepto la raíz r de $f(x)$. Este procedimiento se puede denominar "deflación de funciones" (Gerald y Wheatley, 2000). Sin embargo, debe observarse que en $x = r$ se ha introducido una discontinuidad. Una dificultad adicional puede ocurrir con las raíces múltiples. Es posible dividir $f(x)$ por $(x-r)$ y deflactar la función, reduciendo la multiplicidad por uno, el problema aquí es que se desconoce r. No obstante, al dividir por $(x-s)$, donde s es una aproximación de r, se obtiene casi lo mismo. Sin embargo, debe observarse que la división crea una forma indeterminada en $x = r$ y una discontinuidad fuerte en $x = s$.

En este trabajo se discute el desarrollo de un algoritmo básico para obtener las raíces de una ecuación no lineal utilizando deflación con el método de Newton-Raphson. Se propone un estimador de la multiplicidad de las raíces que permite predecir la misma durante el proceso iterativo. El objetivo de conocer la multiplicidad es neutralizar en gran medida las dificultades inherentes a las raíces múltiples y recuperar la convergencia cuadrática del método de Newton al permitir utilizar su variante acelerada (Burden y Faires, 2004; Gerald y Wheatley, 2000; Mathews y Fink, 1999). La potencialidad y efectividad del algoritmo se ilustra mediante un experimento numérico aprovechando las facilidades que brinda el ambiente de MATLAB (Mathews y Fink, 1999; Nakamura, 1997).

2 NEWTON ACELERADO: MULTIPLICIDAD Y ORDEN DE CONVERGENCIA

Una técnica fundamental de los algoritmos numéricos utilizados en computación científica para obtener ceros o raíces de ecuaciones es la de iteración. Como su nombre lo indica, se trata de repetir un proceso hasta que se obtiene un resultado. Un método iterativo genera una sucesión $x_0, x_1 ... x_n, x_{n+1}...$ que converge a una raíz r de la función $f(x)$. El método iterativo más utilizado para la obtención de raíces de ecuaciones no lineales es el de Newton-Raphson, o simplemente de Newton, debido a su simplicidad y velocidad de convergencia (Burden y Faires, 2004; Gerald y Wheatley, 2000, 2003; Mathews y Fink, 1999). Está dado por la función de iteración:

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

Cuando el método converge el error en cada nueva iteración, $e_{n+1} = | x_{n+1} - r |$, es asintóticamente proporcional al error en la iteración anterior, $e_n = | x_n - r |$, elevado a una potencia p que se denomina orden de convergencia, o sea

$$| x_{n+1} - r | = A \; | x_n - r |^{p}. \tag{2}$$

Se dice que el método de Newton es de orden 2, $p = 2$, porque converge cuadráticamente a raíces simples, aunque dependiendo de las características de la función podría converger con un orden mayor. En términos prácticos con la convergencia cuadrática se verifica en forma aproximada que el número de dígitos significativos exactos se duplica a cada iteración, lo que hace al método de Newton muy eficiente y explica su gran popularidad. En una raíz de multiplicidad m la convergencia es lineal, $p = 1$, y se verifica asintóticamente que el error en una iteración, $e_{n+1} = | x_{n+1} - r |$, es proporcional al error en la iteración anterior, $e_n = | x_n - r |$, de acuerdo a la relación

$$| x_{n+1} - r | = (m\text{-}1) \,/\, m \; | x_n - \mathrm{r} |. \tag{3}$$

Aparentemente las Ec. (2) y (3) sólo tendrían importancia conceptual porque el error y la multiplicidad no son conocidos de antemano para los problemas prácticos. Sin embargo, como se demuestra más adelante una variante de las mismas puede ser usada para estimar la multiplicidad y el orden de convergencia durante el proceso iterativo. El conocimiento de la multiplicidad permite restablecer la convergencia cuadrática con el algoritmo acelerado de Newton

$$x_{n+1} = x_n - \; m \; f(x_n) \,/\, f'(x_n), \tag{4}$$

que obviamente sólo es de aplicación práctica si se conoce la multiplicidad m, que en general no es conocida de antemano. Si la Ec. (4) no es de aplicación porque no se conoce la multiplicidad pero se sabe que el orden de convergencia es lineal, $p = 1$, puede acelerarse la convergencia aplicando el método de Aitken que consiste en la ecuación

