



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA

Universitat Politècnica de València - Departamento de Matemática Aplicada

Programa de Doctorado en Matemáticas

Tesis Doctoral

**Modelado Matemático y Simulación Numérica de
disipadores de calor para luminarias LED. Aplicaciones
a alumbrado público**

Diego Francisco Alarcón Correa

Directores:

Ricardo Javier Bendaña Jácome (U. Vigo)

Pedro Fernández de Córdoba Castellá (UPV)

Jose Luís Higón Calvet (UPV)

Septiembre, 2020

Resumen

En esta tesis se plasma un ejemplo paradigmático de Matemática Industrial: se define un problema real de enorme interés actual, se presenta un modelo matemático del mismo, se resuelve numéricamente mediante métodos de Elementos Finitos, se realiza diferentes prototipos y se verifican experimentalmente las predicciones teóricas; además, en este caso particular, los prototipos aquí analizados se llevaron al mercado, cerrando un ciclo que se inicia con el modelado matemático y se termina con la transferencia a la sociedad de una solución competitiva a un problema real.

El problema que se aborda en esta tesis se enmarca en el desarrollo de soluciones de iluminación basadas en tecnología de diodos emisores de luz (LED, por su abreviación en inglés) de alta potencia. De hecho, el problema que se afronta es el desarrollo de disipadores pasivos de calor que garanticen la correcta evacuación del calor producido en el dispositivo LED y aseguren su adecuado funcionamiento. Para ello, se modela el problema de transferencia de calor (incluyendo conducción, radiación y convección) en diferentes prototipos, se resuelve con técnicas de Elementos Finitos y se optimizan los diseños propuestos, garantizando siempre que la temperatura de operación del chip LED sea correcta. Una vez realizado este análisis teórico, se construyen los prototipos y se verifican experimentalmente las predicciones realizadas.

Por último, en los anexos se recoge una serie de aportaciones complementarias: una sobre el gas de van der Waals y la Geometría de Contacto y otras dos sobre la convergencia de métodos iterativos.

Summary

In this thesis, a paradigmatic example of Industrial Mathematics is captured: a real problem of enormous current interest is defined, a mathematical model of it is presented, it is solved numerically using Finite Element methods, different prototypes are made and the theoretical predictions are experimentally verified; Furthermore, in this particular case, the prototypes analyzed here were brought to the market, closing a cycle that begins with mathematical modeling and ends with the transfer to society of a competitive solution to a real problem.

The problem addressed in this thesis is part of the development of lighting solutions based on high-power LED technology. In fact, the problem being faced is the development of passive heat sinks that guarantee the correct evacuation of the heat produced in the LED device and ensure its proper operation. For this, the heat transfer problem (including conduction, radiation and convection) is modeled in different prototypes, it is solved with Finite Element techniques and the proposed designs are optimized, always guaranteeing that the operating temperature of the LED chip is correct. Once this theoretical analysis has been carried out, the prototypes are built and the predictions made are experimentally verified.

Finally, the annexes contain a series of complementary contributions: one on van der Waals gas and Contact Geometry and two others on the convergence of iterative methods.

Resum

En aquesta tesi es plasma un exemple paradigmàtic de Matemàtica Industrial: es defineix un problema real d'enorme interès actual, es presenta un model matemàtic del mateix, es resol numèricament mitjançant mètodes d'Elements Finites, es realitza diferents prototips i es verifiquen experimentalment les prediccions teòriques; a més, en aquest cas particular, els prototips aquí analitzats es van dur a mercat, tancant un cicle que s'inicia amb el modelatge matemàtic i s'acaba amb la transferència a la societat d'una solució competitiva a un problema real.

El problema que s'aborda en aquesta tesi s'emmarca en el desenvolupament de solucions d'il·luminació basades en tecnologia LED d'alta potència. De fet, el problema que s'afronta és el desenvolupament de dissipadors passius de calor que garanteixin la correcta evacuació de la calor produïda en el dispositiu LED i assegurin la seva adequat funcionament. Per a això, es modela el problema de transferència de calor (incloent conducció, radiació i convecció) en diferents prototips, es resol amb tècniques d'Elements Finites i s'optimitzen els dissenys proposats, garantint sempre que la temperatura d'operació de l'xip LED sigui correcta. Un cop realitzat aquest anàlisi teòrica, es construeixen els prototips i es verifiquen experimentalment les prediccions realitzades.

Finalment, en els annexos es recull una sèrie d'aportacions complementàries: una sobre el gas de van der Waals i la Geometria de Contacte i dues sobre la convergència de mètodes iteratius.

Agradecimientos

En primer lugar, me gustaría agradecer a la **Secretaría de Educación Superior, Ciencia, Tecnología e Innovación (SENESCYT)** por el apoyo económico para poder realizar mis estudios en el extranjero con el fin de fortalecer el talento humano en el Ecuador.

También quiero agradecer a mis directores de tesis **Ricardo Bendaña, Pedro Fernández de Córdoba** y **José Luis Higón**, y las instituciones a las que pertenecen **Universidade de Vigo** y la **Universitat Politècnica de València**, que con su conocimiento han guiado este trabajo de investigación y han aportado directamente a mi formación tanto personal como de investigador.

Asimismo, agradecer a todas las personas especiales que esta experiencia me ha permitido conocer. Resaltando a **Daniel, Roberto, Mónica, Víctor** y **Cristina** por ayudarme a superar dificultades que he experimentado en todo este proceso de formación y, también, por enriquecer con innumerables recuerdos esta travesía.

Finalmente, agradecer a mi padre **Fabián** y a mi madre **Patricia** por ser el principal soporte y ejemplo que he tenido en toda mi vida. Por empujarme a cumplir mis metas sabiendo que siempre puedo contar con su ayuda, protección y amor. A mis hermanas **Chavaleth** y **Ana** que con su ejemplo de lucha son pieza fundamental en mi vida y que gracias a sus consejos y amor nunca me he sentido desamparado. En general, para todas las personas que completan mi amplia familia y que siempre con sus mensajes y bendiciones se han hecho sentir presentes en todo este tiempo fuera del país.

Índice general

Lista de figuras	ix
Lista de tablas	xi
1. Introducción	1
1.1. Evolución de las fuentes de iluminación	3
1.1.1. Historia del desarrollo del LED	5
1.1.2. Características técnicas de los LED	6
1.2. Iluminación de alta potencia	7
1.2.1. Problemática de componentes LED para alta potencia	8
1.3. Interés	9
1.4. Objetivos	10
2. Modelado Matemático para el estudio de la transferencia de calor	11
2.1. Modelado Matemático	12
2.2. Diseños propuestos para disipadores de calor pasivos	14
3. Simulación numérica del modelo matemático aplicado a diversas geometrías	19
3.1. Definiciones previas	19
3.2. Resultado de las simulaciones	20
4. Comprobación experimental de los resultados obtenidos mediante simulación numérica	25
5. Conclusiones	29
Bibliografía	31
Anexos	33

Índice de figuras

1.	a) Consumo de energía eléctrica mundial (kWh per cápita). b) Producción mundial de electricidad a partir de fuentes de petróleo, gas y carbón (% del total).	2
2.	Mecanismo de lámparas incandescentes [20].	3
3.	Mecanismo utilizado por lámparas fluorescentes [5].	4
4.	Lámparas fluorescentes compactas [27].	4
5.	Lámparas LED [14].	4
6.	Diferentes enfoques para la generación de luz blanca [4].	6
7.	Tendencias de crecimiento de la potencia de LED y decrecimiento relativo de su coste [4].	7
8.	Resumen de la aparición de cada fuente de iluminación y sus respectivas eficiencias [4].	8
9.	Vida útil del LED en función de la temperatura de trabajo [19].	9
10.	Ejemplo de aplicación de elementos finitos a una geometría.	11
11.	Elemento LED, fuente de calor 50 W.	15
12.	Geometría disipador I.	15
13.	Geometría disipador II.	16
14.	Geometría disipador III.	16
15.	Geometría disipador “ <i>Innebo</i> ”.	16
16.	Geometría disipador “ <i>Illumnia</i> ”.	17
17.	Simulación Disipador I.	21
18.	Simulación Disipador II.	21
19.	Simulación Disipador III.	22
20.	Simulación Disipador Innebo.	23
21.	Simulación disipador “ <i>Illumnia</i> ”.	23
22.	Vista frontal y lateral del prototipo de luminaria LED.	25
23.	Distribución de puntos de análisis en el prototipo.	26
24.	Mediciones de los puntos a), b) y c) en el disipador [3].	26
25.	Sistema empleado para realizar las mediciones de temperatura en la luminaria para alumbrado público [2]	27
26.	Resultados del experimento con termómetro infrarrojo y resultado de la simulación con Solidworks [2]	28

Índice de tablas

1.	Resumen de características de elementos de iluminación.	5
2.	Comparación del consumo necesario por tipo de iluminación de alta potencia para generar ciertas cantidades de lúmenes.	8
3.	Propiedades del material Aluminio 1060.	20

Capítulo 1

Introducción

En este escrito se resumen todos los resultados relevantes relacionados con la investigación y desarrollo de una fuente alternativa de iluminación de alta potencia. A lo largo de la historia, el tema de la iluminación se ha visto modificado por diferentes procesos de innovación marcados en cada época. Hoy en día el aspecto que rige la iluminación es el cuidado medioambiental, lo que ha obligado a cambiar las tradicionales fuentes de iluminación por unas que sean más responsables con el medioambiente, pero que al mismo tiempo permitan garantizar la misma calidad de iluminación que las fuentes tradicionales.

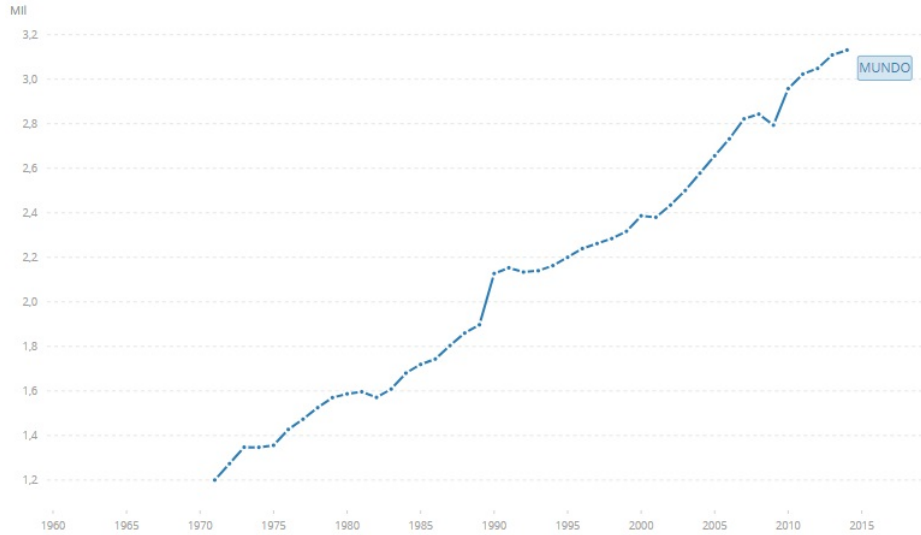
Han sido muchos años en los que se ha contado con diferentes fuentes clásicas de iluminación como la lámpara fluorescente, incandescente, vapor de mercurio, entre otras. Estas fuentes de iluminación han satisfecho las necesidades dentro de diferentes campos, pero con el pasar del tiempo y las nuevas exigencias han quedado obsoletas. En cuanto al alumbrado público, las bombillas utilizadas tienen como característica generar mucho calor, y en muchos casos, generar iluminación como residuo de un proceso principal de producción de calor, lo que hace que estas fuentes de iluminación no sean eficientes teniendo altos consumos energéticos. Además, algunas resultan ser peligrosas para la salud debido a los diferentes componentes que conforman estas bombillas.

En la actualidad, las nuevas exigencias para los diferentes procesos tecnológicos son prácticamente las que miden la viabilidad de los mismos. Debido a las últimas demandas de cuidado medioambiental, la tecnología LED de alta potencia se ha desarrollado como una alternativa a la iluminación tanto interior como exterior. Al inicio del desarrollo de la tecnología LED, debido a sus limitaciones de funcionalidad, esta tecnología era usada en aplicaciones de menor potencia como, por ejemplo, indicadores, adornos, etc. A partir del desarrollo tecnológico, sobre todo en sus componentes, se logra vincular esta tecnología a aplicaciones más relevantes y relacionadas con la iluminación interior y de alta potencia.

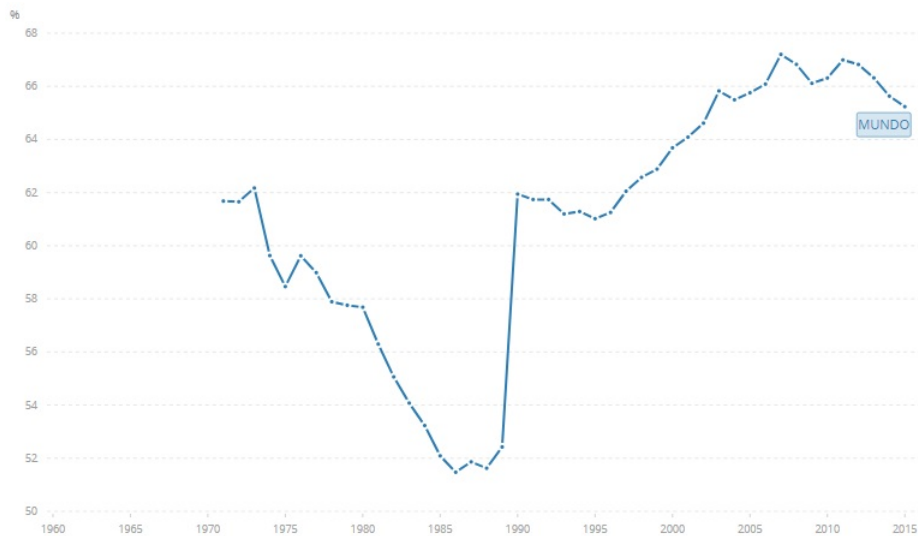
Es por esto que esta investigación se centra en el desarrollo de nuevas fuentes de iluminación de alta potencia aprovechando los avances debidos al desarrollo de los componentes del LED. Dicho desarrollo ha permitido obtener fuentes mucho más eficientes, ya que con un menor consumo de energía pueden alcanzar las mismas características de iluminación que las luminarias clásicas.

Otra de las motivaciones de llevar a cabo esta investigación es que la iluminación, al relacionarse directamente con el consumo energético, es objeto de mejora constante en cuanto a su rendimiento y eficacia. Como se puede observar en la figura 1a, según el Banco Mundial, el consumo energético ha tenido un significativo incremento en los últimos años debido a la expansión de sectores urbanos y al desarrollo dentro de sectores rurales. La iluminación, tanto interior como

exterior, representa entre un 10 % al 15 % del consumo energético total. Por ejemplo, dentro de las edificaciones, el consumo relacionado con la iluminación oscila entre el 30 al 45 % del consumo total, lo que sustenta el interés de este trabajo en desarrollar elementos que pueden aportar a la reducción del consumo energético.



(a)



(b)

Figura 1: a) Consumo de energía eléctrica mundial (kWh per cápita). b) Producción mundial de electricidad a partir de fuentes de petróleo, gas y carbón (% del total).

Además, la mayor cantidad de la energía consumida a nivel mundial es generada a partir de recursos no renovables como el petróleo, gas y carbón. La generación de energía con estos recursos contribuye al deterioro del medioambiente por los procesos de extracción que suelen ser altamente contaminantes y agota con rapidez recursos que no se pueden restablecer. En la figura 1b se muestra que más de la mitad de la energía es generada con recursos no renovables, es decir, la generación de energía tiene un alto impacto de contaminación. Por lo cual, al enfocar el estudio en la reducción de consumo energético, directamente se relaciona con la reducción de la contaminación ambiental.

1.1. Evolución de las fuentes de iluminación

En esta sección, se pretende realizar un breve resumen de la evolución de fuentes de iluminación artificial. A lo largo de la historia, junto con el avance tecnológico y los nuevos descubrimientos, se han creado diversos sistemas de iluminación. A continuación se presentan diferentes elementos de iluminación que existieron antes del desarrollo del LED.

Una de las primeras alternativas de iluminación fueron las lámparas incandescentes. Su funcionamiento puede ser comparado con una antorcha, es decir, que el principal proceso es generar calor y, como residuo de éste, obtener luz. En la figura 2 se puede observar el mecanismo empleado en este tipo de luminarias. Para la obtención de luz se hace pasar una corriente eléctrica a través del filamento de tungsteno que contiene la bombilla. Al pasar la corriente por el filamento hace que éste entre en incandescencia y a su vez se produzca la radiación de luz.



Figura 2: Mecanismo de lámparas incandescentes [20].

Su rendimiento está estimado entre 12 y 18 lm/W (lm = lúmenes y W = watts). En cuanto a la durabilidad, la esperanza de vida de las bombillas incandescentes es aproximadamente de 1200 horas¹. Uno de los factores que perjudica la vida útil de estas luminarias es la variación de tensión de alimentación, es decir, suministrar una mayor alimentación de la necesaria influirá directamente en el desgaste del filamento. Además, la utilización de estas bombillas se empezó a retirar progresivamente al ponerse en marcha la Directiva 2009/125/CE del Parlamento Europeo y del Consejo [28].

Dada la baja eficiencia de las luminarias y las regulaciones gubernamentales, se buscaron nuevas fuentes de iluminación más eficientes y con un menor impacto en el medioambiente, es así que se crean las bombillas fluorescentes. A diferencia de las incandescentes, estas luminarias casi no emiten calor y su funcionamiento se centra en la emisión de fotones. Dentro de un tubo de cristal, cubierto de una capa fluorescente en su interior, que contiene un gas inerte y dos filamentos en los extremos y al pasar una corriente eléctrica se emiten electrones que chocan con los átomos del gas noble y se producen radiaciones ultravioletas que al excitar la capa fluorescente producen luz visible. En la figura 3 se puede observar el mecanismo de funcionamiento empleado por estos dispositivos. En cuanto a la vida útil de estos elementos se puede establecer entre 5.000 y 10.000 horas de funcionamiento. Su rendimiento se encuentra entre los 50 a 90 lm/W, lo cual muestra su mayor eficiencia comparado con las incandescentes².

Una vez creadas las lámparas fluorescentes y con la exigencia de reducir el consumo de energía se desarrollaron las lámparas fluorescentes compactas, ver figura 4, con el objetivo de reem-

¹Datos de manuales técnicos

²Datos de manuales técnicos

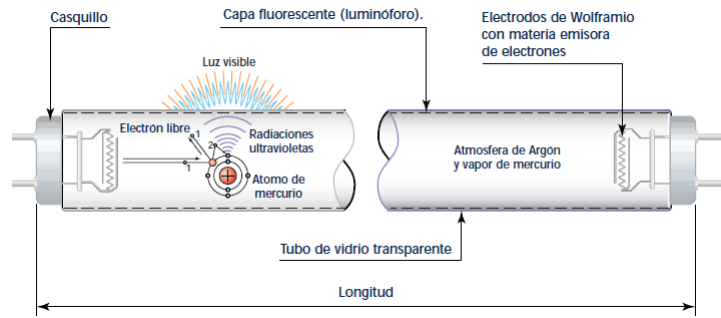


Figura 3: Mecanismo utilizado por lámparas fluorescentes [5].

plazar las luminarias incandescentes. Uno de los principales inconvenientes en el uso de estas luminarias es que al desecharlas se debe optar por lugares específicos ya que contienen residuos tóxicos que pueden poner en riesgo la salud. Su rendimiento actualmente se puede establecer alrededor de 56 a 60 lm/W y su vida útil se estima entre 3.000 a 8.000 horas de empleo³.



Figura 4: Lámparas fluorescentes compactas [27].

Todas estas alternativas nacieron con el fin de optimizar el consumo energético en cada luminaria. Dadas las exigencias, nuevas normativas sobre la eficiencia energética y el desarrollo tecnológico, los LED son la nueva alternativa de iluminación, ver figura 5. En cuanto a su rendimiento, dependiendo del tipo de dispositivo, actualmente se pueden encontrar dispositivos para iluminación interna de 250 lm/W, destronando así a todas las alternativas anteriormente citadas en cuanto a eficiencia energética. Otra ventaja de esta tecnología es su vida útil que es alrededor de 50.000 horas de uso, haciéndola menos contaminante y mucho más duradera.



Figura 5: Lámparas LED [14].

Una vez expuestas las características de todas las luminarias se puede confirmar las ventajas que poseen los LED frente a otros elementos mostrando su comportamiento en cuanto a eficiencia

³Datos de manuales técnicos

(lm/W) y a vida útil de los dispositivos. En la tabla 1 se muestra un resumen de las características de cada luminaria.

Tabla 1: Resumen de características de elementos de iluminación.

Fuente de iluminación	Rendimiento [lm/W]	Vida útil [hs]
Incandescentes	12 - 18	1.200
Fluorescentes	50 - 90	5.000 -10.000
Fluorescentes compactas	56 - 60	3.000 - 8.000
LED	150	50.000

Dado que este trabajo se concentra en la utilización de elementos LED, en la siguiente sección se resumen brevemente la historia de la creación de los LED, sus características y su desarrollo hasta llegar a los dispositivos actuales.

1.1.1. Historia del desarrollo del LED

Los primeros registros de investigación sobre los LED son del año 1907 y fueron realizados por Henry Joseph Round, aunque las primeras publicaciones son del ruso Oleg Lósev. Las publicaciones no tuvieron mayor eco en el mundo eléctrico sino hasta el siglo XXI. En estas primeras publicaciones se estudió cómo los diodos eran capaces de producir una cantidad de luz al ser atravesados por una corriente eléctrica.

A pesar de existir publicaciones previas no es sino hasta el año 1962 cuando estas investigaciones son consideradas como grandes descubrimientos. Nick Holonyak, trabajador de General Electric, es el encargado de desarrollar el primer diodo con emisión en el espectro visible, luz roja. A partir de este descubrimiento y con la ayuda de diversos colaboradores se desarrollan otros tipos de luz como, por ejemplo, amarillo y rojo-naranja. Además, se logra mejorar la luminosidad de los dispositivos y a partir de los años 70 se logran fabricar los primeros LEDs de alto brillo y de alta eficiencia.

Inicialmente, los LEDs, por su complejidad de fabricación, tenían un alto coste lo cual limitaba su aplicación, pero a partir de su producción masiva son utilizados como indicadores ya que tenían la capacidad suficiente para llamar la atención pero no la suficiente como para iluminar una zona específica. Uno de los principales enfoques de investigación, ya en este tiempo, fue mejorar la potencia del LED. Al realizar estos estudios ya se evidenciaba que, para alcanzar este objetivo, se debía resolver el problema del calor que desprende el LED, tema que plantea la principal línea de investigación de este trabajo.

El siguiente paso en el desarrollo de los LEDs se da con la creación del LED azul. Este paso es uno de los principales para poder desarrollar dispositivos para aplicaciones de alta potencia. No solo fue la creación del LED azul sino la creación del primer LED de luz azul de alto brillo. Este descubrimiento introducido por Shuji Nakamura junto a Isamu Akasaki e Hiroshi Amano les otorga el Premio Nobel de física en el 2014. Finalmente, es a partir de 2012, que Osram, empresa alemana, pone en el mercado los primeros dispositivos LED de alta potencia y con esto crea una nueva alternativa de iluminación a un coste accesible y que puede competir perfectamente con las diversas alternativas de iluminación ya existentes.

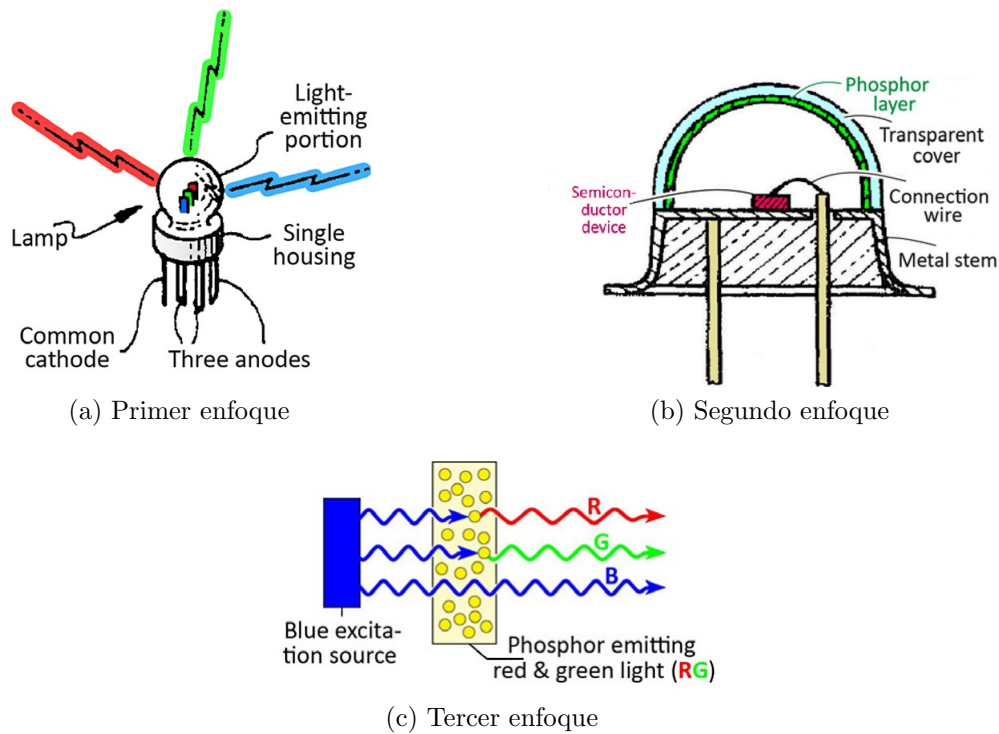


Figura 6: Diferentes enfoques para la generación de luz blanca [4].

1.1.2. Características técnicas de los LED

Una vez descrita la evolución histórica de los dispositivos LED, a continuación se puntualizan las características técnicas que rigen al LED. En la figura 6 se pueden observar los diferentes enfoques que se tienen para la generación de luz blanca a través de diodos emisores de luz. [4]

El **primer enfoque** consiste en formar luz blanca a partir de la luz emitida por tres diferentes LEDs (rojo, verde y azul) [26]. Este tipo de generación es utilizado principalmente en pantallas y garantizan una alta durabilidad y un bajo consumo. El **segundo enfoque** consiste en el uso de una lámina de fósforo que absorbe la luz emitida por un LED ultravioleta y como resultado se obtiene luz blanca [21]. Finalmente, el **tercer enfoque** utiliza un chip LED azul y una lámina de fósforo que se encarga de convertir parte de la luz azul emitida en verde y roja [24]. Al tener la combinación de estas tres tonalidades se obtiene la luz blanca.

