

Algoritmo para la Resolución de Ecuaciones No Lineales utilizando Deflación

Adair Martins, Claudia Allan, Susana Parra, Roberto Laurent

Fecha de recepción: 12/12/2012
 Fecha de aceptación: 11/11/2013

Resumen	<p>La bien conocida deflación de polinomios consiste en disminuir su grado con la obtención de cada nueva raíz. En este trabajo se propone una metodología para la generalización del concepto de deflación para funciones no lineales y su implementación en un software libre de matemática. Una vez obtenida una raíz r de multiplicidad m con el método iterativo de Newton Raphson la función reducida $F(x) = f(x)/(x-r)^m$ tendrá todas las raíces con excepción de r, facilitando la obtención de las restantes en forma análoga a la deflación de polinomios. La multiplicidad se obtiene realizando una predicción numérica en un único proceso iterativo recuperándose la convergencia cuadrática.</p> <p>Palabras clave: Deflación, Ecuaciones No Lineales, Algoritmo</p>
Abstract	<p>The well known polynomial deflation is to reduce the degree to obtain each new root. In this work a methodology for the generalization of the concept of deflation for nonlinear functions and their implementation in a free math software is proposed. After obtaining a root r of multiplicity m with the Newton-Raphson iterative method the reduced function $F(x) = f(x)/(x-r)^m$ have all except the r root, making it easier to obtain the remaining roots analogously to deflation of polynomials. The multiplicity is obtained by a numerical prediction in a single iterative process recovering the quadratic convergence.</p> <p>Keywords: Deflation, Nonlinear Equations, Algorithm</p>
Resumo	<p>A bem conhecida deflação de polinômios consiste em baixar o seu grau com a obtenção de cada nova raiz. Neste trabalho propõe-se uma metodologia para a generalização do conceito de deflação para funções não lineares e sua implementação em um software livre de matemática. Uma vez obtida uma raiz r de multiplicidade m com o método iterativo de Newton Raphson a função reduzida $F(x) = f(x)/(x-r)^m$ terá todas as raízes com exceção de r, facilitando a obtenção das restantes em forma análoga à deflação de polinômios. A multiplicidade se obtêm realizando uma predição numérica em um único processo iterativo recuperando-se a convergência quadrática.</p> <p>Palavras-chave: Deflação, Equação não linear, Algoritmo</p>

1. Introducción

La deflación de polinomios, concepto utilizado y conocido en los cursos de Álgebra de los primeros años de diversas carreras de ciencias e ingeniería, consiste en disminuir el grado del mismo al obtenerse una raíz, de tal forma que el polinomio

reducido ya no poseerá esta raíz, facilitando así la obtención progresiva de todas las raíces. 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.

Muchos problemas prácticos involucran la resolución mediante métodos numéricos de ecuaciones no lineales que no son polinómicas. Los métodos iterativos como Newton-Raphson, Müller o de la Secante permiten obtener sólo una raíz a la vez (Akai, 1994, pp. 124-132), (Burden y Faires, 2009, pp. 66-88), (Chapra y Canale, 2003, pp.146-165), (Gerald y Wheatley, 2000, pp.48-65). Por lo tanto, es interesante observar que la técnica de la función reducida o deflactada puede utilizarse para todo tipo de función, permitiendo hallar no sólo una raíz sino 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, pp.79-80). 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 presenta el desarrollo e implementación de un algoritmo para obtener las raíces de una ecuación no lineal utilizando 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 (Gerald y Wheatley, 2000, pp.84-85). La potencialidad y efectividad de la metodología se ilustra mediante dos ejemplos numéricos, el primero se aplica a una función no lineal y el segundo a un polinomio, mostrando que la metodología desarrollada también es válida para funciones polinómicas. La implementación del algoritmo fue realizada utilizando el entorno de programación del software libre Scilab.