$$x_{n+1,mejorada} = x_{n\text{-}2} - (x_{n\text{-}2} - x_{n\text{-}1})^2 \,/\, (x_{n+1} - 2x_n + x_{n\text{-}1}), \tag{5}$$

la cual permite mejorar la estimación x_{n+1} prácticamente sin costo computacional ya que sólo necesita información de las estimaciones anteriores, sin necesidad de nuevos cálculos de $f(x)$ *y* $f'(x)$. Cuando la Ec. (5) se aplica a cada dos iteraciones de Newton el proceso se conoce como método de aceleración de Steffensen. Obviamente la Ec. (5) sólo es de aplicación práctica si se sabe que la convergencia es lineal, $p = 1$, lo que también en general no es sabido de antemano.

Se muestra a continuación que a partir de las Ec. (2) y (3) es posible obtener estimadores prácticos tanto para la multiplicidad como para el orden de convergencia. La Ec. (3) puede manipularse despejando la diferencia entre dos iteraciones sucesivas, utilizada normalmente como cota del error verdadero, resultando

$$| x_{n+1} - x_n | = | r - x_n | \,/\, m, \tag{6}$$

que indica que la diferencia entre dos estimaciones sucesivas es proporcional al error verdadero en la iteración anterior. Sustituyendo la Ec. (6) en la (2) se deduce una expresión alternativa que relaciona diferencias entre estimativas sucesivas:

$$| x_{n+1} - x_n | = A^{*} \, | x_n - x_{n\text{-}1} |^{p}, \tag{7}$$

donde $A^* = A\, m^{p-1}$. Aplicando la Ec. (7) a dos iteraciones sucesivas es posible eliminar A^* y obtener una expresión para el orden de convergencia p. Haciendo $\Delta x_{n+1} = |\, x_{n+1} - x_n \,|$, para dar un aspecto más compacto a la expresión, se obtiene el estimador para el orden de convergencia dado por

$$p = \log (|\, \Delta x_{n+1} / \Delta \mathrm{x_n} \,|) \,/\, \log (|\, \Delta x_n / \Delta x_{\mathrm{n-1}} \,|), \tag{8}$$

que permite estimar p a partir de la tercera iteración. Lógicamente esta estimación vale como las anteriores asintóticamente, o sea p tiende al valor verdadero cuando x tiende a la raíz.

Por otro lado aplicando la Ec. (2) a dos iteraciones sucesivas y restando las dos ecuaciones resultantes se demuestra la relación equivalente

$$|\, x_{n+1} - x_n \,| = (\, m\text{-}1) \,/\, m \;|\, x_n - x_{n\text{-}1}|, \tag{9}$$

de la cual puede despejarse un estimador práctico para la multiplicidad a partir de la segunda iteración dado por

$$m = 1 + \; (|\, \Delta x_{n+1}|) \,/\, (|\, \Delta x_n \text{ - } \; \Delta x_{n\text{-}1}|). \tag{10}$$

Como conclusión, la estimación de la multiplicidad eventualmente confirmada por la estimación del orden de convergencia, permite utilizar el método de Newton acelerado en las raíces múltiples. De esta manera cada raíz múltiple es obtenida en un único proceso iterativo con convergencia cuadrática y se atenúan las dificultades debidas a la indeterminación y discontinuidad que ocurre en las proximidades de estas raíces con la consiguiente mejora de la eficiencia computacional.

3 UN CASO DE APLICACIÓN DE DEFLACIÓN

A efectos de mostrar el desempeño numérico de la metodología de deflación de funciones en combinación con los estimadores de multiplicidad y orden de convergencia presentados en la sección anterior se desarrolla un caso de aplicación. El mismo consiste en la obtención de las raíces de la función

