

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
Facultad de Ingeniería, Arquitectura y Diseño
Bioingeniería



Apuntes de Métodos Numéricos

DRA. DORA-LUZ FLORES

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA, MÉXICO

2016

Métodos Numéricos

Dra. Dora-Luz Flores

10 de enero de 2017

Índice general

1. Conceptos básicos	2
1.1. Uso de los métodos numéricos	2
1.2. Errores numéricos y propagación	2
1.2.1. Errores inherentes	3
1.2.2. Errores de truncamiento	3
1.2.3. Errores de redondeo	3
1.2.4. Cifras significativas	4
1.3. Exactitud y precisión	5
1.3.1. Convergencia	5
1.3.2. Recursividad	5
1.3.3. Series y sucesiones	5
1.3.4. Criterio de convergencia y divergencia	6
1.4. Modelos matemáticos	6
1.4.1. Algoritmos	6
1.4.2. Estabilidad	6
1.4.3. Serie de Taylor	7
1.4.4. Serie binomial	8
1.4.5. Serie de McLaurin	8
2. Solución numérica de ecuaciones de una sola variable	9
2.1. Método gráfico	9
2.1.1. Ejemplo de aproximación gráfica	9
2.2. Método de bisecciones sucesivas	10
2.2.1. Ejemplo del método de bisección	11
2.3. Método de interpolación lineal (Regla Falsa)	11
2.3.1. Ejemplo del método de interpolación lineal	13
2.4. Método de Newton-Raphson de primer orden	13
2.5. Método de Newton-Raphson modificado para raíces múltiples	14
2.5.1. Ejemplo del método de Newton-Raphson para raíces múltiples	15
2.6. Método de Von Mises	17
2.6.1. Ejemplo de von Mises	18
2.6.2. Ejercicio	19
2.7. Método de Birge-Vieta	19

2.7.1.	Método de Horner (división sintética)	19
2.7.2.	Método de Birge-Vieta	20
2.7.3.	Ejemplo de Birge-Vieta	20
2.7.4.	Ejercicio de Birge-Vieta	23
3.	Solución numérica de sistemas de ecuaciones	24
3.1.	Método de eliminación de Gauss	28
3.1.1.	Algoritmo de eliminación de Gauss	29
3.1.2.	Código en Matlab del método de Gauss	29
3.2.	Método de eliminación de Gauss-Jordan	31
3.2.1.	Algoritmo de eliminación de Gauss-Jordan	31
3.2.2.	Diagrama de flujo del método de Gauss-Jordan	31
3.3.	Inversa de matrices	32
3.3.1.	Procedimiento para inversa de una matriz	33
3.3.2.	Ejemplo de la inversa de una matriz	33
3.3.3.	Ejercicios propuestos para inversión de matrices	34
3.4.	Método iterativo de Jacobi	34
3.4.1.	Algoritmo del método de Jacobi	35
3.4.2.	Ejemplo del método de Jacobi	37
3.5.	Método de eliminación de Gauss-Seidel	37
3.5.1.	Algoritmo de eliminación de Gauss-Seidel	37
3.5.2.	Ejemplo de eliminación de Gauss-Seidel	39
3.5.3.	Ejercicios propuestos	41
4.	Aproximación polinomial y funcional	42
4.1.	Método de interpolación	42
4.1.1.	Diferencias finitas	42
4.1.2.	Diferencias divididas	44
4.2.	Método de interpolación de Newton	44
4.2.1.	Ejemplo del polinomio de Newton	45
4.2.2.	Ejercicios	46
4.3.	Método de interpolación de Lagrange de primer orden	46
4.3.1.	Ejemplo del método de interpolación de Lagrange	47
4.4.	Métodos de interpolación mediante polinomios de grado n	48
4.5.	Método de mínimos cuadrados	48
4.5.1.	Regresión lineal	49
4.5.2.	Ejemplo de regresión lineal	50
4.5.3.	Linealización de regresiones	52
4.5.4.	Regresión polinomial	53
4.5.5.	Ejemplo de regresión polinomial	54

5. Integración numérica	55
5.1. Método analítico	55
5.2. Método de la Regla del Trapecio	57
5.2.1. Ejemplo del método de la regla del trapecio	57
5.2.2. Aplicación múltiple de la regla trapezoidal	58
5.2.3. Ejemplo de la aplicación múltiple de la regla del trapecio	60
5.3. Método Simpson 1/3 y 3/8	61
5.3.1. Regla de Simpson 1/3	61
5.3.2. Ejemplo del método Simpson 1/3	62
5.3.3. Regla de Simpson 3/8	63
5.3.4. Ejemplo del método Simpson 3/8	63
5.4. Método de diferenciación	64
5.4.1. Diferenciación hacia adelante, hacia atrás y centrada	64
5.4.2. Ejemplo de diferenciación numérica	66
6. Solución numérica de ecuaciones diferenciales	67
6.1. Método de Euler	68
6.1.1. Ejemplo del método de Euler	69
6.1.2. Análisis del error para el método de Euler	70
6.1.3. Ejemplo del cálculo del error del método de Euler	72
6.2. Método de Euler mejorado	73
6.2.1. Método de Heun	73
6.2.2. Ejemplo del método de Heun	75
6.3. Métodos de Runge-Kutta	76
6.3.1. Métodos de Runge-Kutta de segundo orden	77
6.3.2. Métodos de Runge-Kutta de tercer orden	78
6.3.3. Métodos de Runge-Kutta de cuarto orden	78
6.3.4. Ejemplo del método de Runge-Kutta	79

Unidad 1

Conceptos básicos

1.1. Uso de los métodos numéricos

En el campo de las ciencias e ingeniería, existen infinidad de fenómenos que requieren representarse mediante modelos matemáticos. Desafortunadamente, la gran mayoría de estos modelos no tiene una solución exacta ó no es fácil encontrarla. Es estos casos es en donde los métodos numéricos proporcionan una solución aproximada al problema original. Un método numérico es aquel que obtiene números que se aproximan a los que se obtendrían aplicando la solución analítica de un problema.

Los métodos numéricos son herramientas extremadamente poderosas para la solución de problemas. Son capaces de manejar sistemas de ecuaciones grandes, no linealidades geométricas complicadas que son comunes en la practica de la ingeniería y que, a menudo, son imposibles de resolver analíticamente.

1.2. Errores numéricos y propagación

Deberá ser suficiente, en la práctica de la ingeniería y de las ciencias, contar con una solución aproximada a un problema por las siguientes razones:

- Los modelos matemáticos son aproximados esto es, simplificaciones al problema real. No se toman en cuenta todos los factores que afectan a un fenómeno. Por ejemplo, en el caso del tiro parabólico, se suele despreciar la resistencia del aire, sin embargo, esta puede ser importante.
- Los modelos matemáticos requieren de parámetros, los cuales la mayoría de las veces provienen de mediciones experimentales y estas, solo tienen una precisión limitada, que depende del instrumento de medición. Por ejemplo la constante de los gases ideales. También pueden provenir de cálculos y estos tienen una precisión limitada que depende tanto del método como del instrumento de cálculo que se utilicen. Por ejemplo π .

Los modelos matemáticos resultantes son imposibles de resolver por métodos analíticos y se debe de aproximar la solución numéricamente. Por ejemplo una ecuación de quinto grado. Por lo anterior, se debe aceptar que siempre se tendrán errores presentes, estos pueden clasificarse en:

- Errores inherentes.
- Errores de truncamiento.
- Errores de redondeo.

1.2.1. Errores inherentes

Los errores inherentes son aquellos que tienen los datos de entrada de un problema, y son debidos principalmente a que se obtienen experimentalmente, debiéndose tanto al instrumento de medición, como a las condiciones de realización del experimento. Por ejemplo, sí el experimento es a temperatura constante y no se logra esto mas que en forma aproximada. También pueden deberse a que se obtengan de cálculos previos. Por ejemplo el valor calculado es el de un número irracional como π o $\sqrt{2}$.

1.2.2. Errores de truncamiento

Los errores de truncamiento se originan por el hecho de aproximar la solución analítica de un problema, por medio de un método numérico. Por ejemplo al evaluar la función exponencial por medio de la serie de Taylor, se tiene que calcular el valor de la siguiente serie infinita:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^N}{N!} = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{x^N}{N!}$$

Ante la imposibilidad de tomar todos los términos de la serie, se requiere truncar después de cierto número de términos. Esto nos introduce ciertamente un error, que es el error de truncamiento. Este es independiente de la manera de realizar los cálculos. Solo depende del método numérico empleado.

1.2.3. Errores de redondeo

Los errores de redondeo, se originan al realizar los cálculos que todo método numérico o analítico requieren y son debidos a la imposibilidad de tomar todas las cifras que resultan de operaciones aritméticas como los productos y los cocientes, teniendo que retener en cada operación el número de cifras que permita el instrumento de cálculo que se este utilizando. Por ejemplo al calcular el valor de , tenemos que conformarnos solo con la mayor cantidad de cifras 3, que maneje nuestro instrumento de calculo.

Los errores anteriores también suelen denominarse como las fuentes de error. La magnitud del error generada por alguna o todas las fuentes de error mencionadas anteriormente, se puede cuantificar con ayuda de los siguientes parámetros:

- Error.
- Error relativo.
- Error porcentual.

Error

El error se define como la diferencia entre el valor real (V_r) y una aproximación a este valor V_a :

$$e = V_r - V_a$$

Error relativo

El error relativo se define como el cociente del error entre el valor real V_r (si $V_r \neq 0$):

$$e_r = \frac{e}{V_r} = \frac{V_r - V_a}{V_r}$$

En ciertos métodos numéricos se utilizan esquemas iterativos para calcular resultados. En tales esquemas, se hace una aproximación en base a la aproximación anterior. Este proceso se repite varias veces, o de forma iterativa, para calcular sucesivamente más y mejores aproximaciones.

En tales casos, el error a menudo se calcula como la diferencia entre aproximación previa y la actual por lo tanto, el error relativo porcentual o error porcentual esta dado por el error porcentual.

Error porcentual

El error porcentual es simplemente el error relativo expresado en por ciento (%).

$$e_p = \left| \frac{V_r - V_a}{V_r} \right| * 100 \%$$

En 1966 Scarborough demostró que si el siguiente criterio se cumple puede tenerse la seguridad de que el resultado es correcto en al menos n cifras significativas.

$$Es = 0.5 \times 10^{2-n}$$

1.2.4. Cifras significativas

El concepto de cifras significativas se ha desarrollado para designar formalmente la confiabilidad de un valor numérico. El número de cifras significativas es el número de dígitos que se puede usar con plena confianza. Por ejemplo se puede calcular un número irracional con varias cifras, pero de ellas no todas, sobre todo las últimas pueden tomarse con plena confianza de que son correctas. Por otro lado, los ceros no siempre son cifras significativas ya que pueden usarse solo para ubicar al punto decimal. Por ejemplo los siguientes números tienen todos 4 cifras significativas: 0.00001985, 0.0001985, 0.001985, 1985, 19.85. Para asegurar que un cero nos represente una cifra significativa, es común emplear la notación científica. Por ejemplo los siguientes números tienen 3, 4 y 5 cifras significativas: 4.53×10^{-5} , 4.530×10^{-5} y 4.5300×10^{-5} . También se suele poner explícitamente los ceros. Los siguientes números tienen 5 cifras significativas: 19850, 0.019850, 19.850.