2. Multiplicidad y Orden de Convergencia: Método de Newton Acelerado

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 con un error preestablecido. Un método iterativo genera una sucesión $x_0, x_1 \dots x_n, x_{n+1} \dots$ 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. Está dado por la función de iteración:

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

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:

$$|x_{n+1} - r| = A |x_n - r|^p. \quad (2)$$

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:

$$|x_{n+1} - r| = (m-1) / m |x_n - r|. \quad (3)$$

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:

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

que obviamente sólo es de aplicación práctica si se conoce la multiplicidad m , que en general no es conocida 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:

$$|x_{n+1} - x_n| = |r - x_n| / m, \quad (5)$$

que indica que la diferencia entre dos estimaciones sucesivas es proporcional al error verdadero en la iteración anterior. Sustituyendo la Ec. (5) en la (2) se deduce una expresión alternativa que relaciona diferencias entre estimativas sucesivas:

$$|x_{n+1} - x_n| = A^* |x_n - x_{n-1}|^p, \quad (6)$$

donde $A^* = A m^{p-1}$. Aplicando la Ec. (6) 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:

$$p = \log(|\Delta x_{n+1} / \Delta x_n|) / \log(|\Delta x_n / \Delta x_{n-1}|), \quad (7)$$

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 resultante se demuestra la relación equivalente:

$$|x_{n+1} - x_n| = (m-1) / m |x_n - x_{n-1}|, \tag{8}$$

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

$$m = 1 + (|\Delta x_{n+1}|) / (|\Delta x_n - \Delta x_{n-1}|). \tag{9}$$

Finalmente, 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 (Martins, Allan, Parra y Laurent, 2009, pp. 2649-2655).

3. Algoritmo Básico

En la Figura 1 se muestra gráficamente el algoritmo representado por un diagrama de llaves para la realización de deflación de funciones no lineales utilizando la metodología desarrollada. En el mismo se implementa el algoritmo de Newton Raphson y se estiman los valores de la multiplicidad m y de la velocidad de convergencia p , los cuales permiten determinar si se requiere acelerar el método para poder recuperar la convergencia cuadrática. Finalmente se redefine la función utilizando el concepto de deflación descrito anteriormente y se reinicia el proceso de búsqueda de raíces.