$$f(x) = \exp(0.25\, x^{\,3} \text{-}2.25\, x^{\,2} + 6\, x - 4) - 1. \tag{11}$$

En las gráficas de la Fig. 1 se muestra la función original y sus versiones deflactadas, Las gráficas con línea continua corresponden a la función original. Puede inferirse que posee una raíz simple en $r = 1$ y una raíz doble en $r = 4$. La gráfica con línea a trazos de la izquierda corresponde a la función reducida o deflactada, $f(x)/(x\text{-}4)^2$, que como se observa ya no posee la raíz doble en $r = 4$, y la gráfica punteada muestra la función deflactada nuevamente por la raíz simple en $r = 1$, $f(x)/[(x\text{-}4)^2(x\text{-}1)]$, que como puede verse ya no posee raíces en el intervalo. Alternativamente, la gráfica con línea a trazos de la derecha permite observar a la función deflactada, $f(x)/(x\text{-}1)$, con la raíz simple eliminada y la gráfica con línea a punteada muestra nuevamente la función con las dos raíces eliminadas. Estas gráficas muestran que el método de Newton puede converger a raíces distintas dependiendo de la estimación inicial x_0 por lo que las raíces podrán ser obtenidas en una secuencia diferente pero con el mismo resultado final.

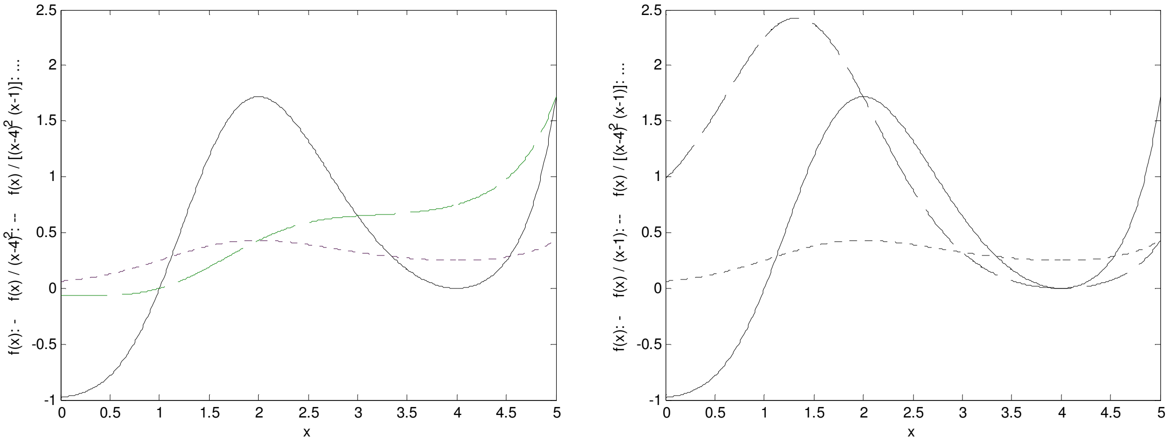


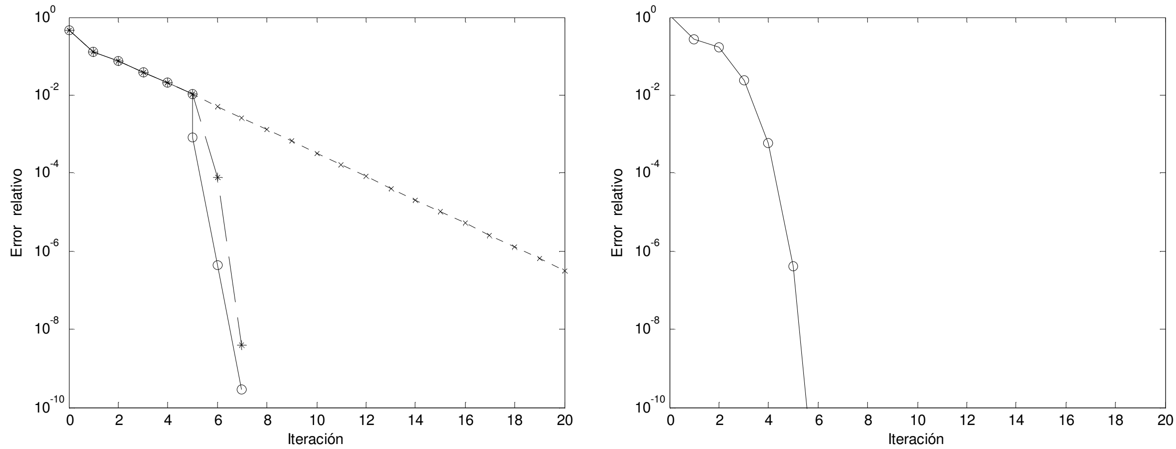
Figura 1: Gráficas de f(x) = exp(0.25 x^3 -2.25 x^2 + 6 x – 4) –1 y el efecto de la deflación.

