MARGARITA MATHEMATICA EN MEMORIA DE JOSÉ JAVIER (CHICHO) GUADALUPE HERNÁNDEZ (Luis Español y Juan L. Varona, editores), Servicio de Publicaciones, Universidad de La Rioja, Logroño, Spain, 2001.

EL MÉTODO DE HALLEY: POSIBLEMENTE, EL MÉTODO MÁS REDESCUBIERTO DEL MUNDO

JOSÉ A. EZQUERRO, JOSÉ M. GUTIÉRREZ, MIGUEL A. HERNÁNDEZ Y M. AMPARO SALANOVA

A nuestro amigo y compañero Chicho

ABSTRACT. Halley's method is a third order iterative method to solve nonlinear equations. Many authors have deduced it independtly. Here we try to justify, by showing different constructions, why it is said that Halley's method is the most "rediscovered" method in the mathematical literature.

Si tuviéramos que hacer una clasificación con los más famosos métodos iterativos para resolver ecuaciones, no hay duda alguna de que el método de Newton ocuparía el primer lugar. Según la opinión de varios autores y, teniendo en cuenta el número de publicaciones relacionadas con él, el método de Halley ocuparía el segundo puesto en esta ficticia clasificación. Así, por ejemplo, Traub, en su clásica monografía [19, pág. 91], dice: «El método de Halley puede compartir con el método de la secante la distinción de ser el método más frecuentemente redescubierto en la literatura». Confirmando este hecho, Scavo y Thoo [17] presentan un excelente artículo en el que se cuenta la historia del método, respaldada por numerosas referencias bibliográficas.

Es costumbre extendida entre los investigadores el bautizar sus descubrimientos con su propio nombre o con el de un personaje relevante en la materia. La resolución numérica de ecuaciones no lineales no escapa a esta costumbre. En este caso, dos de los métodos más conocidos, los métodos de Newton y Halley, reciben sus nombres de dos eminentes científicos británicos de finales del siglo XVII y comienzos del XVIII: Sir Isaac Newton y Edmund Halley. Pero, ¿hasta qué punto conocían estos autores los métodos cuya «paternidad» se les atribuye?

Por lo que respecta al método de Newton, parece ser que la idea que pudo tener Sir Isaac dista bastante de lo que conocemos hoy en día. Así, en una carta a sus colegas Barrow y Collins en 1669, Newton mostraba un ejemplo para resolver numéricamente una ecuación. Newton ilustraba su técnica con el ejemplo $x^3-2x-5=0$ y argumentaba de la siguiente manera: Por tanteo, se ve que la solución está cerca de 2. Haciendo $x=2+\varepsilon$ y sustituyendo en la ecuación se obtiene:

(1)
$$\varepsilon^3 + 6\varepsilon^2 + 10\varepsilon - 1 = 0.$$

²⁰⁰⁰ Mathematics Subject Classification. 65–02.

Key words and phrases. Nonlinear equations, Halley's method, third order methods.

Este trabajo ha sido subvencionado por una ayuda de la DGES (ref. PB98-0198) y otra de la Universidad de La Rioja (ref. API-00/B16).

Ignorando los términos $\varepsilon^3 + 6\varepsilon^2$ con el pretexto de que ε es pequeño, se llega a que $10\varepsilon - 1 = 0$ ó $\varepsilon = 0,1$. Entonces x = 2,1 es una aproximación de la solución mejor que la inicial.

Haciendo ahora $\varepsilon = 0.1 + \nu$ y sustituyendo en (1) se sigue que

$$\nu^3 + 6.3\nu^2 + 11.23\nu + 0.061 = 0.$$

Ignorando de nuevo los términos en ν de grado mayor o igual que dos, se llega a que $\nu = -0.0054$ y, por tanto, x = 2.0946 es una aproximación que mejora las anteriores. Newton indicaba que el proceso se puede repetir las veces que sean necesarias.

Como vemos, la idea de Newton consiste en añadir un término corrector a una aproximación inicial dada. Para obtener esta aproximación, lo que hace es truncar el binomio de Newton en el segundo término en expresiones del tipo

$$(a+\varepsilon)^n \simeq a^n + na^{n-1}\varepsilon.$$

De esta manera, para obtener el valor aproximado de ε simplemente hay que resolver una ecuación lineal.

Escribiendo el problema con la notación actual y llamando $p(x) = x^3 - 2x - 5$, tenemos que la nueva aproximación es

$$2 - \frac{p(2)}{p'(2)} = 2 + \frac{1}{10} = 2,1,$$

que se corresponde con la conocida formulación del método de Newton

(2)
$$x_{n+1} = x_n - \frac{p(x_n)}{p'(x_n)}.$$

Ahora bien, no se tiene constancia de que Newton usara el cálculo diferencial ni de que expresara el proceso como un método iterativo en el sentido de que una aproximación pueda ser considerada como punto de partida de la siguiente.

La idea de iteración se atribuye a Joseph Raphson, quien además simplifica el aspecto operacional de la técnica de Newton. En 1690 publica un tratado en el que se dan fórmulas explícitas para el término corrector para algunos casos particulares. En concreto, calcula los términos correctores para las ecuaciones $x^3 - r = 0$ y $x^3 - px - q = 0$ que son, respectivamente,

$$\frac{r - x_0^3}{3x_0^2} \quad \text{y} \quad \frac{q + px_0 - x_0^3}{3x_0^2 - p},$$

siendo x_0 la aproximación inicial. La contribución de Raphson ha sido tenida en cuenta históricamente, no en vano muchos autores denominan el proceso como método de Newton-Raphson. Sin embargo, en los trabajos de Raphson no se aprecia la conexión existente entre el término corrector, la función que define la ecuación y su derivada.