Este desarrollo permite que los LED dejen de ser vistos únicamente para aplicaciones de indicadores y similares. Así mismo, mediante este desarrollo, estos dispositivos han logrado alcanzar records de eficiencia hasta el punto de convertirse en la futura fuente de iluminación mundial. Existen diversos estudios donde se resaltan las numerables ventajas de los LED frente a fuentes tradicionales de iluminación. En [7] los autores concluyen que, al implementar elementos de iluminación basados en la tecnología de iluminación de semiconductores (LED) a gran escala, se produce un ahorro de más del 50 %, lo cual se puede traducir en resultados económicos y medioambientales beneficiosos.

A partir de estos estudios, en la figura 7 se muestra una gráfica conjunta de la capacidad de generar lúmenes por los paquetes LED (violeta) y la relación entre coste y los lúmenes generados. En cuanto a la capacidad de generación se puede observar un crecimiento significativo al pasar los años. Para la relación coste-lúmenes se obtiene una relación inversa en la que cuanto mayor es la generación de lúmenes, menor es el coste. Además, para tener una referencia, se ha incluido los valores correspondientes a las lámparas incandescentes, valor que ya han sido am-

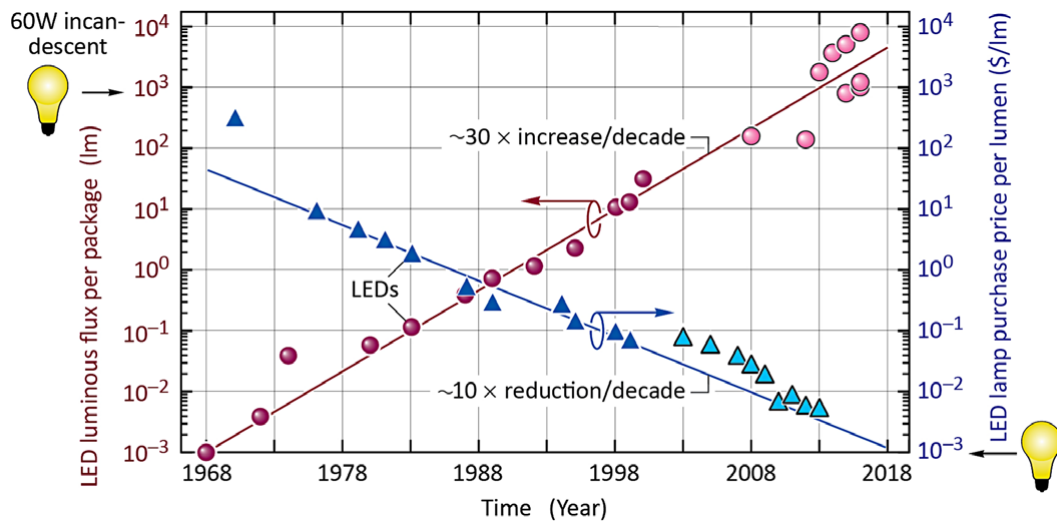


Figura 7: Tendencias de crecimiento de la potencia de LED y decrecimiento relativo de su coste [4].

pliamente mejorado por los componentes LED demostrando así ser una tecnología más eficiente en la actualidad. Hay que tener en cuenta que en la figura 7, para el coste, se ha considerado únicamente el valor del dispositivo y no el valor del consumo de energía de cada elemento lo cual marcaría aún más la significativa diferencia [4].

Los estudios que se han llevado a cabo sobre la evolución del rendimiento de los LED se puede comparar con la Ley de Moore sobre los circuitos dando como resultado la Ley de Haitz [1] y su confirmación en otros estudios [8] y [25]. Haitz asegura que por cada década los lúmenes de los LED incrementan en un factor de 30 mientras que su coste disminuye en un factor de 10. Es decir, que se esperan elementos más potentes y a menor precio relativo. Por lo tanto, se confirma, una vez más, que los LED serán prácticamente la única alternativa de iluminación futura siendo los más eficientes y los más responsables con el medioambiente eliminando el uso de las tecnologías antiguas de iluminación.

Para resumir, la evolución y las características de cada una de las diferentes tecnologías de iluminación se presentan en la figura 8 en la cual se marca en una línea del tiempo, el año de aparición de cada tecnología y la eficiencia lumínica de cada una. Como se puede apreciar claramente, los LED son los elementos más eficientes, aún considerando que, en esta gráfica, únicamente se han incluido los primeros elementos LED de alta potencia.

1.2. Iluminación de alta potencia

Hasta ahora se han detallado elementos de iluminación de baja potencia principalmente utilizados para iluminar áreas interiores, pero las necesidades, y el máximo consumo, también se enfocaban en la iluminación de áreas exteriores. Debido a la necesidad de iluminar grandes áreas externas se crean los elementos de alta potencia. Estas necesidades fueron cubiertas por diferentes adaptaciones de las luminarias existentes, por ejemplo, lámparas de halogenuros metálicos, lámparas de vapor de sodio de alta presión, lámparas de vapor de sodio de baja presión y los LED que van mejorando su eficiencia constantemente.

En la actualidad, los elementos LED se encuentran con la capacidad de sustituir a las luminarias existentes para la alta potencia. En la tabla 2 se resumen las potencias utilizadas por diferentes

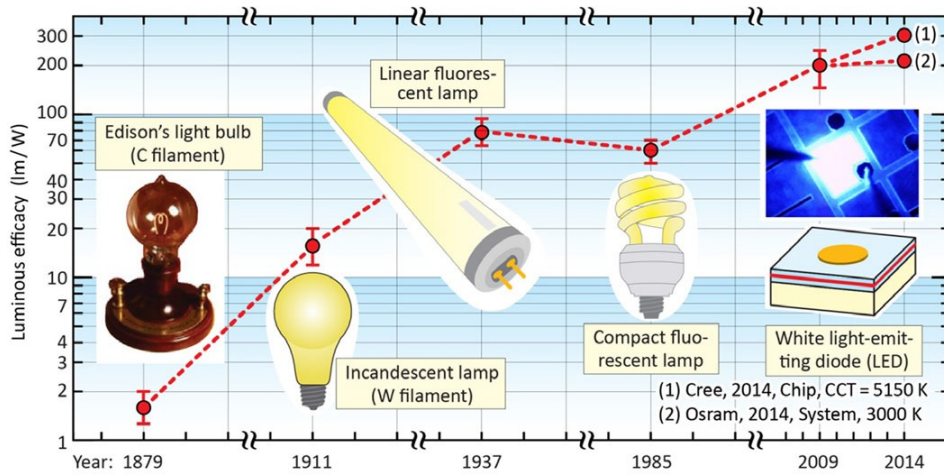


Figura 8: Resumen de la aparición de cada fuente de iluminación y sus respectivas eficiencias [4].

Tabla 2: Comparación del consumo necesario por tipo de iluminación de alta potencia para generar ciertas cantidades de lúmenes.

Lúmenes [lm]	Consumo [W]				
	LED	Halógenas	Bajo Consumo	Tubos Fluorescentes	Vapor de Sodio (sin balastro)
4.800 - 5.400	60	400	120	120	300
6.400 - 7.200	80	450	160	160	380
7.200 - 8.100	90	550	180	180	450
9.600 - 10.080	120	750	240	240	600
12.000 - 13.500	150	900	300	300	750
12.800 - 14.400	160	950	320	320	750

tipo de luminarias para producir cierta cantidad de lúmenes. Los elementos LED son los que menor cantidad de energía demandan para poder alcanzar estos valores, por lo que se puede concluir que los elementos LED ya no solo pueden implementarse en aplicaciones interiores sino que también pueden ser tomados en cuenta para iluminar áreas externas.

Como se ha mencionado anteriormente, los LED tienen una alta eficiencia por su capacidad de generación lumínica. Sin embargo, el 70 % de energía utilizada se disipa como calor durante la operación [11]. Es por eso que es importante controlar la temperatura de funcionamiento en el LED. Garantizar una temperatura de trabajo adecuada permite asegurar la amplia vida útil que caracteriza al LED [16].

1.2.1. Problemática de componentes LED para alta potencia

Al conocer la problemática de la creación de dispositivos LED de alta potencia se abre una rama de estudio vinculada al diseño óptimo de disipadores de calor pasivos que sean capaces de conducir el calor generado por el efecto Joule. Muchos son los factores a tomar en cuenta en el momento de diseñar un disipador óptimo dado que se debe obtener un producto comercialmente competitivo [16].

Los dispositivos LED poseen una temperatura de funcionamiento en la que se recomienda que trabajen para poder garantizar la vida útil de los elementos. En la figura 9 se puede observar los resultados de cómo el incremento de la temperatura de funcionamiento en el LED disminuye su tiempo de vida útil de una manera muy acusada [19].

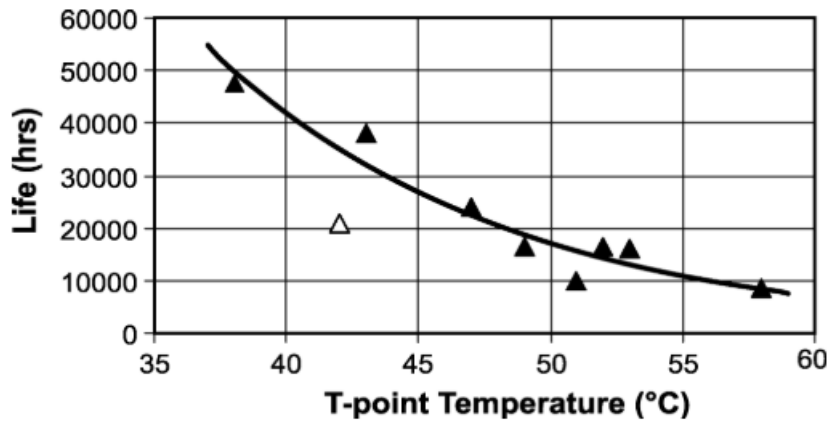


Figura 9: Vida útil del LED en función de la temperatura de trabajo [19].

Adicionalmente, son diferentes factores los que se deben valorar para la fabricación de estos dispositivos. Por ejemplo, dentro de los factores económicos, se puede considerar que la geometría adoptada debe tener un proceso de fabricación sencillo. El tipo de material que se implemente, además de poseer las mejores características térmicas, debe tener un coste reducido. También se deben tener en cuenta factores estéticos. La geometría empleada y la forma final del dispositivo juegan un papel importante ya que los elementos diseñados serán utilizados en lugares para iluminación tanto interna como externa y, por lo tanto, tienen que cuidar la estética del lugar. Además, la facilidad de manejo es otro factor a tener en cuenta, es decir, que sea compatible con las instalaciones actuales de los elementos de iluminación.

1.3. Interés

La importancia de una buena iluminación puede girar en torno a diferentes factores. Como otras disciplinas, la iluminación se controla mediante el cumplimiento de normativa. Más allá de obtener sistemas que proporcionen una eficiente iluminación, se pretende obtener sistemas que aporten al confort de los habitantes. Se ha demostrado que la iluminación puede influir directamente en asuntos importantes para la sociedad. Por ejemplo, diferentes estudios han demostrado que el alumbrado puede tener un impacto favorable en la disminución de la delincuencia [6]. También se ha vinculado con el rendimiento cognitivo [13], el estado de ánimo [18] y la productividad [12].

A continuación, se presentan algunos de los puntos de interés que se desean tratar en este trabajo:

- Uno de los principales intereses es el medioambiental. Los diodos emisores de luz han sido calificadas como las fuentes de iluminación más eficientes por lo cual directamente contribuyen a la disminución del consumo energético. Así mismo, que los dispositivos LED no posean elementos que sean perjudiciales para la salud tributa al objetivo de generar alternativas lo más amigables con el ambiente. Es por esto que el desarrollo de luminarias basadas en la tecnología LED adquiere mucha importancia.
- La reducción del consumo también puede traducirse a beneficios económicos para la sociedad. Los recursos que se ahorren por la disminución del consumo podrán dirigirse a satisfacer nuevas necesidades.

- La introducción de este tipo de iluminación es el primer paso a la modernización de las ciudades. Uno de los principales intereses a nivel mundial es la creación de ciudades inteligentes (smart cities), es decir, ciudades que son sostenibles en aspectos operativos, sociales y medioambientales. Este estudio se vincula directamente con dos de estos aspectos, operativos y medioambientales. Lo relativo al medioambiente ya se ha detallado en el punto anterior. En cuanto a lo operativo, las luminarias LED pueden transformarse en puntos de medición de las variables necesarias de estudio por ejemplo: contaminación, radiación, etc (sin más que introducir los sensores adecuados en las luminarias -o junto a ellas-).
- Las luminarias LED, al ser compatibles con alimentación de corriente directa, pueden vincularse con elementos de control a distancia. Por lo tanto, otro punto de interés es la posibilidad de establecer el control remoto de los sistemas de iluminación haciéndolos así más adaptables a las necesidades puntuales de un sector. Con esta característica se puede realizar iluminación inteligente mediante sistemas de control, por ejemplo, sistemas que regulen la intensidad en función del flujo de personas.
- El desarrollo de estos dispositivos puede vincular a otras disciplinas como la óptica, diseño, producción, entre otras. La constante mejora en estos dispositivos serán los aportes de cada disciplina. Por tal motivo, estas investigaciones se vuelven de carácter multidisciplinar abriendo la posibilidad de contar constantemente con mejores elementos.

1.4. Objetivos

En general, este trabajo tiene por objetivo crear luminarias con tecnología LED y que sean adaptables a todos los sistemas ya existentes de iluminación. Las luminarias deben garantizar la máxima vida útil de los dispositivos LED, así como la correcta iluminación cumpliendo parámetros de calidad. A continuación se presentan los principales objetivos de este trabajo:

- El principal objetivo de este trabajo es diseñar disipadores de calor pasivos para elementos LED de alta potencia. Se desea obtener un disipador que utilice la menor cantidad de material posible para su elaboración pero que a su vez sea capaz de garantizar que el LED opere por debajo de la temperatura exigida para su correcto funcionamiento.
- Encontrar la geometría ideal que optimice el material empleado, considerando los requisitos termodinámicos de transferencia de calor. La geometría final debe ser fácil de adaptar a sistemas existentes de luminarias.
- Valorar los diversos factores de elaboración con el fin de encontrar mejoras en el diseño y en su funcionamiento. Esto tiene por objetivo lograr enriquecer el diseño con el fin de proporcionar una alternativa comercial que sea competitiva y a su vez cumpla con todos los estándares de calidad.
- Siguiendo el objetivo anterior, optimizar el diseño general del dispositivo teniendo en cuenta todos los puntos anteriormente estudiados, lo que proporcionará un prototipo mejorado con un valor diferencial en el mercado.
- Resaltar la inclusión de esta tecnología en el alumbrado y mostrar las relaciones que tiene con la creación de ciudades inteligentes.
- Destacar los importantes ahorros energéticos que se obtienen al implementar esta tecnología. Además, mostrar los beneficios para el medioambiente al elegir una fuente de iluminación mucho más eficiente y con mayor durabilidad.

Capítulo 2

Modelado Matemático para el estudio de la transferencia de calor

En este capítulo se presenta toda la información tenida en cuenta para el diseño y modelado de los disipadores de calor. El capítulo se divide en dos partes. La primera parte del estudio consiste en definir un modelo matemático que simule la transferencia de calor en geometrías complejas. Posteriormente, se introducen las geometrías diseñadas detallando los factores que se han considerado en el diseño. Se estudiarán diferentes tipos de geometrías para obtener la mejor respuesta. Adicionalmente, se tomarán en cuenta diferentes características y se propondrá un dispositivo óptimo.

Una vez definidas las geometrías se simulará numéricamente el modelo matemático propuesto usando el Método de los Elementos Finitos. Este método incluye un proceso de discretización del modelo [30]. Gracias al desarrollo computacional, los estudios de diferentes fenómenos físicos (regidos por complejos sistemas de ecuaciones diferenciales parciales) se pueden estudiar al discretizarlos, es decir, dividir una geometría continua compleja en *elementos finitos* para formar un mallado, es decir, al dividir una geometría continua compleja en elementos finitos que formen un mallado. En consecuencia, el problema se transforma en la resolución de un problema algebraico extenso que, gracias a las capacidades computacionales actuales, es posible resolver.

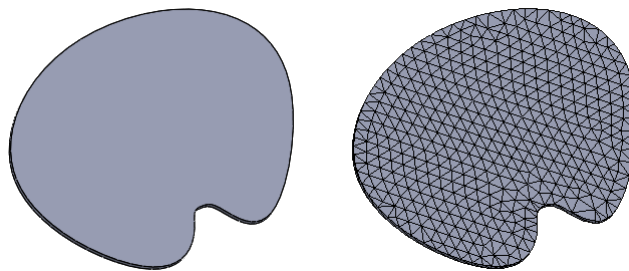


Figura 10: Ejemplo de aplicación de elementos finitos a una geometría.

En la figura 10 se visualiza el resultado de aplicar el Método de los Elementos Finitos a una geometría continua. Para ello se divide la geometría original en una serie de regiones que son los elementos finitos (como se puede ver en la gráfica). Una vez discretizada la geometría se obtienen los nodos que son las intersecciones entre los elementos finitos formando así el mallado. Sobre este conjunto de nodos, mallado, se resolverán las ecuaciones que rigen el fenómeno estudiado.

2.1. Modelado Matemático

La transferencia de calor puede ser definida como el estudio que considera el uso, conversión e intercambio de calor o energía térmica [22]. Este fenómeno se presenta cuando existe una diferencia de temperatura entre dos elementos, es decir, se tiene la presencia de un gradiente térmico. Además, el intercambio de calor siempre se dará del elemento con mayor temperatura (energía) hacia el de menor ya que el sistema siempre buscará el equilibrio térmico descrito por la segunda ley de la termodinámica.

La transferencia de calor se puede dar mediante diferentes *mecanismos*, llamados también *modos*. Los modos básicos de transferencia de calor son conducción, radiación y convección. Estos son los mecanismos que van a regir el comportamiento del fenómeno y, por tanto, definir las ecuaciones que rigen el modelo matemático.

Conducción

Este mecanismo es la transferencia de calor de una parte de un cuerpo a mayor temperatura hacia una parte del cuerpo a menor temperatura. Esta interacción también puede existir entre dos cuerpos en contacto, es decir, la energía del cuerpo de mayor temperatura se dirigirá al cuerpo con temperatura menor sin existir intercambio de materia [22].

Un parámetro importante dentro de este modo de transferencia es la conductividad térmica. Por lo tanto, el primer requisito que se debe cumplir es encontrar un material que tenga una conductividad elevada para que pueda absorber de mejor forma el calor desprendido por el chip LED. Al mismo tiempo, el material elegido debe ser económico.

Radiación

La radiación térmica se genera por la radiación electromagnética emitida por un cuerpo debido a su temperatura y a expensas de su energía interna. Un ejemplo de esto último lo constituye los rayos ultravioletas a los que estamos sometidos [22]. Ya que el disipador no alcanzará temperaturas muy elevadas, si bien se considera para la modelización, el aporte de este tipo de transferencia de calor no es significativo.

Convección

Finalmente, la convección es el último modo de transferencia de calor básico que se considera. Se define como la transferencia de calor desde una superficie límite a un fluido en movimiento, es decir, la encargada de transportar el calor a través del movimiento del fluido que está en contacto con la superficie de un cuerpo. Existen dos clases: natural o forzada. La **convección natural** se da cuando el movimiento del fluido es generado por el intercambio de temperatura, por ejemplo, por la diferencia de densidad entre gases. La **convección forzada** se presenta cuando el movimiento del fluido es generado por un elemento externo, por ejemplo, por un ventilador.

Este principio es muy importante para el correcto funcionamiento del disipador ya que está relacionado con el flujo de aire a través del dispositivo. El aire en contacto con el área del disipador se calienta y es desplazado por el aire con menor temperatura (mayor densidad). Este ciclo se repita y colabora al enfriamiento del material del disipador. En consecuencia, los

disipadores propuestos presentarán convección natural.

Una vez expuestas las diferentes formas de transferencia de calor, a continuación se describirá matemáticamente el modelo que rige al experimento. La relación entre la ecuación de onda lineal

$$-\partial^2\psi/\partial t^2 + \nabla^2\psi = 0, \quad (1)$$

la ecuación de onda de Schrödinger

$$i\partial\psi/\partial t + \nabla^2\psi = 0 \quad (2)$$

y la ecuación de calor

$$-\partial\psi/\partial t + \nabla^2\psi = 0 \quad (3)$$

son conocidas. La ecuación de onda de Schrödinger es el límite no relativista de la ecuación de onda lineal y, además, cambiando la coordenada de tiempos al eje imaginario se obtiene la ecuación de calor. Este trabajo se concentra en la ecuación disipativa de las tres ecuaciones anteriores llamada la ecuación de calor.

En el estudio, el disipador de calor se modela simétrico axialmente, la gravedad \mathbf{g} (dimensionalmente una aceleración) actúa verticalmente a lo largo del eje de simetría (tomado como Oz). El campo de velocidad \mathbf{v} del aire en el que rodea el disipador de calor satisface la ecuación de Navier-Stokes

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \rho (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \rho \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g}, \quad (4)$$

donde

$$\begin{aligned} \rho &\Rightarrow \text{densidad del aire,} \\ \nu &\Rightarrow \text{viscosidad cinemática,} \\ p &\Rightarrow \text{presión.} \end{aligned}$$

Además, la velocidad y la densidad están relacionadas entre sí por la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (5)$$

El flujo de calor en un gradiente de temperatura se rige por la ecuación

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla T = \kappa \nabla^2 T + \frac{J}{\rho C_\rho}, \quad (6)$$

donde

$$\begin{aligned} C_\rho &\Rightarrow \text{capacidad térmica por unidad de volumen de aire,} \\ \kappa &\Rightarrow \text{difusividad térmica,} \\ J &\Rightarrow \text{calor interno por unidad de volumen.} \end{aligned}$$

Las ecuaciones (5), (6) y (4) se aplican para el aire que rodea el disipador. Se asume que el disipador de calor en sí mismo es un cuerpo negro a una temperatura de T , irradiando energía de acuerdo con la ley Stefan - Boltzmann¹

¹ \dot{q} , energía por unidad de tiempo por unidad de área

$$\dot{q} = \varepsilon \sigma T^4, \quad (7)$$

donde

$$\begin{aligned} \dot{q} &\Rightarrow \text{flujo de salida de energía del disipador de calor,} \\ \varepsilon &\Rightarrow \text{emisividad,} \\ \sigma &\Rightarrow \text{constante de Stefan - Boltzmann.} \end{aligned}$$

Se resuelve numéricamente el sistema acoplado de ecuaciones (4), (5), (6) y (7) sujeto a las condiciones de contorno de Dirichlet. Sea T_0 sea la temperatura ambiente (fija) del aire que rodea el LED, lo suficientemente lejos de la fuente de calor. Se impone la condición de Dirichlet $T = T_0$ en el límite de la ventana de simulación numérica.

Además, la condición límite de Dirichlet se ha complementado con:

1. La transferencia de calor por conducción sólida a sólida entre el LED y el disipador, con una resistencia térmica distribuida de $0.001 \text{ m}^2 \text{ K/W}$.
2. La transferencia de calor por convección de sólido a aire. El coeficiente de transferencia de calor h se ha tomado como $12 \text{ W/m}^2 \text{ K}$. Dado que los valores de h encontrados en la literatura varían ampliamente, esta última entrada se ajustó hasta que los resultados de la simulación coincidieron con los del experimento. Una vez que se encontró el mejor ajuste, se tomó el valor correspondiente de h para el resto de las simulaciones numéricas.

Si el sistema acoplado de ecuaciones (4), (5), (6) y (7) define un problema bien planteado, es una problema muy delicado. La cuestión de que la ecuación de Navier - Stokes esté bien definida por sí sola es un problema no resuelto, al menos globalmente (aunque se conocen resultados parciales sobre problemas locales). Por supuesto, acoplar Navier - Stokes a las ecuaciones restantes no simplifica las cosas. Sin embargo, podemos hacer la siguiente observación. Un campo de velocidad $\mathbf{v} = \mathbf{v}_0$ que es constante, tanto en espacio como en tiempo, reduce la ecuación de Navier - Stokes (4) a la ley de Newton

$$\nabla p = \rho \mathbf{g} \quad (8)$$

En este límite, nuestro sistema acoplado de ecuaciones (ley de Newton + ecuación de continuidad + ecuación de calor) es conocido por definir un problema bien planteado. Esto hace plausible la siguiente declaración: *perturbativamente alrededor de un campo de velocidad constante \mathbf{v}_0 , el sistema de ecuaciones acoplado define un problema bien planteado bajo condiciones de límite de Dirichlet.*

La ecuación de Navier - Stokes (4) es cuadrática en \mathbf{v} , por lo que el fenómeno descrito por el sistema de ecuaciones anterior es genuinamente no lineal. Sin embargo, las velocidades del fluido involucradas son pequeñas y podemos linealizar la ecuación (4) simplemente despreciando el término $(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}$. Esto tiene la ventaja adicional de que la resolución numérica de las ecuaciones anteriores se simplifica considerablemente. Un análisis detallado del problema completamente no lineal, sin eliminar el término $(\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v}$, se aplaza a una publicación posterior.

2.2. Diseños propuestos para disipadores de calor pasivos

Se ha detallado como uno de los principales objetivos del trabajo el estudio de la problemática térmica que poseen los LED cuando se adaptan a la alta potencia. Siguiendo diferentes

recomendaciones y teniendo en cuenta los resultados obtenidos en diferentes estudios previos [10, 11, 15, 29], las geometrías que se proponen se detallan a continuación.

El primer elemento a considerar en las simulaciones es el **chip LED**, que se puede apreciar en la figura 11. Este elemento será el que actúe como fuente de calor con una potencia de 50 W. En este elemento se llevará a cabo el seguimiento de la temperatura para poder mantenerla bajo el nivel recomendado por el fabricante que se estima alrededor de 70°C . El diseño consiste en un cuadrado de 25 mm de lado y 1 mm de espesor.