1.3. Exactitud y precisión

Los errores asociados con los cálculos y mediciones se pueden caracterizar observando su precisión y exactitud. La mayoría de la gente piensa que estos términos son sinónimos, pero no es así. La precisión se refiere al número de cifras significativas que representan una cantidad. La exactitud se refiere al grado de aproximación que se tiene de un número o de una medida al valor verdadero que se supone representa, es decir, que tan cerca estamos del valor buscado. Por ejemplo, si leemos la velocidad del velocímetro de un auto, esta tiene una precisión de 3 cifras significativas y una exactitud de ± 5 Kph.

1.3.1. Convergencia

Velocidad de convergencia (rapidez o razón de convergencia): Es el número de iteraciones que requiere un cálculo o algoritmo para converger o aproximarse a un valor. Es decir, la convergencia se refiere al hecho de que los métodos numéricos obtienen n términos de una sucesión de valores. Comenzamos con un valor inicial que sea una aproximación de la solución de un problema x_0 . Aplicando un método numérico se obtiene otra aproximación x_1 . Se repite el procedimiento para obtener x_2 y así sucesivamente, es decir, se genera la sucesión x_0, x_1, \dots, x_n (todos los términos son aproximaciones a la solución del problema). Si la sucesión obtenida al cabo de n iteraciones tiende a un límite se dice que el método es convergente o divergente en caso contrario.

1.3.2. Recursividad

Fórmula recursiva: Relaciona términos sucesivos de una sucesión particular de números, funciones o polinomios, para proporcionar medios para calcular cantidades sucesivas en términos de las anteriores.

1.3.3. Series y sucesiones

Serie infinita: 2, 4, 6, 8, \dots

Serie finita: 2, 4, 6, 8, 10.

Sucesión aritmética

$a + (a + d) + (a + 2d) + \dots + (a + (N - 1)d) = n(a + l)$ donde:
 $l = (N - 1)d$ y representa el último término de la sucesión.

Sucesión geométrica

$$a + ax + ax^2 + ax^3 + \dots + ax^{N-1} = \frac{a(1 - x^N)}{1 - x}$$

Se dice que una sucesión es creciente si:

$$a_{n-1} \leq a_n \forall n$$

y es decreciente si:

$$a_{n-1} \geq a_n \forall n$$

1.3.4. Criterio de convergencia y divergencia

Sea $\sum_{n=1}^{\infty}$ una serie infinita dada y sea $\{S_n\}$ la sucesión de sumas parciales que definen esta serie infinita. Entonces si el $\lim_{n \rightarrow \infty} S_n$, existe y es igual a S entonces se dice que la serie converge y que S es la suma infinita dada. Si coexiste al $\lim_{n \rightarrow \infty} S_n$, entonces se dice que la serie diverge o no converge y S no tiene valor. Una serie infinita es convergente si y solo si, la secuencia correspondiente es convergente.

1.4. Modelos matemáticos

1.4.1. Algoritmos

Un algoritmo es una secuencia de pasos lógicos necesarios para llevar a cabo una tarea específica, generalmente los algoritmos se describen mediante un pseudocódigo.

Ejemplo. Algoritmo hecho en pseudocódigo del promedio de n números.

1. Pedir datos
2. Contar datos: $n = \text{números de datos}$.
3. Sumar los datos: $\text{suma} = \text{suma} + \text{dato}(i)$
4. Dividir suma entre n : $\text{prom} = \text{suma}/n$
5. Imprimir el prom .

Los algoritmos pueden ser estables e inestables.

1.4.2. Estabilidad

Algoritmos estables: Son aquellos en los que los cambios pequeños en los datos de entrada generan cambios pequeños al final o a la salida. Algoritmos inestables: Son aquellos en los que los cambios pequeños en la entrada producen grandes cambios en la salida.

Por ejemplo si e_n es un error en alguna etapa de un proceso y k es una constante independiente de n el número de etapa, entonces si el error después de n operaciones se puede representar por $f(n) = kn^\varepsilon$, se dice que el crecimiento del error es lineal. Sí en cambio el error se representa por $f(n) = k^n \varepsilon$ para $k > 1$, el crecimiento del error se dice que es exponencial.

El crecimiento del error lineal es por lo general inevitable, y cuando k y n son pequeños, los resultados son aceptables. El crecimiento del error exponencial debe ser evitado, ya que el término k^n será grande, aun para valores relativamente pequeños de n . Por lo tanto si el crecimiento del error es lineal el método es estable y sí es exponencial es inestable.

1.4.3. Serie de Taylor

La serie de Taylor permite predecir o calcular el valor de una función en un punto en términos del valor de la función y sus derivadas en otro punto. Esto quiere decir que cualquier función suave puede ser aproximada mediante un polinomio.

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)(x-a)^2}{2!} + \frac{f'''(a)(x-a)^3}{3!} + \dots + \frac{f^n(a)(x-a)^n}{n!} + R_n$$

donde R_n es el término residual

$$\frac{f^{n+1}(\xi)h^{n+1}}{(n+1)!}$$

Algunas series típicas de Taylor son las siguientes:

$$1. \ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots + \frac{x^n}{n} \text{ para } -1 \leq x \leq 1$$

$$2. \ln(x) = \frac{x-1}{x} + \frac{1}{2} \left(\frac{x-1}{x}\right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{x-1}{x}\right)^3 + \dots + \frac{1}{n} \left(\frac{x-1}{x}\right)^n \text{ para } x \geq 1/2$$

$$3. \sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \dots \text{ para } -\infty < x < \infty$$

$$4. \cos(x) = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \text{ para } -\infty < x < \infty$$

$$5. \tan(x) = x + \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \frac{17}{315}x^7 + \dots \text{ para } x < \pi/2$$

$$6. \sin^{-1}(x) = x + \frac{1}{2} \frac{x^3}{3} + \frac{1 \times 3}{2 \times 4} \frac{x^5}{5} + \frac{1 \times 3 \times 5}{2 \times 4 \times 6} \frac{x^7}{7} + \dots \text{ para } x < 1$$

$$7. \cos^{-1}(x) = \frac{\pi}{2} - \sin^{-1}(x) = \frac{\pi}{2} - \left(x + \frac{1}{2} \frac{x^3}{3} + \frac{1 \times 3}{2 \times 4} \frac{x^5}{5} + \frac{1 \times 3 \times 5}{2 \times 4 \times 6} \frac{x^7}{7} + \dots \right) \text{ para } x < 1$$

$$8. \sinh(x) = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \dots \text{ para } -\infty < x < \infty$$

$$9. \cosh(x) = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \dots \text{ para } -\infty < x < \infty$$

1.4.4. Serie binomial

$$(a + x)^n = a^n + na^{n-1}x + \frac{n(n-1)a^{n-2}}{2!}x^2 + \frac{n(n-1)(n-2)a^{n-3}}{3!}x^3 + \dots$$

1.4.5. Serie de McLaurin

En matemáticas a menudo se pueden representar funciones mediante una serie infinita por ejemplo la función exponencial se puede utilizar usando

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots + \frac{x^n}{n!}$$

que es conocida como expansión de serie de McLaurin, que es una modificación de la serie de Taylor para cuando $x_i = 0$.

Unidad 2

Solución numérica de ecuaciones de una sola variable

Las soluciones de una ecuación $f(x) = 0$, se llaman ceros o raíces de $f(x)$. En algunos casos las raíces pueden ser obtenidas con métodos directos, por ejemplo, para una ecuación cuadrática se utiliza la fórmula general. Aunque existen ecuaciones que no se pueden resolver directamente, por ejemplo una función tan simple como $f(x) = e^{-x} - x$. Para estos casos, la única alternativa es una técnica de solución numérica.

2.1. Método gráfico

Un método simple para obtener una aproximación a la raíz de la ecuación $f(x) = 0$, consiste en graficar la función y observar en donde cruza al eje x . Este punto representa el valor de x para el cual $f(x) = 0$ y proporciona una aproximación de la raíz de la función $f(x)$.

2.1.1. Ejemplo de aproximación gráfica

Usando la aproximación gráfica para obtener el coeficiente de razonamiento c , necesario para que un paracaidista de masa = 68.1kg tenga una velocidad de 40m/s después de una caída libre de 10 segundos, donde la función que representa este hecho esta dada por:

$$v(t) = \frac{gm}{c} \left(1 - e^{\frac{-c}{m}t} \right) \quad (2.1)$$

En este caso se reescribe la función de tal manera que sea igualada a cero, lo cual queda:

$$f(c) = \frac{gm}{c} \left(1 - e^{\frac{-c}{m}t} \right) - v \quad (2.2)$$

Se obtiene la tabla 2.1.1, y con esos valores se genera la gráfica 2.1.

Tabla 2.1: Valores generados de la ecuación 2.2

c	$f(c)$
2	45.00718
4	34.19047
6	25.20892
8	17.71226
10	11.42152
12	6.11394
14	1.61112
16	-2.23026
18	-5.52565
20	-8.36838
22	-10.83416

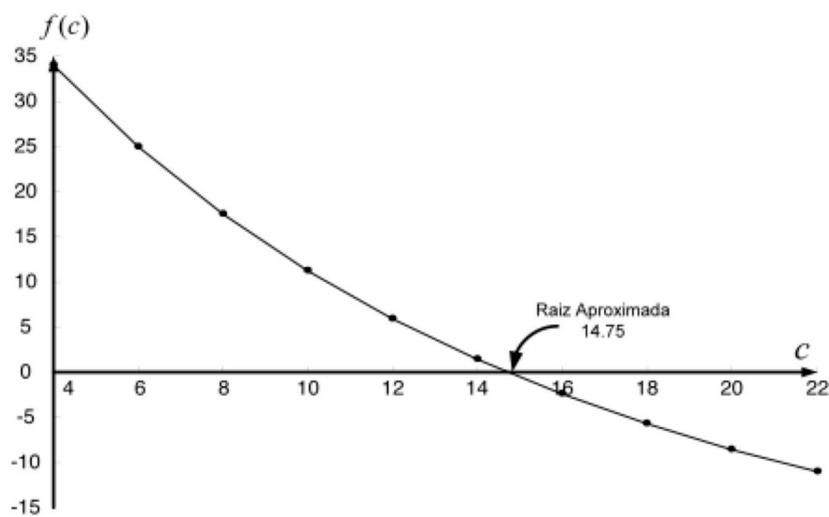


Figura 2.1: Aproximación gráfica

2.2. Método de bisecciones sucesivas

Este método consiste en encerrar una raíz entre un intervalo en el cual la función debe cruzar al eje horizontal (eje x), e ir dividiendo el intervalo a la mitad hasta encontrar la mejor aproximación, como se puede observar en la figura 2.2.