La incorporación del cálculo diferencial se debe a Thomas Simpson (1740) quien estableció el método tal y como lo conocemos actualmente, salvo aspectos notacionales (Simpson explicaba de forma retórica cómo obtener las aproximaciones sucesivas). Además, Simpson extendió el proceso a funciones cualesquiera, no solamente polinomios.

Posteriormente, Lagrange (1798) expresa el método con la notación actual (2) y Fourier (1831) lo bautiza como «la méthode newtonienne». Quizá, Fourier es el causante de la falta de reconocimiento para el trabajo de Simpson.

Con estas líneas hemos querido indicar que, en ocasiones, la «paternidad» de un método no se debe exclusivamente al científico que le da el nombre, sino que es contribución de varios investigadores. Para profundizar más en la historia del método de Newton, recomendamos el trabajo de Ypma [20].

Algo parecido ocurre con el método de Halley. Siguiendo a Bailey [1], podemos ver que Halley quedó impresionado por los trabajos del matemático francés Thomas Fautet de Lagny, quien en 1691 dio fórmulas (racionales e irracionales) para aproximar la raíz cúbica de un número. Halley, en 1708 escribe en la revista londinense Miscellanea Curiosa lo siguiente: «Habiendo comprobado la eficiencia de estas fórmulas (las de de Lagny), voy a intentar encontrar la demostración». Y he aquí la demostración de Halley para la fórmula racional. Se trata de aproximar la raíz cúbica de un número natural escrito en la forma $a^3 + b$, con $a, b \in \mathbb{Z}$. Para ello, Halley busca un término corrector ε de forma que $(a+\varepsilon)^3 = a^3 + b$. De aquí se deduce que $b = 3a^2\varepsilon + 3a\varepsilon^2 + \varepsilon^3$. Despreciando el término ε^3 , se llega a que $b \simeq 3a^2\varepsilon + 3a\varepsilon^2$ y se obtienen las siguientes aproximaciones para ε :

(3)
$$\frac{b}{3a^2} \simeq \varepsilon + \frac{\varepsilon^2}{a} \simeq \varepsilon,$$

$$\frac{b}{3a^2 + 3a\varepsilon} \simeq \varepsilon.$$

Sustituyendo (3) en (4) se llega a

$$\varepsilon \simeq \frac{b}{3a^2 + 3a\frac{b}{3a^2}} = \frac{ab}{3a^3 + b}.$$

Esta es la fórmula racional dada por de Lagny:

$$\sqrt[3]{a^3 + b} \simeq a + \frac{ab}{3a^3 + b}.$$

Si escribimos con notación actual el problema, llamando $f(x) = x^3 - a^3 - b$ y tomando $x_0 = a$, la expresión anterior se corresponde efectivamente con el primer paso del método de Halley:

(5)
$$x_{n+1} = x_n - \frac{2}{2 - L_f(x_n)} \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},$$

donde

(6)
$$L_f(x_n) = \frac{f(x_n)f''(x_n)}{f'(x_n)^2}.$$

Parece ser que Halley intentó extender sus métodos para obtener aproximaciones incluso para ecuaciones dadas por funciones trascendentes. De hecho, en un trabajo suyo de 1694 aparecen implícitamente aproximaciones del tipo (5) y también aproximaciones dadas por fórmulas irracionales. Lo que no está claro es dónde aparecieron por primera vez estas fórmulas explícitamente. Así, debemos esperar un siglo

y medio hasta que en un trabajo de Schröder (1870) podemos encontrar la iteración de Halley tal y como la conocemos actualmente. No obstante, en dicho trabajo, el método de Halley sólo aparece de pasada y sin ninguna referencia al propio Halley. Posteriormente, el método de Halley irá apareciendo con cierta frecuencia en los trabajos de muchos autores que lo irán «redescubriendo». Para hacernos una idea de este hecho, podemos consultar la historia del método que aparece en el trabajo de Scavo y Thoo [17].

En lo que sigue, vamos a exponer diferentes formas de «descubrir» el método de Halley. Pretendemos exponer estas técnicas por el interés que tienen por sí mismas y porque, además, estos procedimientos nos permitirán, mediante ligeras variantes, construir otros procesos iterativos. No se pretende asignar un descubridor a cada una de estas técnicas. En consecuencia, entendemos que los autores que citamos han trabajado en ellas, pero, eso sí, no tienen porqué ser los primeros ni los únicos en hacerlo.

No es nuestra intención realizar aquí un estudio de las características de los métodos que tratamos (convergencia local o global, orden de convergencia, análisis del error, etc.). Simplemente queremos mostrar distintas maneras de construir procesos iterativos y, en particular, el método de Halley. Del mismo modo, tampoco precisaremos las condiciones que han de cumplirse para que estas construcciones puedan realizarse. Así, supondremos que las funciones que manejaremos son todo lo continuas y derivables que deban ser.

Primera forma: a partir del desarrollo de Taylor. Según se puede leer en el artículo de Bateman [2], el trabajo de Halley para extender su método para aproximar soluciones a ecuaciones trascendentes inspiró a Brook Taylor en la consecución de su afamado teorema. El propio Taylor escribe en una carta a un colega en 1712: «Estaba pensando en cómo aplicar el método del Dr. Halley a la ecuación de Kepler cuando se me ocurrió la forma de extender su método de extracción de raíces a todos los problemas . . . »

La idea que presentamos a continuación es, probablemente, la manera más habitual de «redescubrir» el método de Halley. En ella empleamos el desarrollo de Taylor de una función, que como acabamos de ver es un resultado que se publicó con posterioridad a los trabajos de Newton, Raphson o Halley.