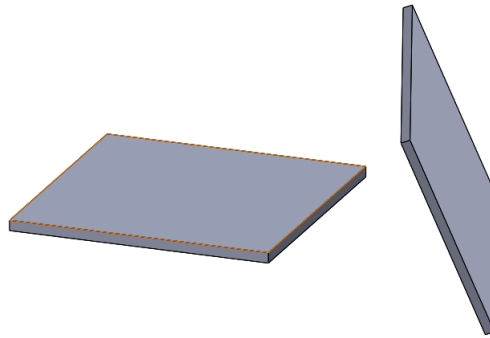


Figura 11: Elemento LED, fuente de calor 50 W.

Ahora, entrando en el diseño de los disipadores se plantean un total de cuatro geometrías. El primer disipador, (**Disipador I**), se puede apreciar en la figura 12, y se consideró como una de las opciones para solucionar el problema térmico dentro de los chip LED. La estructura de este disipador está formada por una base cuadrada de 100 mm de lado con un espesor de 20 mm. Adicionalmente, se implementan un total de 25 cilindros en la parte posterior. Estos cilindros tienen un radio de 5 mm y una extrusión de 100 mm.

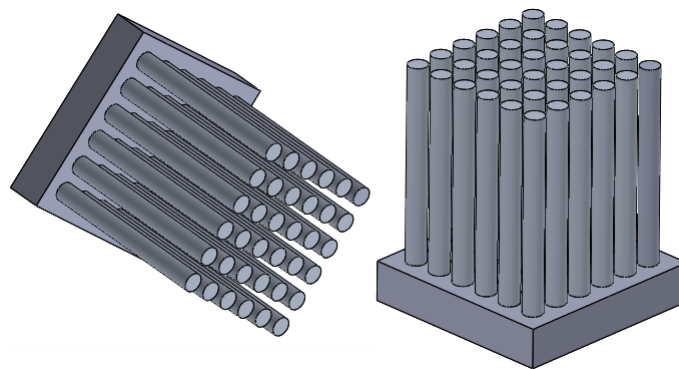


Figura 12: Geometría disipador I.

Siguiendo con el desarrollo de disipadores, el **disipador II** tiene como base un cilindro central y aletas equidistantes alrededor de su circunferencia, ver figura 13, siguiendo las recomendaciones de [11] ya que se obtienen buenos resultados para este tipo de geometrías. El cilindro central tiene una circunferencia de radio de 20 mm con un estiramiento de 100 mm. Las aletas están formadas por rectángulo de 2 mm y 26 mm de largo, con una extrusión igual de 100 mm. El total de aletas empleadas en el disipador es de 42.

El **disipador III**, inspirado en estudios previos [11], está formado por un cilindro central de 20 mm de radio, pero se acopla una geometría diferente para las aletas. Se agregan un total de

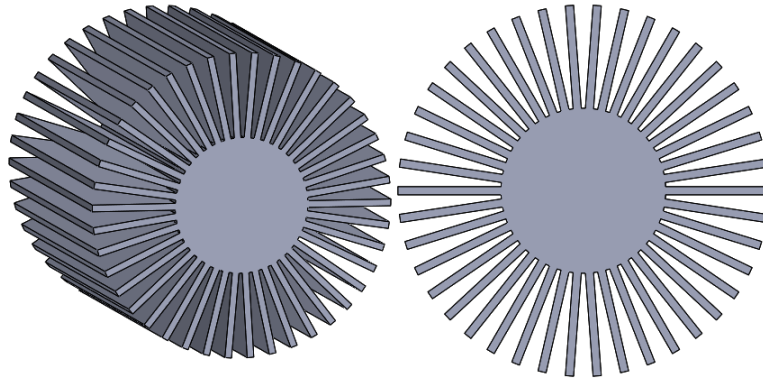


Figura 13: Geometría dissipador II.

42 aletas de tipo “pincho” formadas con una base de 10 mm y una forma de “U” de 13 mm de longitud. El dissipador puede observarse en la figura 14. La extrusión de todos los componentes es de 100 mm al igual que los dos dissipadores anteriores.

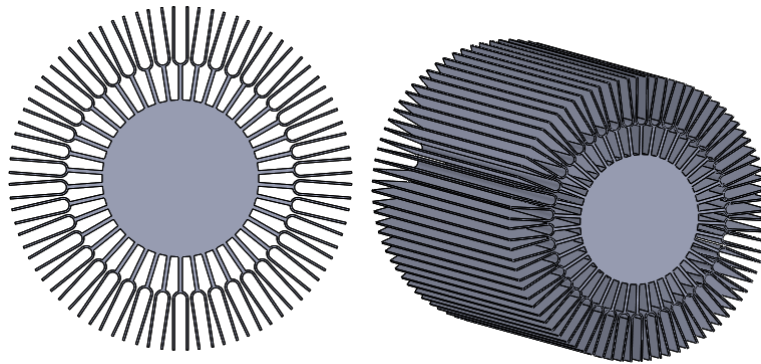


Figura 14: Geometría dissipador III.

Todos estos dispositivos han sido creados en base a los estudios previos mencionados y a modelos existentes. La geometría del **dissipador “Innebo”** se basa en la investigación [3], se muestra en la figura 15. La geometría consta de un cilindro central sólido de 20 mm de radio con un total de 60 aletas con el diseño mostrado y una extrusión de 100 m como longitud del dispositivo.

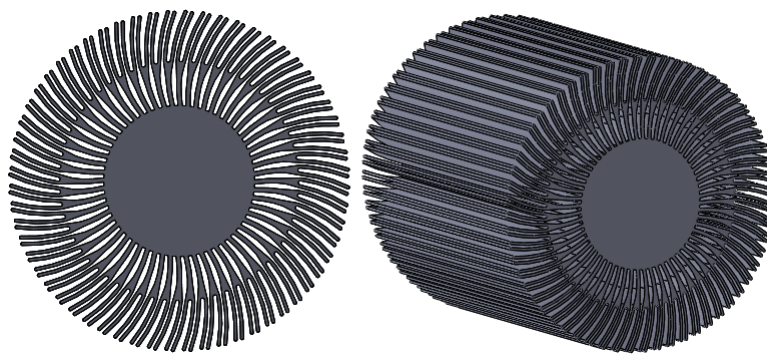


Figura 15: Geometría dissipador “Innebo”.

Finalmente, la luminaria con mayor desarrollo de diseño y que se ha creado con el fin de tener una aplicación directamente en alumbrado público es la **luminaria “Illumnia”**, ver figura

16. Dicha luminaria tiene unas dimensiones de 48 cm de largo y un ancho de 17.44 cm. Tiene por objetivo usar la propia carcasa como disipador de calor y, a la vez, brindar las protecciones necesarias al chip LED. Así mismo, esta solución es muy fácil de instalar reemplazando las luminarias de alumbrado público existentes.

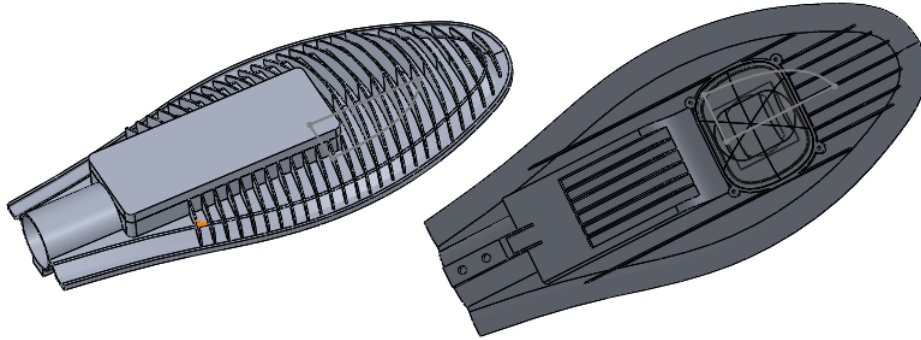


Figura 16: Geometría disipador “*Illumnia*”.

Capítulo 3

Simulación numérica del modelo matemático aplicado a diversas geometrías

En el capítulo anterior se definió tanto el modelo matemático que rige al estudio como los diseños de disipador que se van a emplear. Se han definido diferentes geometrías con el fin de resaltar los diferentes efectos se tienen en el momento de elegir una u otra. Para realizar la simulación del fenómeno de transferencia de calor sobre las diferentes geometrías, se ha optado por usar el Método de los Elementos Finitos. Específicamente, para realizar las simulaciones se usará el software Solidworks.

Solidworks es un software de diseño asistido por ordenador que es utilizado para la creación de diseños tanto 2D como 3D. En este capítulo se muestran todos los resultados correspondientes a cada geometría planteada. Además, un breve análisis de los resultados obtenidos.

3.1. Definiciones previas

Para comenzar las simulaciones, además de las geometrías definidas, se deben definir ciertos parámetros globales. Uno de los más importantes es el material que se va a emplear en los disipadores. En este caso el material que se va a utilizar es una aleación de aluminio, específicamente aluminio 1060 que posee las características mostradas en la tabla 3 ¹. Este material tiene excelentes cualidades térmicas que facilitan la evacuación de calor y además un coste no elevado, lo que es muy adecuado para cumplir con el objetivo de producir elementos competitivos para el mercado.

Para la utilización de las herramientas de simulación de transferencia de calor, es necesario definir los parámetros correspondientes a cada uno de los modos de transferencia de calor. Una vez seleccionado el estudio térmico y especificado el material que se va a emplear, se procede a introducir las cargas térmicas del sistema.

La primera carga térmica que se define es la potencia calorífica del sistema. Como se explicó anteriormente, el chip LED es el que cumplirá el papel de fuente de calor con una potencia de 50 W distribuida en toda la cápsula. Posteriormente, se define el componente de convección, uno de los más importantes, donde se solicita especificar todas las áreas que tienen contacto con el fluido. Se selecciona toda el área exterior de la geometría y el coeficiente de convección

¹Propiedades de material tomadas de Solidworks.

Tabla 3: Propiedades del material Aluminio 1060.

Propiedad	Valor	Unidades
Módulo elástico	6.9×10^{10}	N/m^2
Coefficiente de Poisson	0.33	N/D
Módulo cortante	2.7×10^{10}	N/m^2
Densidad de la masa	2700	kg/m^3
Límite de tracción	68935600	N/m^2
Límite elástico	27574200	N/m^2
Coefficiente de expansión térmica	2.4×10^{-5}	/K
Conductividad térmica	200	$W/(mK)$
Calor específico	900	$J/(kgK)$

utilizado es de $5.25 W/(m^2K)$.

En la literatura concerniente a la transferencia de calor no se encuentra con detalle una forma precisa de estimar el valor del coeficiente de convección. Existen diferentes sugerencias pero no se define a ciencia cierta un valor específico. Además, en el momento de establecer la convección es necesario conocer la temperatura ambiente y, en este trabajo, se ha considerado un valor de $303.15 \text{ }^\circ\text{K}$ en todas las simulaciones. Finalmente, se especifica el parámetro correspondiente a la conducción que es la resistencia térmica que existe entre el contacto de una cara del LED con la base del disipador. El valor de la conductividad térmica distribuida es de $240 W/(mK)$.

El último aspecto que se define previamente a la simulación es el *mallado*. Para esto el programa Solidworks cuenta con una herramienta que crea un mallado por defecto. Esta herramienta también brinda la posibilidad de definir las formas de los elementos finitos y especificar sus dimensiones, es decir, si se desea un mallado grueso o fino; en este caso, la diferencia está en el tamaño de los elementos finitos, lo que se ve reflejado en el número de nodos del mallado. Cuanto más pequeños sean los elementos finitos del mallado, se obtendrá una mayor cantidad de nodos, es decir, más puntos donde el programa debe resolver el sistema de ecuaciones que rige el fenómeno físico y, por consiguiente, repercutirá en el tiempo de cómputo. Obviamente, cuanto más fino sea el mallado, más detalle se puede lograr en la descripción del sistema.

Otra de las opciones que presenta el programa es la utilización de un mallado estándar o de un mallado basado en curvatura. Debido a las complejas geometrías de los diferentes disipadores, se ha optado por elegir un mallado basado en curvatura. Con esto, quedan definidos todos los parámetros requeridos para las simulaciones y, en lo que sigue, se procederá a presentar los resultados.

3.2. Resultado de las simulaciones

En esta sección se presentan los resultados de las simulaciones de todas las geometrías planteadas. Las simulaciones fueron realizadas con el programa Solidworks que trabaja con elementos finitos. A partir de cada simulación, se comentarán las novedades principales que presentan los resultados finales. En la figura 17 se muestra la solución final que obtiene el programa para el disipador I.

Gráficamente se puede observar un comportamiento esperado. La región con la mayor temperatura dentro del arreglo es el chip LED y es precisamente en este punto donde se analiza

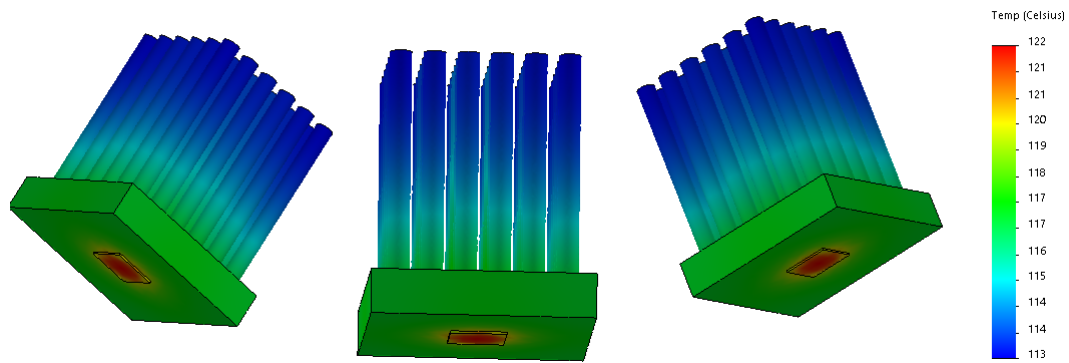


Figura 17: Simulación Disipador I.

el resultado. En este caso la temperatura máxima es de 122°C mientras que la temperatura más baja es de 113°C . Como es evidente, la disposición geométrica de este disipador de calor no cumple con el control de la temperatura del chip LED. Para una temperatura recomendada que no supere los 70°C , este dispositivo no garantiza el correcto funcionamiento del LED. Las principales desventajas de este diseño son la falta de contacto con el aire y que la geometría no facilita la circulación del aire caliente.

Si bien este diseño ha sido seleccionado en base a diseños existentes en el mercado, no es una geometría que se podría adaptar para el tema que se maneja en este trabajo, es decir, la iluminación interior o exterior. Este tipo de disipadores son empleados en dispositivos electrónicos que no presentan una importante generación de calor. Sin embargo, se ha deseado mostrar cómo este tipo de geometrías se comportan en sistemas de iluminación LED.

Continuando con el análisis, en la figura 18 se muestra la simulación correspondiente al dispositivo II utilizando Solidworks. En este dispositivo se considera un disipador con un cilindro central y con aletas extruidas buscando así un mayor contacto superficial con el fluido que circula. Además, este tipo de geometrías permiten un mejor tránsito del aire caliente y, además, dependiendo de la forma de las aletas, se facilita la fabricación en serie de estos dispositivos.

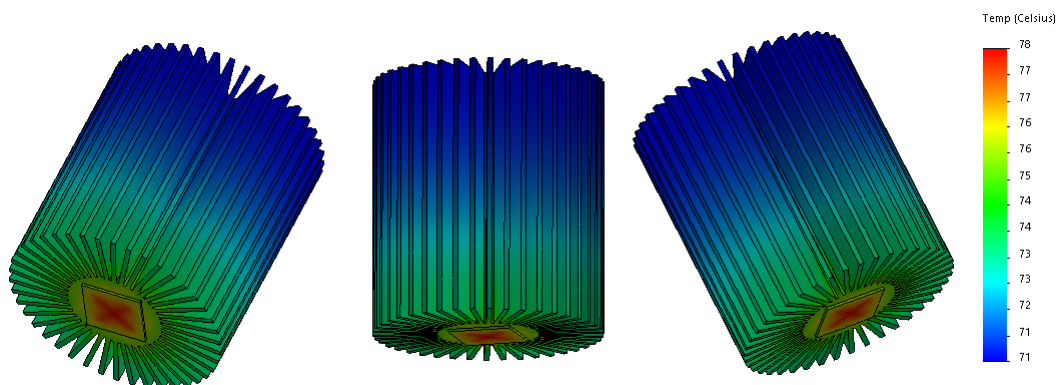


Figura 18: Simulación Disipador II.

La temperatura crítica es de 78°C y es localizada en la cápsula LED, mientras que la menor temperatura del arreglo se encuentra, al igual que en la simulación anterior, en la cara opuesta del disipador y alcanza los 71°C . Es notable la diferencia del resultado obtenido para este tipo de disipador. Al poseer mayor área de contacto, se favorece el enfriamiento del material y es por ello que se alcanzan menores temperaturas en el arreglo. La temperatura crítica excede a

la recomendada por el fabricante, por lo que es importante mejorar el presente diseño y buscar una mayor reducción de la temperatura en la zona del chip LED.

Ahora, en cuanto al disipador III sus resultados se encuentran en la figura 19. Esta geometría insiste en la idea de tener un cilindro central sólido y junto a unas aletas brindar la mejor estabilidad a la temperatura de funcionamiento de la cápsula LED. En este diseño se ha modificado la forma de las aletas presentando una bifurcación en el extremo. Esto se ha realizado con el fin de aumentar el área de contacto del disipador con el refrigerante, en este caso el aire. Además, mediante esta geometría se proporciona una mejor circulación del fluido.

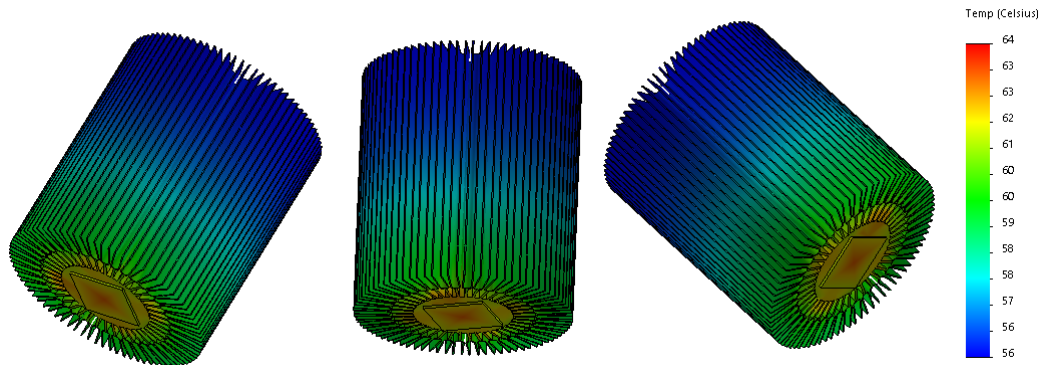


Figura 19: Simulación Disipador III.

Los resultados del disipador III muestran gran similitud con los resultados anteriores. La temperatura de funcionamiento del LED es la mayor temperatura del arreglo alcanzando 64°C . Esta modificación de la geometría ha permitido reducir en 14°C la temperatura crítica de funcionamiento del dispositivo. Para el resto del arreglo, la menor temperatura que se alcanza es 56°C , que al igual que la temperatura crítica, es menor que la de los dispositivos anteriores. Este cambio en el diseño ha motivado a buscar una geometría que optimizando el material empleado dé como resultado un dispositivo funcional y que, como principal objetivo, garantice el correcto funcionamiento del LED. Después de varios análisis y pruebas, la geometría del disipador “Innebo” se presenta como una muy buena alternativa.

Para esta geometría se mantiene la idea principal de un cilindro sólido central a partir del cual las aletas extruidas serán las encargadas de circular el aire a través del dispositivo para su correcto enfriamiento. Además, se ha considerado el mayor número de aletas posible con el fin de maximizar el área de contacto. En la figura 20 se muestran los resultados correspondientes al disipador “Innebo” [3].

Al igual que en los dispositivos anteriores, las principales características de la simulación se repiten. La temperatura máxima de la simulación se encuentra en el chip LED debido a que éste actúa como generador de calor. La temperatura, a medida que se aleja del LED, disminuye en todo el arreglo. La temperatura máxima registrada en la simulación es de 56°C , mientras que la menor es de 48°C . Ambas temperaturas son las mínimas de todos los arreglos estudiados. La geometría propuesta en este dispositivo garantiza el correcto funcionamiento del LED ya que proporciona unas temperaturas mucho menores que la temperatura de funcionamiento recomendada por el fabricante.

Finalmente, la última geometría que se va a estudiar es la diseñada para aplicaciones de alumbrado público exterior. Como se ha mencionado anteriormente, el objetivo de este diseño es

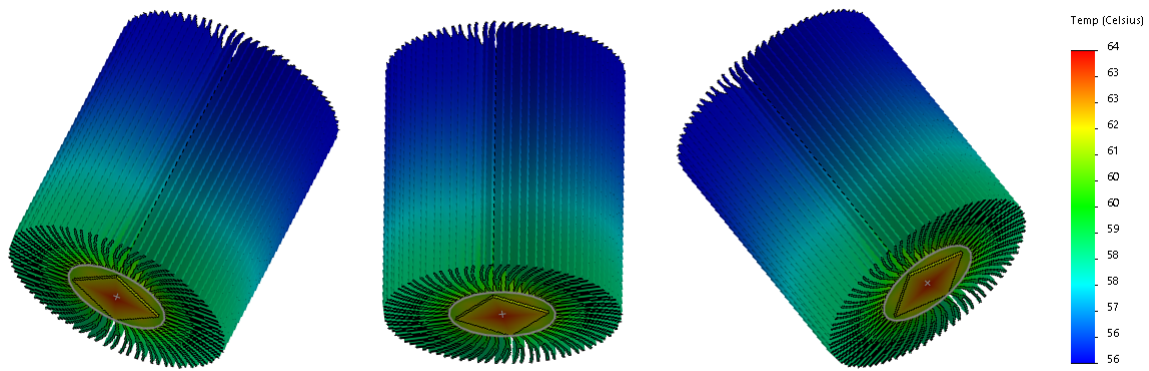


Figura 20: Simulación Disipador Innebo.

aprovechar la carcasa de la luminaria para que sirva como disipador de calor. Además, dicho diseño tiene las características necesarias para que la luminaria pueda reemplazar a cualquiera del mercado existente. En la figura 21 se muestra la solución de la simulación numérica.

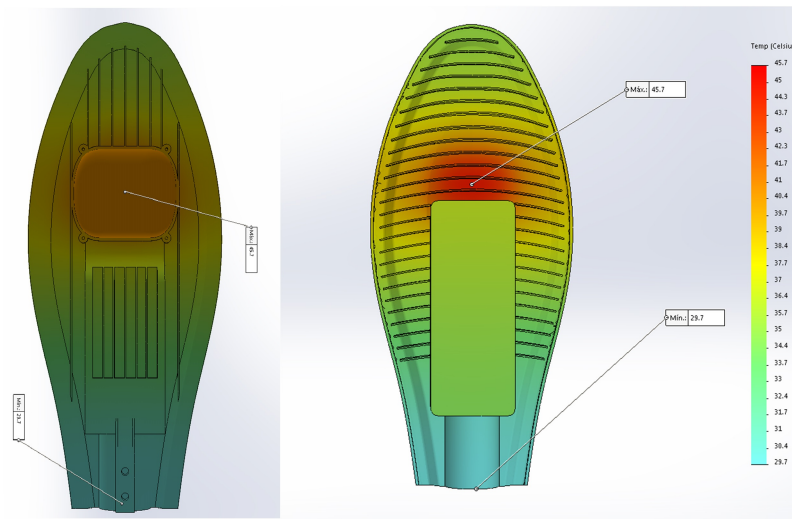


Figura 21: Simulación disipador “Illumnia”.

Los resultados muestran que la temperatura máxima alcanzada es de 45.7°C. Como en las simulaciones anteriores, la región de mayor temperatura se registra en zonas aledañas al chip LED. También se puede observar la disminución en zonas más alejadas de la fuente. Es importante resaltar que existe mucho material que no alcanza una temperatura mayor que la del ambiente. Por lo tanto, esto sería una primera pauta para buscar una optimización del modelo cuestionando si este material que no aporta a la disipación de calor debe, o no, formar parte de un arreglo final.

El disipador “Innebo” garantiza un importante margen en relación a la temperatura recomendada por el fabricante. Esto puede ser una característica diferenciadora del disipador versus otros existentes. Además, su geometría puede ser adaptada a diferentes fuentes de iluminación (diferentes potencias) únicamente especificando la longitud del disipador y adaptando otros factores del diseño.

En esta sección se han presentado los resultados de las simulaciones de todas las geometrías planteadas en la sección anterior. Se ha visto como cada geometría, si bien las características generales son similares, obtiene resultados particulares. Ha sido común la ubicación tanto de

la temperatura más alta como la menor y esto está vinculado con la posición de la fuente de calor.

Los disipadores I y II no han cumplido el objetivo de mantener al chip LED por debajo de la temperatura recomendada por el fabricante. Por otra parte, la incorporación de bifurcaciones y la búsqueda de una mayor área de contacto han hecho que el disipador II e “*Innebo*” verifiquen el principal objetivo del estudio.

Capítulo 4

Comprobación experimental de los resultados obtenidos mediante simulación numérica

En este capítulo se realizará la comparación de los resultados teóricos mostrados anteriormente con valores experimentales de estas geometrías. El principal objetivo de esta comparación es concluir si los resultados teóricos se aproximan al comportamiento real de los dispositivos. Además, en caso de percibir diferencias notables, indagar la razón que produce estos errores y plantear correcciones que mejoren el comportamiento de los simulaciones.

Al encontrar una relación significativa entre los resultados teóricos y experimentales se podrá *perfeccionar* el diseño de los disipadores sin tener que recurrir a nuevas elaboraciones de prototipos, es decir, reduce en gran proporción el coste de diseño y elaboración de un dispositivo óptimo.

Disipador “*Innebo*”

Para la siguiente comparación se ha desarrollado un prototipo con la geometría final del disipador “*Innebo*”. En la figura 22 se puede apreciar el resultado final del prototipo. El experimento consiste en colocar en tres puntos distintos termopares y analizar la evolución de la temperatura en cada punto hasta que el sistema se estabilice. Una vez se estabilicen los valores se podrán comparar con los resultados obtenidos en la simulación.