El algoritmo para determinar la raíz por el método de bisección se describe a continuación:

1. Elegir límites superior x_u e inferior x_i .
2. Obtener la aproximación a la raíz $x_r = \frac{x_i + x_u}{2}$.

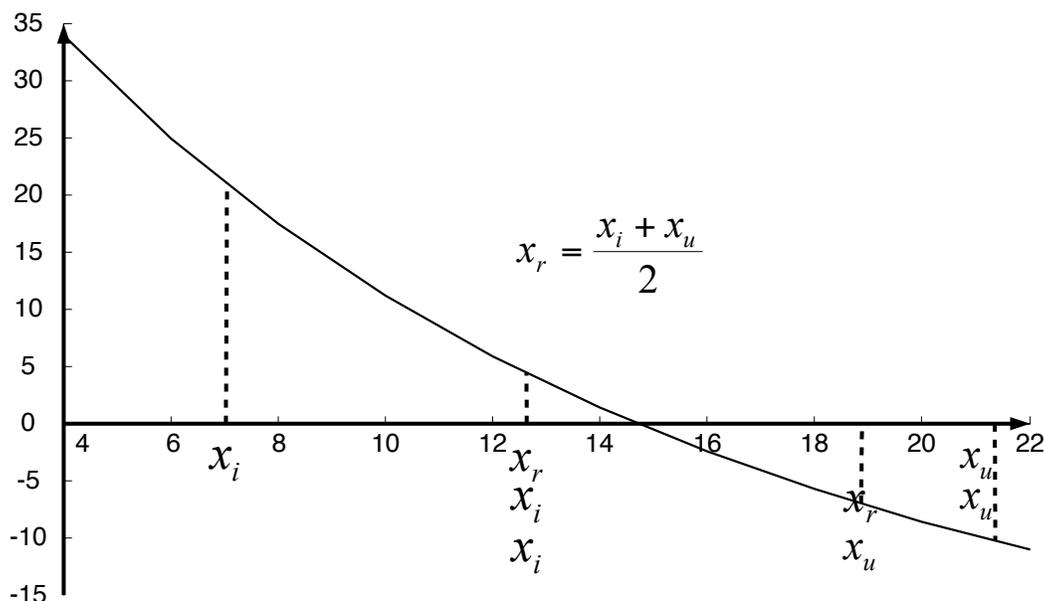


Figura 2.2: Método de bisección

3. Si $f(x_i)f(x_r) < 0$, entonces $x_i = x_i$ y $x_u = x_r$. Si no, si $f(x_u)f(x_r) < 0$, entonces $x_i = x_r$ y $x_u = x_u$.
4. Si $f(x_u)f(x_r) = 0$, la raíz es igual a x_r ; termina el cálculo.

2.2.1. Ejemplo del método de bisección

Resolviendo el ejemplo mostrado en el método de aproximación gráfica con la ecuación 2.2, ahora utilizando el método de bisección con $x_i = 12$ y $x_u = 16$ se tienen las siguientes iteraciones y luego se genera la tabla 2.2:

Primera iteración.

$$x_r = \frac{x_i + x_u}{2} = \frac{12 + 16}{2} = 14$$

$$f(x_i) = f(12) = \frac{gm}{c} \left(1 - e^{\frac{-ct}{m}} \right) - v = \frac{(9.81)(68.1)}{12} \left(1 - e^{\frac{(-12)(10)}{68.1}} \right) - 40 = 6.1139431$$

2.3. Método de interpolación lineal (Regla Falsa)

Un defecto del método de bisección es que al dividir el intervalo de x_i a x_u en mitades, no se considera la magnitud de $f(x_i)$ y de $f(x_u)$. Por ejemplo, si $f(x_i)$ está más cercano a 0 que $f(x_u)$,

Tabla 2.2: Valores generados de la ecuación 2.2

i	x_i	x_u	x_r	$f(x_i)$	$f(x_u)$	$f(x_r)$	$\ e_r\ $
1	12.0000000	16.0000000	14.0000000	6.1139431	-2.2302607	1.6111164	-
2	14.0000000	16.0000000	15.0000000	1.6111164	-2.2302607	-0.3844581	6.6666667
3	14.0000000	15.0000000	14.5000000	1.6111164	-0.3844581	0.5936984	3.4482759
4	14.5000000	15.0000000	14.7500000	0.5936984	-0.3844581	0.0998300	1.6949153
5	14.7500000	15.0000000	14.8750000	0.0998300	-0.3844581	-0.1434972	0.8403361
6	14.7500000	14.8750000	14.8125000	0.0998300	-0.1434972	-0.0221312	0.4219409
7	14.7500000	14.8125000	14.7812500	0.0998300	-0.0221312	0.0387748	0.2114165
8	14.7812500	14.8125000	14.7968750	0.0387748	-0.0221312	0.0083032	0.1055966
9	14.7968750	14.8125000	14.8046875	0.0083032	-0.0221312	-0.0069187	0.0527704

es lógico pensar que la raíz se encuentra más cerca de x_i que de x_u . El método de falsa posición aprovecha la visualización gráfica de unir $f(x_i)$ y $f(x_u)$ con una recta, donde la intersección de esta recta con el eje x representa una mejor estimación a la raíz, como se muestra en la gráfica 2.3.

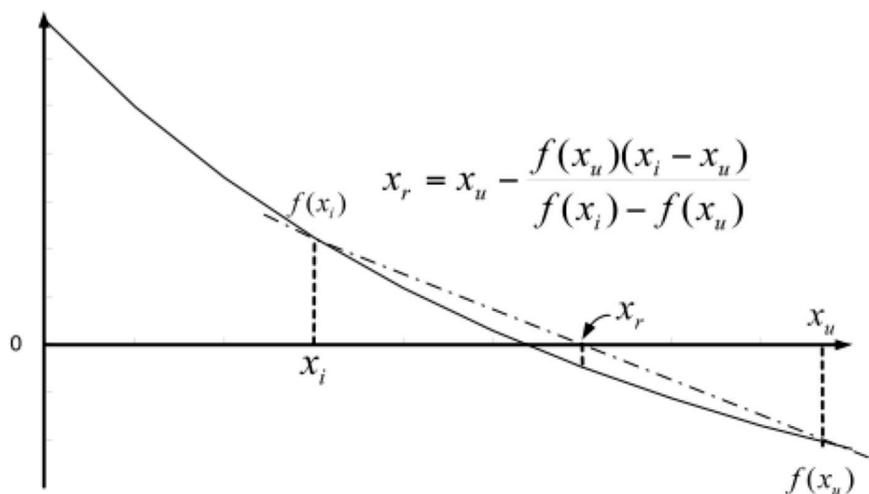


Figura 2.3: Método de la falsa posición

De la gráfica se observan triángulos semejantes:

$$\frac{f(x_i)}{x_r - x_i} = \frac{f(x_u)}{x_r - x_u} \quad (2.3)$$

de la ecuación anterior se despeja x_r y se obtiene:

$$x_r = x_u - \frac{f(x_u)(x_i - x_u)}{f(x_i) - f(x_u)} \quad (2.4)$$

El algoritmo es igual al del método de bisección, lo único que cambia es la ecuación para x_r .

2.3.1. Ejemplo del método de interpolación lineal

Tomando el mismo ejemplo mostrado en los métodos de aproximación gráfica y bisecciones sucesivas, con la ecuación 2.2, ahora utilizando el método de interpolación lineal con $x_i = 12$ y $x_u = 16$ se tienen las siguientes iteraciones y luego se genera la tabla 2.3:

Primera iteración.

$$x_r = \frac{x_i + x_u}{2} = \frac{12 + 16}{2} = 14$$

$$f(x_i) = f(12) = \frac{gm}{c} \left(1 - e^{\frac{-ct}{m}} \right) - v = \frac{(9.81)(68.1)}{12} \left(1 - e^{\frac{(-12)(10)}{68.1}} \right) - 40 = 6.1139431$$

Tabla 2.3: Valores generados de la ecuación 2.2

i	x_i	x_u	x_r	$f(x_i)$	$f(x_u)$	$f(x_r)$	ERP
1	12.0000000	16.0000000	14.0000000	6.1139431	-2.2302607	1.6111164	-
2	14.0000000	16.0000000	15.0000000	1.6111164	-2.2302607	-0.3844581	6.6666667
3	14.0000000	15.0000000	14.5000000	1.6111164	-0.3844581	0.5936984	3.4482759
4	14.5000000	15.0000000	14.7500000	0.5936984	-0.3844581	0.0998300	1.6949153
5	14.7500000	15.0000000	14.8750000	0.0998300	-0.3844581	-0.1434972	0.8403361
6	14.7500000	14.8750000	14.8125000	0.0998300	-0.1434972	-0.0221312	0.4219409
7	14.7500000	14.8125000	14.7812500	0.0998300	-0.0221312	0.0387748	0.2114165
8	14.7812500	14.8125000	14.7968750	0.0387748	-0.0221312	0.0083032	0.1055966
9	14.7968750	14.8125000	14.8046875	0.0083032	-0.0221312	-0.0069187	0.0527704

2.4. Método de Newton-Raphson de primer orden

Los métodos de Bisección y falsa posición son llamados métodos por intervalos en los cuales los valores iniciales deben encerrar a la raíz deseada. Los métodos siguientes son llamados métodos de intervalo abierto dado que las condiciones iniciales no necesariamente tienen que contener a la raíz. Si el valor inicial de la raíz es x_i , entonces se puede trazar una tangente del punto $f(x_i)$; el punto donde esta tangente cruza al eje x representa una aproximación de la raíz.