Partiendo de una aproximación x_0 de la solución de una ecuación f(x) = 0, buscamos una aproximación mejor de la forma $x_0 + \varepsilon$. Lo ideal sería que $f(x_0 + \varepsilon) = 0$. Teniendo en cuenta esto y usando el desarrollo de Taylor, llegamos a

(7)
$$0 = f(x_0 + \varepsilon) = f(x_0) + f'(x_0)\varepsilon + \frac{f''(x_0)}{2}\varepsilon^2 + \frac{f'''(x_0)}{6}\varepsilon^3 + \cdots$$

La idea de Newton o Halley de truncar el binomio de Newton se extiende ahora al desarrollo de Taylor. De esta manera, truncando (7) en el segundo sumando se llega al método de Newton. Si añadimos un término más, es decir, si truncamos (7) en el término con potencias en ε^2 , se obtiene

(8)
$$0 \simeq f(x_0) + f'(x_0)\varepsilon + \frac{f''(x_0)}{2}\varepsilon^2,$$

y de aquí,

$$\varepsilon \simeq \frac{2}{1 \pm \sqrt{1 - 2L_f(x)}} \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Para evitar restar dos cantidades similares, se recomienda [19] elegir la raíz cuadrada con signo positivo. Por tanto, la nueva aproximación pasa a ser

(9)
$$x_1 = x_0 - \frac{2}{1 + \sqrt{1 - 2L_f(x_0)}} \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Este método, conocido como método de Euler o método de Halley irracional ha sido estudiado, entre otros, por Traub [19, pág. 93] y Melman [13]. La expresión correspondiente para el cálculo de raíces cúbicas, es decir, cuando $f(x) = x^3 - a^3 - b$ era conocida por Halley (y por de Lagny):

$$x_1 = \frac{a}{2} + \sqrt{\frac{a^2}{2} + \frac{b}{3a}}, \quad (x_0 = a).$$

Además parece ser que Halley era más partidario de las expresiones que dependían del cálculo de raíces cuadradas que de las que contenían fracciones con denominadores muy grandes. Con este comentario, Halley anuncia con siglos de antelación uno de los problemas con los que nos podemos encontrar al trabajar numéricamente. Halley creía incluso que la fórmula irracional era más precisa que la racional¹.

Sin embargo, no es este el método que ha heredado su nombre y que, con el transcurso del tiempo, ha adquirido más fama. El método en cuestión evita el cálculo de raíces cuadradas. Para ello, en la aproximación (8) se hace

(10)
$$\varepsilon \simeq -\frac{f(x_0)}{f'(x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}\varepsilon}.$$

Para no tener que resolver una ecuación de segundo grado y no tener que calcular raíces cuadradas, se sustituye el término corrector ε que aparece en el denominador anterior por la corrección del método de Newton, $\varepsilon = -f(x_0)/f'(x_0)$, para obtener así la corrección de Halley:

$$\varepsilon \simeq -\frac{f(x_0)}{f'(x_0) - \frac{f(x_0)f''(x_0)}{2f'(x_0)}}.$$

El método resultante es el que se conoce como método de Halley (5):

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

Se observa el paralelismo que hay entre la forma de deducir el método que acabamos de comentar y el trabajo original de Halley para el cálculo de raíces cúbicas explicado con anterioridad.

Extensiones de esta misma técnica han permitido encontrar gran número de procesos iterativos. Si en lugar de sustituir el término corrector ε que aparece en el

¹Esta afirmación no es cierta en general, como lo demuestra el contraejemplo dado por $f(x) = e^x - 2$, con $x_0 = 1,3$.

denominador de (10) por la corrección del método de Newton se sustituye por otras correcciones, se obtienen otros procesos. Esta técnica, denominada de reemplazamiento, ha sido utilizada por autores como Neta [14] para definir una treintena de nuevos procesos iterativos de tercer orden.

Stewart [18] y Hamilton [9], en lugar de trabajar con la ecuación (7), la transforman en un sistema de dos ecuaciones como sigue:

$$\begin{cases} f'(x_0)\varepsilon + \frac{f''(x_0)}{2}\varepsilon^2 = -f(x_0) - \frac{f'''(x_0)}{6}\varepsilon^3 + \cdots \\ f(x_0)\varepsilon + f'(x_0)\varepsilon^2 = -\frac{f''(x_0)}{2}\varepsilon^3 + \cdots \end{cases}$$

Despreciando los términos en ε^k con $k \geq 3$, denotando u y v a las aproximaciones de ε y ε^2 respectivamente, y resolviendo el sistema resultante por la regla de Cramer, se tiene que

$$\varepsilon \simeq u = \frac{ \begin{vmatrix} -f(x_0) & f''(x_0)/2 \\ 0 & f'(x_0) \end{vmatrix}}{ \begin{vmatrix} f'(x_0) & f''(x_0)/2 \\ f(x_0) & f'(x_0) \end{vmatrix}} = \frac{2}{2 - L_f(x_0)} \frac{f(x_0)}{f'(x_0)},$$

que es la corrección del método de Halley (5). Extensiones de esta técnica permiten encontrar procesos iterativos de distintos órdenes, a partir de expresiones que dependen de determinantes. Para obtener una información más detallada, se puede consultar el trabajo de Kalantari, Kalantari y Zaare-Nahandi [11].

Segunda forma: construcción geométrica. Es bien conocido que el método de Newton tiene una clara interpretación geométrica, ya que, dado una aproximación inicial x_0 , la siguiente aproximación, x_1 , se obtiene como la intersección de la recta tangente a la función f(x) en el punto x_0 con el eje de abscisas. Así, x_1 es la intersección de las rectas $y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$ e y = 0, es decir,

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

Por este motivo, al método de Newton se le suele denominar también como método de la tangente.