En la Tabla 1 y la Fig. 3 se compara el desempeño de tres variantes del método de Newton y se muestra el funcionamiento de los estimadores de multiplicidad y orden de convergencia utilizando como condición inicial $x_0 = 2.2$ en todos los casos. Adicionalmente la evolución de los estimadores se muestra gráficamente en la Fig. 4.

Newton				Newton más Aitken		Newton Acelerado		Newton después de la deflación			
n	*x*	*p*	*m*	*n*	*x*	*n*	*x*	*n*	*x*	*p*	*m*
0	2.20000000			0	2.20000000	0	2.20000000	0	2.20000000		
1	4.50249767			1	4.50249767	1	4.50249767	1	0.72245893		
2	4.29217298		1.10	2	4.29217298	2	4.29217298	2	1.17166504		1.44
3	4.15709430	0.19	2.80	3	4.15709430	3	4.15709430	3	1.02360511	0.93	1.49
4	4.08119552	1.30	2.28	4	4.08119552	4	4.08119552	4	1.00059704	1.68	1.18
5	4.04122729	1.11	2.11	5	4.04122729	5	4.04122729	5	1.00000040	1.96	1.03
6	4.02076565	1.04	2.05	5	3.99676767	6	4.00030401	6	1.00000000	2.00	1.00
7	4.01042007	1.02	2.02	6	4.00000173	7	4.00000002				
8	4.00521925	1.01	2.01	7	4.00000000						
9	4.00261192	1.00	2.01								
10	4.00130653	1.00	2.00								
11	4.00065341	1.00	2.00								
12	4.00032674	1.00	2.00								
13	4.00016338	1.00	2.00								
14	4.00008169	1.00	2.00								
15	4.00004085	1.00	2.00								
16	4.00002042	1.00	2.00								
17	4.00001021	1.00	2.00								
18	4.00000511	1.00	2.00								
19	4.00000255	1.00	2.00								
20	4.00000128	1.00	2.00								

Tabla 1: Comparación del desempeño del método de Newton y de los estimadores de multiplicidad y orden de convergencia

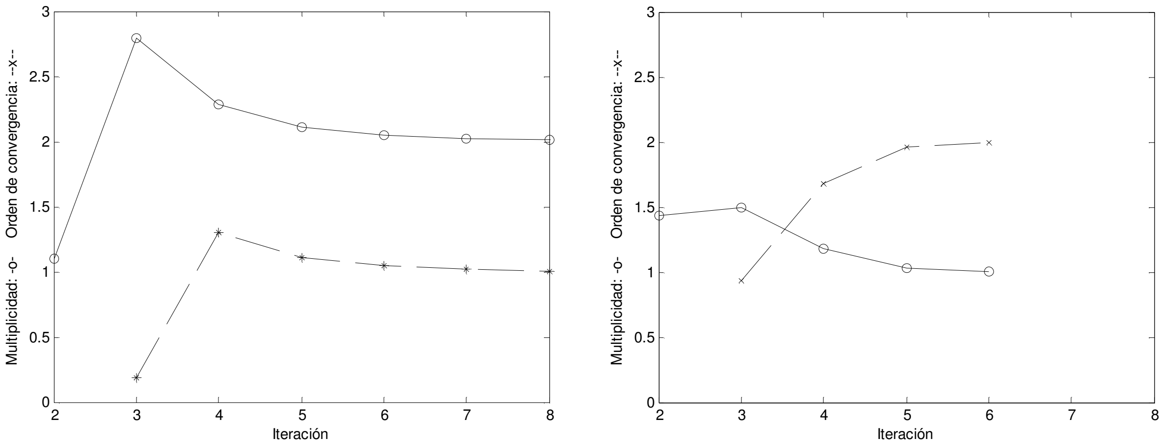
En las tres primeras columnas de la Tabla 1 se observa convergencia a la raíz doble en r = 4 y en la cuarta columna a la raíz simple en r =1. En la Fig. 3(a) se comparan las velocidades de convergencia del error relativo correspondiente a la raíz doble para el método de Newton, la combinación de la fórmula de Aitken con el método de Newton acelerado y el método de Newton acelerado. Se puede apreciar el cambio brusco de la lenta convergencia lineal a la rápida convergencia cuadrática a partir de la quinta iteración. Como condición de cambio de método se utilizó que los estimadores redondeados al entero más próximo se repitan en dos iteraciones sucesivas y que la solución presente por lo menos dos cifras significativas exactas aproximadamente. Cabe aclarar que como la aplicación de la fórmula de Aitken tiene un costo computacional despreciable no se la consideró una iteración adicional por lo que la quinta iteración aparece repetida en la segunda columna de la tabla y en la figura correspondiente, se puede observar que la aplicación de la fórmula permitió mejorar la convergencia aunque su influencia no parece muy significativa. La Fig. 3(b) muestra claramente la velocidad de convergencia cuadrática para el método de Newton en la raíz simple en r = 1 después de la deflación de la función y a partir de la misma condición inicial que para la raíz doble.