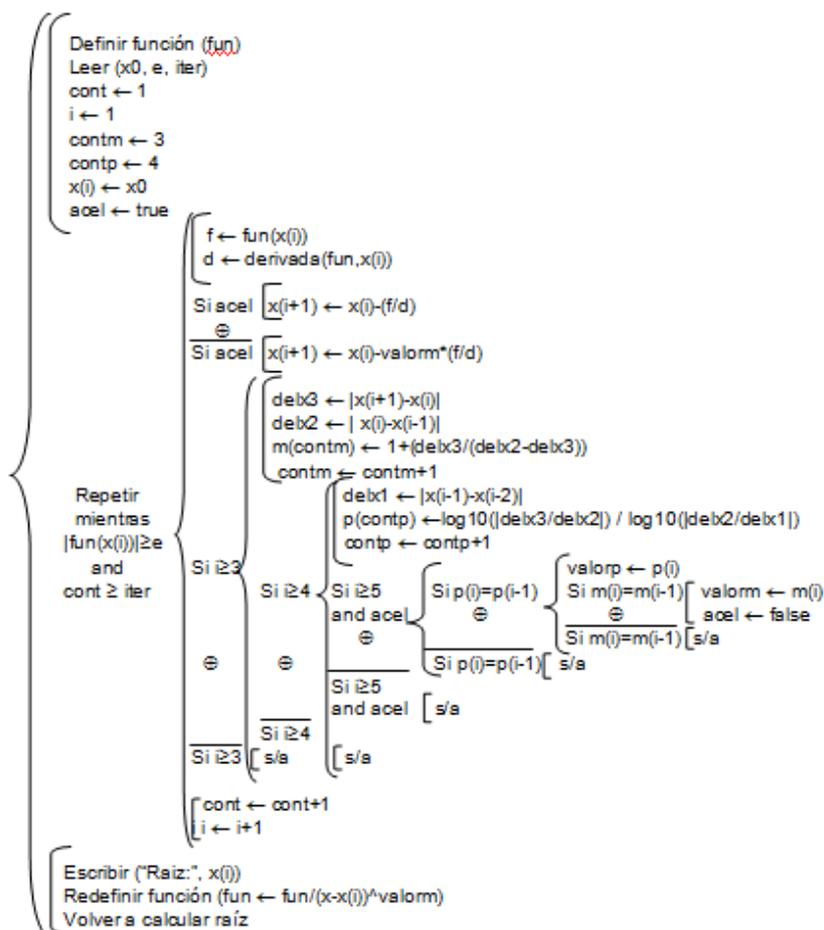


Figura 1: Algoritmo Básico de deflación

4. Ejemplos Numéricos con aplicación de Deflación

Para mostrar el desempeño numérico de la metodología y del algoritmo de deflación de funciones en combinación con los estimadores de multiplicidad y orden de convergencia presentados en la sección anterior se presentan dos casos de aplicación. En el primer caso se aplica el algoritmo implementado para la obtención de las raíces de la siguiente función no lineal:

$$f(x) = \cos^2(x) \tag{10}$$

En la Figura 2 se muestra la función original y dos versiones deflactadas o reducidas. La gráfica con línea continua corresponde a la función original. Puede inferirse que posee una raíz doble en $r = 1.5707968$ y otra raíz doble en $r = 4.7121797$.

La gráfica con línea a trazos corresponde a la función reducida, $f(x)/(x-1.5707968)^2$, que como se observa ya no posee la raíz doble en $r = 1.5707968$, y la gráfica punteada muestra la función deflactada nuevamente por la raíz doble en $r = 4.7121797$, $f(x)/[(x-1.5707968)^2(x-4.7121797)^2]$, que como puede verse ya no posee raíces en el intervalo graficado.

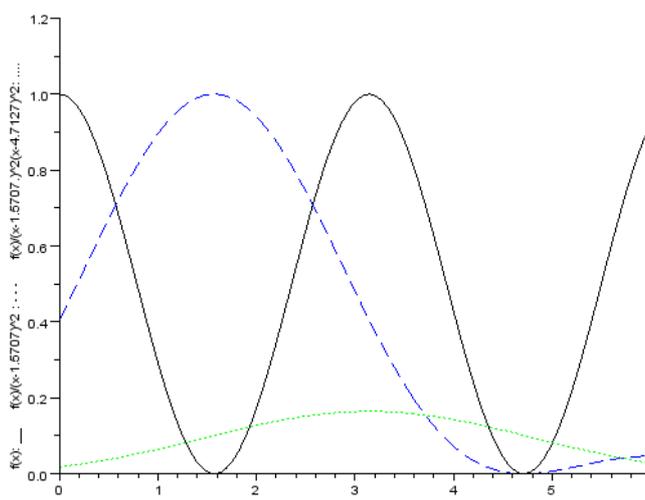


Figura 2: Gráficas de $f(x) = \cos^2(x)$ y el efecto de la deflación

En la Tabla 1 y la Figura 3 se compara el desempeño de dos 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 Figura 4.

En las dos primeras columnas de la Tabla 1 se observa convergencia a la raíz doble en $r = 1.5707968$ y en la tercera columna a la raíz doble en $r = 4.7121797$. En la Figura 2 se comparan las velocidades de convergencia del error relativo correspondiente a la raíz doble para el método de Newton 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.