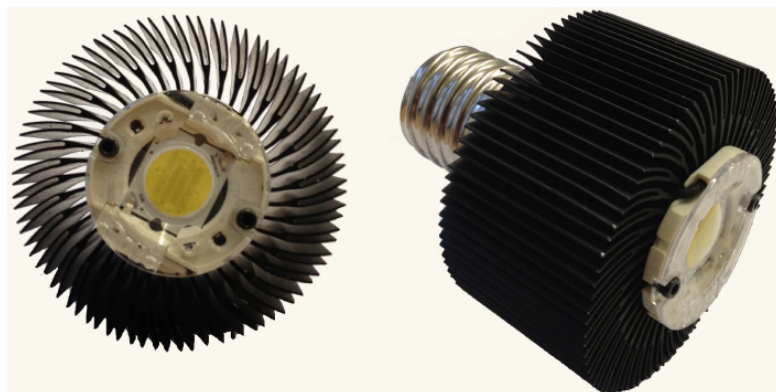


Figura 22: Vista frontal y lateral del prototipo de luminaria LED.

En la figura 23 se muestra la ubicación en las cuales serán posicionadas las termopares. El punto A es punto de mayor atención ya que es aquel en el que se registra la temperatura en el chip LED, temperatura crítica que se desea controlar para que no supere la sugerida por el fabricante. El punto B está ubicado en la cara opuesta siendo el punto más alejado de la fuente de calor. Finalmente, el punto C se ubica próximo al dispositivo para conocer cómo evoluciona la temperatura ambiente alrededor del dispositivo.

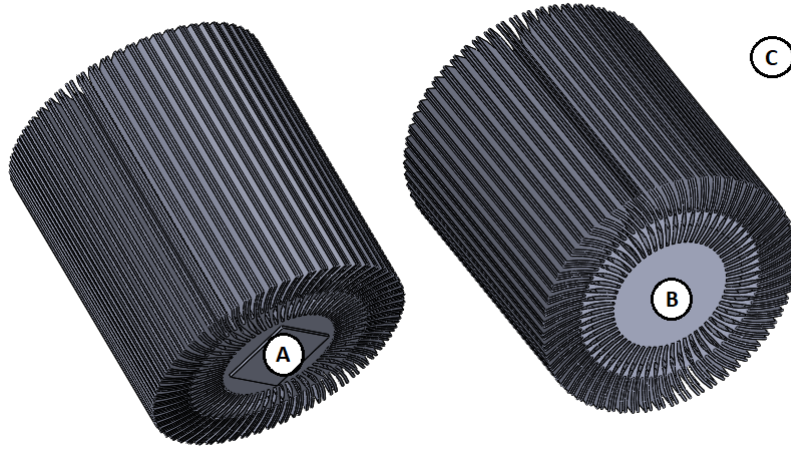


Figura 23: Distribución de puntos de análisis en el prototipo.

Una vez llevado a cabo el experimento, los resultados se muestran en la figura 24. Se presenta la evolución de las mediciones en los diferentes puntos del disipador a lo largo de un periodo necesario para lograr la estabilización del sistema. Como se puede observar, el tiempo de estabilización del sistema en los puntos A y B es, aproximadamente, una hora. En esta hora los dos puntos muestran una gráfica creciente hasta llegar a una medida acotada.

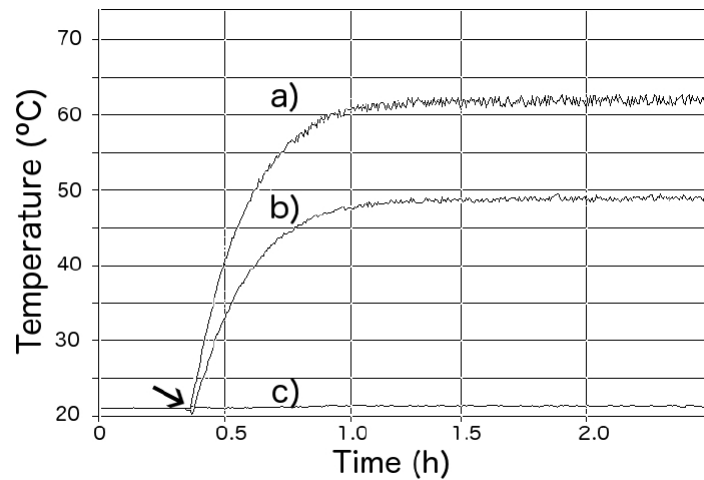


Figura 24: Mediciones de los puntos a), b) y c) en el disipador [3].

Dentro de todas las mediciones que se han monitorizado, para el punto A, la temperatura máxima registrada es de 63°C; para el punto B, correspondiente al punto opuesto del disipador, la temperatura máxima registrada fue de 49°C. En el tercer punto, el punto C, no se han registrado variaciones significativas desde el momento del encendido de la luminaria.

Al obtener los valores experimentales se puede apreciar que las simulaciones realizadas presentan resultados que no se desvían de los resultados del experimento. En el punto A la simulación

proporciona un resultado de 64°C y en el experimento se alcanza una temperatura de 63°C , es decir que se obtiene un error absoluto de 1 grado y un error relativo del 2%. La simulación predice de manera muy acertada el comportamiento del disipador. Las ventajas que se presentan con este buen ajuste de las simulaciones es que se pueden realizar modificaciones en la geometría del disipador y conocer de manera precisa cuál sería la influencia de los cambios en el comportamiento térmico del dispositivo.

En cuanto a los otros valores estudiados, el punto en la cara opuesta del disipador, los resultados son más diferenciados. En la simulación se obtiene un valor de 56°C mientras que en el experimento el resultado es de 49°C . El error absoluto para este punto es de 7 grados que equivale a un 11% de error relativo. En general, los errores obtenidos para el estudio que se realiza son aceptables. En la siguiente sección se presentará el experimento para la luminaria de alumbrado público.

Luminaria “*Illumnia*”

Una vez obtenidos los resultados de las simulaciones se realiza un prototipo de la geometría propuesta para alumbrado público. Se toman los valores de la temperatura en distintos puntos del dispositivo utilizando un termómetro infrarrojo, como se muestra en la figura 25 y se comparan con los resultados de la simulación expuestos en el capítulo anterior.



Figura 25: Sistema empleado para realizar las mediciones de temperatura en la luminaria para alumbrado público [2] .

Un vez realizado el experimento, en la figura 26 se presenta una gráfica térmica comparativa de los resultados del experimento (a) y el resultado de la simulación (b). En general, se observa que la mayor temperatura se concentra en la región del LED y disminuye en sus alrededores. En los puntos mostrados de cada gráfica, los valores de temperatura son: el termómetro infrarrojo muestra una temperatura de 51.6°C mientras que en la simulación la temperatura en el punto crítico es de 50.7°C .

En conclusión, para los dos casos estudiados, las simulaciones numéricas realizadas con un software basado en elementos finitos han presentado resultados muy semejantes al comportamiento real de las geometrías empleadas como disipadores de calor. Lo importante de obtener un correcto modelado es que se pueden crear o modificar dispositivos a partir de las simulaciones numéricas que, además, nos permiten predecir con cierto grado de confianza cómo sería el comportamiento

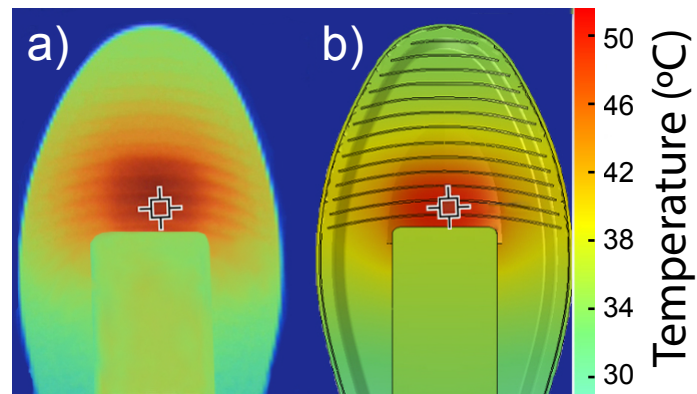


Figura 26: Resultados del experimento con termómetro infrarrojo y resultado de la simulación con Solidworks [2] .

de los nuevos dispositivos.

Además, la riqueza informática de este tipo de software permite plantear mejoras en el diseño que permitan aumentar la eficiencia de los disipadores. De hecho, una de las líneas de investigación de gran interés actual en este campo es la optimización y mejora de estas geometrías [9, 17, 23] .

Capítulo 5

Conclusiones

La presente tesis doctoral ha servido para plantear un ejemplo concreto de matemática industrial. El inicio de este estudio se enfoca en la transmisión de calor, específicamente en el diseño de disipadores pasivos de calor que se puedan implementar en elementos de iluminación, en este caso, diodos emisores de luz (de alta potencia). Una vez definido el problema se define un modelo matemático que sea capaz de representar el fenómeno que se estudia.

El modelo planteado ha permitido estudiar de manera acertada la transferencia de calor en los dispositivos. Se ha utilizado un software basado en elementos finitos para poder realizar las simulaciones numéricas sobre las diferentes geometrías. Se han realizado las simulaciones para todas las geometrías expuestas, obteniendo resultados, en la mayoría de los casos, satisfactorios.

El primer disipador no ha cumplido el objetivo de mantener al chip LED por debajo de la temperatura de funcionamiento recomendada por el fabricante (para el diseño de esta geometría se consideraron modelos de disipadores usados para la refrigeración de piezas electrónicas).

El resto de disipadores se diseñaron manteniendo una parte central sólida con diferentes estructuras de aletas. Estas geometrías lograron evacuar adecuadamente el calor generado por la fuente de luz (de hecho, se diseñaron para aumentar el área total en contacto con el aire).

La aplicación de conocimiento teórico para la resolución de problemas es un tema que cada día aporta y ayuda más al desarrollo tecnológico de los países. Este trabajo se ha enfocado en plasmar la importancia del desarrollo de conceptos teóricos que llegan a emplearse en aplicaciones tangibles. Además, resalta la importancia del cumplimiento de todas las fases del proceso de innovación para alcanzar soluciones a los problemas planteados.

En cuanto a los objetivos específicos, en este trabajo se obtuvieron elementos de disipación de calor pasivos con los cuales se puede garantizar el correcto funcionamiento de los dispositivos LED y así mantener una de sus ventajas que es su amplia vida útil.

El correcto modelado matemático ha permitido representar un problema real como un sistema de ecuaciones diferenciales que modelan la transferencia de calor (considerando los diferentes tipos presentes en el problema planteado).

Además, para resolver el modelo planteado, se han realizado las simulaciones numéricas mediante un software basado en el Método de los Elementos Finitos.

Por último, se han construido los prototipos propuestos y se han comprobado experimental-

mente los resultados obtenidos, logrando una destacable precisión numérica.

En resumen, en esta tesis se plasma un ejemplo paradigmático de Matemática Industrial: se ha definido un problema real de enorme interés aplicado, se ha definido un modelo matemático del mismo, se ha resuelto numéricamente, se han construido diferentes prototipos y se han verificado experimentalmente las predicciones teóricas; además, en este caso particular, los prototipos analizados se llevaron al mercado, cerrando un ciclo que se inició con el modelado matemático y que terminó con la transferencia a la sociedad de una solución competitiva a un problema real.

Bibliografía

- [1] *Haitz's law*, Nature Photonics **1** (2007), no. 1, 23–23.
- [2] D. Alarcón, E. Balvís, R. Bendaña, A. Conejero, P. Fernández de Córdoba, J. Higón, J. Isidro, and H. Michinel, *Mathematical modeling and numerical simulation of heat dissipation in led bulbs*, Thermal Science (2020), no. 00, 76–76.
- [3] E. Balís, R. Bendaña, H. Michinel, P. Fernández de Córdoba, and A. Paredes, *Analysis of a passive heat sink for temperature stabilization of high-power LED bulbs*, Journal of Physics: Conference Series **605** (2015), 012005.
- [4] J. Cho, J. H. Park, J. K. Kim, and E. F. Schubert, *White light-emitting diodes: History, progress, and future*, Laser & Photonics Reviews **11** (2017), no. 2, 1600147.
- [5] Curso de iluminación on line, *Fuentes de luz y equipos auxiliares*, url<https://grlum.dpe.upc.edu/manual/sistemasIluminacion-fuentesDeLuz-LamparasDeDescarga.php>.
- [6] D. P. Farrington and B. C. Welsh, *Effects of improved street lighting on crime: a systematic review*, Citeseer, 2002.
- [7] R. Haitz, F. Kish, J. Tsao, and J. Nelson, *The case for a national research program on semiconductor lighting*, Sandia Report SAND-2000–1612 (2000).
- [8] R. Haitz and J. Y. Tsao, *Solid-state lighting: 'the case' 10 years after and future prospects*, Physica status solidi **208** (2010), no. 1, 17–29.
- [9] T.-C. Hung, W.-M. Yan, X.-D. Wang, and Y.-X. Huang, *Optimal design of geometric parameters of double-layered microchannel heat sinks*, International Journal of Heat and Mass Transfer **55** (2012), no. 11, 3262 – 3272.
- [10] D. Jang, S.-J. Yook, and K.-S. Lee, *Optimum design of a radial heat sink with a fin-height profile for high-power LED lighting applications*, Applied Energy **116** (2014), 260–268.
- [11] D. Jang, S.-H. Yu, and K.-S. Lee, *Multidisciplinary optimization of a pin-fin radial heat sink for LED lighting applications*, International Journal of Heat and Mass Transfer **55** (2012), no. 4, 515–521.
- [12] H. Juslén, *Publicación xi*, 2007.
- [13] I. Knez, *Effects of indoor lighting on mood and cognition*, Journal of Environmental Psychology **15** (1995), no. 1, 39 – 51.
- [14] Efecto LED, *Lámpara led alumbrado público corn e40 40w ip64*, url<https://www.efectoled.com/es/comprar-lamparas-led-e40/458-lampara-led-alumbrado-publico-corn-e40-40w.html>, 2017.

- [15] Z. Lin, S. Wang, J. Huo, Y. Hu, J. Chen, W. Zhang, and E. Lee, *Heat transfer characteristics and LED heat sink application of aluminum plate oscillating heat pipes*, Applied Thermal Engineering **31** (2011), no. 14-15, 2221–2229.
- [16] X.-Y. Lu, T.-C. Hua, and Y.-P. Wang, *Thermal analysis of high power LED package with heat pipe heat sink*, Microelectronics Journal **42** (2011), no. 11, 1257–1262.
- [17] J. G. Maveety and H. H. Jung, *Design of an optimal pin-fin heat sink with air impingement cooling*, International Communications in Heat and Mass Transfer **27** (2000), no. 2, 229 – 240.
- [18] C. L. B. McCloughan, P. A. Aspinall, and R. S. Webb, *The impact of lighting on mood*, International Journal of Lighting Research and Technology **31** (1999), no. 3, 81–88.
- [19] N. Narendran and Y. Gu, *Life of LED-based white light sources*, Journal of Display Technology **1** (2005), no. 1, 167–171.
- [20] On-Energía, *Bombillas de incandescencia*, [urlhttps://www.on-energia.es/caducidad-bombillas-de-incandescencia/](https://www.on-energia.es/caducidad-bombillas-de-incandescencia/), 2017.
- [21] R. M. Potter, P. Pike, and S. V. Galginaitis, 1970, U.S. Patent 3, 529, 200.
- [22] W. M. Rohsenow, J. P. Hartnett, Y. I. Cho, et al., *Handbook of heat transfer*, vol. 3, McGraw-Hill New York, 1998.
- [23] C. J. Shih and G. C. Liu, *Optimal design methodology of plate-fin heat sinks for electronic cooling using entropy generation strategy*, IEEE Transactions on Components and Packaging Technologies **27** (2004), no. 3, 551–559.
- [24] Y. Shimizu, K. Sakano, Y. Noguchi, and T. Moriguchi, 1996, Japanese priority patent applications to U. S. Patent 5, 998, 925.
- [25] D. A. Steigerwald, J. C. Bhat, D. Collins, R. M. Fletcher, M. O. Holcomb, M. J. Ludowise, P. S. Martin, and S. L. Rudaz, *Illumination with solid state lighting technology*, IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics **8** (2002), no. 2, 310–320.
- [26] J. W. Stinson, 1991, U.S. Patent 4, 992, 704.
- [27] Vivion, *Lámparas fluorescentes compactas*, [urlhttp://www.vivionelectric.com/esp/productos/iluminacion/lamparas-fluorescentes-compactas](http://www.vivionelectric.com/esp/productos/iluminacion/lamparas-fluorescentes-compactas), 2012.
- [28] Parlamento Europeo y el Consejo de la Unión Europea, *Directivo 2009/125/ce*, 2009.
- [29] S.-H. Yu, K.-S. Lee, and S.-J. Yook, *Natural convection around a radial heat sink*, International Journal of Heat and Mass Transfer **53** (2010), no. 13-14, 2935–2938.
- [30] O. C. Zienkiewicz, *El método de los elementos finitos*, 1980.

Anexos

Como se ha comentado en el resumen de esta tesis doctoral, en el desarrollo de este trabajo de investigación se han realizado diferentes aportaciones complementarias:

- An alternative analysis for the local convergence of iterative methods for multiple roots including when the multiplicity is unknown.
- A Higher Order Chebyshev-Halley-Type Family of Iterative Methods for Multiple Roots.
- On the van derWaals Gas, Contact Geometry and the Toda Chain.

En lo que sigue, se presentan esas contribuciones.

An alternative analysis for the local convergence of iterative methods for multiple roots including when the multiplicity is unknown

Diego Alarcón^a, Jose L. Hueso^b and Eulalia Martínez^b

^aDepartamento de Matemática Aplicada. Universitat Politècnica de València, Spain;

^bInstituto Universitario de Matemática Multidisciplinar. Universitat Politècnica de València, Spain

ARTICLE HISTORY

Compiled March 28, 2020

ABSTRACT

In this paper we propose an alternative for the study of local convergence radius and the uniqueness radius for some third order methods for multiple roots whose multiplicity is known. The main goal is to provide an alternative that avoids the use of sophisticated properties of divided differences that are used in already published papers about local convergence for multiple roots. We defined the local study by using a technique taking into consideration a bounding condition for the $(m + i)$ th derivative of the function $f(x)$ with $i = 1, 2$. In the case that the method uses first and second derivative in its iterative expression and $i = 1$ in case the method only uses first derivative.

Furthermore we implement a numerical analysis in the following sense. Since the radius of local convergence for high-order methods decreases with the order, we must take into account the analysis of ITS behavior when we introduce a new iterative method. Finally, we have used these iterative methods for multiple roots for the case where the multiplicity m is unknown, so we estimate this factor by different strategies comparing the behavior of the corresponding estimations and how this fact affect to the original method.

KEYWORDS

Nonlinear equations; Iterative methods; Multiple roots; Convergence Ball; Local convergence.

1. Introduction

In the last years some of the studies concerning iterative methods for approximating roots of nonlinear equations have focused on multiple roots. That is, to find a multiple zero γ of multiplicity m of a nonlinear equation $f(x) = 0$, $f : D \subseteq \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, for this particular case some special aspects must be taken into account. This happens in the Van der Waals equation of state, in the compression of band-limited signals and the multipactor effect in electronic devices among other phenomenons. In this sense different iterative methods for this particular case have been recently published see [1]-[6] and the references therein.

For an iterative method, we define r the radius of the local convergence ball if the sequence x_n generated by this iterative method, starting from any initial point in

the open ball $B(\gamma, r)$ converges to γ and remains in the ball. In these studies it is interesting to obtain the largest possible value of r , but obviously, this depends on the conditions that the nonlinear function verifies.

Specially interesting from a mathematical point of view is paper [1] where a complete local convergence study has been performed, obtaining the convergence radius of the well known modified Newton's method for multiple zeros,

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

when the involved function satisfies Hölder continuity conditions, that is, $\forall x, y \in D$, $p \in]0, 1]$ and K_0, K_m positive real numbers.

$$\left| f^{(m)}(x^*)^{-1} (f^{(m+1)}(x) - f^{(m+1)}(y)) \right| \leq K_0 |x - y|^p, \quad (2)$$

$$\left| f^{(m)}(x^*)^{-1} f^{(m+1)}(x) \right| \leq K_m. \quad (3)$$

For this purpose, different results involving divided differences have been used. The same sophisticated properties have been used for obtaining the local convergence study of the third order Halley's method, [3], given by:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{\frac{m+1}{2m} f'(x_n) - \frac{f'(x_n)f''(x_n)}{2f'(x_n)}}, \quad (4)$$

and Osada's method, [13], whose function iteration is:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{1}{2} m(m+1) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} + \frac{1}{2} (m-1)^2 \frac{f'(x_n)}{f''(x_n)}. \quad (5)$$

In this paper we propose an alternative to obtain this local convergence radius for iterative methods for nonlinear equations with roots with multiplicity m showing that we can obtain similar results in a much more natural way. The bound conditions (6) and (7) used for this work for a function f that defines the nonlinear problem are shown below.

$$|f^{(m)}(\gamma)^{-1} f^{(m+1)}(x)| \leq k, \quad \forall x \in D, \quad k > 0. \quad (6)$$

For the method that uses second derivative we need to add another assumption as follows:

$$|f^{(m)}(\gamma)^{-1} f^{(m+2)}(x)| \leq p, \quad \forall x \in D, \quad p > 0. \quad (7)$$

First of all we develop the whole study for the third order iterative method due to Osada whose iterative expression is given by (5), we obtained similar results for local radius that the ones obtained in precedent studies cited before.

An analogous procedure can be applied in order to obtain the radius of other iterative methods. Specifically we have also studied the third order method introduced by Dong in [6], whose expression is given by:

$$\begin{aligned} y_n &= x_n - \sqrt{m} \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\ x_{n+1} &= y_n - m \left(1 - \frac{1}{\sqrt{m}}\right)^{(1-m)} \frac{f(y_n)}{f'(x_n)}, \end{aligned} \quad (8)$$

this method has two steps and for this reason some variations must be taken into account.

2. Preliminaries

In this study we use a simple form for studying the local convergence radius of some iterative method for approximating multiple roots, for that we require the Taylor expansion with integral form remainder, avoiding in this way the use of some intricate properties of divided differences operator that were used in previous works with this aim.

Lemma 2.1. *If γ is a multiple zero of multiplicity m with $m > 1$, of a nonlinear equation $f(x) = 0$, where $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ is a sufficiently differentiable function in a open interval D , then the function $f(x)$ can be expressed as*

$$f(x) = (x - \gamma)^m h(x), \quad h(\gamma) \neq 0, \quad (9)$$

where

$$h(x) = \frac{f^{(m)}(\gamma)}{m!} + \frac{1}{(m-1)!} \int_0^1 [f^{(m)}(\gamma + \theta(x - \gamma)) - f^{(m)}(\gamma)] (1 - \theta)^{m-1} d\theta, \quad (10)$$

and it verifies

$$h(\gamma) = \frac{f^{(m)}(\gamma)}{m!}, \quad (11)$$

and their derivatives for $i = 1, 2$ are

$$h^{(i)}(x) = \frac{1}{(m-1)!} \int_0^1 f^{(m+1)}(\gamma + \theta(x - \gamma)) \theta^i (1 - \theta)^{m-1} d\theta. \quad (12)$$

Proof: It is well known that if the nonlinear equation $f(x) = 0$ has γ a zero of multiplicity m and $m > 1$, then, it verifies $f^{(j)}(\gamma) = 0$, $j = 0, 1, \dots, m-1$, and $f^{(m)}(\gamma) \neq 0$, and function f can be expressed as:

$$f(x) = (x - \gamma)^m g(x), \quad g(\gamma) \neq 0. \quad (13)$$

Approximating the function $f(x)$ by the Taylor expansion with integral form remainder

around γ , [8] we obtain

$$\begin{aligned}
f(x) &= \frac{f^{(m)}(\gamma)}{m!}(x-\gamma)^m + \int_{\gamma}^x \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!}(x-t)^m dt \\
&= \frac{f^{(m)}(\gamma)}{m!}(x-\gamma)^m + \frac{1}{(m-1)!} \int_{\gamma}^x [f^{(m)}(t) - f^{(m)}(\gamma)](x-t)^{m-1} dt \\
&= \frac{f^{(m)}(\gamma)}{m!}(x-\gamma)^m + \frac{1}{(m-1)!} \int_0^1 [f^{(m)}(\gamma + \theta(x-\gamma)) - f^{(m)}(\gamma)](x-\gamma)^m (1-\theta)^{m-1} d\theta \\
&= \left[\frac{f^{(m)}(\gamma)}{m!} + \frac{1}{(m-1)!} \int_0^1 [f^{(m)}(\gamma + \theta(x-\gamma)) - f^{(m)}(\gamma)](1-\theta)^{m-1} d\theta \right] (x-\gamma)^m,
\end{aligned}$$

where one can check second equality by writing the last integral as $\int_{\gamma}^x u dv$ with $u = f^{(m)}(t) - f^{(m)}(\gamma)$ and $dv = (x-t)^{m-1} dt$.

Then, by comparing the zero γ of multiplicity m of function (13) with the one of (9), we see that they have the same structure, therefore we can deduce (10). Expressions, (11) and (12) follows obviously.

This property suggests that f satisfies the boundary conditions established in (6) and (7), which allows establishing the following bounds that we will use in our study.

Lemma 2.2. *Let $f(x)$ be a function satisfying conditions (6) and (7) for all $x_0 \in]\gamma - r_0, \gamma + r_0[= I_0$ where $r_0 = \frac{m+1}{k}$ and $e_0 = x_0 - \gamma$. Then, function $h(x)$ defined by (10) verifies the following bounds:*

$$\begin{aligned}
(B_1) \quad & |h(\gamma)^{-1}h(x_0)| \leq \frac{m+1+k|e_0|}{m+1} \\
(B_2) \quad & |h(\gamma)^{-1}h'(x_0)| \leq \frac{k}{m+1} \\
(B_3) \quad & |h(x_0)^{-1}h(\gamma)| \leq \frac{m+1}{m+1-k|e_0|} \\
(B_4) \quad & |h(x_0)^{-1}h'(x_0)| \leq \frac{k}{m+1-k|e_0|} \\
(B_5) \quad & |h(x_0)^{-1}h''(x_0)| \leq \frac{2p}{(m+2)(m+1-k|e_0|)}.
\end{aligned}$$

Proof: Notice that by Lemma 2.1 it we can be deduced that $h(\gamma)^{-1} \neq 0$ so by using assumptions above defined, (6) and (7), and applying the Mean Value Theorem we have (B_1) ,

$$\begin{aligned}
|h(\gamma)^{-1}h(x_0)| &= \left| 1 + m \int_0^1 f^{(m)}(\gamma)^{-1} [f^{(m)}(\gamma + \theta(x_0 - \gamma)) - f^{(m)}(\gamma)](1-\theta)^{m-1} d\theta \right| \\
&\leq \left| 1 + m \int_0^1 f^{(m)}(\gamma)^{-1} f^{(m+1)}(\xi) \theta |e_0| (1-\theta)^{m-1} d\theta \right| \leq \frac{m+1+k|e_0|}{m+1},
\end{aligned}$$

where in the last inequality we have used that $\int_0^1 \theta(1-\theta)^{m-1} d\theta = \frac{1}{m(m+1)}$.