El método de reemplazamiento introducido en la sección anterior no nos permite dar una interpretación geométrica clara sobre la construcción del método de Halley. No obstante, en 1952 Salehov [16] sugiere que el método de Halley puede obtenerse aproximando una función por medio de hipérbolas. Siguiendo a Scavo y Thoo [17], para aproximar la solución de una ecuación f(x) = 0, a partir de un valor inicial x_0 , vamos a buscar una hipérbola de la forma

$$y(x) = \frac{(x - x_0) + c}{a(x - x_0) + b}$$

que cumpla $y(x_0) = f(x_0)$, $y'(x_0) = f'(x_0)$ e $y''(x_0) = f''(x_0)$. Este tipo de curvas, denominadas osculatrices, coinciden con f en x_0 hasta la segunda derivada. En consecuencia, estas hipérbolas aproximan mejor a una curva que la recta tangente, donde la coincidencia sólo es hasta la primera derivada. Esta mejor aproximación se

ve reflejada en una convergencia más rápida para el método de Halley que para el de Newton. El primero tiene orden tres mientras que el segundo tiene orden dos. De forma breve, se puede decir que el orden de convergencia mide la velocidad con la que una sucesión se aproxima a su límite: a mayor orden, mayor velocidad. Volveremos a tratar el tema del orden en la última sección.

Para que la hipérbola cumpla las condiciones requeridas sus coeficientes $a,\,b$ y c deben satisfacer:

$$\begin{cases} \frac{c}{b} = f(x_0), \\ \frac{b - ac}{b^2} = f'(x_0), \\ \frac{2a(ac - b)}{b^3} = f''(x_0), \end{cases}$$

es decir.

$$\begin{cases} a = \frac{-f(x_0)}{2f'(x_0)^2 - f(x_0)f''(x_0)}, \\ b = \frac{2f'(x_0)}{2f'(x_0)^2 - f(x_0)f''(x_0)}, \\ c = \frac{2f(x_0)f'(x_0)}{2f'(x_0)^2 - f(x_0)f''(x_0)}. \end{cases}$$

Una vez encontrada la hipérbola osculatriz, tomamos como nueva aproximación su intersección con el eje de abscisas, es decir el punto tal que $y(x_1) = 0$. Dada la forma de la hipérbola, se tiene que

$$x_1 = x_0 - c = x_0 - \frac{2f(x_0)f'(x_0)}{2f'(x_0)^2 - f(x_0)f''(x_0)}$$
$$= x_0 - \frac{2}{2 - L_f(x_0)} \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}.$$

Debido a esta interpretación geométrica, el método de Halley es llamado a veces el método de las hipérbolas tangentes.

Ideas similares se pueden utilizar para construir otros procesos iterativos, aproximando una función por otro tipo de curvas osculatrices. Por ejemplo, si en lugar de hipérbolas consideramos parábolas de la forma

$$y(x) = a(x - x_0)^2 + b(x - x_0) + c,$$

se obtiene el método de Euler (9). Si las parábolas son de la forma

$$y(x)^{2} + ay(x) + b(x - x_{0}) + c = 0,$$

el método obtenido es el de Chebyshev, método que presentamos en la siguiente sección.

Tercera forma: a partir de la interpolación racional inversa. Presentamos en esta sección otra técnica para construir procesos iterativos, conocida como interpolación inversa. En breve, podemos resumir el problema diciendo que se trata de resolver una ecuación f(x) = 0. Para ello, consideramos la función que a cada x le hace corresponder y = f(x), y denotamos por $x = \phi(y)$ a su función inversa.

El problema de aproximar la solución de f(x) = 0 se transforma entonces en el de aproximar $\phi(0)$. Se nos ofrecen ahora distintas posibilidades, en función de las diferentes maneras de aproximar la función ϕ .

La primera de ellas consiste en aproximar $\phi(0)$ usando el desarrollo de Taylor hasta el orden dos. Esta idea se atribuye al matemático ruso Pafnuty Lvovich Chebyshev, quien presentó el método que lleva su nombre en un concurso estudiantil celebrado entre 1840 y 1841 y en el que consiguió la medalla de plata. Aunque existe una cierta unanimidad entre los científicos en atribuir a Chebyshev la «paternidad» del método, hay quien se lo atribuye a Leonhard Euler, lo cual no sería de extrañar, debido a la prolijidad científica de este insigne matemático y a que Chebyshev conocía bien la obra de Euler. No en vano, Chebyshev contribuyó a preparar una edición con algunas de las obras de Euler a finales de 1840.

Volviendo al problema de la interpolación inversa, supongamos que x_0 es una aproximación inicial de la solución de f(x) = 0 y sea $y_0 = f(x_0)$. Entonces

$$\phi(0) \simeq \phi(y_0) - \phi'(y_0)y_0 + \frac{1}{2}\phi''(y_0)y_0^2$$

$$= x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} - \frac{1}{2}\frac{f(x_0)^2 f''(x_0)}{f'(x_0)^3}$$

$$= x_0 - \left(1 + \frac{1}{2}L_f(x_0)\right)\frac{f(x_0)}{f'(x_0)},$$

donde $L_f(x)$ se define en (6). A la iteración resultante

(11)
$$x_{n+1} = x_n - \left(1 + \frac{1}{2}L_f(x_n)\right) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

se la conoce como método de Chebyshev, método de la interpolación cuadrática inversa o método de las parábolas tangentes.

Desde otro punto de vista, podemos expresar la idea de Chebyshev indicando que se ha aproximado la función inversa por un polinomio de segundo grado

$$\phi(y) \simeq a + b(y - y_0) + c(y - y_0)^2 = p(y),$$

eligiendo los coeficientes de forma que $\phi^{(k)}(y_0) = p^{(k)}(y_0)$ para k = 0, 1, 2. Evidentemente, este polinomio es el polinomio de Taylor de segundo orden. Pero se pueden buscar otro tipo de funciones de aproximación, como por ejemplo, aproximantes de Padé, que es lo que hace Traub en [19, Cap. 5].