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

Newton				Newton Acelerado		Newton después de la deflación			
n	x	p	m	n	x	n	x	p	m
0	2.20000000			0	2.20000000	0	2.20000000		
1	1.8360521			1	1.8360521	1	4.520308		
2	1.7002235		1.91	2	1.7002235	2	4.6115324		1.04
3	1.6351461	0.95	1.98	3	1.6351461	3	4.6605026	0.19	2.15
4	1.6029267	0.98	1.99	4	1.6029267	4	4.6860398	1.04	2.08
5	1.586856	0.99	1.99	5	1.586856	5	4.6991069	1.02	2.04
6	1.5788255	0.99	1.99	6	1.5707949	6	4.7057203	1.01	2.02
7	1.5748108	0.99	1.99	7	1.5707968	7	4.7090476	1.00	2.01
8	1.5728036	0.99	1.99			8	4.7107165	1.00	2.00
9	1.5717999	0.99	1.99			9	4.7115523	1.00	2.00
10	1.5712981	0.99	1.99			10	4.7119705	1.00	2.00
11	1.5710472	0.99	1.99			11	4.7121797	1.00	2.00
12	1.5709218	0.99	1.99						
13	1.5708591	0.99	2.00						
14	1.5708277	1.00	2.00						
15	1.570812	1.00	2.00						
16	1.5708042	1.00	2.00						
17	1.5708002	1.00	2.00						
18	1.5707983	1.00	2.00						
19	1.5707973	1.00	2.00						
20	1.5707968	1.00	2.00						

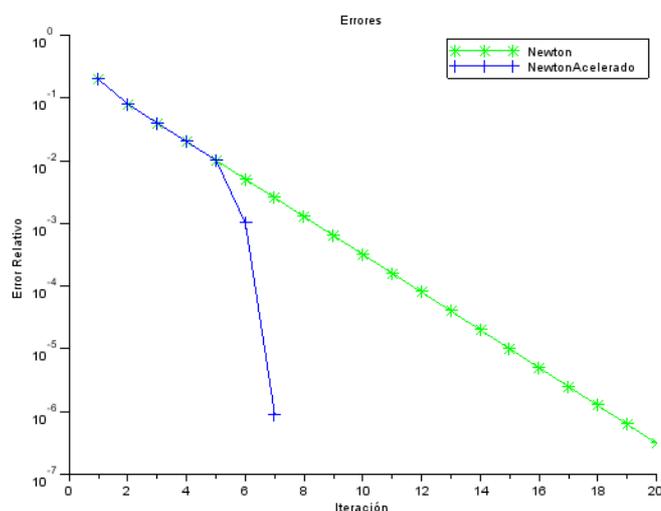


Figura 3: Velocidad de convergencia. Newton y Newton acelerado

En la Figura 4 se encuentran graficadas 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 $r = 1.5707968$, se observa una rápida convergencia a la multiplicidad $m = 2$ y al orden de convergencia $p = 1$.

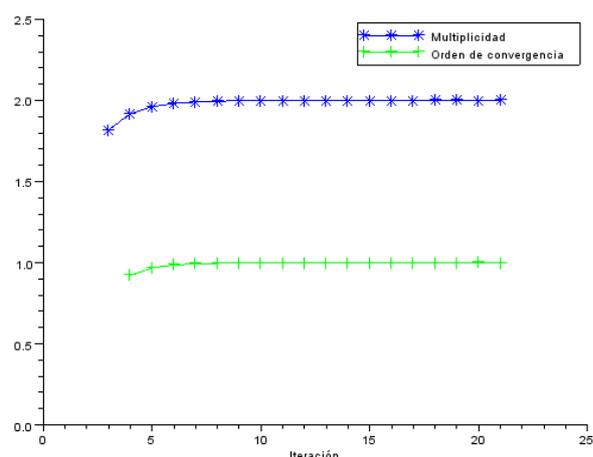


Figura 4: Estimativa de la multiplicidad (m) y del orden de convergencia (p)

Para el segundo ejemplo de aplicación se aplica la metodología para obtención de las raíces de la función polinómica:

$$f(x) = x^3 - 4x^2 + 5x - 2 \tag{11}$$

En las gráficas de la Figura 5 se muestra la función original y sus versiones reducidas o deflactadas. Las gráficas con línea continua corresponden a la función original. Puede inferirse que posee una raíz doble en $r = 1$ y una raíz simple en $r = 2$. La gráfica con línea a trazos de la izquierda corresponde a la función reducida, $f(x)/(x-1)^2$, que como se observa ya no posee la raíz doble en $r = 1$, y la gráfica punteada muestra la función deflactada nuevamente por la raíz simple en $r = 2$, $f(x)/[(x-1)^2(x-2)]$, 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 reducida, $f(x)/(x-2)$, 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.