Si la pendiente en un punto dado se llama primera derivada de la función $f'(x)$ y la pendiente de una recta es $m = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1}$ se puede tener que:

$$f'(x) = m = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_i)}{x_i - x_{i+1}} \quad (2.5)$$

Despejando x_{i+1} se tiene la ecuación de Newton-Raphson

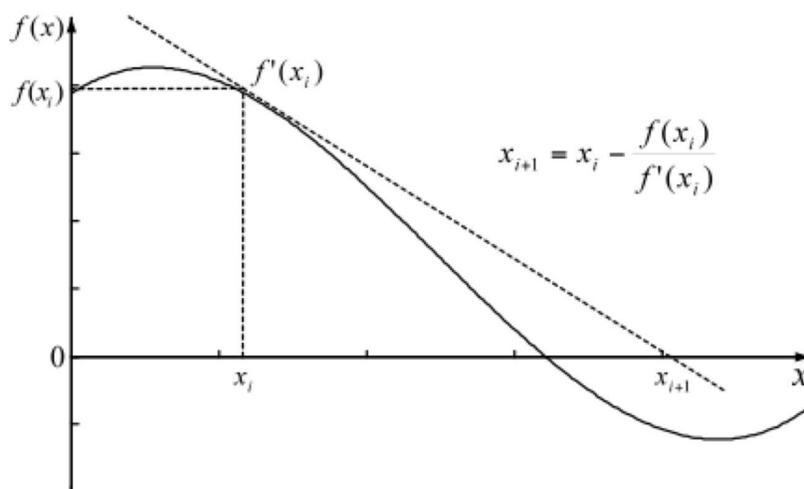


Figura 2.4: Método de Newton-Raphson

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (2.6)$$

2.5. Método de Newton-Raphson modificado para raíces múltiples

Una raíz múltiple corresponde a un punto donde una función es tangencial al eje horizontal x , por ejemplo si $f(x)$ es formada por una multiplicación de binomios iguales se encontrará una raíz repetida, como se puede observar en la figura 2.5.

La ecuación anterior tiene una raíz doble porque un valor de x hace que dos términos de la ecuación sean iguales a cero en $x = 1$, se observa que en la curva toca al eje x pero no lo cruza.

Para la ecuación $f(x) = x^4 - 6x^3 + 12x^2 - 10x + 3$ se observa en la figura 2.6 que la función es tangente al eje x . En general, la multiplicación impar de raíces cruza al eje horizontal x , mientras que la multiplicidad par no lo hace. Las raíces múltiples ofrecen ciertas dificultades a los métodos anteriormente expuestos.

Para el método de Newton-Raphson modificado, es necesario la obtención de la primera y segunda derivada de la función y la obtención de la aproximación de la raíz, esta dada por:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)f'(x_i)}{[f'(x_i)]^2 - f(x_i)f''(x_i)} \quad (2.7)$$

La manera en que se realizan las iteraciones es de la misma forma que el del método de Newton-Raphson.

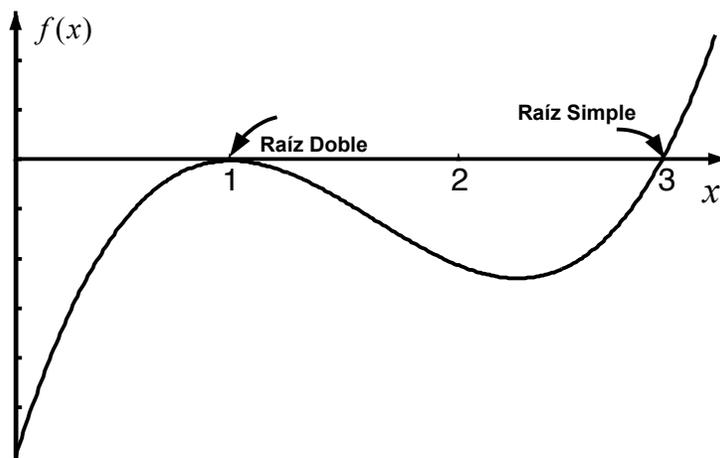


Figura 2.5: Raíces múltiples, $f(x) = x^3 - 5x^2 + 7x - 3 = (x - 3)(x - 1)^2$

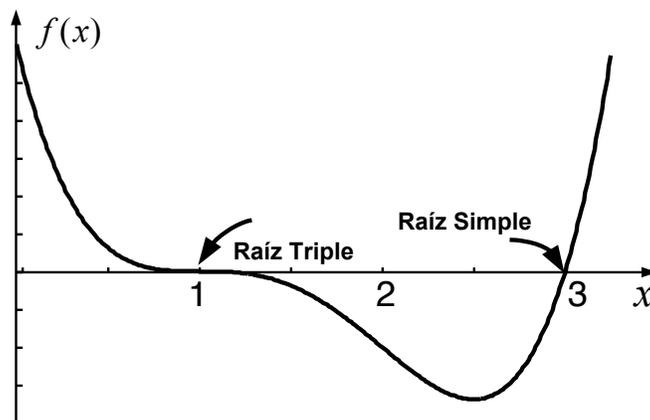


Figura 2.6: Raíces múltiples, $f(x) = x^4 - 6x^3 + 12x^2 - 10x + 3 = (x - 3)(x - 1)^3$

2.5.1. Ejemplo del método de Newton-Raphson para raíces múltiples

Utilizar el método de Newton-Raphson modificado para evaluar la raíz múltiple de la ecuación $f(x) = x^3 - 5x^2 + 7x - 3$ con un valor inicial de $x_0 = 0$.

Obteniendo la primera y segunda derivada de la función se tiene que:

$$f'(x) = 3x^2 - 10x + 7$$

$$f''(x) = 6x - 10$$

Primera iteración

$$x_0 = 0$$

$$f(x_0) = x^3 - 5x^2 + 7x - 3 = -3$$

$$f'(x_0) = 3x^2 - 10x + 7 = 7$$

$$f''(x_0) = 6x - 10 = -10$$

$$x_1 = 0 - \frac{(-3)(7)}{[7]^2 - (-3)(-10)} = 1.1052$$

Segunda iteración

$$x_1 = 1.1052$$

$$f(x_1) = x^3 - 5x^2 + 7x - 3 = -0.0209$$

$$f'(x_1) = 3x^2 - 10x + 7 = -0.3878$$

$$f''(x_1) = 6x - 10 = -3.3684$$

$$x_2 = 1.1052 - \frac{(-0.0209)(-0.3878)}{[-0.3878]^2 - (-0.0209)(-3.3684)} = 1.0030$$

$$e_r = \left| \frac{1.0030 - 1.1052}{1.0030} \right| * 100 = 10.1867$$

Tercera iteración

$$x_2 = 1.0030$$

$$f(x_2) = x^3 - 5x^2 + 7x - 3 = -0.000019$$

$$f'(x_2) = 3x^2 - 10x + 7 = -0.01229$$

$$f''(x_2) = 6x - 10 = -3.9815$$

$$x_3 = 1.0030 - \frac{(-0.000019)(-0.01229)}{[-0.01229]^2 - (-0.000019)(-3.9815)} = 1.0000024$$

$$e_r = \left| \frac{1.0000024 - 1.0030817}{1.0000024} \right| * 100 = 0.3079275$$

Tabla 2.4: Valores generados de la ecuación $f(x) = x^3 - 5x^2 + 7x - 3$ usando el método de Newton-Raphson para raíces múltiples

i	x_i	$f(x_i)$	$f'(x_i)$	$f''(x_i)$	x_{i+1}	$ e_r $
0	0.0000000	-3.0000000	7.0000000	-10.0000000	1.1052632	-
1	1.1052632	-0.0209943	-0.3878116	-3.3684211	1.0030817	10.1867572
2	1.0030817	-0.0000190	-0.0122982	-3.9815100	1.0000024	0.3079275
3	1.0000024	0.0000000	-0.0000095	-3.9999857	1.0000000	0.0002381
4	1.0000000	0.0000000	0.0000000	-4.0000000	1.0000000	0.0000000

2.6. Método de Von Mises

El método de Newton-Raphson puede ser problemático si se está en puntos alejados de las raíces y cercanos a puntos donde el valor de $f'(x_i)$ sea próximo a cero. Para ello Von Mises sugirió utilizar Newton-Raphson, $x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_0)}$, sustituyendo el denominador $f'(x_i)$ por $f'(x_0)$, es decir obtener geoméricamente las siguientes aproximaciones por medio de paralelas a la primera tangente, como se muestra en la figura 2.7.

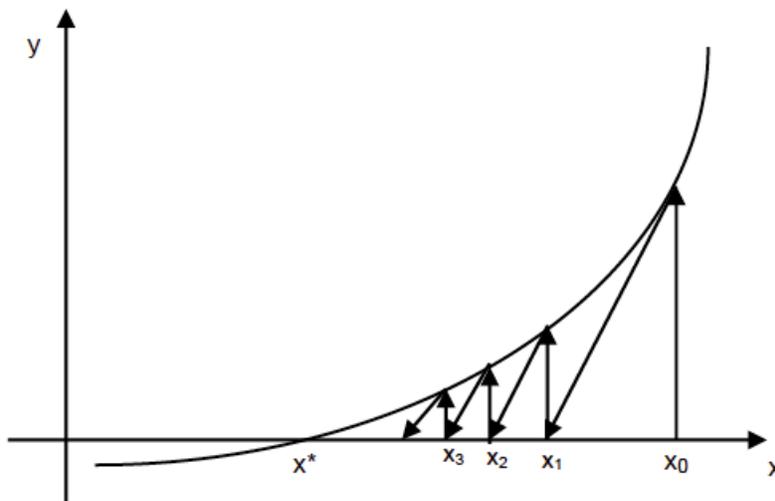


Figura 2.7: Método de Von Mises

Por lo anterior, la ecuación de Von Mises es:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_0)} \quad (2.8)$$

2.6.1. Ejemplo de von Mises

Utilizar el método de von Mises para encontrar la raíz de $e^{-x} - \ln x$ empleando un valor inicial de $x_0 = 1$.

Se tiene que $f(x) = e^{-x} - \ln(x)$ y su derivada evaluada en x_0 es $f'(x_0) = f'(1) = -e^{-1} - \frac{1}{x} = -1.36787944$.

Primera iteración

$$i = 0$$

$$x_0 = 1$$

$$f(x_0) = e^{-1} - \ln(1) = 0.36787944$$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 1 - \frac{0.36787944}{-1.36787944} = 1.26894142$$

Segunda iteración

$$i = 1$$

$$x_1 = 1.26894142$$

$$f(x_1) = e^{-1.26894142} - \ln(1.26894142) = 0.04294604$$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_0)} = 1.26894142 - \frac{0.04294604}{-1.36787944} = 1.30033749$$

$$|e_r| = \left| \frac{1.30033749 - 1.26894142}{1.30033749} \right| * 100 = 2.41445529$$

Así sucesivamente hasta completar la información que se muestra en la tabla 2.5.

Tabla 2.5: Iteraciones para evaluar la función $f(x) = e^{-x} - \ln(x)$ con el método de von Mises

i	x_i	$f(x_i)$	x_{i+1}	$ e_r $
0	1	0.36787944	1.26894142	-
1	1.26894142	0.042946035	1.30033749	2.4144554
2	1.30033749	0.00981599	1.307513555	0.54883309

2.6.2. Ejercicio

Utilizar el método de von Mises para calcular la raíz de la función $f(x) = \cos x - x$ con un valor inicial de $x_0 = 1$. Realizar al menos 6 iteraciones.