(a) (b)

Figura 2: Velocidad de convergencia. (a) Newton: ···x···, Newton modificado: --*-- y Newton modificado más Aitken: -o-, para la raíz doble en 4. (b) Newton: -o-, para la raíz simple en 1 después de la deflación.

En la Fig. 4 se encuentran graficados la estimación de la multiplicidad y el orden de convergencia en función del número de iteraciones para el método de Newton. Para la raíz doble en r = 4, Fig. 4 (a), se observa una rápida convergencia a la multiplicidad m = 2 y al orden de convergencia p = 1, mientras que para la raíz simple en r = 1, Fig. 4, (b) la multiplicidad tiende a m = 1 y el orden de convergencia a p = 2, de acuerdo a lo esperado teóricamente. Cabe observar que en rigor la obtención del orden de convergencia no es imprescindible aunque contribuye a confirmar la convergencia de la multiplicidad ya que debe existir una coherencia entre ambos parámetros.



(a) (b)

Figura 4: Estimativa de la multiplicidad (*m*: -o-) y del orden de convergencia (*p*: --x--) para la raíz doble (a) y para la raíz simple (b)

4 CONCLUSIONES

Se propuso una metodología para la generalización del concepto de deflación para funciones no lineales trascendentes utilizando el método de Newton Raphson. El aporte principal de la metodología propuesta consiste en la predicción numérica de la multiplicidad durante el proceso iterativo lo que permite solucionar los problemas provocados por las raíces múltiples. También se propuso un estimador del orden de convergencia, lo que brinda información complementaria que sirve para confirmar la estimación de la multiplicidad. El funcionamiento de la metodología fue ilustrado mediante experimentos numéricos con un caso de aplicación.

El conocimiento de la multiplicidad contribuye a potenciar la utilización de deflación de tres maneras diferentes. En primer lugar permite que el método de Newton recupere su convergencia cuadrática en las raíces múltiples disminuyendo el costo computacional. En segundo lugar permite que las raíces múltiples puedan obtenerse en un único proceso iterativo en vez de un proceso para cada una de las raíces, disminuyendo todavía más el costo computacional. Finalmente, hace que pierda importancia la combinación de indeterminación y discontinuidad que se produce en la cercanía de una raíz múltiple haciendo que la técnica de deflación gane en robustez.

5 REFERENCIAS

Akai, T. J., *Applied Numerical Methods for Engineers*, John Wiley& Sons, Inc. ,1994.

Burden, R. L., Faires, J. D., *Numerical Analysis*, Brooks-Cole Publishing, 2004.

Chapra, S. C., Canale, R. P., *Métodos Numéricos para Ingenieros con Programas de Aplicación*, McGraw Hill, 2003.

Gerald, C. F., Wheatley, P. O., *Análisis Numérico con Aplicaciones*, Prentice Hall, 2000.

Gerald, C. F., Wheatley, P. O., Applied Numerical Analysis, Addison Whesley Longman Inc., 2003.

Mathews, J. H., Fink, K. D., *Métodos Numéricos con Matlab*, Prentice Hall, 1999

Nakamura, S., *Análisis Numérico y Visualización Gráfica con Matlab*, Prentice Hall, 1997.