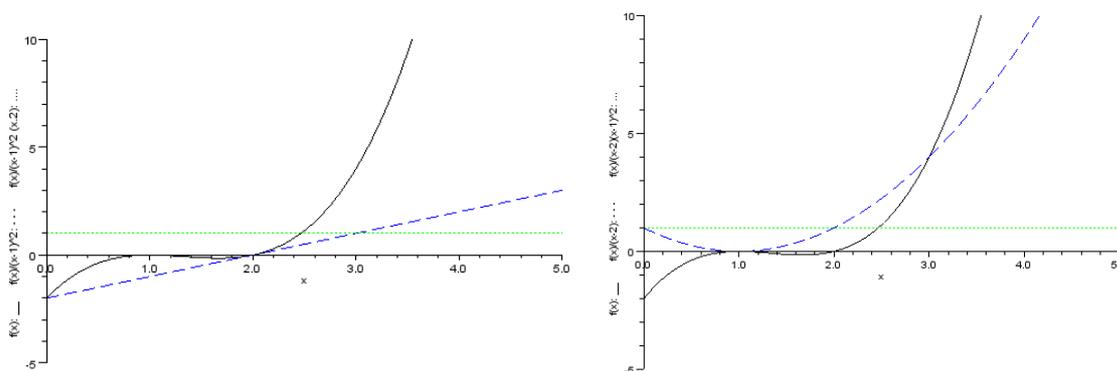


Figura 5: Gráfica de $f(x) = x^3 - 4x^2 + 5x - 2$ y el efecto de la deflación

En la Tabla 2 y la Figura 6 se compara el desempeño de las variantes del método de Newton y se muestra el funcionamiento de los estimadores de multiplicidad y orden de convergencia utilizando como condición inicial $x_0 = 0$ en todos los casos.

Tabla 2. Comparación del desempeño del método de Newton y de los estimadores de multiplicidad y orden de convergencia

Newton				Newton Acelerado		Newton después de la deflación	
<i>n</i>	<i>x</i>	<i>p</i>	<i>m</i>	<i>n</i>	<i>x</i>	<i>n</i>	<i>x</i>
0	0.0			0	0.0	0	0.0
1	0.4			1	0.4	1	2.0
2	0.6526316		2.55	2	0.6526316		
3	0.8064833	1.09	2.39	3	0.8064833		
4	0.8959857	1.08	2.24	4	0.8959857		
5	0.9456532	1.06	2.14	5	0.9456532		
6	0.9721438	1.04	2.07	6	0.9986345		
7	0.9858857	1.02	2.04	7	0.9999991		
8	0.9928941	1.01	2.02	8	1.0		
9	0.9964346	1.00	2.01				
10	0.9982141	1.00	2.00				
11	0.9991063	1.00	2.00				
12	0.9995529	1.00	2.00				
13	0.9997764	1.00	2.00				
14	0.9998882	1.00	2.00				
15	0.9999441	1.00	2.00				
16	0.9999720	1.00	2.00				
17	0.9999860	1.00	2.00				
18	0.9999930	1.00	2.00				
19	0.9999965	1.00	2.00				
20	0.9999983	1.00	2.00				
21	0.9999991	1.00	2.00				
22	0.9999996	1.00	2.00				

En las dos primeras columnas de la Tabla 2 se observa convergencia a la raíz doble en $r = 1$ y en la tercer columna a la raíz simple en $r = 2$. En la Figura 6 se comparan las velocidades de convergencia del error relativo correspondiente a la raíz doble para el método de Newton 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.