Similar reasoning allow us to get (B_2)

$$|h(\gamma)^{-1}h'(x_0)| = \left| m!f^{(m)}(\gamma)^{-1} \frac{1}{(m-1)!} \int_0^1 f^{(m+1)}(\gamma + \theta(x_0 - \gamma))\theta(1-\theta)^{m-1}d\theta \right| \leq \frac{k}{m+1}.$$

Now for getting (B_3) we use the Mean Value Theorem having ξ between γ and x_0 such as:

$$|1 - h(\gamma)^{-1}h(x_0)| = |h(\gamma)^{-1}(h(\gamma) - h(x_0))| = |h(\gamma)^{-1}h'(\xi)|e_0| \leq \frac{k|e_0|}{m+1} < 1,$$

so, we can apply Banach Lemma to establish the existence of $h(x_0)^{-1}$ and moreover it is verified that:

$$|h(x_0)^{-1}h(\gamma)| \leq \frac{m+1}{m+1-k|e_0|}.$$

Following bounds (B_4) and (B_5) can be achieved by using previous ones.

3. Local convergence results

3.1. Local convergence for a one step iterative method

In this section in order to obtain the local convergence radius for the third order method defined by (5) we analyze it by taking an initial guess $x_0 \in]\gamma - r, \gamma + r[= I_r$ where $r < r_0$. For this we obtain the error equation of this method for obtaining the iteration x_1 generating some more restrictions that will determine the final value for r . In the process we use bounds obtained in Lemma 2.2 and after that we will follow an induction procedure to complete the study.

So, the first iteration can be written as

$$x_1 = x_0 - \frac{1}{2}m(m+1)\frac{f(x_0)}{f'(x_0)} + \frac{1}{2}(m-1)^2\frac{f'(x_0)}{f''(x_0)}. \quad (14)$$

Then, from Lemma 2.1 and being γ a zero of multiplicity m of equation $f(x) = 0$ and $e_0 = x_0 - \gamma$ we obtain,

$$\begin{aligned} f(x_0) &= h(x_0)e_0^m, \\ f'(x_0) &= h'(x_0)e_0^m + mh(x_0)e_0^{m-1}, \\ f''(x_0) &= h''(x_0)e_0^m + 2mh'(x_0)e_0^{m-1} + m(m-1)h(x_0)e_0^{m-2}. \end{aligned} \quad (15)$$

So, by subtracting γ in both sides of (2) and using these expressions we have:

$$\begin{aligned} e_1 &= e_0 - \frac{1}{2}m(m+1)\frac{h(x_0)e_0^m}{h'(x_0)e_0^m + mh(x_0)e_0^{m-1}} \\ &\quad + \frac{1}{2}(m-1)^2\frac{h'(x_0)e_0^m + mh(x_0)e_0^{m-1}}{h''(x_0)e_0^m + 2mh'(x_0)e_0^{m-1} + m(m-1)h(x_0)e_0^{m-2}}, \end{aligned}$$

then we write the error equation as:

$$e_1 = \frac{A}{B}e_0, \quad (16)$$

where

$$A = 2h'(x_0)h''(x_0)e_0^3 + (m+1)^2h'(x_0)^2e_0^2 + m(1-m)h(x_0)h''(x_0)e_0^2,$$

and

$$B = 2h'(x_0)h''(x_0)e_0^3 + 4mh'(x_0)^2e_0^2 + 2m(3m-1)h(x_0)h'(x_0)e_0 + 2mh(x_0)h''(x_0)e_0^2 + 2m^2(m-1)h(x_0)^2.$$

Now, by dividing both terms by the expression $2m^2(m-1)h(\gamma)h(x_0)$ denoting new terms \hat{A} and \hat{B} , we have:

$$e_1 = \frac{\hat{A}}{\hat{B}}e_0. \quad (17)$$

Then, in order to bound the quotient $|e_1|$, we bound upperly the numerator then,

$$|\hat{A}| = \left| \frac{h(\gamma)^{-1}h'(x_0)h(x_0)^{-1}h''(x_0)e_0^3}{m^2(m+1)} + \frac{(m+1)^2h(\gamma)^{-1}h'(x_0)h(x_0)^{-1}h'(x_0)e_0^2}{2m^2(m+1)} - \frac{h(\gamma)^{-1}h''(x_0)h(x_0)^{-1}h(x_0)e_0^2}{2m} \right|$$

by using bounds obtained in Lemma 2.2 we get

$$|\hat{A}| \leq \frac{2kp|e_0|^3}{m^2(m^2-1)(m+2)(m+1-k|e_0|)} + \frac{(m+1)k^2|e_0|^2}{2m^2(m-1)(m+1-k|e_0|)} + \frac{p|e_0|^2}{m(m+1)(m+2)}.$$

So, we have $|\hat{A}| \leq \varphi(|e_0|)$ with $\varphi : [0, r_0[\rightarrow \mathbb{R}$, defined as:

$$\varphi(t) = \frac{4kpt^3 + [(m+1)^2(m+2)k^2 + 2m(m-1)(m+1-kt)]t^2}{2m^2(m^2-1)(m+2)(m+1-kt)}$$

and one can check that φ is a increasing function in $[0, r_0[$ for being the quotient of two positive functions, an increasing numerator and a decreasing denominator.

After that, we study the term \hat{B} of (17) as follows:

$$|\hat{B}| = \left| \frac{h(\gamma)^{-1}h'(x_0)h(x_0)^{-1}h''(x_0)e_0^3}{m^2(m-1)} + \frac{2h(\gamma)^{-1}h'(x_0)h(x_0)^{-1}h'(x_0)e_0^2}{m(m-1)} + \frac{h(\gamma)^{-1}h''(x_0)e_0^2}{m(m-1)} + \frac{(3m-1)h(\gamma)^{-1}h'(x_0)e_0}{m(m-1)} + h(\gamma)^{-1}h(x_0) \right|.$$

In order to apply Banach Lemma we have:

$$|I - \hat{B}| \leq \left| h(\gamma)^{-1}h(\gamma) - h(\gamma)^{-1}h(x_0) - \frac{h(\gamma)^{-1}h'(x_0)h(x_0)^{-1}h''(x_0)e_0^3}{m^2(m-1)} - \frac{2h(\gamma)^{-1}h'(x_0)h(x_0)^{-1}h'(x_0)e_0^2}{m(m-1)} - \frac{h(\gamma)^{-1}h''(x_0)e_0^2}{m(m-1)} - \frac{(3m-1)h(\gamma)^{-1}h'(x_0)e_0}{m(m-1)} \right|.$$

So by using the Mean Value Theorem for the first term and bounds obtained in Lemma 2.2 we get

$$|I - \hat{B}| \leq \frac{k|e_0|}{m+1} + \frac{2kp|e_0|^3}{m^2(m^2-1)(m+2)(m+1-k|e_0|)} + \frac{2k^2|e_0|^2}{m(m^2-1)(m+1-k|e_0|)} + \frac{2p|e_0|^2}{m(m^2-1)(m+2)} + \frac{(3m-1)k|e_0|}{m(m^2-1)} \leq g_1(|e_0|)$$

where g_1 is defined as:

$$g_1(t) = \frac{2kp}{m^2(m^2-1)(m+2)(m+1-kt)}t^3 + \frac{2[(m+2)k^2 + (m+1-kt)p]}{m(m^2-1)(m+2)(m+1-kt)}t^2 + \frac{(m^2+2m-1)k}{m(m^2-1)}t.$$

Notice that, g_1 is an increasing function in $]0, r_0[$, for being the quotient of two positive functions, increasing the numerator and decreasing the denominator, so, we take $h_1(t) = g_1(t) - 1$, verifying, $h_1(0) = -1$ and $h_1(r_0^-) \rightarrow +\infty$. Then h_1 has a unique a root r_1 between these values, where $r_1 \in]0, r_0[/ 0 \leq g_1(t) < 1, \forall t \in]0, r_1[$, therefore by applying Banach's Lemma it follows:

$$|\hat{B}^{-1}| \leq \frac{1}{1 - g_1(|e_0|)}.$$

Then, turning to (17) we get

$$|e_1| \leq |\hat{B}^{-1}\hat{A}||e_0| \leq \frac{\varphi(|e_0|)}{1 - g_1(|e_0|)}|e_0| = g_2(|e_0|)|e_0| \quad (18)$$

where

$$g_2(t) = \frac{\varphi(t)}{1 - g_1(t)},$$

is an increasing function in $]0, r_1[$. So if we take $h_2(t) = g_2(t) - 1$, it is verified $h_2(0) = -1 < 0$ and $h_2(r_1^-) \rightarrow +\infty$. Therefore $\exists r_2 \in]0, r_1[/ 0 \leq g_2(t) < 1 \forall t \in]0, r_2[$.

Now, as we have obtained the sequence $r_2 < r_1 < r_0$ we take $r = r_2$, concluding that:

$$e_1 = |x_1 - \gamma| \leq g_2(|x_0 - \gamma|)|x_0 - \gamma| < |x_0 - \gamma| = e_0, \quad \forall x_0 \in]\gamma - r, \gamma + r[.$$

That is, $x_1 \in]\gamma - r, \gamma + r[= I$. The same process holds starting from x_1 and getting x_2 and then it is obtained that for all $k > 0$ it follows:

$$e_{k+1} = |x_{k+1} - \gamma| \leq g_2(|x_k - \gamma|)|x_k - \gamma| < |x_k - \gamma|.$$

So we have obtained that:

$$|e_{k+1}| \leq g_2(r)|e_k| \leq \left(g_2(r)\right)^2 |e_{k-1}| \leq \dots \leq \left(g_2(r)\right)^{k+1} |e_0|.$$

Then, we deduce that $x_{k+1} \in]\gamma - r, \gamma + r[= I$ and by taking limits in the last expression and using that $\lim_{k \rightarrow +\infty} \left(g_2(r)\right)^{k+1} = 0$, we get that $\lim_{k \rightarrow +\infty} x_k = \gamma$ so we have proved the following

Theorem 3.1. *Under the conditions of Lemma 2.2, let $r_0 = \frac{m+1}{k}$ and $r_i, i = 1, 2$ be the unique positive root of equation $h_i(t) = g_i(t) - 1$, $i = 1, 2$, with functions g_i defined below. Then, by taking $r = r_2$, for any initial guess $x_0 \in]\gamma - r, \gamma + r[$ the sequence $\{x_k\}$ obtained by the iterative method defined in (5) is well defined verifying that $x_{k+1} \in]\gamma - r, \gamma + r[$ for all $k \geq 0$ and converges at a rate of order at least 3 to the unique solution $x^* \in]\gamma - r_0, \gamma + r_0[$. Moreover, the following error bound holds for all $n \geq 0$*

$$|e_{k+1}| \leq \frac{|e_k|^3}{r_2^3}. \quad (19)$$

Proof: The first part of the proof follows from results of previous section. In order to obtain the rate of convergence turning to (18) and by using definitions of function φ , we have:

$$e_1 \leq |e_0| \frac{\frac{4kp|e_0|^3 + [(m+1)^2(m+2)k^2 + 2m(m-1)(m+1-k|e_0|)]|e_0|^2}{2m^2(m^2-1)(m+2)(m+1-k|e_0|)}}{1 - g_1(|e_0|)}.$$

Now, we multiply and divide by $|e_0|^2$

$$e_1 \leq |e_0|^3 \frac{\frac{4kp|e_0| + [(m+1)^2(m+2)k^2 + 2m(m-1)(m+1-k|e_0|)]}{2m^2(m^2-1)(m+2)(m+1-k|e_0|)}}{1 - g_1(|e_0|)}$$

observe that the function that we obtain in the numerator is increasing in I_0 , so we

have by the definition of r_2 that:

$$\begin{aligned} e_1 &\leq \frac{|e_0|^3}{r_2^2} \frac{\left(\frac{4kpr_2 + [(m+1)^2(m+2)k^2 + 2m(m-1)(m+1-kr_2)]}{2m^2(m^2-1)(m+2)(m+1-kr_2)} \right) r_2^2}{1 - g_1(r_2)} \\ &= \frac{|e_0|^3}{r_2^2} g_2(r_2) = \frac{|e_0|^3}{r_2^2}. \end{aligned}$$

Then, by an induction procedure we have $|e_{k+1}| \leq \frac{|e_k|^3}{r_2^2}$, that is, sequence x_k converges to γ with order at least 3.

To show the uniqueness, we assume that there exists a second solution $y^* \in]\gamma - r_0, \gamma + r_0[$, by (9) we have

$$f(y^*) = h(y^*)(y^* - \gamma)^m. \quad (20)$$

By using the Mean Value Theorem and Lemma 2.2 we have:

$$|1 - h(\gamma)^{-1}h(y^*)| = |h(\gamma)^{-1}(h(\gamma) - h(y^*))| = |h(\gamma)^{-1}h'(\xi)| |\gamma - y^*| \leq \frac{k|\gamma - y^*|}{m+1} < 1,$$

we deduce that $h(y^*) \neq 0$ and then by (20) we have that $y^* = \gamma$.

3.2. Local convergence for a two steps iterative method

Now in order to obtain the local convergence radius for the third order method defined by (8) we analyze their iterates by taking an initial guess $x_0 \in]\gamma - r, \gamma + r[$, where $r < r_0$. This value will be determined once the error equation of this method is obtained and analyzed. In the process we use bounds obtained in Lemma 2.2 and after that we will follow an induction procedure to complete the study in an analogous way as it has been done with the previous method.

So, by taking an initial guess $x_0 \in]\gamma - r, \gamma + r[$, where $r < r_0$ using expressions obtained in (15) from the first step of (8) we can write:

$$\hat{e}_0 = x_0 - \gamma - m^{\frac{1}{2}} \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = \frac{h'(x_0)e_0 + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)h(x_0)}{h'(x_0)e_0 + mh(x_0)} e_0$$

Multiplying both terms by the expression $m^{-1}h(\gamma)^{-1}$ we have

$$\hat{e}_0 = \frac{\hat{A}_0}{\hat{B}_0} e_0 \quad (21)$$

with

$$\begin{aligned} \hat{A}_0 &= m^{-1}h(\gamma)^{-1}(h'(x_0)e_0 + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)h(x_0)), \\ \hat{B}_0 &= m^{-1}h(\gamma)^{-1}(h'(x_0)e_0 + mh(x_0)). \end{aligned}$$

Now, applying bounds obtained in Lemma 2.2 and taking into account that $m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1) > 0$ it follows:

$$|\hat{A}_0| \leq \frac{k|e_0| + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)(m + 1 + k|e_0|)}{m(m + 1)}.$$

In order to use Banach's Lemma we calculate

$$|I - \hat{B}_0| = |h(\gamma)^{-1}(h(\gamma) - h(x_0)) - m^{-1}h(\gamma)^{-1}h'(x_0)e_0| \leq \frac{k|e_0|}{m},$$

then, we need $\frac{k|e_0|}{m} < 1$, so we have to take now $|e_0| < \frac{m}{k} = r_1$ and being this value minor than $r_0 = \frac{m+1}{k}$ defined in Lemma 2.2 we are in conditions of applying the bounds established there. So we have:

$$|\hat{B}_0^{-1}| = \frac{m}{m - k|e_0|}, \quad (22)$$

and so turning to (21) one has:

$$|\hat{e}_0| \leq \frac{k|e_0| + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)(m + 1 + k|e_0|)}{(m + 1)(m - k|e_0|)}|e_0| = g_1(|e_0|)|e_0|,$$

where

$$g_1(t) = \frac{kt + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)(m + 1 + kt)}{(m + 1)(m - kt)}$$

is an increasing function in $]0, r_1[$. Then by taking $h_1(t) = g_1(t) - 1$, it is verified that $h_1(0) = -m^{-\frac{1}{2}}$ and $h_1(r_1^-) \rightarrow +\infty$. Therefore h_1 has a unique root in $]0, r_1[$ let it be r_2 , then we have that $0 < g_1(t) < 1 \forall t \in]0, r_2[$ and so:

$$|y_0 - \gamma| \leq g_1(|x_0 - \gamma|)|x_0 - \gamma| < |x_0 - \gamma|.$$

Now, we proceed to analyze the second step of (8) by similar expressions to the ones in (15) but now with $\hat{e}_0 = y_0 - \gamma$ we have:

$$\begin{aligned} f(y_0) &= h(y_0)\hat{e}_0^m, \\ f'(y_0) &= h'(y_0)\hat{e}_0^m + mh(y_0)\hat{e}_0^{m-1}, \end{aligned} \quad (23)$$

substituting these in

$$x_1 = y_0 - mb \frac{f(y_0)}{f'(x_0)},$$

and dividing numerator and denominator by e_0^{m-1} we get:

$$e_1 = x_1 - \gamma = \hat{e}_0 - \frac{mbh(y_0)\left(\frac{\hat{e}_0}{e_0}\right)}{h'(x_0)e_0 + mh(x_0)}e_0$$

By doing some calculations and denoting $N = \frac{\hat{e}_0}{e_0}$ we write the error equation as:

$$e_1 = \frac{A_1}{B_0}e_0 \quad (24)$$

where B_0 has been used in (21) for first step and

$$A_1 = h'(x_0)e_0 + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)h(x_0) - mbh(y_0)N^m,$$

so, by dividing both terms by the expression $mh(\gamma)$ denoting new terms \hat{A}_1 and \hat{B}_0 , we have:

$$e_1 = \frac{\hat{A}_1}{\hat{B}_0}e_0. \quad (25)$$

Now, we analyze $|e_1|$, for this, we first bound the numerator given by:

$$|\hat{A}_1| = \left| m^{-1}h(\gamma)^{-1}h'(x_0)e_0 + m^{-\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)h(\gamma)^{-1}h(x_0) - bh(\gamma)^{-1}h(y_0)N^m \right|$$

and using bounds obtained in Lemma 2.2 we get

$$|\hat{A}_1| \leq \frac{k|e_0|}{m(m+1)} + \frac{(m^{\frac{1}{2}} - 1)(m+1+k|e_0|)}{m^{\frac{1}{2}}(m+1)} + \frac{b(m+1+kg_1(|e_0|)|e_0|)g_1(|e_0|)^m}{m+1}.$$

So, we have obtained $|\hat{A}_1| \leq \varphi(|e_0|)$ with $\varphi : [0, r_1[\rightarrow \mathbb{R}$, defined as:

$$\varphi(t) = \frac{kt + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)(m+1+kt) + mb(m+1+kg_1(t)t)g_1(t)^m}{m(m+1)}$$

and one can check that φ is a increasing function because g_1 is so.

Then, turning to (25) and using (22) we get:

$$|\hat{e}_1| \leq \frac{\varphi(|e_0|)}{(m+1)(m-k|e_0|)},$$

that is,

$$\begin{aligned} |\hat{e}_1| &\leq \frac{k|e_0| + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)(m+1+k|e_0|) + mb(m+1+kg_1(|e_0|)|e_0|)g_1(|e_0|)^m}{(m+1)(m-k|e_0|)}|e_0| \\ &\leq g_2(|e_0|)|e_0|, \end{aligned}$$

where

$$g_2(t) = \frac{kt + m^{\frac{1}{2}}(m^{\frac{1}{2}} - 1)(m + 1 + kt) + mb(m + 1 + kg_1(t)t)g_1(t)^m}{(m + 1)(m - kt)}$$

and we take $h_2(t) = g_2(t) - 1$, verifying, $h_2(0) = \frac{m^{\frac{1}{2}}-1}{m^{\frac{1}{2}}} + b\left(\frac{m^{\frac{1}{2}}-1}{m^{\frac{1}{2}}}\right)^m - 1 < 0$ and $h_2(r_1^-) \rightarrow +\infty$. Then $h_2(t)$ has a unique root between these values, let it be r_3 . Therefore $\exists r_3 \in]0, r_1[/ 0 \leq g_2(t) < 1 \forall t \in]0, r_3[$.

Now, we take $r = \min\{r_i, i = 0, \dots, 3\}$ for concluding that:

$$\begin{aligned} |y_0 - \gamma| &\leq g_1(|x_0 - \gamma|)|x_0 - \gamma| < |x_0 - \gamma|, \\ |x_1 - \gamma| &\leq g_2(|x_0 - \gamma|)|x_0 - \gamma| < |x_0 - \gamma|, \end{aligned}$$

That is, $y_0, x_1 \in]\gamma - r, \gamma + r[= I$. The same process holds starting from x_1 and getting y_1, x_2 and then by an inductive procedure it is obtained that for all $k > 0$ it follows:

$$\begin{aligned} |y_k - \gamma| &\leq |g_1(|x_k - \gamma|)|x_k - \gamma| < |x_k - \gamma|, \\ |x_{k+1} - \gamma| &\leq |g_2(|x_k - \gamma|)|x_k - \gamma| < |x_k - \gamma|, \end{aligned} \tag{26}$$

So we have obtained that:

$$\begin{aligned} |\hat{e}_k| &\leq g_1(r)|e_k| \leq \left(g_1(r)\right)^2 |e_{k-1}| \leq \dots \leq \left(g_1(r)\right)^{k+1} |e_0|, \\ |e_{k+1}| &\leq g_2(r)|e_k| \leq \left(g_2(r)\right)^2 |e_{k-1}| \leq \dots \leq \left(g_2(r)\right)^{k+1} |e_0|, \end{aligned} \tag{27}$$

Then, we deduce that $y_k, x_{k+1} \in]\gamma - r, \gamma + r[= I$ and by taking limits in the last expression and using that $\lim_{k \rightarrow +\infty} \left(g_2(t)\right)^{k+1} = 0$, we get that $\lim_{k \rightarrow +\infty} x_k = \gamma$. Then, we have proved a similar result than the one obtained in theorem 1 for the iterative method due to Dong. The uniqueness proof follows in the same way that in Theorem 3.1.

4. Numerical results

In this section, first we study the local convergence radius for the third order iterative methods studied in previous sections for some particular examples and by following the theoretical results of this study. For that, we use some equations taken from [3], [7] and [5] to show the comparison of our results with theirs. In each example we give the root, γ , its multiplicity m and the constants used in (6) and (7).

In table 2 we can see the different values of r_i , $i = 0, 1, 2$, described in our theoretical results for Osada's iterative method (5). As it can be observed, the minimum value for the radii is always r_2 . Similar behavior is presented on the two steps method due to Dong, (8), where the sequence of radius is decreasing. Moreover we notice that in this case the value of the local convergence radius is smaller than the one obtained for the one step method due to Osada. This behavior was expected because in this case it is normally used the first step error expression in the second step with the corresponding restriction for finding good bounds.

Exercise	γ	m	$k_1 = k_m$	k_2	k_0	p
$f_1(x) = \cos(x) - 1$	0	2	1	1	1	1
$f_2(x) = (x^{5/2} - 1)^2$	1	2	$\frac{54}{5} - \frac{1}{10}\sqrt{6}$	$\frac{72}{5} + \frac{1}{30}\sqrt{6}$	$\frac{72}{5} - \frac{3}{30}\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}$
$f_3(x) = x^2(x^2 - 1)$	0	2	12	12	12	1
$f_4(x) = \int_0^x G(x)dx,$ $G(x) = \int_0^x (x + \cos(\pi x^2))dx$	0	2	$1 + 2\pi$	$2\pi(1 + 2\pi)$	2π	1
$f_5(x) = (\frac{1}{10}x - \frac{1}{15}x^{3/2})^2$	$\frac{9}{4}$	2	2.56	0.43	6.32	$\frac{1}{2}$
$f_6(x) = x^5 - 8x^4 + 24x^3 - 34x^2 + 23x - 6$	1	3	4	10	10	1

Table 1. Nonlinear examples.

Osada's method				
Examples	r_0	r_1	r_2	r
f_1	3.0000	0.7418	0.6781	0.6781
f_2	0.2842	0.0733	0.0676	0.0676
f_3	0.2500	0.0646	0.0596	0.0596
f_4	0.4119	0.1025	0.0938	0.0938
f_5	1.1719	0.3033	0.2798	0.2798
f_6	1.0000	0.3822	0.3469	0.3469

Table 2. Numerical values of local convergence radii for examples given in Tabla (1).

5. Comparative study

Now, in order to complete our study we apply the technique described in section 3 to different iterative methods with the aim of performing a numerical comparison by using the different techniques that we mention in the introduction. Specifically, we compare the local convergence radii for the second order modified Newton's method (1) and the third order methods due to Halley (4), whose local convergence study have been performed in [1] and [3] by using the technique that involves divided differences and the assumption conditions given by (2).

First of all, we give the results for obtaining the local convergence radius with the study presented in this paper in the following theorem, whose proof is ommited by it is similar structure with theorem developed in section 3.