Si aproximamos $\phi(y)$ por una función racional del tipo

$$\phi(y) \simeq \frac{(y - y_0) + a}{b(y - y_0) + c} = R(y),$$

exigiendo que $\phi^{(k)}(y_0) = R^{(k)}(y_0)$ para k = 0, 1, 2, se llega a que

$$R(y) = \frac{(2f'(x_0) + x_0f''(x_0))(y - y_0) + 2x_0f'(x_0)^2}{f''(x_0)(y - y_0) + 2f'(x_0)^2}.$$

Eligiendo como nueva aproximación el valor $x_1 = R(0)$ se obtiene

$$x_1 = \frac{-f(x_0)(2f'(x_0) + x_0f''(x_0)) + 2x_0f'(x_0)^2}{-f(x_0)f''(x_0) + 2f'(x_0)^2},$$

expresión que, después de operar adecuadamente, se puede escribir en la conocida forma

$$x_1 = x_0 - \frac{2}{2 - L_f(x_0)} \frac{f(x_0)}{f'(x_0)},$$

es decir, de nuevo, el método de Halley (5).

Cuarta forma: usando fracciones continuas. El procedimiento que mostramos en esta sección es una variante de la interpolación inversa introducida en la sección precedente. La idea fue presentada por Frame en [5]. Manteniendo la misma notación de la sección anterior, es decir, denotando $x = \phi(y)$ a la función inversa de y = f(x), Frame obtuvo el siguiente desarrollo en serie de potencias para el término corrector ε :

$$\varepsilon = r - x_0 = \phi(0) - \phi(y_0) = \sum_{k \ge 1} c_k \nu^k$$
$$= \nu - \frac{f''(x_0)}{2f'(x_0)} \nu^2 + \frac{3f''(x_0) - f'''(x_0)f'(x_0)}{6f'(x_0)} \nu^3 + \cdots,$$

donde r denota a la solución de $f(x)=0,\ \nu=-f(x_0)/f'(x_0)$ y $c_1=1,\ c_2=-f''(x_0)/(2f'(x_0)),$ etc.

En la sección anterior hemos aproximado la función inversa por polinomios o aproximantes de Padé. En esta sección vamos a desarrollar en fracciones continuas el desarrollo en serie de potencias del término corrector:

el desarrollo en serie de potencias del término corrector:
$$(12) \qquad \qquad \varepsilon = \sum_{k \geq 1} c_k \nu^k = b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \frac{a_3}{b_3 + \cdots + \frac{a_j}{b_j + \rho_{j+1}}}}}$$

donde
$$\rho_j = \frac{a_j}{b_j + \rho_{j+1}}$$
.

Dependiendo de las diversas fracciones continuas desarrolladas y del lugar en el que las trunquemos, obtendremos diversos procesos iterativos. En el desarrollo propuesto por Frame [5] se tiene que $b_0=0,\ b_j=1\ \forall j\geq 1,\ a_1=\nu\ y\ a_{j+1}$ es el primer término del desarrollo en serie de potencias de ν del cociente

$$\rho_{j+1} = \frac{a_j - \rho_j}{\rho_j},$$

donde $\rho_1 = \varepsilon = \sum_{k>1} c_k \nu^k$.

Así, si truncamos la fracción continua en el primer término, tenemos que

$$\varepsilon \simeq a_1 = \nu = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

y la corrección que se obtiene es la del método de Newton.

Para truncar en el segundo término se necesita calcular a_2 que, como hemos dicho, es el primer término del desarrollo en serie de potencias de ρ_2 . Como

$$\rho_2 = \frac{a_1 - \rho_1}{\rho_1} = -c_2 \nu + (c_2^2 - c_3) \nu^3 + \cdots,$$

se tiene que $a_2 = -c_2\nu = -L_f(x_0)/2$. Por tanto,

$$\varepsilon \simeq \frac{a_1}{1+a_2} = -\frac{2}{2-L_f(x_0)} \frac{f(x_0)}{f'(x_0)},$$

que es la corrección del método de Halley (5).

Si truncamos la fracción continua en términos superiores, se obtienen métodos de orden superior, aunque el propio Frame advierte que, siguiendo la técnica indicada unas líneas más arriba, los cómputos se complican excesivamente a partir del cuarto término. No obstante, en el mismo artículo [5] se proporciona otro procedimiento para el cálculo de los numeradores a_j y los restos ρ_j mediante el uso de determinantes.

Si en lugar del desarrollo en fracciones continuas considerado por Frame, se tienen en cuenta otros desarrollos, se obtienen otros procesos iterativos. Por ejemplo, siguiendo a Kincaid y Cheney [12, pág. 417], se puede convertir una serie en fracción continua. De hecho, la serie $\sum_{k\geq 1} c_k \nu^k$ admite el desarrollo (12) con $b_0 = 0$, $a_1 = 1$, $b_1 = 1/\nu$,

$$a_j = -\left(\frac{1}{c_{j-1}\nu^{j-1}}\right)^2, \quad b_j = \frac{1}{c_{j-1}\nu^{j-1}} + \frac{1}{c_j\nu^j}, \quad j \ge 2.$$

Si truncamos la fracción continua en el segundo término, el término corrector que se obtiene es el correspondiente al método de Chebyshev (11).