2.7. Método de Birge-Vieta

Un caso especial de importancia práctica es encontrar las raíces de la ecuación $f(x) = 0$ cuando $f(x)$ es un polinomio en x . En esta sección se verá el método Birge-Vieta que encuentra todas las raíces reales de un polinomio.

2.7.1. Método de Horner (división sintética)

Suponer dos polinomios $P(x)$ y $Q(x)$ de la forma

$$P(x) = a_1x^n + a_2x^{n-1} + \dots + a_nx + a_{n+1} \quad (2.9)$$

$$Q(x) = b_1x^n + b_2x^{n-1} + \dots + b_nx + b_{n+1} \quad (2.10)$$

donde $a_1 \neq 0$. Si la relación entre $P(x)$ y $Q(x)$ esta dada por

$$P(x) = (x - x_0)Q(x) + b_{n+1}, \quad (2.11)$$

se tiene que $b_1 = a_1, b_{n+1} = P(x_0)$, y

$$b_k = a_k + b_{k-1}x_0, \quad (2.12)$$

para $k = 2, 3, \dots, n + 1$.

Lo anterior puede realizarse mediante una tabla de la siguiente manera

$$\begin{array}{r|cccccc}
 x_0 & a_1 & a_2 & a_3 & \dots & a_n & a_{n+1} \\
 & b_1x_0 & b_2x_0 & b_2x_0 & \dots & b_{n-1}x_0 & b_nx_0 \\
 \hline
 & b_1 = a_1 & b_2 = a_2 + b_1x_0 & b_3 = a_3 + b_2x_0 & \dots & b_n = a_n + b_{n-1}x_0 & b_{n+1} = a_{n+1} + b_nx_0
 \end{array}$$

El polinomio $P(x)$,

$$P(x) = a_1x^n + a_2x^{n-1} + \dots + a_nx + a_{n+1}$$

puede ser representado por el vector de sus coeficientes,

$$\mathbf{a} = [a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_n \quad a_{n+1}]$$

de la misma manera $Q(x)$ puede ser representado por el vector $\mathbf{b}(1 : n)$

$$\mathbf{b} = [b_1 \quad b_2 \quad \dots \quad b_n].$$

Dado que

$$\begin{aligned}P(x) &= (x - x_0)Q(x) + b_{n+1}, \\P'(x) &= Q(x) + (x - x_0)Q'(x).\end{aligned}$$

Por lo tanto

$$P'(x_0) = Q(x_0),$$

es decir, que $P'(x_0)$ puede evaluarse obteniendo el residuo de la división de $Q(x)$ por $(x - x_0)$ y evaluando $Q(x_0)$.

2.7.2. Método de Birge-Vieta

Un polinomio de la forma,

$$P(x) = a_1x^n + a_2x^{n-1} + \dots + a_{n-1}x + a_n \quad (2.13)$$

puede ser factorizado en la forma

$$P(x) = (x - p_1)(x - p_2) \dots (x - p_n) \quad (2.14)$$

donde p_i es un cero (o raíz) del polinomio porque $P(p_i) = 0$.

El método Birge-Vieta aplica Newton-Raphson para encontrar una raíz del polinomio $P(x)$. Dado un punto x_k , evalúa $P(x_k)$ y $P'(x_k)$ mediante división sintética. Cuando encuentra una raíz p_i , elimina el factor $(x - p_i)$ mediante división sintética y continúa trabajando sobre el polinomio resultante. El proceso se repite hasta encontrar todas las raíces del polinomio.

2.7.3. Ejemplo de Birge-Vieta

Sea $P(x) = x^3 - 2x^2 - 5x + 6$. Valor inicial $x = -(-5)/6 = 0.8333$.

Primera iteración

$$\begin{array}{r|rrrr}0.8333 & 1 & -2 & -5 & 6 \\ & & 0.8333 & -0.9722 & -4.9769 \\ \hline & 1 & -1.1667 & -5.9722 & 1.0231\end{array}$$

$$\begin{array}{r|rrr}0.8333 & 1 & -1.1667 & -5.9722 \\ & & 0.8333 & -0.2778 \\ \hline & 1 & -0.3333 & -6.2500\end{array}$$

$$x = 0.8333 - \frac{1.0231}{-6.2500} = 0.9970$$

$$0.9970 \left| \begin{array}{cccc} 1 & -2 & -5 & 6 \\ & 0.9970 & -1.0000 & -5.9822 \\ \hline 1 & -1.0030 & -6.0000 & 0.0178 \end{array} \right.$$

$$0.9970 \left| \begin{array}{ccc} 1 & -1.0030 & -6.0000 \\ & 0.9970 & -0.0059 \\ \hline 1 & -0.0059 & -6.0059 \end{array} \right.$$

$$x = 0.9970 - \frac{0.0178}{-6.0059} = 1$$

$x = 1$ es la primera raíz.

Se encuentra el siguiente polinomio eliminando el factor $(x - 1)$ mediante división sintética.

$$1 \left| \begin{array}{cccc} 1 & -2 & -5 & 6 \\ & 1 & -1 & -6 \\ \hline 1 & -1 & -6 & 0 \end{array} \right.$$

El polinomio $Q(x)$ resultante es $x^2 - x - 6$.

Segunda iteración

Continuando con el polinomio $x^2 - x - 6$ y con un valor inicial $x = -(-1)/(-6) = -0.1667$

$$-0.1667 \left| \begin{array}{ccc} 1 & -1 & -6 \\ & -0.1667 & 0.1944 \\ \hline 1 & -1.1667 & -5.8056 \end{array} \right.$$

$$-0.1667 \left| \begin{array}{cc} 1 & -1.1667 \\ & -0.1667 \\ \hline 1 & -1.3333 \end{array} \right.$$

$$x = -0.1667 - \frac{-5.8056}{-1.3333} = -4.5208$$

$$-4.5208 \left| \begin{array}{ccc} 1 & -1 & -6 \\ & -4.5208 & 24.9588 \\ \hline 1 & -5.5208 & 18.9588 \end{array} \right.$$

$$-4.5208 \left| \begin{array}{cc} 1 & -5.5208 \\ & -4.5208 \\ \hline 1 & -10.0417 \end{array} \right.$$

$$x = -4.5208 - \frac{18.9588}{-10.0417} = -2.6328$$

$$-2.6328 \left| \begin{array}{ccc} 1 & -1 & -6 \\ & -2.6328 & 9.5646 \\ \hline 1 & -3.6328 & 3.5646 \end{array} \right.$$

$$-2.6328 \left| \begin{array}{cc} 1 & -3.6328 \\ & -2.6328 \\ \hline 1 & -6.2656 \end{array} \right.$$

$$x = -2.6328 - \frac{3.5646}{-6.2656} = -2.0639$$

$$-2.0639 \left| \begin{array}{ccc} 1 & -1 & -6 \\ & -2.0639 & 6.3237 \\ \hline 1 & -3.0639 & 0.3237 \end{array} \right.$$

$$-2.0639 \left| \begin{array}{cc} 1 & -3.0639 \\ & -2.0639 \\ \hline 1 & -5.1278 \end{array} \right.$$

$$x = -2.0639 - \frac{0.3237}{-5.1278} = -2.0008$$

$$-2.0008 \left| \begin{array}{ccc} 1 & -1 & -6 \\ & -2.0008 & 6.0040 \\ \hline 1 & -3.0008 & 0.0040 \end{array} \right.$$

$$-2.0008 \left| \begin{array}{cc} 1 & -3.0008 \\ & -2.0008 \\ \hline 1 & -5.0016 \end{array} \right.$$

$$x = -2.0008 - \frac{0.0040}{-5.0016} = -2$$

$x = -2$ es la segunda raíz.

Se encuentra el siguiente polinomio eliminando el factor $(x + 2)$ mediante división sintética.

$$\begin{array}{r|rrr} -2 & 1 & -1 & -6 \\ & & -2 & 6 \\ \hline & 1 & -3 & 0 \end{array}$$

El polinomio $Q(x)$ resultante es $x - 3$. La tercera raíz es $x = 3$.

2.7.4. Ejercicio de Birge-Vieta

Encontrar las raíces del polinomio $x^4 + 4x^3 - 6x^2 - 4x + 5$.

Las raíces son: 1, -1, 1, -5.

Unidad 3

Solución numérica de sistemas de ecuaciones

Conceptos básicos de matrices

Una matriz consiste de un arreglo rectangular de elementos representado por un solo símbolo.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

A es de n renglones por m columnas. Su dimensión es de $n \times m$ donde $A_{n \times m}$. Si $n = 1$, se le conoce como vector renglón;

$$b = [b_1 \quad b_2 \quad b_3 \quad \cdots \quad b_m]$$

si $m = 1$, se le conoce como vector columna.

$$c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}$$

Si $m = n$ se le llama matriz cuadrada.

$$A_{4 \times 4} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

A los elementos $a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{44}$ y en general a a_{ii} se les conoce como diagonal principal.

Tipos de matrices cuadradas

Matriz simétrica

Es una matriz donde $a_{ij} = a_{ji} \forall i, j$.

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 7 \\ 2 & 7 & 8 \end{bmatrix}$$

Matriz diagonal

Es una matriz donde todos los elementos fuera de la diagonal principal son cero.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} \end{bmatrix}$$

Matriz identidad

Es aquella matriz cuyos elementos de la diagonal principal son 1 y los demás 0.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Matriz triangular superior

Es aquella matriz en la que todos los elementos por debajo de la diagonal principal son 0.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{bmatrix}$$

La matriz triangular inferior

Es aquella matriz en la que todos los elementos por encima de la diagonal principal son 0.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

Matriz banda, tribanda o tridiagonal

La matriz banda tiene todos los elementos igual a 0 excepto en una banda centrada sobre la diagonal principal.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Operaciones con matrices

Dos matrices de $m \times n$ son iguales, si y solo si, cada elemento se encuentra en la segunda matriz. $A = B$ si $a_{ij} = b_{ij} \forall i, j$.

Suma de matrices

$$C = A + B$$

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij} \text{ para } \begin{cases} i = 1, 2, 3, \dots, n \\ j = 1, 2, 3, \dots, m \end{cases}$$

Resta de matrices

$$C = A - B$$

$$c_{ij} = a_{ij} - b_{ij} \text{ para } \begin{cases} i = 1, 2, 3, \dots, n \\ j = 1, 2, 3, \dots, m \end{cases}$$

La suma y la resta de matrices son conmutativas y asociativas.

Multiplicación por un escalar

$$C = gA$$

donde g es el escalar.