Theorem 5.1. *Under the conditions of Lemma 2.2, let $r_0 = \frac{m+1}{k}$ and $r = \min\{r_i, i = 0, 1, 2\}$ where r_i is the smallest positive root of equation $h_i(t) = g_i(t) - 1$, $i = 1, 2$ where functions g_i are defined below for different methods. Then, for any initial guess $x_0 \in]\gamma - r, \gamma + r[$ the sequence $\{x_k\}$ obtained by each iterative method is well defined and verifies that $x_{k+1} \in]\gamma - r, \gamma + r[$ for all $k \geq 0$. Moreover the root γ is unique in the interval $] \gamma - r_0, \gamma + r_0[$ and the following error bounds hold for all $k \geq 0$,*

$$|x_{k+1} - \gamma| \leq |g_2(|x_k - \gamma|)|x_k - \gamma| < |x_k - \gamma|,$$

(1) **Modified Newton's method**, (1), we have

$$g_1(t) = \frac{kt}{m}$$

Dong's method					
<i>Examples</i>	r_0	r_1	r_2	r_3	r
f_1	3	2.0000	0.9252	0.2167	0.2167
f_2	0.2842	0.1895	0.0877	0.0205	0.0205
f_3	0.2500	0.1667	0.0771	0.0181	0.0181
f_4	0.4119	0.2746	0.1270	0.0298	0.0298
f_5	1.1719	0.7813	0.3614	0.0846	0.0846
f_6	1.0000	0.7500	0.2763	0.0230	0.0230

Table 3. Numerical values of local convergence radii for examples given in Table (1).

and

$$g_2(t) = \frac{kt}{(m+1)(m-kt)}$$

(2) **Halley's method**, (4), we get

$$g_1(t) = \frac{k}{m}t + \left(\frac{k^2}{2m^2(m+1-kt)} + \frac{p}{m(m+1)(m+2)} \right) t^2$$

and

$$g_2(t) = \frac{\left(\frac{k^2}{2m^2(m+1-kt)} + \frac{p}{m(m+1)(m+2)} \right) t^2}{1 - \left[\frac{k}{m}t + \left(\frac{k^2}{2m^2(m+1-kt)} + \frac{p}{m(m+1)(m+2)} \right) t^2 \right]}$$

We will use numerical examples given in table 1 where it is shown the values of constants needed in our study k , p and the constant values $K_m = k$, k_0 and p needed with the technique that uses divided differences and Hölder conditions, (2).

Table 4 shows the radii of local convergence for different iterative methods. We denote with *DD* when the local convergence study has been performed by using divided differences and denote with *OP* our proposal that has been established in section 3. Notice that the computed results are equal for cases where the Hölder's constant p is 1. But second an fourth examples where p is different from 1, there is a small difference. In those examples, our proposal gets a bigger radius, a logical result since our conditions are stricter.

It can be checked that Newton's radius are always bigger than those of the methods of higher order. However, in the case of the methods of order 3 and 4, the difference is less accused. We have to point out the the good values obtained for the radii with Halley's method while Dong's methods has always has reached the smallest radii.

6. Case of unknown multiplicity

Having studied the radius of local convergence for the different methods, the goal now is to analyze the behavior of the iterative methods for multiple roots when the value of the multiplicity, m is unknown. In fact, all the iterative methods studied include the value of m in their iterative expression. However, in real problems one can have an

Radius		Examples					
Method	Condition	f_1	f_2^*	f_3	f_4	f_5^*	f_6
M. Newton	DD	1.5000	0.1421	0.1250	0.2060	0.5859	0.6000
	OP	1.5000	0.1421	0.1250	0.2060	0.5859	0.6000
Osada	DD	0.6781	0.0644	0.0596	0.0938	0.2348	0.3469
	OP	0.6781	0.0676	0.0596	0.0938	0.2798	0.3469
M. Halley	DD	1.2679	0.1235	0.1152	0.1762	0.4357	0.5091
	OP	1.2679	0.1304	0.1152	0.1762	0.5411	0.5091

Table 4. Comparing results.

equation with unknown root and unknown multiplicity. How can we proceed in order to apply the method? Our aim in this section is to check if the formulas proposed in [14] for approximating the multiplicity tested in this paper with modified Newton's method are also working with different iterative methods for multiple roots. In this way it is studied if the approximations of the multiplicity allow to give acceptable results with different methods. Finally, some examples are shown to demonstrate their application.

For this section, we use the modified Newton method, Osada's method and an optimum method of fourth order (M4), see [2] defined as

$$y_n = x_n - b \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},$$

$$x_{n+1} = x_n - (s_1 + s_2 h(y_n, x_n) + s_3 h(x_n, y_n) + s_4 h(y_n, x_n)^2) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

where

$$h(x_n, y_n) = \frac{f'(y_n)}{f'(x_n)}, \quad b = \frac{2m}{2+m}, \quad \mu = 1 - \frac{b}{m},$$

$$s_1 = -\frac{1}{4}m(-4 + 2m + 3m^2 + m^3),$$

$$s_2 = \frac{1}{8}m\mu^m(2+m)^3, \quad s_3 = \frac{1}{8}m^4\mu^{-m}, \quad s_4 \in \mathbb{R}.$$

Additionally, we used different procedures to estimate the multiplicity m of the root given in [14]:

a) Schröder's method [10]

$$u_i = \frac{f(x_i)}{f'(x_i)},$$

$$u'_i = \frac{(f'(x_i))^2 - f(x_i)f''(x_i)}{f'(x_i)^2},$$

$$m_i = \frac{1}{u'_i}.$$

b) Ostrowsky's method [9]

$$\begin{aligned}x_{i+1} &= x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \\x_{i+2} &= x_{i+1} - \frac{f(x_{i+1})}{f'(x_{i+1})}, \\m_i &= \frac{x_i - x_{i+1}}{x_i - 2x_{i+1} + x_{i+2}}.\end{aligned}$$

c) Traub's method [11]

$$m_i = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\ln(|f(x_i)|)}{\ln\left(\left|\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}\right|\right)}.$$

d) Straten's method [12]

$$\begin{aligned}x_{i+1} &= x_i - m_i \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}, \\m_{i+1} &= \frac{m_i}{1 - \frac{f(x_{i+1})f'(x_i)}{f'(x_{i+1})f(x_i)}}.\end{aligned}$$

It is worth noting that the order of approximation of the multiplicity limits the order of the iterative method to which it is applied. Therefore, using the estimations provided by these methods, which are of second order, will limit the order of the resulting iterative method to order 2. Working with integer multiplicity roots, one can circumvent this difficulty, by rounding the estimation to the nearest integer. In this case, the computational cost can be reduced if one stops estimating the multiplicity after finding two consecutive equal estimations.

These 3 strategies have been applied to equations f_2 , f_5 and f_6 of Section 4. In the tables, each method is identified by its author abbreviation followed by a digit: 1 if the raw value of the estimated multiplicity is used, 2 if the estimation is rounded, and 3 if one stops estimating the multiplicity when it stabilizes. Additionally, the method is run using the true value of the multiplicity from the beginning, in order to assess the increase of cost due to the multiplicity estimation.

In order to compare the performance of the different strategies, we use the functional evaluations that are used in each iteration. That is, the number of functional evaluations used in the method plus the ones used in the estimation of the multiplicity are taken. Table 5 shows the cost of one iteration on the analyzed method with or without using a multiplicity estimation procedure. This aim was partially published in [7].

Multiplicity estimation	M. Newton	Osada	M4
known	2	3	3
Ostrowski	4	5	5
Schröder	3	3	3
Traub	2	3	3
Straten	4	5	5

Table 5. Number of functional evaluations per iteration according to the multiplicity estimation procedure

Method	Aprox.	iter	ρ	incr	$f(x_n)$	mul	EF
M. Newton	Ost ₁	6	2.00	7.42e-36	2.66e-141	[1.03, 1.96, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	24
	Ost ₂	6	2.00	6.81e-26	7.58e-101	[1, 2, 2, 2, 2, 2]	24
	Ost ₃	6	2.00	6.81e-26	7.58e-101	[1, 2, 2]	18
	Scho ₁	7	2.00	3.88e-22	8.00e-86	[0.52, 1.21, 1.82, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	21
	Scho ₂	6	2.00	6.81e-26	7.58e-101	[1, 2, 2, 2, 2, 2]	18
	Scho ₃	6	2.00	6.81e-26	7.58e-101	[1, 2, 2]	15
	Trau ₁	24	1.02	6.03e-22	2.56e-45	[..., 1.93]	48
	Trau ₂	9	2.00	4.06e-23	9.58e-90	[1, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2]	18
	Trau ₃	30	1.00	6.06e-11	2.29e-20	[1, 1]	60
	Stra ₁	5	2.42	5.58e-35	4.80e-117	[1.03, 1.96, 1.99, 1.99, 1.99]	20
	Stra ₂	6	2.00	6.81e-26	7.58e-101	[1, 2, 2, 2, 2, 2]	24
	Stra ₃	5	2.00	6.54e-36	6.45e-141	[1, 2, 2]	16
	known	8	2.00	1.95e-38	5.13e-151	2	16
Osada	Ost ₁	6	2.00	6.61e-40	3.78e-157	[1.03, 1.98, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	30
	Ost ₂	5	3.00	2.06e-35	2.18e-207	[1, 2, 2, 2, 2]	25
	Ost ₃	5	3.00	2.06e-35	2.18e-207	[1, 2, 2]	21
	Scho ₁	7	2.00	3.88e-22	8.01e-86	[0.52, 1.21, 1.82, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	21
	Scho ₂	5	3.00	2.06e-35	2.18e-207	[1, 2, 2, 2, 2]	15
	Scho ₃	5	3.00	2.06e-35	2.18e-207	[1, 2, 2]	15
	Trau ₁	21	1.03	7.82e-21	1.33e-43	[..., 1.93]	63
	Trau ₂	8	3.00	1.28e-23	1.29e-136	[1, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2]	24
	Trau ₃	30	1.00	6.06e-11	2.29e-20	[1, 1]	90
	Stra ₁	5	2.43	3.13e-37	1.88e-125	[1.03, 1.96, 1.99, 1.99, 1.99]	25
	Stra ₂	5	3.00	2.06e-35	2.18e-207	[1, 2, 2, 2, 2]	25
	Stra ₃	4	2.39	3.15e-36	2.75e-212	[1, 2, 2]	21
	known	7	2.99	4.83e-42	3.61e-247	2	21
M4	Ost ₁	6	2.00	1.92e-33	5.57e-132	[1.03, 1.93, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	30
	Ost ₂	4	4.01	1.10e-22	1.08e-175	[1, 2, 2, 2]	20
	Ost ₃	4	4.01	1.10e-22	1.07e-175	[1, 2, 2]	18
	Scho ₁	7	2.00	1.28e-36	1.95e-144	[0.52, 1.42, 1.95, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	21
	Scho ₂	4	4.01	1.10e-22	1.08e-175	[1, 2, 2, 2]	12
	Scho ₃	4	4.01	1.10e-22	1.08e-175	[1, 2, 2]	12
	Trau ₁	16	1.03	6.41e-22	1.63e-46	[..., 1.93]	48
	Trau ₂	6	4.00	6.61e-41	1.80e-321	[1, 1, 1, 2, 2, 2]	18
	Trau ₃	30	1.00	1.08e-17	1.13e-34	[1, 1]	90
	Stra ₁	5	2.42	2.46e-45	6.00e-154	[1.03, 1.98, 1.99, 1.99, 1.99]	25
	Stra ₂	4	4.01	1.10e-22	1.08e-175	[1, 2, 2, 2]	20
	Stra ₃	4	3.43	2.43e-76	6.05e-605	[1, 2, 2]	18
	known	6	3.99	7.51e-28	4.95e-217	2	18

Table 6. $f_2(x) = (x^{5/2} - 1)^2$, $x_0 = 0.5$, $\gamma = 1$, $m = 2$

To be able to make a comparison between the different performances for each method and procedure for multiplicity estimation, the tables 6, 7 and 8 show the number of iterations needed to converge, the approximated computational order of convergence (28), the error between the last two iterates, the absolute value of the function evaluated in the last approximation, the multiplicity estimations used in each iteration, and the total cost of the iterations, in terms of the total number of evaluations of the function and its derivatives along the iterations of each method.

$$\rho = \frac{\log(|x_{n-1} - x_{n-2}|/|x_n - x_{n-1}|)}{\log(|x_{n-2} - x_{n-3}|/|x_{n-1} - x_{n-2}|)}, \quad (28)$$

In general, it can be seen that the order of convergence is limited to approximately 2 despite the order of theoretical convergence of the method (rows of tables where the name of the method has subscript 1). It is important that the methods used to estimate the multiplicity give a good approximation.

In the rows where the name of the method has subscripts 2 and 3, the rounding of the approximation of the multiplicity has been made. On most of them, in the cases of sub-index 3 they have a lower cost than sub-index 2 since in case of finding repeated estimates it stops the estimation process and adopts this value as the multiplicity. The Schröder method obtains the best results when estimating the multiplicity, while the Traub method fails to estimate the multiplicity and converge. Also, the cost increment due to the multiplicity estimation is quite moderated. In general, it is less than two times the cost of the same method with known multiplicity.

Method	Aprox.	iter	ρ	incr	$f(x_n)$	mul	EF
M. Newton	Ost ₁	5	2.00	8.59e-22	3.79e-89	[1.73, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	20
	Ost ₂	6	1.99	2.80e-33	1.71e-134	[2, 2, 2, 2, 2, 2]	24
	Ost ₃	6	1.99	2.80e-33	1.71e-134	[2, 2]	16
	Scho ₁	6	2.00	5.16e-33	1.96e-133	[1.62, 1.96, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	18
	Scho ₂	6	2.00	2.80e-33	1.71e-134	[2, 2, 2, 2, 2, 2]	18
	Scho ₃	6	2.00	2.80e-33	1.71e-134	[2, 2]	14
	Trau ₁	nc	-	-	-	-	-
	Trau ₂	nc	-	-	-	-	-
	Trau ₃	nc	-	-	-	-	-
	Stra ₁	5	2.41	1.53e-47	7.79e-164	[1.73, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	20
	Stra ₂	6	2.00	2.80e-33	1.71e-134	[2, 2, 2, 2, 2, 2]	24
	Stra ₃	4	2.00	8.94e-23	1.78e-92	[2, 2]	12
known	6	1.99	2.80e-33	1.70e-134	2	12	
Osada	Ost ₁	6	2.00	8.40e-37	7.78e-149	[1.73, 1.98, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	30
	Ost ₂	5	3.00	5.27e-53	1.18e-317	[2, 2, 2, 2, 2]	25
	Ost ₃	5	3.00	5.27e-53	1.18e-317	[2, 2]	19
	Scho ₁	6	2.00	5.16e-33	1.96e-133	[1.62, 1.96, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	18
	Scho ₂	5	3.00	5.27e-53	1.18e-317	[2, 2, 2, 2, 2]	15
	Scho ₃	5	3.00	5.27e-53	1.18e-317	[2, 2]	15
	Trau ₁	30	1.00	7.98e-09	1.47	[..., 0.39]	90
	Trau ₂	30	1.32	5.74	4.2	[..., -1]	90
	Trau ₃	11	3.00	1.1349e-58	1.75e-351	[5, -11, 2, 2]	33
	Stra ₁	4	2.41	9.40e-22	1.59e-76	[1.73, 1.99, 1.99, 1.99]	20
	Stra ₂	5	3.00	5.27e-53	1.18e-317	[2, 2, 2, 2, 2]	25
	Stra ₃	3	2.40	9.36e-21	3.70e-124	[2, 2]	13
known	5	3.00	5.27e-53	1.18e-317	2	15	
M4	Ost ₁	5	2.00	4.09e-24	9.04e-99	[1.73, 1.99, 1.99, 1.99, 1.99]	25
	Ost ₂	4	3.99	2.16e-55	1.40e-442	[2, 2, 2, 2]	20
	Ost ₃	4	3.99	2.16e-55	1.40e-442	[2, 2]	16
	Scho ₁	5	2.00	1.48e-21	2.75e-88	[1.61, 1.98, 1.99, 1.99, 1.99]	15
	Scho ₂	4	3.99	2.16e-55	1.41e-442	[2, 2, 2, 2]	12
	Scho ₃	4	3.99	2.16e-55	1.41e-442	[2, 2]	12
	Trau ₁	13	1.02	3.90e-21	2.27e-48	[..., 2.10]	39
	Trau ₂	6	10.55	9.38e-22	1.75e-173	[5, 4, 3, 3, 2, 2]	18
	Trau ₃	15	1.00	8.84e-21	1.79e-46	[5, 4, 3, 3]	45
	Stra ₁	4	2.40	3.02e-25	2.77e-89	[1.73, 1.99, 1.99, 1.99]	20
	Stra ₂	4	3.99	2.16e-55	1.41e-442	[2, 2, 2, 2]	20
	Stra ₃	3	3.43	7.50e-41	1.78e-325	[2, 2]	16
known	4	3.99	2.16e-55	1.41e-442	2	8	

Table 7. $f_5(x) = (\frac{1}{10}x - \frac{1}{15}x^{3/2})^2$, $x_0 = 2$, $\gamma = \frac{9}{4}$, $m = 2$

7. Conclusions

We obtain the local convergence for several iterative methods without using some sophisticated properties of divided difference and apply the theoretical results to some problems obtaining the local convergence radius, including a comparison with already existing results. Moreover, we perform a study of the behavior of these methods when m is unknown and we use an estimation.

8. Agreements

This research was supported by Ministerio de Economía y Competitividad under grant MTM2014-52016-C2-1-2-P and by the project of Generalitat Valenciana Prometeo/2016/089 and SENESCYT of Ecuador (Secretaría de Educación Superior, Ciencia, Tecnología e Innovación).

9. Funding

This work has not funding.

Method	Aprox.	iter	ρ	incr	$f(x_n)$	mul	EF
M. Newton	Ost ₁	6	2.00	1.95e-39	4.01e-234	[3.43, 2.98, 2.99, 2.99, 2.99, 2.99]	24
	Ost ₂	6	1.99	3.95e-34	-9.48e-202	[3, 3, 3, 3, 3, 3]	24
	Ost ₃	6	1.99	3.95e-34	-9.48e-202	[3, 3]	16
	Scho ₁	6	2.00	1.57e-34	3.76e-204	[3.49, 2.95, 2.99, 2.99, 2.99, 2.99]	18
	Scho ₂	6	2.00	3.95e-34	-9.48e-202	[3, 3, 3, 3, 3, 3]	18
	Scho ₃	6	2.00	3.95e-34	-9.48e-202	[3, 3]	14
	Trau ₁	21	1.02	5.10e-22	-5.37e-69	[..., 2.92]	42
	Trau ₂	10	2.00	3.78e-28	-7.33e-166	[1, 2, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 3, 3]	20
	Trau ₃	30	1.00	4.85e-15	-2.87e-44	[1, 2, 2]	60
	Stra ₁	5	2.43	4.61e-45	4.45e-228	[3.43, 2.98, 3.00, 2.99, 3.00]	20
	Stra ₂	6	2.00	3.95e-34	-9.48e-202	[3, 3, 3, 3, 3, 3]	24
	Stra ₃	5	2.00	9.88e-39	-2.32e-229	[3, 3]	14
known	6	1.99	3.95e-34	-9.48e-202	3	12	
Osada	Ost ₁	6	2.00	8.67e-37	6.12e-218	[3.43, 2.98, 2.99, 2.99, 2.99, 2.99]	30
	Ost ₂	4	2.99	5.05e-23	-2.47e-201	[3, 3, 3, 3]	20
	Ost ₃	4	2.99	5.05e-23	-2.47e-201	[3, 3]	16
	Scho ₁	6	2.00	1.57e-34	3.76e-204	[3.49, 2.95, 2.99, 2.99, 2.99, 2.99]	18
	Scho ₂	4	2.99	5.05e-23	-2.47e-201	[3, 3, 3, 3]	12
	Scho ₃	4	2.99	5.05e-23	-2.47e-201	[3, 3]	12
	Trau ₁	17	1.03	4.99e-21	-7.86e-67	[..., 2.91]	51
	Trau ₂	8	2.99	8.84e-30	-3.83e-262	[1, 2, 2, 2, 2, 3, 3, 3]	24
	Trau ₃	30	1	1.71e-18	-3.71e-55	[1, 2, 2]	90
	Stra ₁	4	2.36	9.39e-21	8.89e-105	[3.43, 2.99, 3.00, 2.99]	20
	Stra ₂	4	2.99	5.05e-23	-2.47e-201	[3, 3, 3, 3]	20
	Stra ₃	4	3.00	5.54e-55	-5.66e-489	[3, 3]	16
known	4	2.99	5.05e-23	-2.47e-201	3	12	
M4	Ost ₁	5	2.00	9.27e-23	1.19e-134	[3.43, 2.99, 2.99, 2.99, 2.99]	25
	Ost ₂	4	3.99	2.67e-57	2.63e-680	[3, 3, 3, 3]	20
	Ost ₃	4	3.99	2.67e-57	2.63e-680	[3, 3]	16
	Scho ₁	5	2.00	7.97e-22	8.34e-129	[3.50, 2.97, 2.99, 2.99, 2.99]	15
	Scho ₂	4	3.99	2.67e-57	2.67e-57	[3, 3, 3, 3]	12
	Scho ₃	4	3.99	2.67e-57	2.67e-57	[3, 3]	12
	Trau ₁	14	1.03	5.08e-21	-1.09e-67	[..., 2.91]	42
	Trau ₂	7	3.99	1.56e-57	-4.27e-683	[1, 2, 2, 2, 3, 3, 3]	42
	Trau ₃	25	1	7.92e-21	-5.22e-63	[1, 2, 2]	75
	Stra ₁	4	2.35	4.15e-24	-4.88e-123	[3.43, 2.99, 3.00, 2.99]	20
	Stra ₂	4	3.99	2.67e-57	-2.62e-680	[3, 3, 3, 3]	20
	Stra ₃	3	3.39	3.98e-34	-3.19e-402	[3, 3]	16
known	4	3.99	2.67e-57	-2.62e-680	3	12	

Table 8. $f_6(x) = x^5 - 8x^4 + 24x^3 - 34x^2 + 23x - 6$, $x_0 = 0.8$, $\gamma = 1$, $m = 3$

References

- [1] I. Argyros, On the convergence and application of Newton's method under weak Hölder continuity assumptions, *International Journal of Computer Mathematics*. 80 (2003), pp. 767-780.
- [2] Jose L. Hueso, E. Martínez, C. Teruel, Determination of multiple roots of nonlinear equations and applications, *Journal of Mathematical Chemistry*. 53 (2015), pp. 880-892.
- [3] W. Bi, H. Ren, Q. Wu, Convergence of the modified Halley's method for multiple zeros under Hölder continuous derivative, *Numerical Algorithms*. 58 (2011), pp. 497-512.
- [4] X. Zhou, X. Chen, Y. Song, On the convergence radius of the modified Newton method for multiple roots under the center Hölder condition, *Numerical Algorithms*, 65 (2014), pp. 221-232.
- [5] X. Zhou, Y. Song, Convergence radius of Osada's method under center-Hölder continuous condition, *Applied Mathematics and Computation*. 243 (2014), pp. 809-816.
- [6] C. Dong, A basic theorem of constructing an iterative formula of the higher order for computing multiple roots of an equation, *Mathematica Numerica Sinica*. 11 (1982), pp. 445-450.
- [7] D. Alarcón, F. Cevallos, J.L. Hueso, and E. Martínez, A Comparative Study of the Local Convergence Radius of Iterative Methods for Multiple Roots, *Modelling for Engineering and Human Behavior*. (2017), pp. 1-6.
- [8] Apostol Tom M, *One-Variable Calculus, with an introduction to Lineal Algebra*. Blaisdell Publishing Company, Waltham, Massachusetts (1967).
- [9] J. Ortega, Solution of Equations in Euclidean and Banach Spaces, *SIAM Review*. 16 (1974), pp. 564-564.
- [10] E. Schröder, Ueber unendlich viele Algorithmen zur Auflösung der Gleichungen, *Mathematische Annalen*. 16 (1870), pp. 317-365.
- [11] J.K. Traub, Iterative methods for the solution of equations, *Mathematische Annalen*.

- (1964), pp. 317-365.
- [12] M. Vander Straten, H. Van de Vel, Multiple root-finding methods, *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 40 (1992), pp. 105-114.
 - [13] Osada, N. An optimal multiple root-finding method of order three. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 51, 1 (1994), pp. 131-133.
 - [14] J.M. McNamee, A comparison of methods for accelerating convergence of Newton's method for multiple polynomial roots, *ACM SIGNUM Newsletter*. 33 (1998), pp. 17-22.

ARTICLE TYPE

A higher-order reconstruction of Chebyshev-Halley type iterative methods for multiple roots

Ramandeep Behl¹ | Eulalia Martínez² | Fabricio Cevallos³ | Diego Alarcón³

¹Department of Mathematics, King Abdulaziz University, Jeddah-21589, Saudi Arabia

²Instituto Universitario de Matemática Multidisciplinar, Universitat Politècnica de València, Valencia, España

³Fac. de Ciencias Económicas, Universidad Laica “Eloy Alfaro de Manabí”, Manabí, Ecuador

⁴Departamento de Matemática Aplicada, Universitat Politècnica de València, València, España

Correspondence

Eulalia Martínez, Instituto Universitario de Matemática Multidisciplinar, Universidad Politècnica de València, Camino de Vera s/n, 46022, Valencia, Spain. Email: eumarti@mat.upv.es

Present Address

Present address

Abstract

Construction of optimal methods for multiple roots of nonlinear scalar equation is a hard and demanding task in the area of computational mathematics and numerical analysis. This paper is written with the aim to present a straightforward and simple way of developing a new Chebyshev-Halley type iteration functions having at least six-order convergence and eighth-order convergence for particular value in the case of multiple roots, for the first time. With regard to computational cost, each member of our scheme needs four functional evaluations each step. So, the maximum efficiency index of our scheme is 1.6818. We present an extensive convergence analysis with the main theorem which clearly confirm that the consider scheme attain minimum six and maximum eighth-order convergence for different values of the free parameter. Finally, we consider some real-life situations which start from some given conditions to investigate and some well-known academic test problems for numerical experiments which establish the theoretical development.

KEYWORDS:

Nonlinear equations; multiple roots; Chebyshev-Halley type; optimal iterative methods; efficiency index.

1 | INTRODUCTION

One of the most challenging, of great significance and difficult tasks in the area of computational methods and numerical analysis is to find approximating and efficiently solutions of nonlinear equations of the form

$$f(x) = 0, \quad (1)$$

where $f : \mathbb{D} \subset \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ holomorphic function in the enclosed region \mathbb{D} , enclosing the required solution. It is almost impossible to obtain the exact solution in analytic way of such problems or we can say that it is almost fictitious. So, we have to satisfy ourselves by obtaining approximated and efficient solution up to any specific degree of accuracy by the means of iterative procedure.