Quinta forma: como aceleración del método de Newton. El problema que intentan resolver los procesos iterativos es el de aproximar la solución de una ecuación f(x) = 0. En ocasiones, puede resultar más sencillo resolver una ecuación modificada f(x)g(x) = 0, donde g(x) es una función convenientemente elegida. Entre otras cosas, deberá cumplir que no se anule en un entorno de la raíz buscada: si r es tal que f(r) = 0, entonces $g(x) \neq 0$ en un entorno de r.

Si para aproximar la solución de una ecuación empleamos el método de Newton, la situación ideal sería que la función que manejamos sea una recta, ya que, evidentemente, en este caso la solución exacta se alcanzaría en la primera iteración. Pero bueno, en la práctica no tiene mucho sentido usar el método de Newton para resolver una ecuación lineal. De hecho, los métodos iterativos se usan para resolver ecuaciones no lineales. Pero a partir de esta idea y como sugiere Brown en [3], podemos usar la función g(x) para «linealizar» lo más posible la ecuación f(x)g(x) = 0. ¿En qué sentido?; por ejemplo, exigiendo que (f(x)g(x))'' se anule en x = r. Este «aumento de la linealidad» de la ecuación en un entorno de r debería repercutir en la velocidad de convergencia del método de Newton.

Recogiendo esta idea, Gerlach [7] prueba que cuando se aplica el método de Newton a una ecuación $\Psi(x) = 0$ donde la solución r cumple que $\Psi'(r) \neq 0$, $\Psi''(r) = 0$ y $\Psi'''(r) \neq 0$, entonces se alcanza la convergencia de orden tres, cuando en general,

el orden de convergencia del método de Newton es dos. Al tener mayor orden, la sucesión obtenida para las funciones Ψ converge más rápidamente. En la última sección trataremos con un poco más de detalle el tema del orden de convergencia.

En resumen, si $\Psi(x) = f(x)g(x)$, buscamos g de manera que $\Psi''(r) = 0$, es decir,

$$f''(r)g(r) + 2f'(r)g'(r) = 0.$$

Después de resolver esta ecuación diferencial se llega a que la solución es (salvo constantes multiplicativas)

$$g(x) = \frac{1}{\sqrt{f'(x)}}.$$

En consecuencia la idea de Brown y Gerlach consiste en aplicar el método de Newton a la función $\Psi(x) = f(x)/\sqrt{f'(x)}$ en lugar de a f(x). ¿Cuál es la expresión del método resultante?

$$x_{n+1} = x_n - \frac{\Psi(x)}{\Psi'(x)} = x_n - \frac{2}{2 - L_f(x_n)} \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},$$

expresión que, como no podía ser menos, coincide con la del método de Halley (5).

Sexta forma: a partir de iteraciones de Laguerre. El método de Laguerre es un conocido método para encontrar las raíces de un polinomio. De forma resumida, expondremos aquí en qué consiste para mostrar después una generalización que nos llevará, entre otros, al método de Halley. Para un estudio más detallado del método de Laguerre, recomendamos al lector el libro de Ostrowski [15, Apéndice O].

Para ver cómo se construye la iteración de Laguerre, vamos a considerar un polinomio p(x) de grado n con raíces reales $x_1 \le x_2 \le \cdots \le x_n$:

$$p(x) = \prod_{i=1}^{n} (x - x_i).$$

La idea del método de Laguerre parte de la derivación logarítmica de p(x). Así, denotando $a_i = 1/(x - x_i)$, A = p'(x)/p(x) y B = -dA/dx se llega a

$$A = (\log p(x))' = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{(x - x_i)} = \sum_{i=1}^{n} a_i,$$

$$B = -\frac{d(p'(x)/p(x))}{dx} = \frac{p'(x)^2 - p(x)p''(x)}{p(x)^2} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{(x - x_i)^2} = \sum_{i=1}^{n} a_i^2.$$

La desigualdad de Cauchy-Schwarz nos permite deducir la siguiente desigualdad:

$$(A - a_1)^2 = (a_2 + \dots + a_n)^2 \le (n - 1)(a_2^2 + \dots + a_n^2) = (n - 1)(B - a_1^2),$$

o equivalentemente

$$na_1^2 - 2Aa_1 - (n-1)B + A^2 \le 0.$$

Entonces, a_1 se encuentra situado entre las raíces de la ecuación

(13)
$$nu^2 - 2Au - (n-1)B + A^2 = 0,$$

que son

$$u_1 = \frac{A - \sqrt{(n-1)(nB - A^2)}}{n}, \quad u_2 = \frac{A + \sqrt{(n-1)(nB - A^2)}}{n}.$$

Es más, se tiene que a_2, \ldots, a_n están entre u_1 y u_2 , es decir,

(14)
$$u_1 \le a_j = \frac{1}{x - x_j} \le u_2, \quad j = 1, \dots, n.$$

Este hecho permite encontrar mejores aproximaciones de las raíces de un polinomio a partir de una aproximación dada. En efecto, si la aproximación inicial x está entre dos raíces consecutivas, digamos

$$x_j < x < x_{j+1},$$

entonces

$$x_j < x - \frac{1}{u_2} < x < x - \frac{1}{u_1} < x_{j+1}.$$

Para deducir las desigualdades centrales debemos tener en cuenta que $u_1 < 0 < u_2$, ya que (14) es cierta para j = 1, ..., n y las cantidades $x-x_j$ son tanto positivas como negativas. Para las desigualdades laterales debemos aplicar la primera desigualdad de (14) a x_{j+1} y la segunda a x_j .

De esta manera se pueden construir sucesiones que aproximen las raíces más próximas de una aproximación inicial dada. Este es el que se conoce como método de Laguerre. Para una mayor información (comportamiento monótono de las sucesiones, qué ocurre cuando $x < x_1$ o cuando $x > x_n$, etc.) se puede consultar la obra de Ostrowski [15].