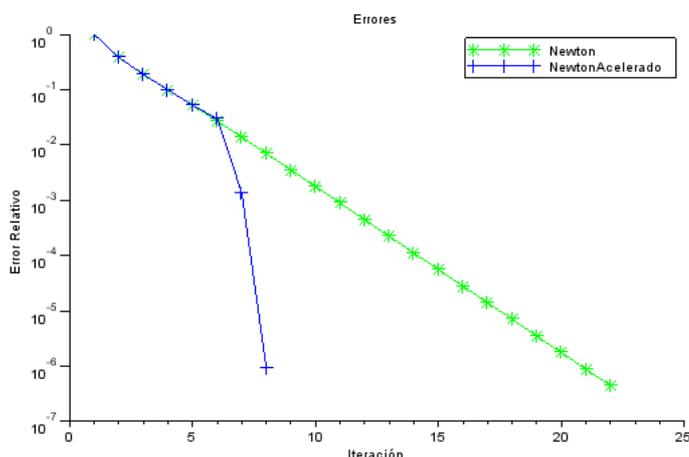


Figura 6. Velocidad de convergencia. Newton y Newton acelerado

5. Conclusiones

Se presentó una metodología para la generalización del concepto de deflación para funciones no lineales utilizando el método de Newton Raphson y el algoritmo básico implementado en el entorno del software matemático Scilab.

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 del algoritmo fue ilustrado mediante la aplicación de dos ejemplos numéricos.

El conocimiento de la multiplicidad contribuye a potenciar la utilización de deflación permitiendo que el método de Newton recupere su convergencia cuadrática en las raíces múltiples disminuyendo el costo computacional. Además 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, la técnica de deflación hace que pierda importancia la combinación de indeterminación y discontinuidad que se produce en la cercanía de una raíz múltiple, potenciando la robustez del algoritmo.

Bibliografía

- Burden, R. L., Faires, J. D., (2009), *Análisis Numérico*, Cengage Learning.
- Chapra, S. C., Canale, R. P. (2003), *Métodos Numéricos para Ingenieros con Programas de Aplicación*, McGraw Hill.
- Gerald, C. F., Wheatley, P. O. (2000). *Análisis Numérico con Aplicaciones*, Prentice Hall.
- Martins, A., Allan, C., Parra, S., Laurent, R. (2009), *Generalización del Concepto de Deflación en la Resolución de Ecuaciones No Lineales*, Revista Mecánica Computacional, 28, pp. 2649-2655, ISSN 1666-6070.
- Scilab (Versión 5.4.0). (2012). Scilab Enterprises. [en línea]. Recuperado el 12 de septiembre de 2012, de www.scilab.org/

Adair Martins es Ingeniera Electricista y Master en Ciencias en Ingeniería por la Universidad Federal de Itajubá (UNIFEI), Brasil. Actualmente es Profesora Asociada y Directora del Departamento de Computación Aplicada de la Facultad de Informática en la Universidad Nacional del Comahue, Argentina. Dirige el proyecto de Investigación: "Simulación y Métodos Computacionales en Ciencias y Educación".

Claudia Allan es Analista en Computación por la Facultad de Informática de la Universidad Nacional del Comahue (UNCo) y docente del Departamento de Computación Aplicada (UNCo). Actualmente cursa la Maestría en Enseñanza de las Ciencias Exactas y Naturales (UNCo) y participa en el proyecto de Investigación: "Simulación y Métodos Computacionales en Ciencias y Educación".

Susana Parra es Profesora en Informática por la Facultad de Informática de la Universidad Nacional del Comahue (UNCo) y docente del Departamento de Computación Aplicada (UNCo). Actualmente cursa la Maestría en Informática Aplicada a la Educación en la Universidad Nacional de La Plata. Participa en el proyecto de Investigación: "Simulación y Métodos Computacionales en Ciencias".

Roberto Laurent es Ingeniero Electricista por la Universidad Nacional del Sur, Argentina, y Master en Ingeniería Eléctrica por la Universidad Federal de Itajubá (UNIFEI), Brasil. Actualmente es Profesor Titular y Director de la carrera de Ingeniería Eléctrica en la Universidad Nacional del Comahue. Dirige el Proyecto de Investigación: "Simulación y Otros Métodos Computacionales en Sistemas de Potencia".