For solving nonlinear equation (1) by the means of iterations, we have a well-known cubically convergent family of Chebyshev-Halley method²⁷, which is given by

$$x_{n+1} = x_n - \left[1 + \frac{1}{2} \frac{L_f(x_n)}{1 - \alpha L_f(x_n)} \right] \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad \alpha \in \mathbb{R}, \quad (2)$$

where $L_f(x_n) = \frac{f''(x_n)f(x_n)}{\{f'(x_n)\}^2}$. Some of the famous iterative methods can be reported as its particular cases. For example, the classical Chebyshev's method^{2,28}, Halley's method^{2,28} and super-Halley method^{2,28} can be obtained if $\alpha = 0$, $\alpha = \frac{1}{2}$ and $\alpha = 1$,

respectively. Despite of the third-order convergence, the scheme (2), is consider less practical from a computational point of view because it is not an easy task to find the second-order derivative of every problem.

For this reason several variants of Chebyshev-Halley's methods free from second derivative have been presented in^{31,32,33,34,35,39,40}. It has been shown that these methods are comparable to the classical third-order methods of Chebyshev-Halley's type in their performance, can also compete with Newton's method. One family of these methods is given as follows:

$$\begin{aligned} y_n &= x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\ x_{n+1} &= x_n - \left(1 + \frac{f(y_n)}{f(x_n) - \alpha f(y_n)}\right) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad \alpha \in \mathbb{R} \end{aligned} \quad (3)$$

We can easily obtain some well-known third-order methods proposed by Potra and Pták³⁴ and Sharma³⁵ (the Newton-Secant method (NSM)) for $\alpha = 0$ and $\alpha = 1$. In addition, we have Ostrowski's method¹ having optimal fourth-order convergence is also a special case for $\alpha = 2$. This family is important and interesting not only because of not using second or higher-order derivative. But, this scheme also converge at least cubically and better results in compare to the existing ones. Moreover, we have several higher-order modifications of Chebyshev-Halley methods available in the literature and some of them can be seen in^{38,37,29,30,41}.

Nowadays researchers more concerned about the multiple roots of nonlinear equations. We have some fourth-order optimal and non-optimal modifications or improvement of Newton's iteration function or Newton's like for multiple roots in the research articles^{4,5,6,7,8,9,10,11,12,13}. All these modifications require either require one-function and two first order-derivative or two-function and one first order-derivative evaluations each step. Further, we have only seven research articles^{14,15,16,17,18,19,20} till date that talk about the sixth as well as eighth-order convergence in the case of multiple roots. This discussion confirms that we don't have enough number of six or eight-order iteration function in literature which can easily able to find multiple roots. The laborious and lengthy calculation work which consume so much time are the main reason behind of this.

The construction of Chebyshev-Halley type iteration functions for multiple roots having optimal eighth-order convergence free from second or higher-order derivative is a very significant and demanding task from the computational and practical way of considering. In this direction, some attempts have been made by Sharma and Sharma²¹ to construct higher-order optimal Chebyshev-Halley type iteration functions for multiple solutions. But, they obtained a third-order multi-point Chebyshev-Halley type iteration functions which don't contain any second-order derivative. However, they did not get success in this direction. Therefore, we don't have any fourth-order multi-point and optimal family of Chebyshev-Halley iteration functions, till date.

We intend to propose an optimal multi-point eighth-order Chebyshev-Halley type iteration functions for multiple roots, for the first time. This means, we are working one more step ahead than optimal fourth-order modification. The convergence order of the present iteration functions is two and half time more than the Sharma and Sharma²¹ scheme and also optimal. Additionally, an extensive convergence analysis is presented with the main theorem which clearly show the eighth-order convergence of our scheme when multiplicity of zeros ($m \geq 1$) is known in advance. Finally, we consider some real-life situations which start from some given conditions to investigate and some standard academic test problems for numerical experiments. Our iteration functions here are found to be more comparable and effective than the existing methods for multiple roots in terms of residual errors, error among two consecutive iteration and more stable computational order of convergence.

2 | CONSTRUCTION OF HIGHER-ORDER SCHEME

In this section, we present the new Chebyshev-Halley type methods for multiple roots of nonlinear equations, for the first time. In order to construct the new scheme, we consider the following scheme:

$$\begin{aligned} y_n &= x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\ z_n &= x_n - m \left(1 + \frac{\eta}{1 - \alpha\eta}\right) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\ x_{n+1} &= z_n - H(\eta, \tau) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \end{aligned} \quad (4)$$

where the function
$$H(\eta, \tau) = \frac{\eta\tau(\beta - (\alpha - 2)^2\eta^2(\eta + 1) + \tau^3 + \tau^2)}{(\eta + 1)(\tau + 1)}$$

with
$$\eta = \left(\frac{f(y_n)}{f(x_n)}\right)^{\frac{1}{m}},$$

$$\tau = \left(\frac{f(z_n)}{f(y_n)}\right)^{\frac{1}{m}},$$

$$\beta = m((\alpha(\alpha + 2) + 9)\eta^3 + \eta^2(\alpha(\alpha + 3) - 6\tau - 3) + \eta(\alpha + 8\tau + 1) + 2\tau + 1),$$

where $\alpha \in \mathbb{R}$ is a free disposable variable. For $m = 1$, we can easily obtain the scheme (3) from the first two steps of the scheme (4).

In Theorem 1, we illustrate that the constructed scheme attain at least sixth-order of convergence and for $\alpha = 2$ it goes to eighth-order without using any extra functional evaluation. It is interesting to observe that $H(\mu, \eta)$ play a significant role in the construction of the presented scheme (for details please see Theorem 1).

Theorem 1. Let us consider $x = \xi$ be a multiple zero with multiplicity $m \geq 1$ of an analytic function $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ in the region containing the multiple zero ξ of $f(x)$. Then, the present scheme (4) attain at least sixth-order convergence for each α but for particular value of $\alpha = 2$ it reaches to optimal eighth-order convergence.

Proof. We expand the functions $f(x_n)$ and $f'(x_n)$ about $x = \xi$ with the help of Taylor’s series expansion which leads us

$$f(x_n) = \frac{f^{(m)}(\xi)}{m!} e_n^m \left(1 + c_1 e_n + c_2 e_n^2 + c_3 e_n^3 + c_4 e_n^4 + c_5 e_n^5 + c_6 e_n^6 + c_7 e_n^7 + c_8 e_n^8 + O(e_n^9)\right), \tag{5}$$

and

$$f'(x_n) = \frac{f^{(m)}(\xi)}{m!} e_n^{m-1} \left(m + (m + 1)c_1 e_n + (m + 2)c_2 e_n^2 + (m + 3)c_3 e_n^3 + (m + 4)c_4 e_n^4 + (m + 5)c_5 e_n^5 + (m + 6)c_6 e_n^6 + (m + 7)c_7 e_n^7 + (m + 8)c_8 e_n^8 + O(e_n^9)\right), \tag{6}$$

respectively, where $c_k = \frac{m!}{(m-1+k)!} \frac{f^{m-1+k}(\xi)}{f^m(\xi)}$, $k = 2, 3, 4, \dots, 8$ and $e_n = x_n - \xi$ is the error in the n th iteration.

Insert the above expressions (5) and (6) in the first substep of scheme (4), we yield

$$y_n - \xi = \frac{c_1}{m} e_n^2 + \sum_{i=0}^5 \phi_i e_n^{i+3} + O(e_n^9), \tag{7}$$

where $\phi_i = \phi_i(m, c_1, c_2, \dots, c_8)$ are given in terms of m, c_2, c_3, \dots, c_8 for example $\phi_0 = \frac{1}{m^2}(2mc_2 - (m + 1)c_1^2)$ and $\phi_1 = \frac{1}{m^3}[3m^2c_3 + (m + 1)^2c_1^3 - m(3m + 4)c_1c_2]$, etc.

Using the Taylor Series expansion and the expression (7), we have

$$f(y_n) = f^{(m)}(\xi) e_n^{2m} \left[\frac{\left(\frac{c_1}{m}\right)^m}{m!} + \frac{(2mc_2 - (m + 1)c_1^2) \left(\frac{c_1}{m}\right)^m}{m!c_1} e_n + \left(\frac{c_1}{m}\right)^{1+m} \frac{1}{2m!c_1^3} \{(3 + 3m + 3m^2 + m^3)c_1^4 - 2m(2 + 3m + 2m^2)c_1^2c_2 + 4(m - 1)m^2c_2^2 + 6m^2c_1c_3\} e_n^2 + \sum_{i=0}^5 \bar{\phi}_i e_n^{i+3} + O(e_n^9) \right]. \tag{8}$$

We obtain the following expression by using (5) and (8)

$$\eta = \frac{c_1 e_n}{m} + \frac{2mc_2 - (m + 2)c_1^2}{m^2} e_n^2 + \theta_0 e_n^3 + \theta_1 e_n^4 + \theta_2 e_n^5 + O(e_n^6), \tag{9}$$

where $\theta_0 = \frac{(2m^2+7m+7)c_1^3+6m^2c_3-2m(3m+7)c_1c_2}{2m^3}$, $\theta_1 = -\frac{1}{6m^4} [12m^2(2m+5)c_1c_3 + 12m^2((m+3)c_2^2 - 2mc_4) - 6m(4m^2 + 16m + 17)c_1^2c_2 + (6m^3 + 29m^2 + 51m + 34)c_1^4]$ and $\theta_2 = \frac{1}{24m^5} [12m^2(10m^2 + 43m + 49)c_1^2c_3 - 24m^3((5m + 17)c_2c_3 - 5mc_5) + 12m^2((10m^2 + 47m + 53)c_2^2 - 2m(5m + 13)c_4)c_1 - 4m(30m^3 + 163m^2 + 306m + 209)c_1^3c_2 + (24m^4 + 146m^3 + 355m^2 + 418m + 209)c_1^5]$.

With the help of expressions (5)–(9), we obtain

$$z_n - \xi = -\frac{(\alpha - 2)c_1^2}{m^2}e_n^3 + \sum_{i=0}^4 \psi_i e_n^{i+4} + O(e_n^9), \quad (10)$$

where $\psi_i = \psi_i(\alpha, m, c_1, c_2, \dots, c_8)$ are given in terms of $\alpha, m, c_1, c_2, c_3, \dots, c_8$ with the first two coefficients explicitly written as $\psi_0 = -\frac{1}{2m^3} \left[(2\alpha^2 - 10\alpha + (7 - 4\alpha)m + 11)c_1^3 + 2m(4\alpha - 7)c_1c_2 \right]$ and $\psi_1 = \frac{1}{6m^4} \left[(-6\alpha^3 + 42\alpha^2 - 96\alpha + (29 - 18\alpha)m^2 + 6(3\alpha^2 - 14\alpha + 14)m + 67)c_1^4 + 12m^2(5 - 3\alpha)c_1c_3 + 12m^2(3 - 2\alpha)c_2^2 + 12m(-3\alpha^2 + 14\alpha + (5\alpha - 8)m - 14)c_1^2c_2 \right]$.

By using the Taylor series expansion and (10), we have

$$f(z_n) = f^{(m)}(\xi)e_n^{3m} \left[\frac{\left(-\frac{(\alpha-2)c_1^2}{m^2} \right)^m}{m!} + \sum_{i=1}^5 \bar{\psi}_i e_n^i + O(e_n^6) \right]. \quad (11)$$

From expressions (8) and (11), we further have

$$\tau = -\frac{(\alpha - 2)c_1}{m}e_n + \frac{\left((-2\alpha^2 + 8\alpha + (2\alpha - 3)m - 7)c_1^2 + 2m(3 - 2\alpha)c_2 \right)}{2m^2}e_n^2 + \gamma_1 e_n^3 + \gamma_2 e_n^4 + O(e_n^5), \quad (12)$$

where $\gamma_1 = \frac{1}{3m^3} \left[(-3\alpha^3 + 18\alpha^2 - 30\alpha + (4 - 3\alpha)m^2 + 3(2\alpha^2 - 7\alpha + 5)m + 11)c_1^3 + 3m^2(4 - 3\alpha)c_3 + 3m(-4\alpha^2 + 14\alpha + 3\alpha m - 4m - 10)c_1c_2 \right]$ and $\gamma_2 = \frac{1}{24m^4} \left[24m^2(-6\alpha^2 + 20\alpha + (4\alpha - 5)m - 14)c_1c_3 + 12m^2((-8\alpha^2 + 24\alpha + 4\alpha m - 5m - 13)c_2^2 + 2m(5 - 4\alpha)c_4) - 12m(12\alpha^3 - 66\alpha^2 + 100\alpha + 2(4\alpha - 5)m^2 + (-20\alpha^2 + 64\alpha - 41)m - 33)c_1^2c_2 + (-24\alpha^4 + 192\alpha^3 - 492\alpha^2 + 392\alpha + 6(4\alpha - 5)m^3 + (-72\alpha^2 + 232\alpha - 151)m^2 + 6(12\alpha^3 - 66\alpha^2 + 100\alpha - 33)m + 19)c_1^4 \right]$.

By using expressions (9) and (12), we obtain

$$H(\eta, \tau) = -\frac{(\alpha - 2)c_1^2}{m^2}e_n^2 + \lambda_1 e_n^3 + \lambda_2 e_n^4 + O(e_n^5) \quad (13)$$

where $\lambda_1 = \frac{c_1}{2m^3} \left[c_1^2(-2\alpha^2 + 8\alpha + (4\alpha - 7)m - 7) + 2(7 - 4\alpha)c_2m \right]$ and $\lambda_2 = \frac{1}{6m^3} \left[c_1^4(-6\alpha^3 + 36\alpha^2 - 66\alpha + (29 - 18\alpha)m^2 + 3(6\alpha^2 - 22\alpha + 17)m + 34) + 12(5 - 3\alpha)c_3c_1m^2 + 12(3 - 2\alpha)c_2^2m^2 + 6c_2c_1^2m(-6\alpha^2 + 22\alpha + 2(5\alpha - 8)m - 17) \right]$.

Now, we use the expressions (5) – (13) in the last substep of scheme (4), we get

$$e_{n+1} = \sum_{i=1}^3 L_i e_n^{i+5} + O(e_n^9), \quad (14)$$

where $L_i = L_i(\alpha, m, c_1, c_2, \dots, c_8)$, and $L_1 = \frac{(\alpha-2)^2c_1^3(c_1^2(\alpha^2-\alpha+m^2-(\alpha^2+4\alpha-17)m-3)-2c_2(m-1)m)}{m^6}$, etc.

It is noteworthy that we reached at least six-order convergence for all α . In addition, we can easily obtain $L_1 = L_2 = 0$ by using $\alpha = 2$.

Now, by adopting $\alpha = 2$ in expression (14), we obtain

$$e_{n+1} = \frac{A_0(12c_3c_1m^3 - 12c_2c_1^2m(3m^2 + 30m - 1) + 12c_2^2m^2(2m - 1) + c_1^4(10m^3 + 183m^2 + 650m - 3))}{24m^8}e_n^8 + O(e_n^9), \quad (15)$$

where $A_0 = (c_1^3(m + 1) - 2c_1c_2m)$. The above expression (15) demonstrate that our proposed scheme (4) reaches eighth-order convergence for $\alpha = 2$ by using only four functional evaluations per full iteration. Hence, it is an optimal scheme for particular value of $\alpha = 2$ according to Kung-Traub conjecture, completing the proof. \square

3 | NUMERICAL EXPERIMENTS

In this section, we illustrate the efficiency and convergence behavior of our iteration functions for particular values $\alpha = 0$, $\alpha = 1$, $\alpha = 1.9$ and $\alpha = 2$ in expression (4), called by *OM1*, *OM2*, *OM3* and *OM4*, respectively. In this regards, we choose five real problems having multiple and simple zeros. The details are outline in the examples (1)–(3).

For better comparison of our iterative methods, we consider several existing methods of order six and optimal eight order. Firstly, we compare our methods with two-point family of sixth-order methods proposed by Geum et al. in¹⁵, out of them we

pick the case 4c, which is mentioned as follows:

$$\begin{aligned}
 y_n &= x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad m > 1, \\
 x_{n+1} &= y_n - \left[\frac{m + a_1 u_n}{1 + b_1 u_n + b_2 u_n^2} \times \frac{1}{1 + c_1 s_n} \right] \frac{f(y_n)}{f'(y_n)},
 \end{aligned} \tag{16}$$

where

$$\begin{aligned}
 a_1 &= \frac{2m(4m^4 - 16m^3 + 31m^2 - 30m + 13)}{(m-1)(4m^2 - 8m + 7)}, & b_1 &= \frac{4(2m^2 - 4m + 3)}{(m-1)(4m^2 - 8m + 7)} \\
 b_2 &= -\frac{4m^2 - 8m + 3}{4m^2 - 8m + 7}, & c_1 &= 2(m-1) \\
 u_n &= \left(\frac{f(y_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}, & s_n &= \left(\frac{f'(y_n)}{f'(x_n)} \right)^{\frac{1}{m-1}}
 \end{aligned}$$

called *GM1*.

In addition, we also compare them with one more non optimal family of sixth-order iteration functions given by the same authors Geum et al.¹⁶, out of them we choose the case 5YD, which is given by

$$\begin{aligned}
 y_n &= x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \quad m \geq 1, \\
 w_n &= x_n - m \left[\frac{(u_n - 2)(2u_n - 1)}{(u_n - 1)(5u_n - 2)} \right] \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\
 x_{n+1} &= x_n - m \left[\frac{(u_n - 2)(2u_n - 1)}{(5u_n - 2)(u_n + v_n - 1)} \right] \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},
 \end{aligned} \tag{17}$$

denoted by *GM2*.

Where $u_n = \left(\frac{f(y_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$ and $v_n = \left(\frac{f(w_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$

Moreover, we compare our methods with optimal eighth-order iterative methods proposed by Zafar et al.¹⁸. We choose the following two schemes out of them

$$\begin{aligned}
 y_n &= x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\
 w_n &= y_n - mu_n(6u_n^3 - u_n^2 + 2u_n + 1) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\
 x_{n+1} &= w_n - mu_n v_n (1 + 2u_n)(1 + v_n) \left(\frac{2w_n + 1}{A_2 P_0} \right) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}
 \end{aligned} \tag{18}$$

and

$$\begin{aligned}
 y_n &= x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\
 w_n &= y_n - mu_n \left(\frac{1 - 5u_n^2 + 8u_n^3}{1 - 2u_n} \right) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\
 x_{n+1} &= w_n - mu_n v_n (1 + 2u_n)(1 + v_n) \left(\frac{3w_n + 1}{A_2 P_0 (1 + w_n)} \right) \frac{f(x_n)}{f'(x_n)},
 \end{aligned} \tag{19}$$

where $u_n = \left(\frac{f(y_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$, $v_n = \left(\frac{f(w_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$, $w_n = \left(\frac{f(w_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$, are known as *ZM1* and *ZM2*, respectively.

Finally, we demonstrate comparison of them with another optimal eighth-order iteration functions given by Behl et al.¹⁹. However, we consider the following best schemes (which was claimed by them):

$$\begin{aligned} y_n &= x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\ z_n &= y_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} h_n (1 + 2h_n), \\ x_{n+1} &= z_n + m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \frac{t_n h_n}{1 - t_n} \left[-1 - 2h_n - h_n^2 + 4h_n^3 - 2k_n \right] \end{aligned} \quad (20)$$

and

$$\begin{aligned} y_n &= x_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \\ z_n &= y_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} h_n (1 + 2h_n), \\ x_{n+1} &= z_n - m \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \frac{t_n h_n}{1 - t_n} \left[\frac{1 + 9h_n^2 + 2k_n + h_n(6 + 8k_n)}{1 + 4h_n} \right], \end{aligned} \quad (21)$$

with $h_n = \left(\frac{f(y_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$, $k_n = \left(\frac{f(z_n)}{f(x_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$, $t_n = \left(\frac{f(z_n)}{f(y_n)} \right)^{\frac{1}{m}}$ are called by *BM1* and *BM2*, respectively.

In tables 1 - 2, we display the difference between two iterations $|x_{n+1} - x_n|$, the residual error in the corresponding function $f(|x_n|)$ and computational order of convergence (ρ) (we used the formula given by Cordero and Torregrosa⁴² in order to calculate ρ). We make our calculations with several number of significant digits (minimum 3000 significant digits) to minimize the round off error.

As we mentioned in the above paragraph we calculate the values of all the constants and functional residuals up to several number of significant digits. However, due to the limited paper space, we display the difference between two consecutive iterations $|x_{n+1} - x_n|$ and residual errors $f(|x_n|)$ up to 2 significant digits with exponent power which are mentioned in Table 1 and 2. Moreover, computational order of convergence is provided up to 5 significant digits. Finally, we displayed the initial guess and approximated zeros up to 25 significant digits in the corresponding example where exact solution is not available.

All computations have been performed using the programming package *Mathematica* 11 with multiple precision arithmetic. Further, the meaning of $a(\pm b)$ is shorthand for $a \times 10^{(\pm b)}$ in the following Table 1 and 2.

Example 1. Population growth problem:

Law of population growth is defined as follows:

$$\frac{dN(t)}{dt} = \gamma N(t) + \eta,$$

where $N(t)$ = population at time t , η = fixed/constant immigration rate and γ = fixed/constant birth rate of population. We can easily obtain the following solution of the above differential equation

$$N(t) = N_0 e^{\gamma t} + \frac{\eta}{\gamma} (e^{\gamma t} - 1),$$

where N_0 is initial population.

For a particular case study, the problem is given as: Suppose a certain population contains 1000000 individuals initially, that 300000 individuals immigrate into the community in the first year and that 1365000 individuals are present at the end of one year. Find birth rate (γ) of this population.

To determine the birth rate, we must solve the equation

$$f_1(x) = 1365 - 1000e^x - \frac{300}{x}(e^x - 1). \quad (22)$$

wherein $x = \gamma$ and our desired zero of the above function f_1 is 0.05504622451335177827483421. The reason of considering the simple zero problem is to confirm that our methods also work for simple zeros. We choose the starting point as $x_0 = 0.5$

Example 2. Van der Waals equation of state:

$$\left(P + \frac{a_1 n^2}{V^2} \right) (V - na_2) = nRT,$$

explains the behavior of a real gas by introducing in the ideal gas equations two parameters, a_1 and a_2 , specific for each gas. The determination of the volume V of the gas in terms of the remaining parameters requires the solution of a nonlinear equation in V ,

$$PV^3 - (na_2P + nRT)V^2 + a_1n^2V - a_1a_2n^2 = 0.$$

Given the constants a_1 and a_2 of a particular gas, one can find values for n , P and T , such that this equation has three simple roots. By using the particular values, we obtain the following nonlinear function

$$f_2(x) = x^3 - 5.22x^2 + 9.0825x - 5.2675. \tag{23}$$

which has three zeros and out of them one is the multiple zero $\alpha = 1.75$ of multiplicity 2, and the other is the simple zero $\alpha = 1.72$. Our desired root is $\alpha = 1.75$ and chose $x_0 = 1.8$ as initial guess.

Example 3. Eigen value problem:

For this we choose the following 8×8 matrix

$$A = \begin{bmatrix} -12 & -12 & 36 & -12 & 0 & 0 & 12 & 8 \\ 148 & 129 & -397 & 147 & -12 & 6 & -109 & -74 \\ 72 & 62 & -186 & 66 & -8 & 4 & -54 & -36 \\ -32 & -24 & 88 & -36 & 0 & 0 & 24 & 16 \\ 20 & 13 & -45 & 19 & 8 & 6 & -13 & -10 \\ 120 & 98 & -330 & 134 & -8 & 24 & -90 & -60 \\ -132 & -109 & 333 & -115 & 12 & -6 & 105 & 66 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}.$$

The corresponding characteristic polynomial of this matrix is as follows:

$$f_3(x) = (x - 4)^3(x + 4)(x - 8)(x - 20)(x - 12)(x + 12).$$

The above function has one multiple zero at $\alpha = 4$ of multiplicity three. In addition, we consider $x_0 = 2.7$ as starting point.

Example 4. Let us consider the following polynomial equation

$$f_4(z) = ((x - 1)^3 - 1)^{50}. \tag{24}$$

The desired zero of the above function f_4 is $\alpha = 2$ with multiplicity of order 50 and we choose initial guess $x_0 = 2.1$ for this problem.

4 | CONCLUSION

We are the first to present an eighth-order modification of Chebyshev-Halley type iteration scheme having optimal convergence for obtaining the multiple solutions of scalar equation, according to our best knowledge. In addition, we also solve the problem where Sharma and Sharma²¹ struggled to obtain higher-order of convergence for Chebyshev-Halley type iteration function for long time. The proposed scheme is optimal in the sense of the classical Kung-Traub conjecture. The computational efficiency index is defined as $E = p^{1/\theta}$, where p is the order of convergence and θ is the number of functional evaluations per iteration. Thus, the efficiency index of the present methods is $E = \sqrt[4]{8} \approx 1.682$ which is better than the classical Newton’s method $E = \sqrt[3]{2} \approx 1.414$. Moreover, we can easily obtain the scheme (3) from the first two steps of our scheme (4). Lower residual errors, lower error among two consecutive iteration and more stable computational order of convergence belongs to our methods when we compared them to the existing ones of identical order of convergence. Finally, on accounts of the results obtained, it can be concluded that our proposed methods are highly efficient and perform better than the existing methods.

References

1. A.M. Ostrowski, Solutions of equations and system of equations, Academic press, New York.
2. J.F. Traub, Iterative methods for the solution of equations, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1964.