Cuatro años más tarde de la publicación del trabajo de Ostrowski, Hansen y Patrick extienden la construcción del método de Laguerre a funciones cualesquiera. Así, sea f(x) una función de variable real o compleja con una raíz simple que denotamos r. La idea de Hansen y Patrick consiste en sustituir el grado del polinomio por un parámetro λ en la igualdad (13). De esta forma, manteniendo la notación

$$A = \frac{f'(x)}{f(x)}, \quad B = -A' = \frac{f'(x)^2 - f(x)f''(x)}{f(x)^2},$$

se buscan las soluciones de

$$\lambda u^2 - 2Au - (\lambda - 1)B + A^2 = 0,$$

donde u es una aproximación de la cantidad 1/(x-r). Así,

(15)
$$r \simeq x - \frac{1}{u} = x - \frac{\lambda}{1 \pm \sqrt{(1-\lambda)(1-\lambda + \lambda L_f(x))}} \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

La expresión que aparece en el lado derecho de la igualdad, que denotamos por x_+ , nos proporciona una aproximación de la raíz r supuestamente mejor que x.

La iteración que aparece en el trabajo de Hansen y Patrick es

(16)
$$x_{+} = x - \frac{(\alpha+1)}{\alpha \pm \sqrt{(1-(\alpha+1)L_{f}(x))}} \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Notemos que coincide con la que nosotros hemos dado sin más que hacer el cambio de parámetro $\alpha = 1/(\lambda - 1)$. Para distintas elecciones del parámetro λ , la familia (15) contiene algunos métodos de renombre:

- 1. Por supuesto, cuando f(x) es un polinomio y λ es su grado, el método coincide con el de Laguerre clásico.
- 2. Cuando $\lambda = 1$, tenemos el método de Newton.
- 3. Haciendo $\lambda \to \infty$, se obtiene el método

(17)
$$x_{+} = x \pm \frac{1}{\sqrt{1 - L_{f}(x)}} \frac{f(x)}{f'(x)},$$

estudiado por Ostrowski en [15, pág. 111].

4. Si $\lambda = 2$, tenemos el método de Euler o método de Halley irracional (9):

$$x_{+} = x - \frac{2}{1 \pm \sqrt{1 - 2L_{f}(x)}} \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

¿Y qué pasa con el método de Halley? ¿No está incluido en esta familia? No nos alarmemos; notemos que si racionalizamos la expresión (15) nos queda

$$x_{+} = x - \frac{1 \pm \sqrt{(1-\lambda)(1-\lambda+\lambda L_f(x))}}{2-\lambda-(1-\lambda)L_f(x)} \frac{f(x)}{f'(x)},$$

que para $\lambda = 0$, y eligiendo el signo + en el numerador, el método correspondiente de esta familia es el «omnipresente» método de Halley (5):

$$x_{+} = x - \frac{2}{2 - L_{f}(x)} \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Séptima forma: a partir de la definición de orden de convergencia. En la sección anterior hemos construido una familia de procesos que incluye varios de los procesos más conocidos. En esta sección intentamos encontrar las características que debe cumplir una función de iteración para que englobe a todos los procesos iterativos con un orden de convergencia determinado.

El orden de convergencia de una sucesión mide, en cierta manera, la velocidad con la que dicha sucesión se acerca a su límite (suponiendo que existe y es finito). En muchas ocasiones una sucesión viene definida a través de una iteración funcional. Eso ocurre por ejemplo con los métodos de Newton, Halley y muchos otros para resolver una ecuación f(x) = 0. En todos estos casos podemos escribir la sucesión resultante en la forma

$$x_{n+1} = F(x_n),$$

donde F es una función que puede depender de x_n , de $f(x_n)$ y de las derivadas de f evaluadas en x_n .

Si r es una raíz de la ecuación f(x) = 0, se dice que un proceso iterativo es convergente a r con orden p > 1 si

$$|F(x) - r| = \mathcal{O}(|x - r|^p).$$

Es sencillo comprobar que esta condición de orden se satisface si F(x) posee en un entorno de r derivadas hasta el orden p y, además,

$$F(r) = r$$
, $F'(r) = F''(r) = \cdots = F^{(p-1)}(r) = 0$, $F^{(p)}(r) \neq 0$.

Entonces el proceso iterativo dado por la función de iteración F tiene exactamente orden p. Esto quiere decir que en cada iteración el numero de cifras significativas con las que se va aproximando la solución r se multiplica aproximadamente por p. Tanto la definición de orden como la caracterización que hemos dado se atribuyen al matemático de finales del siglo XIX E. Schröder. Para profundizar un poco más en este concepto, se puede consultar el artículo de Ehrmann [4].

A partir de la condición suficiente anterior, y a la vista de la forma que tienen algunos de los procesos iterativos más conocidos, Gander [6] se plantea el estudio de los métodos dados por la siguiente función de iteración:

(18)
$$F(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}G(x).$$

En concreto, el objetivo es caracterizar la función G para que el proceso definido por la función anterior tenga orden tres.

Denotamos u(x) = f(x)/f'(x). Notemos que $u'(x) = 1 - L_f(x)$, con $L_f(x)$ definido en (6).

Como F(r)=r, para que (18) defina un proceso iterativo de segundo orden, bastará con que

$$F'(r) = 1 - u'(r)G(r) - u(r)G(r) = 1 - G(r) = 0,$$

es decir, G(r) = 1.

Como caso particular, para la función constante G(x)=1, obtenemos el método de Newton.