Multiplicación de dos matrices

La multiplicación de dos matrices se puede realizar si y solo si la primera matriz tiene el mismo número de columnas que el número de renglones de la segunda matriz. El producto de dos matrices se presenta como:

$$C = AB$$

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}$$

Inversa de una matriz

Aunque la multiplicación de matrices es posible, la división de matrices no está definida. Sin embargo, si la matriz es cuadrada y no singular (determinante diferente de cero) existe una matriz A^{-1} llamada inversa de la matriz para la cual

$$AA^{-1} = I.$$

La multiplicación de una matriz por la inversa es análoga a la división, en el sentido de que un número dividido por sí mismo es igual a 1.

Matriz transpuesta

Si los renglones y las columnas de una matriz A se intercambian, entonces la matriz resultante de $n \times m$ se conoce como la transpuesta de A y se denota por A^T .

$$a_{ij} = a_{ji}$$

La traza de una matriz es la suma de los elementos de su diagonal principal.

$$tr[A] = \sum_{i=1}^n a_{ii}$$

Determinante de una matriz

Para matrices de 2×2 , la determinante es:

$$\det(A) = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

Ejemplo de sistemas de ecuaciones lineales

Muchos problemas pueden ser descritos mediante un sistema de ecuaciones lineales. Por ejemplo, considere el circuito eléctrico mostrado en la figura 3.1.

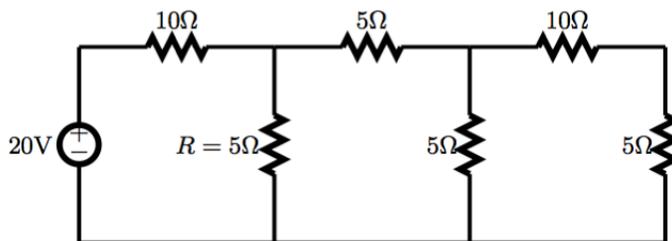


Figura 3.1: Circuito eléctrico que puede ser descrito por un sistema de ecuaciones lineales

Las ecuaciones de malla que describen a este circuito son las siguientes:

$$\begin{aligned} 15i_1 - 5i_2 &= 20 \\ -5i_1 + 15i_2 - 5i_3 &= 0 \\ -5i_2 + 20i_3 &= 0 \end{aligned}$$

A partir de las ecuaciones de malla se pueden obtener todas las corrientes, voltajes y potencial de los elementos del circuito.

Utilizando la notación de matrices se puede obtener una matriz aumentada con este ejemplo. Se define \mathbf{R} , \mathbf{i} y \mathbf{v} :

$$R = \begin{bmatrix} 15 & -5 & 0 \\ -5 & 15 & -5 \\ 0 & -5 & 20 \end{bmatrix}$$

$$i = \begin{bmatrix} i_1 \\ i_2 \\ i_3 \end{bmatrix}$$

$$v = \begin{bmatrix} 20 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Se puede expresar el juego de ecuaciones como:

$$Ri = v = \begin{bmatrix} 15 & -5 & 0 \\ -5 & 15 & -5 \\ 0 & -5 & 20 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i_1 \\ i_2 \\ i_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 20 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Y que a su vez puede representarse por la matriz aumentada:

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} 15 & -5 & 0 & 20 \\ -5 & 15 & -5 & 0 \\ 0 & -5 & 20 & 0 \end{bmatrix}$$

3.1. Método de eliminación de Gauss

Este método consiste en expresar el sistema como una matriz aumentada de la forma:

$$Ax = b \tag{3.3}$$

La idea del método es llevar el sistema a la forma triangular superior y de allí despejar una variable a la vez partiendo de la última. El último paso se conoce como sustitución en reversa. Para lograr llevar el sistema a la forma triangular superior, se emplean las operaciones elementales de matrices como son el intercambio de renglones, división entre un escalar a cada renglón, así como suma y resta entre renglones.

3.1.1. Algoritmo de eliminación de Gauss

n : número de ecuaciones

a_{ij} : elementos de la matriz aumentada A

p : índice del elemento pivote

f_i : fila i

1. Para $i = 1, \dots, n - 1$ seguir los pasos 2 a 4.
2. Sea p el menor entero con $i \leq p \leq n$ y $a_{pi} \neq 0$
Si p no puede encontrarse, SALIDA('No existe solución única')
PARAR
3. Si $p \neq i$ intercambiar la fila p por la fila i
4. Para $j = i + 1, \dots, n$ seguir los pasos 5 a 6
5. Hacer $m_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}$
6. Realizar $f_j - m_{ij}f_i$ e intercambiar por la fila f_j
7. Si $a_{nn} = 0$ entonces SALIDA('No existe solución única')
PARAR
8. Hacer $x_n = \frac{c_n}{a_{nn}}$
9. Para $i = n - 1, \dots, 1$ tomar $x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(c_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j \right)$
10. SALIDA x
PARAR

3.1.2. Código en Matlab del método de Gauss

```

1 function res = EGaussiana(A,varargin)
2
3 % Implementación del método de eliminación gaussiana para resolver sistemas
4 % de ecuaciones lineales y encontrar la inversa de una matriz.
5 %
6 %     Inv = EGaussiana(A)
7 %
8 % Regresa Inv, la inversa de A.
9 %
10 %     x = EGaussiana(A,b)
11 %

```

```

12 % Regresa x, la solución del sistema Ax=b.
13
14 MAXPIVOTE = 1;
15
16 % Se crea la matriz aumentada
17 [n,m] = size(A);
18 if length(varargin)>=1
19     b = varargin{1};
20     A = [A b];
21 elseif n==m
22     A = [A eye(n)];
23 end
24 [n,m] = size(A);
25
26 if n>m
27     error('n>m en la matriz aumentada');
28 end
29
30 for i=1:n
31     if MAXPIVOTE
32         % Encontrar renglon de maximo pivote
33         k = find(abs(A(:,i))==max(abs(A(i:n,i))),1,'last');
34
35         if k~=i
36             % Intercambiar renglones
37             rPivote = A(k,:);
38             A(k,:) = A(i,:);
39             A(i,:) = rPivote;
40         end
41     end
42
43     % Salir si determinante es cero
44     if abs(A(i,i)) == 0
45         error('Determinante es igual a cero')
46     end
47
48     % Hacer ceros en la columna i debajo de la fila i
49     for j=i+1:n
50         A(j,:) = A(j,:) - A(i,:)*A(j,i)/A(i,i);
51     end
52 end
53
54 for i=n:-1:1

```

```

55     % Hacer uno el elemento i, i
56     A(i, :) = A(i, :) / A(i, i);
57
58     % Hacer ceros en la columna i arriba de la fila i
59     for j=i-1:-1:1
60         A(j, :) = A(j, :) - A(i, :) * A(j, i);
61     end
62 end
63
64 res = A(:, n+1:m);

```

3.2. Método de eliminación de Gauss-Jordan

Jordan propuso una modificación al método de Gauss. En vez de llevar el sistema a la forma triangular superior y de allí usar la sustitución en reversa, él pensó que sería más fácil continuar el procedimiento de eliminación de elementos, es decir, él propuso eliminar los elementos tanto arriba como abajo del pivote hasta llegar a la matriz identidad. De esta manera la solución del sistema se puede leer directamente de la última columna de la matriz aumentada.

3.2.1. Algoritmo de eliminación de Gauss-Jordan

1. Determinar la primer columna (a la izquierda) no cero.
2. Si el primer elemento de la columna es cero, intercambiarlo por un renglón que no tenga cero. Multiplicando apropiadamente el renglón igual a 1. Este primer 1 será llamado pivote.
3. Obtener ceros arriba y abajo del pivote sumando múltiplos adecuados a los renglones debajo de renglón pivote en la matriz completa.
4. Cubrir la columna y el renglón de trabajo y repetir el proceso comenzando en el paso 1 con la columna siguiente.

Es importante observar que en el método de Gauss-Jordan:

- De forma general, la matriz se va escalonando y reduciendo a la vez.
- En el paso 2, si el elemento no es cero no se realiza intercambio.
- En el paso 3, los elementos que se hacen cero no solo son los inferiores al pivote (Eliminación Gaussiana) sino también los superiores.

3.2.2. Diagrama de flujo del método de Gauss-Jordan

En la figura 3.2 se muestra el diagrama de flujo del método de eliminación de Gauss-Jordan.

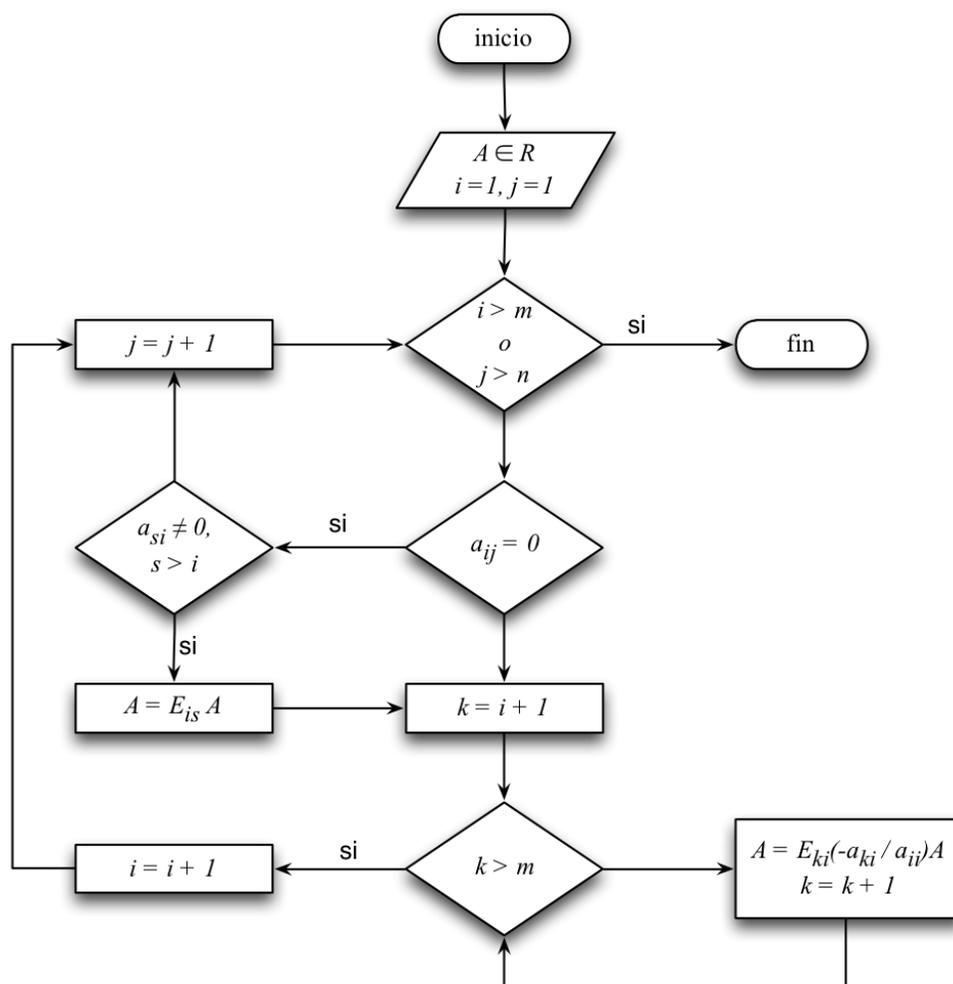


Figura 3.2: Diagrama de flujo del método de Gauss-Jordan

3.3. Inversa de matrices

Este método es más teórico. Consiste en expresar el sistema como una ecuación matricial de la forma $Ax = b$ y despejar el vector columna x . Dado que no está definida la división de matrices, se usa la matriz inversa A^{-1} . Multiplicando por la matriz inversa ambos lados se tiene

$$A^{-1}Ax = A^{-1}b$$

de donde

$$Ix = A^{-1}b$$

y finalmente

$$x = A^{-1}b$$

El problema se reduce a hallar la matriz inversa para multiplicarla por el vector columna b y así hallar x .