3. M.S. Petković, B. Neta, L. D. Petković, and J. Džunić, *Multipoint methods for solving nonlinear equations*, Academic Press, 2012.
4. B. Neta, Extension of Murakami's high-order non-linear solver to multiple roots, *Int. J. Comput. Math.* 87(5), (2010) 1023-1031.
5. S.G. Li, L.Z. Cheng, B. Neta, Some fourth-order nonlinear solvers with closed formulae for multiple roots, *Comput. Math. Appl.* 59, (2010) 126-135.
6. X. Zhou, X. Chen, Y. Song, Constructing higher-order methods for obtaining the multiple roots of nonlinear equations, *J. Comput. Math. Appl.* 235, (2011) 4199-4206.
7. M. Sharifi, D.K.R. Babajee, F. Soleymani, Finding the solution of nonlinear equations by a class of optimal methods, *Comput. Math. Appl.* 63, (2012) 764-774.
8. F. Soleymani, D.K.R. Babajee, Computing multiple zeros using a class of quartically convergent methods, *Alex. Eng. J.* 52, (2013) 531-541.
9. F. Soleymani, D.K.R. Babajee, T. Lofti, On a numerical technique for finding multiple zeros and its dynamic, *J. Egypt. Math. Soc.* 21, (2013) 346-353.
10. X. Zhou, X. Chen, Y. Song, Families of third and fourth order methods for multiple roots of nonlinear equations, *Appl. Math. Comput.* 219, (2013) 6030-6038.
11. J.L. Hueso, E. Martinez, C. Teruel, Determination of multiple roots of nonlinear equations and applications, *J. Math. Chem.* 53, (2015) 880-892.
12. R. Behl, A. Cordero, S.S. Motsa, J.R. Torregrosa, On developing fourth-order optimal families of methods for multiple roots and their dynamics, *Appl. Math. Comput.* 265, (2015) 520-532.
13. R. Behl, A. Cordero, S.S. Motsa, J.R. Torregrosa, V. Kanwar, An optimal fourth-order family of methods for multiple roots and its dynamics, *Numer. Algor.* 71 (4), (2016) 775-796.
14. R. Thukral, Introduction to higher-order iterative methods for finding multiple roots of nonlinear equations, *J. Math.* 2013, Article ID 404635, 3 pages, <http://dx.doi.org/10.1155/2013/404635> (2013)
15. Y.H. Geum, Y.I. Kim, B. Neta, A class of two-point sixth-order multiple-zero finders of modified double-Newton type and their dynamics, *Appl. Math. Comput.* 270, (2015) 387-400.
16. Y.H. Geum, Y.I. Kim, B. Neta, A sixth-order family of three-point modified Newton-like multiple-root finders and the dynamics behind their extraneous fixed points, *Appl. Math. Comput.* 283, (2016) 120-140.
17. R. Behl, A. Cordero, S. S. Motsa, J. R. Torregrosa, An eighth-order family of optimal multiple root finders and its dynamics, *Numer. Algor.*, DOI 10.1007/s11075-017-0361-6.
18. F. Zafar, A. Cordero, S. S. Motsa, J. R. Torregrosa, Optimal iterative methods for finding multiple roots of nonlinear equations using free parameters, *J. Math. Chem.*, DOI 10.1007/s10910-017-0813-1.
19. R. Behl, A.S. Alshomrani, S. S. Motsa, An optimal scheme for multiple roots of nonlinear equations with eighth-order convergence, accepted in *Journal of Mathematical Chemistry*.
20. R. Behl, F. Zafar, A.S. Alshomrani, M. Junjuaz, N. Yasmin, An optimal eighth-order scheme for multiple zeros of univariate functions, accepted in *International Journal of Computational Methods*.
21. J.R. Sharma, R. Sharma, Modified Chebyshev-Halley type method and its variants for computing multiple roots, *Numer. Algor.* 61 (2012) 567-578.
22. A.V. Rangan, D. Cai, L. Tao, Numerical methods for solving moment equations in kinetic theory of neuronal network dynamics, *J. Comput. Phys.* 221 (2) (2007) 781-798.

23. A. Nejat, C. Ollivier-Gooch, Effect of discretization order on preconditioning and convergence of a higher-order Unstructured Newton-GMRES solver for the Euler equations, *J. Comput. Phys.* 227(4) (2008) 2366-2386.
24. G.V. Balaji, J.D. Seader, Application of interval Newton's method to chemical engineering problems, *Reliable Computing* 1 (3) (1995) 215-223.
25. M. Shacham, Numerical solution of constrained nonlinear algebraic equations, *Int. J. Numer. Method Eng.* 23 (1986) 1455-1481.
26. M. Shacham, E. Kehat, Converging interval methods for the iterative solution of nonlinear equations, *Chem. Engg. Sci.* 28 (1973), 2187-2193.
27. J.M. Gutiérrez, M.A. Hernández, A family of Chebyshev-Halley type methods in Banach spaces, *Bull. Aust. Math. Soc.* 55 (1997) 113-130.
28. V. Kanwar, Sukjit Singh, S. Bakshi, Simple geometric constructions of quadratically and cubically convergent iterative functions to solve nonlinear equations, *Numer. Algor.* vol. 47 (2008), 95-107.
29. D. Li, P. Liu, J. Kou, An improvement of Chebyshev-Halley methods free from second derivative, *Appl. Math. Comput.* 235 (2014) 221-225.
30. J.R. Sharma, Improved Chebyshev-Halley methods with sixth and eighth order convergence, *Appl. Math. Comput.* 256 (2015) 119-124.
31. J.A. Ezquerro, M.A. Hernández, On Halley-type iterations with free second derivative, *J. Comput. Appl. Math.* 170 (2004) 455-459.
32. J. Kou, Y. Li, Modified Chebyshev's method free from second derivative for non-linear equations, *Appl. Math. Comput.* 187 (2007) 1027-1032.
33. C. Chun, Some second derivative free variants of Chebyshev-Halley methods, *Appl. Math. Comput.* 191 (2007) 410-414.
34. F.A. Potra, V. Pták, Nondiscrete induction and iterative processes, *Research Notes in Mathematics*, vol. 103, Pitman, Boston, 1984.
35. J.R. Sharma, A composite third order Newton-Steffensen method for solving nonlinear equations, *Appl. Math. Comput.* 169 (2005) 242-246.
36. J. Kou, On Chebyshev-Halley methods with sixth-order convergence for solving non-linear equations, *Appl. Math. Comput.* 190(1) (2007) 126-131.
37. J. Kou, Y. Li, Modified Chebishev-Halley method with sixth-order convergence, *Appl. Math. Comput.* 188(1) (2007) 681-685.
38. S. Amat, M.A. Hernández, N. Romero, A modified Chebyshev's iterative method with at least sixth order of convergence, *Appl. Math. Comput.* 206(1) (2008) 164-174.
39. I.K. Argyros, J.A. Ezquerro, J.M. Gutiérrez, M.A. Hernández, S. Hilout, On the semilocal convergence of efficient Chebyshev-Secant-type methods, *J. Comput. Appl. Math.* 235 (2011) 3195-3206.
40. Z. Xiaojian, Modified Chebyshev-Halley methods free from second derivative, *Appl. Math. Comput.* 203(2) (2008) 824-827.
41. Y.I. Kim, R. Behl, S.S.Motsa, Higher-order efficient class of Chebyshev-Halley type methods, *Appl. Math. Comput.* 273(2016)1148-1159.
42. A. Cordero, J.R.Torregrosa, Variants of Newton's method using fifth-order quadrature formulas, *Appl. Math. Comput.* 190 (1), 686-698 (2007)
43. G.V. Balaji, J.D. Seader, Application of interval Newton's method to chemical engineering problems, *Rel. Comput.* 1 (3) (1995), 215-223.
44. M. Shacham, An improved memory method for the solution of a nonlinear equation, *Chem. Eng. Sci.* 44 (7) (1989), 1495-1501.

5 | TABLES

TABLE 1 Comparison on the basis of difference between of two consecutive iterations $|x_{n+1} - x_n|$ for the functions $f_1 - f_4$

f	n	OM1	OM2	OM3	OM4	GM1	GM2	ZM1	ZM2	BM1	BM2
f_1	1	2.3(-3)	8.4(-4)	9.3(-5)	3.5(-5)	*	3.6(-5)	1.6(-4)	2.3(-4)	7.6(-5)	3.7(-5)
	2	2.0(-16)	9.0(-20)	8.8(-28)	2.0(-37)	*	1.4(-29)	4.2(-31)	8.9(-30)	2.6(-34)	5.0(-37)
	3	9.7(-95)	1.3(-115)	6.4(-166)	2.5(-295)	*	5.4(-173)	1.0(-243)	5.5(-233)	5.4(-270)	5.7(-292)
	ρ	5.9997	6.0000	6.0001	8.0000	*	6.0000	8.0000	8.0000	8.0000	8.0000
f_2	1	1.3(-3)	8.2(-4)	4.0(-3)	3.5(-4)	9.5(-4)	3.9(-4)	3.9(-4)	4.1(-3)	2.7(-4)	2.6(-4)
	2	2.5(-10)	4.2(-12)	6.4(-16)	8.7(-18)	2.7(-11)	1.0(-14)	5.2(-17)	9.8(-17)	1.1(-18)	1.4(-19)
	3	2.0(-50)	8.7(-62)	6.5(-87)	1.5(-126)	2.0(-56)	3.9(-78)	5.9(-120)	1.2(-117)	6.3(-134)	1.0(-141)
	ρ	5.9757	5.9928	6.0214	7.9963	5.9836	5.9975	7.9945	7.9941	7.9971	8.0026
f_3	1	9.1(-5)	3.6(-5)	8.0(-6)	6.0(-6)	8.5(-5)	4.8(-5)	4.9(-6)	5.2(-6)	2.0(-6)	18.(-6)
	2	1.8(-28)	1.4(-31)	9.8(-38)	2.0(-47)	1.0(-28)	5.0(-31)	6.0(-48)	1.0(-47)	1.5(-51)	2.8(-52)
	3	1.2(-170)	4.4(-190)	3.3(-229)	2.5(-379)	3.1(-172)	5.8(-187)	2.7(-383)	2.3(-381)	1.4(-412)	1.3(-418)
	ρ	6.0000	6.0000	6.0000	8.0000	6.0000	6.0000	8.0000	8.0000	8.0000	8.0000
f_4	1	2.4(-5)	7.1(-6)	4.2(-7)	1.4(-7)	1.8(-5)	2.0(-7)	4.8(-7)	6.5(-7)	1.9(-7)	6.3(-8)
	2	1.5(-26)	1.7(-30)	3.9(-40)	6.7(-54)	1.1(-26)	1.8(-41)	5.7(-49)	8.4(-48)	8.0(-53)	4.2(-57)
	3	7.5(-154)	3.2(-178)	2.6(-438)	1.7(-424)	6.6(-154)	1.0(-245)	2.2(-384)	6.6(-375)	9.6(-416)	5.9(-169)
	ρ	6.0000	6.0000	6.0000	8.0000	6.0000	6.0000	8.0000	8.0000	8.0000	8.0000

(*: means that the corresponding method does not work.)

TABLE 2 Comparison on the basis of residual errors $|f(x_n)|$ for the functions $f_1 - f_4$

f	n	OM1	OM2	OM3	OM4	GM1	GM2	ZM1	ZM2	BM1	BM2
f_1	1	2.7	1.0	1.1(-1)	4.2(-2)	*	4.4(-2)	1.9(-1)	2.7(-1)	9.2(-2)	4.4(-2)
	2	2.4(-13)	1.1(-16)	1.1(-24)	2.4(-34)	*	1.7(-26)	5.1(-28)	1.1(-26)	3.2(-31)	6.0(-34)
	3	1.2(-91)	1.6(-112)	7.8(-163)	3.0(292)	*	5.4(-173)	1.2(-240)	6.7(-230)	6.5(-267)	7.0(-289)
f_2	1	5.0(-8)	2.1(-8)	4.8(-9)	3.6(-9)	2.8(-8)	4.6(-9)	4.6(-9)	5.1(-9)	2.3(-9)	2.0(-9)
	2	1.8(-21)	5.3(-25)	1.2(-32)	2.3(-36)	2.2(-23)	3.2(-30)	8.0(-35)	2.9(-34)	3.4(-38)	5.9(-40)
	3	1.2(-101)	2.2(-124)	1.3(-174)	6.9(-254)	1.2(-113)	4.6(-157)	1.1(-240)	4.3(-236)	1.2(-268)	3.1(-284)
f_3	1	4.9(-8)	3.1(-9)	3.1(-11)	1.4(-11)	4.1(-8)	7.4(-9)	7.8(-12)	9.1(-12)	5.2(-13)	3.6(-13)
	2	3.9(-79)	1.8(-88)	6.1(-107)	4.9(-136)	7.1(-80)	8.0(-87)	1.4(-137)	6.9(-137)	2.1(-148)	1.5(-150)
	3	1.0(-505)	5.6(-564)	2.4(-681)	1.1(1131)	1.9(-510)	1.2(-554)	1.3(-1143)	7.5(-1138)	1.9(-1231)	1.3(-1249)
f_4	1	1.2(-207)	2.7(-234)	1.1(-295)	3.3(-319)	3.5(-214)	1.0(-311)	6.6(-293)	2.3(-286)	1.8(-313)	6.2(-337)
	2	1.9(-1268)	2.6(-1465)	3.8(-1947)	1.6(-2635)	1.9(-1274)	9.8(-2014)	3.4(-2389)	9.4(-2331)	9.8(-2582)	1.1(-2795)
	3	4.2(-7633)	2.3(-8851)	7.5(-11856)	6.1(-21166)	6.0(-7636)	7.3(-12226)	1.6(-19159)	7.1(-18686)	8.8(-20728)	3.4(-8388)



ON THE VAN DER WAALS GAS, CONTACT GEOMETRY AND THE TODA CHAIN

D. Alarcón^a, P. Fernández de Córdoba^b, J.M. Isidro^c and C. Orea^d

Instituto Universitario de Matemática Pura y Aplicada,

Universidad Politécnica de Valencia, Valencia 46022, Spain

^adiealcor@doctor.upv.es, ^bpfernandez@mat.upv.es,

^cjoissan@mat.upv.es, ^dcarorhue@etsii.upv.es

Abstract A Toda-chain symmetry is shown to underlie the van der Waals gas and its close cousin, the ideal gas. Links to contact geometry are explored.

1 Introduction

The contact geometry of the classical van der Waals gas [4] is described geometrically using a 5-dimensional contact manifold \mathcal{M} [1] that can be endowed with the local coordinates U (internal energy), S (entropy), V (volume), T (temperature) and p (pressure). This description corresponds to a choice of the fundamental equation, in the energy representation, in which U depends on the two extensive variables S and V . One defines the corresponding momenta $T = \partial U / \partial S$ and $-p = \partial U / \partial V$. Then the standard contact form on \mathcal{M} reads [2, 6]

$$\alpha = dU + TdS - pdV. \quad (1)$$

One can introduce Poisson brackets on the 4-dimensional Poisson manifold \mathcal{P} (a submanifold of \mathcal{M}) spanned by the coordinates S, V and their conjugate variables $T, -p$, the nonvanishing brackets being

$$\{S, T\} = 1, \quad \{V, -p\} = 1. \quad (2)$$

Given now an equation of state

$$f(p, T, \dots) = 0, \quad (3)$$

one can make the replacements $T = \partial U / \partial S$, $-p = \partial U / \partial V$ in order to obtain

$$f\left(-\frac{\partial U}{\partial V}, \frac{\partial U}{\partial S}, \dots\right) = 0. \quad (4)$$

In ref. [5] we have called Eq. (4) a *partial differential equation of state (PDE of state for short)*. It plays a role analogous to that played by the Hamilton–Jacobi equation in classical mechanics [1, 8, 9]. With respect to the latter, however, there is one fundamental difference. While in mechanics the Hamilton–Jacobi equation is just one equation (regardless of the number of degrees of freedom), in thermodynamics we have one PDE of state per degree of freedom, because the defining equation of each momentum qualifies as an equation of state.

2 The PDE's of state of the van der Waals gas

Let us consider one mole of particles of van der Waals gas (*i.e.*, Avogadro's number N of particles). The fundamental equation in the energy representation $U = U(S, V)$ reads [4]

$$U(S, V) = U_0 \left(\frac{V_0}{V-b} \right)^{2/3} \exp \left(\frac{2S}{3Nk_B} \right) - \frac{a}{V}, \quad (5)$$

with U_0, V_0 certain fiducial values; setting $a = 0$ and $b = 0$ one recovers the ideal gas. The variables T and $-p$, conjugate to S and V , are

$$T = \frac{\partial U}{\partial S} = U_0 \left(\frac{V_0}{V-b} \right)^{2/3} \exp \left(\frac{2S}{3Nk_B} \right) \frac{2}{3Nk_B} \quad (6)$$

and

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V} = \frac{2}{3} U_0 \exp \left(\frac{2S}{3Nk_B} \right) \frac{V_0^{2/3}}{(V-b)^{5/3}} - \frac{a}{V^2}. \quad (7)$$

Eqs. (6) and (7) lead to the van der Waals equation of state

$$\left(p + \frac{a}{V^2} \right) (V-b) = Nk_B T \quad (8)$$

and the equipartition theorem:

$$U(T, V) = \frac{3}{2} Nk_B T - \frac{a}{V}. \quad (9)$$

The first PDE of state follows from Eq. (8),

$$\left(\frac{\partial U}{\partial V} - \frac{a}{V^2} \right) (V-b) + Nk_B \frac{\partial U}{\partial S} = 0, \quad (10)$$

while from Eq. (9) we obtain the second PDE of state:

$$U - \frac{3}{2} Nk_B \frac{\partial U}{\partial S} + \frac{a}{V} = 0. \quad (11)$$

When $a = 0$ and $b = 0$, the system (10) and (11) correctly reduces to the corresponding system of PDE's for the ideal gas, obtained in ref. [5]. One readily verifies that integration of the system (10), (11) leads back to the fundamental equation (5) we started off with.

3 Relation to the Toda chain

Although well studied in the literature [11, 12, 13], for the benefit of the reader we very briefly summarise the essentials of Toda lattices needed for our purposes here. The Toda chain is a model for a nonharmonic lattice describing the motion of a chain of particles subject to nearest-neighbour interactions. The statement that interactions

are restricted to nearest neighbours translates into an equation of motion for the n -th particle

$$m_n \ddot{x}_n(t) = \nabla V(x_{n+1}(t) - x_n(t)) - \nabla V(x_n(t) - x_{n-1}(t)), \quad (12)$$

where $x_n(t)$ is its displacement from equilibrium, and V is a certain potential function. Toda assumes the latter to be given by the exponential of the relative displacements:

$$V = \exp(-(x_n - x_{n-1})). \quad (13)$$

Although the resulting model turns out to exhibit many interesting properties, integrability being one of them, the succinct summary just given is all we will need for our purposes.

Returning now to our problem, a succession of changes of variables in configuration space \mathcal{C} (the submanifold of \mathcal{M} spanned by the extensive coordinates S, V) will relate the fundamental equation (5) for the van der Waals gas to the potential energy of the Toda chain. We define the new variables S', V'

$$S' := S, \quad V' := V - b, \quad (14)$$

and s, v

$$s := \frac{S'}{Nk_B}, \quad v := \ln\left(\frac{V'}{V_0}\right), \quad (15)$$

in terms of which the fundamental equation (5) reads

$$U(s, v) = U_0 \exp\left[\frac{2(s-v)}{3}\right] - \frac{a}{V_0 e^v + b}. \quad (16)$$

The transformations (14) and (15) are both diffeomorphisms: they can be inverted, regardless of the values of the van der Waals parameters a, b . However the final change of variables

$$x := s - v, \quad U_0 \exp\left(\frac{2y}{3}\right) := \frac{a}{V_0 e^v + b} \quad (17)$$

becomes singular when $a = 0$. For the moment we proceed under the assumption that $a \neq 0$, so (17) is invertible. Then the fundamental equation (16) becomes

$$U(x, y) = U_0 \left[\exp\left(\frac{2x}{3}\right) - \exp\left(\frac{2y}{3}\right) \right] = W(x) - W(y), \quad (18)$$

where we have defined the new function

$$W(z) := U_0 \exp\left(\frac{2z}{3}\right). \quad (19)$$

The function $W(z)$ coincides with the potential function of the Toda chain; we have already encountered it in ref. [5] in the context of the ideal gas. Since the latter has $a = 0$, which causes the change of variables (17) to be singular, one must proceed

differently in this case. Instead of Eq. (17), a nonsingular change of variables to consider for the ideal gas is

$$x' := s - v, \quad y' := s + v. \quad (20)$$

As already seen in ref. [5], this yields a fundamental equation depending on x' , but not on y' :

$$U_{\text{ideal}}(x') = W(x'). \quad (21)$$

On the other hand from ref. [11] we know that, in the limit of small wave amplitudes, the time average of the momentum variable in a thermal ensemble of Toda chains is directly proportional to the product of Boltzmann's constant k_B times the temperature T (see Eq. (3.20) of ref. [11], the right-hand side of which is independent of the lattice site n). We conclude that, *in the limit of small amplitudes, a thermal ensemble of waves in the Toda chain behaves exactly as an ideal gas.*

Returning now to the van der Waals gas in Eq. (18), the new canonical momenta read

$$p_x = \frac{\partial U}{\partial x} = \frac{2}{3}W(x), \quad p_y = \frac{\partial U}{\partial y} = -\frac{2}{3}W(y). \quad (22)$$

While the momentum p_x is the same as for the ideal gas, the negative sign in p_y can be traced back to the reduction in energy, with respect to the ideal case, due to the van der Waals parameter a . The PDE's of state read, in the new variables x, y ,

$$\frac{\partial U}{\partial x} - \frac{2U_0}{3} \exp\left(\frac{2x}{3}\right) = 0, \quad \frac{\partial U}{\partial y} + \frac{2U_0}{3} \exp\left(\frac{2y}{3}\right) = 0. \quad (23)$$

Compared to Eqs. (10) and (11) we see that, in the new variables x, y , the PDE's of state decouple into a system of two identical equations (up to a sign), one for each independent variable. Moreover, the equation corresponding to the variable x equals that PDE of the ideal gas which expresses the equipartition theorem. Finally the contact form (1) reads, in terms of x, y and the corresponding momenta p_x, p_y ,

$$\alpha = dU + p_x dx + p_y dy. \quad (24)$$

In the limit when the gas is ideal, the momentum p_y vanishes identically [5], and the physics is described in terms of the 3-dimensional contact submanifold \mathcal{N} spanned by x, p_x and U .

4 Discussion

The physics of the classical van der Waals gas is usually described by a 5-dimensional contact manifold \mathcal{M} endowed with the contact form given in Eq. (1). In this paper we have identified one particular diffeomorphism that neatly disentangles the (rather abstruse) fundamental equation (5) to the much more manageable form given by Eqs. (18), (19). This latter form is not just easier to work with; it is also more inspiring. Namely, the fundamental equation of the van der Waals gas now equals the difference

of two terms (one term per independent variable x, y), each one of which is a copy of the Toda potential function [11, 12, 13].

From the point of view of contact geometry, the only difference between the van der Waals gas and the ideal gas lies in the fact that the contact manifold describing the van der Waals gas remains 5-dimensional, instead of reducing to the 3-dimensional contact submanifold \mathcal{N} we found in the ideal case [5]. Yet, as we have proved in Eq. (18), the fundamental equation can be expressed in terms of the Toda potential function in both cases.

Why the precisely Toda potential should arise in this thermodynamical context, instead of some other potential function, is a question that arises naturally. We believe the answer is the following. The distinguishing feature of the Toda potential is the exponential function. In thermodynamics, the exponential function arises naturally through Boltzmann's principle: the number of microstates that are compatible with a given macrostate specified by the value S of the entropy is proportional to $\exp(S/k_B)$. That the latter factor is present in the fundamental equation (5) should come as no surprise, since the internal energy such be an extensive variable of the system.

Another intriguing feature of the above correspondence between the fundamental equation of a gas (either ideal or van der Waals) and the Toda potential function is the following. The small-amplitude limit considered in ref. [11] is the limit of vanishing kinetic energy; this fact is reflected in the vanishing (to first order of approximation) of the time average of the generalised velocities \dot{s}_n in ref. [11]. This limit has been called *the topological limit* in ref. [3]; roughly speaking, it amounts to cancelling the kinetic term while keeping only the potential term in the Hamiltonian. This fact allows us to sharpen our previous correspondence, which we can now state more precisely as follows: *the classical thermodynamics of the (ideal or van der Waals) gas has a dual theory which, to first order of approximation, coincides with the topological limit of a thermal ensemble of waves in the Toda chain.* Surprising here is the fact that, for the ideal gas, all energy is purely kinetic; and the potential energies introduced by the van der Waals parameters a, b are almost negligible compared to the kinetic energy. Thus *the theory of gases, where energies are completely kinetic, or almost, is mapped by this correspondence into a dual theory in which kinetic energies are negligible.* Vanishing or at least negligible kinetic energies are strongly reminiscent of topological field theory [10]; we hope to report on this issue in the future, as well as on its relation to Riemannian fluctuation theory [7, 14].

Acknowledgements J.M.I. wishes to thank the organisers of the congress *Entropy 2018: From Physics to Information Sciences and Geometry*, Barcelona, for the opportunity to present a preliminary version of this work. This research was supported by grant no. ENE2015-71333-R (Spain) and Convocatoria Abierta 2015 para Cursar Estudios de Doctorado, SENESCYT (Ecuador).

References

- [1] V. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Graduate Texts in Mathematics **60**, Springer, Berlin (1989).

- [2] A. Bravetti, *Contact Hamiltonian Dynamics: the Concept and its Use*, Entropy **19** (2017) 535.
- [3] D. Cabrera, P. Fernández de Córdoba, J.M. Isidro and J. Vázquez Molina, *Entropy, Topological Theories and Emergent Quantum Mechanics*, Entropy **19** (2017) 87, arXiv:1611.07357 [quant-ph].
- [4] H. Callen, *Thermodynamics*, Wiley, New York (1960).
- [5] J.M. Isidro and P. Fernández de Córdoba, *On the Contact Geometry and the Poisson Geometry of the Ideal Gas*, Entropy **20** (2018) 247, arXiv:1802.04091 [math-ph].
- [6] R. Mrugala, J. Nulton, J. Schön and P. Salamon, *Contact Structure in Thermodynamic Theory*, Rep. Math. Phys. **29** (1991) 109.
- [7] G. Ruppeiner, *Riemannian Geometry in Thermodynamic Fluctuation Theory*, Rev. Mod. Phys. **67** (1995) 605.
- [8] G. Rajeev, *Quantization of Contact Manifolds and Thermodynamics*, Ann. Phys. **323** (2008) 768, arXiv:math-ph/0703061.
- [9] G. Rajeev, *A Hamilton–Jacobi Formalism for Thermodynamics*, Ann. Phys. **323** (2008) 2265, arXiv:0711.4319 [hep-th].
- [10] A. Schwarz, *Quantum Field Theory and Topology*, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften **307**, Springer, Berlin (2010).
- [11] M. Toda, *Vibration of a Chain with Nonlinear Interaction*, J. Phys. Soc. Japan **22** (1967) 431.
- [12] M. Toda, *Wave Propagation in Anharmonic Lattices*, J. Phys. Soc. Japan **23** (1968) 501.
- [13] M. Toda, *Waves in Nonlinear Lattice*, Prog. Theor. Phys. Suppl. **45** (1970) 174.
- [14] L. Velázquez, *Curvature of Fluctuation Geometry and its Implications on Riemannian Fluctuation Theory*, J. Phys. A: Math. Theor. **46** (2013) 345003, arXiv:1307.7762 [math-ph].