Si queremos métodos con convergencia cúbica, necesitamos añadir la condición F''(r) = 0, que se traduce en

$$\frac{f''(r)}{f'(r)}G(r) - 2G'(r) = 0.$$

Teniendo en cuenta que G(r) = 1, nos queda

$$G'(r) = \frac{f''(r)}{2f'(r)}.$$

Estas condiciones no nos ayudan demasiado a elegir apropiadamente una función G, puesto que dependen de la raíz r. Sin embargo, si consideramos $G(x) = H(L_f(x))$, estas condiciones se traducen en

$$G(r) = H(0) = 1,$$

$$G'(r) = H'(0)L'_f(r) = H'(0)\frac{f''(r)}{f'(r)} = \frac{f''(r)}{2f'(r)}.$$

Esto nos permite construir fácilmente funciones H que cumplan

$$H(0) = 1, \quad H'(0) = \frac{1}{2}.$$

Algunos ejemplos de estas funciones nos han ido apareciendo a lo largo de este trabajo:

- 1. El método de Halley (5): $H(t) = (1 \frac{t}{2})^{-1} = 1 + \frac{t}{2} + \frac{t^2}{4} + \cdots$
- 2. El método de Chebyshev (11): $H(t) = 1 + \frac{t}{2}$
- 3. El método de Euler (9): $H(t) = 2(1 + \sqrt{1 2t})^{-1} = 1 + \frac{t}{2} + \frac{t^2}{2} + \cdots$
- 4. El método de Ostrowski (17): $H(t) = 2(1-t)^{-1/2} = 1 + \frac{t}{2} + \frac{3t^2}{8} + \cdots$
- 5. La familia de métodos de Hansen y Patrick (16):

$$H(t) = (\alpha + 1) \left(\alpha + \sqrt{1 - (\alpha + 1)t}\right)^{-1} = 1 + \frac{t}{2} + \frac{(\alpha + 3)t^2}{8} + \cdots$$

Otra familia de métodos de tercer orden que también se ajusta a la forma (18) es la estudiada en [8]. En este caso,

$$H(t) = 1 + \frac{t}{2(1 - \lambda t)} = 1 + \frac{t}{2} + \frac{\lambda t^2}{2} + \cdots$$

siendo λ un parámetro real. Esta familia incluye, entre otros, un método muy conocido y que no nos había aparecido hasta ahora. Este es el denominado método super-Halley y se corresponde con el valor $\lambda=1$.

Como conclusión, podemos decir que muchos de los procesos iterativos de tercer orden se ajustan a la forma de la función de iteración (18). Muchos, pero no todos. Se puede probar [4] que todos los procesos iterativos de tercer orden están dados por la función de iteración:

$$G(x) = H(L_f(x)) + f(x)^2 b(x),$$

donde b es una función arbitraria que está acotada para valores próximos de la raíz r.

REFERENCIAS

- [1] D. F. Bailey, A historical survey of solution by functional iteration, *Mathematics Magazine* **62** (1989), 155–166.
- [2] H. Bateman, Halley's method for solving equations, Amer. Math. Monthly 45 (1938), 11–17.
- [3] G. H. Brown Jr., On Halley's variation of Newton's method, Amer. Math. Monthly 84 (1977), 726–728.
- [4] H. Ehrmann, Konstruktion und Durchführung von Iterationsverfahren höherer Ordnüng, Arch. Rational Mech. Anal. 4 (1959), 65–88.
- [5] J. S. Frame, The solution of equations by continued fractions, Amer. Math. Monthly 60 (1953), 293–305.
- [6] W. Gander, On Halley's iteration method, Amer. Math. Monthly 92 (1985), 131–134.
- [7] J. Gerlach, Accelerated convergence in Newton's method, SIAM Rev. 36 (1994), 272–276.
- [8] J. M. Gutiérrez y M. A. Hernández, A family of Chebyshev-Halley type methods in Banach spaces, Bull. Austral. Math. Soc. 55 (1997), 113–130.
- [9] H. J. Hamilton, A type of variation of Newton's method, Amer. Math. Monthly 57 (1950), 517–522.
- [10] E. Hansen y M. Patrick, A family of root finding methods, Numer. Math. 27 (1977), 257–269.
- [11] B. Kalantari, I. Kalantari y R. Zaare-Nahandi, A basic family of iteration functions for polynomial root finding and its characterizations, J. Comput. Appl. Math. 80 (1997), 209–226.
- [12] D. Kincaid y W. Cheney, Análisis numérico. Las matemáticas del cálculo científico, Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1994.
- [13] A. Melman, Geometry and convergence of Euler's and Halley's methods, SIAM Rev. 39 (1997), 728–735.

- [14] B. Neta, Several new methods for solving equations, Intern. J. Computer Math. 22 (1988), 265–282.
- [15] A. M. Ostrowski, Solution of equations in euclidean and Banach spaces, Academic Press, Nueva York, 1973.
- [16] G. S. Salehov, On the convergence of the process of tangent hyperbolas (en ruso), Doklady Akad. Nauk SSSR (N.S.) 82 (1952), 525–528.
- [17] T. R. Scavo y J. B. Thoo, On the geometry of Halley's method, Amer. Math. Monthly 102 (1995), 417–426.
- [18] J. K. Stewart, Another variation of Newton's method, Amer. Math. Monthly 58 (1951), 331–334
- [19] J. F. Traub, Iterative methods for solution of equations, Prentice-Hall, Nueva Jersey, 1964.
- [20] T. J. Ypma, Historical development of the Newton-Raphson method, SIAM Rev. 37 (1995), 531–551.

DPTO. DE MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN, UNIVERSIDAD DE LA RIOJA, EDIFICIO J. L. VIVES, 26004 LOGROÑO. SPAIN

Correo electrónico: jezquer@dmc.unirioja.es, jmguti@dmc.unirioja.es, mahernan@dmc.unirioja.es, masalano@dmc.unirioja.es