3.3.1. Procedimiento para inversa de una matriz

Para hallar la matriz inversa se puede utilizar el siguiente procedimiento.

1. Se coloca la matriz A junto a una matriz identidad I del mismo tamaño, es decir,

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n} & 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

2. Se aplica la eliminación de Gauss Jordán a la matriz A , las operaciones que se le hagan a la matriz A , también se le aplican a I . La matriz A se convierte en I . Se puede demostrar que matriz I se convierte en A^{-1} .
3. Una vez hallada A^{-1} se procede a multiplicarla por $bx = A^{-1}b$.

3.3.2. Ejemplo de la inversa de una matriz

Encontrar la inversa de

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 2 & 8 & 6 \\ 5 & 1 & 35 \end{bmatrix}$$

Primero se verifica que sea una matriz no singular, calculando el determinante de A , es igual a 0.5. Por lo tanto se procede a aumentar la matriz con la matriz identidad del mismo tamaño.

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 8 & 6 & 0 & 1 & 0 \\ 5 & 1 & 35 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se utiliza el método de Gauss-Jordan para encontrar la inversa de la matriz.

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -2 & 1 & 0 \\ 5 & 1 & 35 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & -14 & 15 & -5 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -14 & 15 & -5 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 7 & 4 & -\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -14 & 15 & -5 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 7 & 4 & -\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -19 & \frac{7}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 7 & 4 & -\frac{3}{2} & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -20 & \frac{15}{2} & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -19 & \frac{7}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 137 & -\frac{101}{2} & -7 \\ 0 & 1 & 0 & -20 & \frac{15}{2} & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -19 & \frac{7}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

Por lo tanto, la matriz inversa es

$$\begin{bmatrix} 137 & -\frac{101}{2} & -7 \\ -20 & \frac{15}{2} & 1 \\ -19 & \frac{7}{2} & 1 \end{bmatrix}$$

3.3.3. Ejercicios propuestos para inversión de matrices

1. $\begin{bmatrix} 1 & 4 & 6 \\ 3 & 1 & 2 \\ 4 & 5 & 8 \end{bmatrix}$

2. $\begin{bmatrix} 1 & 3 & -2 & 1 \\ 1 & 3 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & -1 & 4 \\ 2 & 6 & 1 & 2 \end{bmatrix}$

3.4. Método iterativo de Jacobi

Este método consiste en despejar una de las incógnitas de una ecuación dejándola en función de las otras. La manera más sencilla es despejar a x_1 de la primera ecuación, x_2 de la segunda ecuación, x_i de la i -ésima ecuación, hasta x_n de la n -ésima ecuación. Es necesario por razones obvias que todos los elementos de la diagonal principal de la matriz de coeficientes del sistema lineal, sean diferentes de cero.

Sea el sistema lineal:

$$\begin{aligned}
 a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
 a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
 a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n &= b_3 \\
 \vdots & \\
 a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
 \end{aligned}$$

Al realizar los despejes propuestos se tiene x_1 de la primera ecuación, x_2 de la segunda ecuación, etc., entonces:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= \frac{b_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n)}{a_{11}} \\
 x_2 &= \frac{b_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n)}{a_{22}} \\
 x_3 &= \frac{b_3 - (a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + \cdots + a_{3n}x_n)}{a_{33}} \\
 &\vdots \\
 x_n &= \frac{b_n - (a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{n(n-1)}x_{n-1})}{a_{nn}}
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Para estimar la primera aproximación a la solución se debe partir de un vector inicial, el cual puede ser el vector $x^0 = 0$, o algún otro que se encuentre próximo al vector de solución x . En general, el vector de aproximación a la solución después de las iteraciones se puede calcular de la siguiente manera:

$$x_i^{k+1} = \frac{b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij}x_j^k}{a_{ii}} \tag{3.5}$$

3.4.1. Algoritmo del método de Jacobi

Para aplicar el método, se considera una primera aproximación al valor de las incógnitas x , se sustituye esta primera aproximación en los segundos miembros de las ecuaciones 3.4, de manera sucesiva, hasta llegar a la última ecuación y encontrar x_n . Se obtiene de esta manera una nueva aproximación a los valores de las incógnitas. El procedimiento se repite hasta que la solución converja cerca de los valores reales. La convergencia se puede verificar usando el criterio de error relativo.

Este método es muy poco utilizado debido a que el método de Gauss-Seidel converge más rápidamente a la solución y además lo hace cuando no se logra que el método de Jacobi converja.

La condición suficiente para que el método de Jacobi converja es que la matriz de coeficientes sea diagonal dominante, es decir que cada elemento de la diagonal principal es mayor en valor absoluto que la suma del resto de los elementos de la misma fila en la que se encuentra el elemento en cuestión.

$$|a_{ii}| > \sum |a_{ij}| \quad (3.6)$$

En la figura 3.4 se presenta un algoritmo para este método iterativo.

Algoritmo de Jacobi

Considerando la siguiente notación:

n: número de ecuaciones

a_{ij} : elementos de la matriz A (i indica el número de fila y j el número de columna en el que se encuentra el elemento en cuestión)

c_i : elementos del vector C

x_{0i} : componentes de la primera aproximación al vector solución (esta primera aproximación es X_0)

$x_i^{(k)}$: componentes de la aproximación de orden k al vector solución, k varía de 1 a N (indica el orden de aproximación o iteración)

E: cota de error o criterio de detención

N: número máximo de iteraciones

Paso 1: Para $k = 1$

Paso 2: Mientras $k \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la aproximación de orden 1 mediante la fórmula:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(c_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_{0j} \right)$$

Paso 4: Si $\|X - X_0\| < E$, SALIDA X (es decir (x_1, x_2, \dots, x_n))

PARAR

Paso 5: Tomar $k = k+1$

Paso 6: Para $i = 1, \dots, n$ tomar $x_{0i} = x_i$

Paso 7: SALIDA ('Número máximo de iteraciones completado')

PARAR

Figura 3.3: Algoritmo del método de Jacobi

3.4.2. Ejemplo del método de Jacobi

Resolver el siguiente sistema de ecuaciones utilizando el método de Jacobi. Emplear el vector inicial de $x^0 = 0$.

$$\begin{aligned} 6x_1 - x_2 - x_3 + 4x_4 &= 17 \\ x_1 - 10x_2 + 2x_3 - x_4 &= -17 \\ 3x_1 - 2x_2 + 8x_3 - x_4 &= 19 \\ x_1 + x_2 + x_3 - 5x_4 &= -14 \end{aligned}$$

Al despejar las incógnitas correspondientes se tiene:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{17 - (-x_2 - x_3 + 4x_4)}{6} \\ x_2 &= \frac{-17 - (x_1 + 2x_3 - x_4)}{-10} \\ x_3 &= \frac{19 - (3x_1 - 2x_2 - x_4)}{8} \\ x_4 &= \frac{-14 - (x_1 + x_2 + x_3)}{-5} \end{aligned} \tag{3.7}$$

Y finalmente se llena la tabla 3.4.2 con los valores calculados.

3.5. Método de eliminación de Gauss-Seidel

Los métodos de Gauss y Gauss-Jordan forman parte de los métodos directos o finitos. Al cabo de un número finito de operaciones, en ausencia de errores de redondeo, se obtiene x^* solución del sistema

$$Ax = b$$

El método de Gauss-Seidel forma parte de los métodos llamados indirectos o iterativos. En ellos se comienza con $x^0 = (x_1^0; x_2^0; \dots; x_n^0)$, una aproximación inicial de la solución. A partir de x^0 se construye una nueva aproximación de la solución, $x^1 = (x_1^1; x_2^1; \dots; x_n^1)$. A partir de x^1 se construye x^2 (aquí el superíndice indica la iteración y no indica una potencia). Así sucesivamente se construye una sucesión de vectores x^k , con el objetivo, no siempre garantizado, de que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^*$$

3.5.1. Algoritmo de eliminación de Gauss-Seidel

Generalmente los métodos indirectos son una buena opción cuando la matriz es muy grande y dispersa, es decir, cuando el número de elementos no nulos es pequeño comparado con el número total de elementos de A .

Tabla 3.1: Valores generados a partir de las ecuaciones 3.7

i	x_1	x_2	x_3	x_4	$ E_{x_1} $	$ E_{x_2} $	$ E_{x_3} $	$ E_{x_4} $
0	0	0	0	0	-	-	-	-
1	2.833333	1.700000	2.375000	2.800000	100	100	100	100
2	1.645833	2.178333	2.087500	4.181667	72.151899	21.958684	13.772455	33.041052
3	0.756528	1.863917	2.825104	3.982333	17.550945	16.868601	26.108919	5.005441
4	0.959948	1.942440	3.055073	3.889110	21.190747	4.042524	7.527439	2.397042
5	1.073512	2.018098	2.986768	3.991492	10.578776	3.748981	2.286907	2.565018
6	1.006483	2.005556	2.975894	4.015676	6.659766	0.625399	0.365414	0.602230
7	0.986458	1.994260	3.000917	3.997587	2.030015	0.566434	0.833855	0.452505
8	1.000805	1.999071	3.003342	3.996327	1.433584	0.240665	0.080719	0.031519
9	1.002851	2.001116	2.999007	4.000643	0.203982	0.102221	0.144546	0.107896
10	0.999591	2.000022	2.999290	4.000595	0.326059	0.054703	0.009464	0.001219
11	0.999489	1.999758	3.000233	3.999781	0.010259	0.013216	0.031418	0.020349
12	1.000145	2.000017	3.000104	3.999896	0.065556	0.012983	0.004312	0.002879
13	1.000090	2.000046	2.999937	4.000053	0.005505	0.001409	0.005552	0.003930
14	0.999962	1.999991	2.999984	4.000014	0.012786	0.002727	0.001578	0.000967
15	0.999986	1.999992	3.000014	3.999987	0.002459	0.000028	0.000983	0.000675
16	1.000009	2.000003	3.000001	3.999998	0.002301	0.000553	0.000415	0.000273
17	1.000002	2.000001	2.999997	4.000003	0.000752	0.000064	0.000150	0.000108
18	0.999998	1.999999	3.000000	4.000000	0.000384	0.000104	0.000101	0.000067
19	1.000000	2.000000	3.000001	3.999999	0.000193	0.000024	0.000020	0.000014
20	1.000000	2.000000	3.000000	4.000000	0.000056	0.000018	0.000022	0.000015

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} & = & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} & = & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & = & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} & = & b_n \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

En cada iteración del método de Gauss-Seidel, hay n subiteraciones. En la primera subiteración se modifica únicamente x_1 . Las demás coordenadas x_2, x_3, \dots, x_n no se modifican. El cálculo de x_1 se hace de tal manera que se satisfaga la primera ecuación.

$$\begin{aligned} x_1^1 &= \frac{b_1 - (a_{12}x_2^0 + a_{13}x_3^0 + \cdots + a_{1n}x_n^0)}{a_{11}} \\ x_i^1 &= x_i^0, i = 2, \dots, n. \end{aligned}$$

En la segunda subiteración se modifica únicamente x_2 . Las demás coordenadas x_1, x_3, \dots, x_n no se modifican. El cálculo de x_2 se hace de tal manera que se satisfaga la segunda ecuación.

$$\begin{aligned} x_2^2 &= \frac{b_2 - (a_{21}x_1^1 + a_{23}x_3^1 + \cdots + a_{2n}x_n^1)}{a_{22}} \\ x_i^2 &= x_i^1, i = 1, 3, 4, 5, \dots, n. \end{aligned}$$

Así sucesivamente, en la n -ésima subiteración se modifica únicamente x_n . Las demás coordenadas x_1, x_2, \dots, x_{n-1} no se modifican. El cálculo de x_n se hace de tal manera que se satisfaga la n -ésima ecuación.

$$\begin{aligned} x_n^n &= \frac{b_n - (a_{n1}x_1^n + a_{n3}x_3^{n-1} + \cdots + a_{nn}x_n^{n-1})}{a_{nn}} \\ x_i^n &= x_i^{n-1}, i = 1, 2, \dots, n-1. \end{aligned}$$

3.5.2. Ejemplo de eliminación de Gauss-Seidel

Utilizar el método de Gauss-Seidel para obtener la solución del sistema de ecuaciones siguiente:

$$\begin{aligned} 3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 &= 7.85 \\ 0.1x_1 + 7x_2 - 0.3x_3 &= -19.3 \\ 0.3x_1 - 0.2x_2 + 10x_3 &= 71.4 \end{aligned}$$

Primero se despeja la incógnita de la diagonal para cada una de las ecuaciones:

$$x_1 = \frac{7.85 + 0.1x_2 + 0.2x_3}{3}$$
$$x_2 = \frac{-19.3 - 0.1x_1 + 0.3x_3}{7}$$
$$x_3 = \frac{71.4 - 0.3x_1 + 0.2x_2}{10}$$

Primera iteración. Se supone que x_2 y x_3 son cero.

1. $x_2 = 0$

$$x_3 = 0$$

$$x_1 = \frac{7.85 + 0.1(0) + 0.2(0)}{3} = 2.616667$$

2. $x_1 = 2.616667$

$$x_3 = 0$$

$$x_2 = \frac{-19.3 - 0.1(2.616667) + 0.3(0)}{7} = -2.794524$$

3. $x_1 = 2.616667$

$$x_2 = -2.794524$$

$$x_3 = \frac{71.4 - 0.3(2.616667) + 0.2(-2.794524)}{10} = 7.005610$$

Segunda iteración.

1. $x_2 = -2.794524$

$$x_3 = 7.005610$$

$$x_1 = \frac{7.85 + 0.1x_1 + 0.2x_2}{3} = 2.990557$$

$$|e_{rx_1}| = \left| \frac{2.990557 - 2.616667}{2.990557} \right| * 100 = 12.502353 \%$$

2. $x_1 = 2.990557$

$$x_3 = 7.005610$$

$$x_2 = \frac{-19.3 - 0.1x_1 + 0.3x_3}{7} = -2.499625$$

$$|e_{rx_2}| = \left| \frac{-2.499625 - (-2.794524)}{-2.499625} \right| * 100 = 11.797729 \%$$

3. $x_1 = 2.990557$

$$x_2 = -2.499625$$

$$x_3 = \frac{71.4 - 0.3x_1 + 0.2x_2}{10} = 7.000291$$

$$|e_{rx_3}| = \left| \frac{7.000291 - (7.005610)}{7.000291} \right| * 100 = 0.0759826 \%$$

3.5.3. Ejercicios propuestos

Resolver los sistemas de ecuaciones utilizando el método de Gauss-Seidel.

$$1. \begin{cases} 17c_1 - 2c_2 - 3c_3 = 500 \\ -5c_1 + 21c_2 - 2c_3 = 200 \\ -5c_1 - 5c_2 + 22c_3 = 30 \end{cases} \text{ con un error porcentual del } 5 \%$$

$$2. \begin{bmatrix} 10 & 2 & -1 & 0 & 26 \\ 1 & 20 & -2 & 3 & -15 \\ -2 & 1 & 30 & 0 & 53 \\ 1 & 2 & 3 & 20 & 47 \end{bmatrix} \text{ con al menos tres iteraciones.}$$

$$3. \begin{bmatrix} -1 & 2 & 10 & 11 \\ 11 & -1 & 2 & 12 \\ 1 & 5 & 2 & 8 \end{bmatrix} \text{ con al menos tres iteraciones.}$$

Unidad 4

Aproximación polinomial y funcional

En la práctica es frecuente tratar funciones que no son del tipo de las elementales, además de funciones definidas de manera tabular o gráfica, de las que se desconoce su expresión analítica y de las que se necesita conocer valores de la variable que no están tabulados.

Existen casos de funciones expresadas en forma tabular en los que se requiere una alta aproximación y para ello existen métodos numéricos que por lo general utilizan funciones racionales enteras (polinomios), de manera que la curva descrita por los mismos toque todos los puntos definidos. Si no se requiere gran aproximación se deriva una curva simple que represente el comportamiento general de los datos.

4.1. Método de interpolación

Si se tiene una función definida en forma tabular de la que se desconoce su expresión analítica puede afirmarse que para $n + 1$ datos o puntos existe uno y solo un polinomio de n -ésimo grado que pasa a través de todos los puntos y existe una variedad de fórmulas matemáticas que permiten expresar a este polinomio.

4.1.1. Diferencias finitas

El cálculo de las diferencias finitas permite encontrar el grado del polinomio por el cual puede describirse una función tabular.

Dada la función $y = f(x)$ definida en forma tabular como la que se presenta en la tabla 4.1, y suponiendo que los valores de la variable independiente x_n , están igualmente espaciados entre sí, es decir que el incremento o paso es igual a un valor constante denominado h .

Se denominan primeras diferencias hacia adelante y se representan con Δy_i a las diferencias entre dos valores consecutivos de y , es decir:

Tabla 4.1: Valores para la función $y = f(x)$

x	y
x_0	y_0
$x_1 = x_0 + h$	y_1
$x_2 = x_0 + 2h$	y_2
$x_3 = x_0 + 3h$	y_3
...	...
$x_n = x_0 + nh$	y_n

$$\begin{aligned}
 a_0 &= y_1 - y_0 \\
 a_1 &= y_2 - y_1 \\
 a_2 &= y_3 - y_2 \\
 &\dots \\
 a_{n-1} &= y_n - y_{n-1}
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Las diferencias de las primeras diferencias se llaman segundas diferencias hacia adelante, $\Delta^2 y_i$:

$$\begin{aligned}
 b_0 &= a_1 - a_0 \\
 b_1 &= a_2 - a_1 \\
 b_2 &= a_3 - a_2 \\
 &\dots \\
 b_{n-2} &= a_{n-1} - a_{n-2}
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

Las diferencias de las segundas diferencias se llaman terceras diferencias hacia adelante, $\Delta^3 y_i$.

$$\begin{aligned}
 c_0 &= b_1 - b_0 \\
 c_1 &= b_2 - b_1 \\
 c_2 &= b_3 - b_2 \\
 &\dots \\
 c_{n-3} &= a_{n-2} - a_{n-3}
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Siguiendo este proceso se definen las cuartas, quintas, etc., diferencias hacia adelante. Todas las diferencias pueden arreglarse en una tabla de diferencias (ver tabla 4.2), en donde cada diferencia se indica entre los dos elementos que la producen.

Tabla 4.2: Tabla de diferencias divididas

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$
x_0	y_0	a_0	b_0	c_0
x_1	y_1	a_1	b_1	c_1
x_2	y_2	a_2	b_2	c_2
...

Si una de estas diferencias se vuelve constante (o aproximadamente constante), puede decirse que los valores tabulados pueden describirse por un polinomio de grado igual al orden de la diferencia constante (o aproximadamente constante).

4.1.2. Diferencias divididas

Si se considera la función $y = f(x)$ definida en forma tabular, parecida a la presentada en la tabla 4.1, pero sin que los valores de la variable independiente tengan paso constante, puede escribirse un polinomio de grado n -ésimo que pase por todos los $(n + 1)$ puntos definidos de la función tal como:

$$P_n(x) = a_0 + (x - x_0)a_1 + (x - x_0)(x - x_1)a_2 + \cdots + (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})a_n \quad (4.4)$$

Los coeficientes a_i pueden determinarse fácilmente si se utilizan las diferencias divididas de los valores tabulados. La diferencia dividida de orden cero se define como $f[x_r] = f(x_r)$, esta diferencia se puede denotar también como y_r o bien f_r .

La diferencia de primer orden o diferencia de orden uno es igual a:

$$f[x_r, x_s] = \frac{f(x_s) - f(x_r)}{x_s - x_r} \quad (4.5)$$

4.2. Método de interpolación de Newton

La fórmula general para la interpolación de Newton para un polinomio de orden n es

$$f_n(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + b_n(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1}) \quad (4.6)$$

Para un polinomio de n -ésimo orden se requieren $n + 1$ puntos. Donde:

$$\begin{aligned} b_0 &= f(x_0) \\ b_1 &= f(x_1, x_0) \\ b_2 &= f(x_2, x_1, x_0) \\ b_3 &= f(x_3, x_2, x_1, x_0) \\ &\vdots \\ b_n &= f(x_n, x_{n-1}, \cdots, x_1, x_0) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Donde las evaluaciones puestas entre paréntesis son diferencias divididas finitas, es decir:

$$f(x_i, x_j) = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j} \quad (4.8)$$

La segunda diferencia dividida es:

$$f(x_i, x_j, x_k) = \frac{f(x_i, x_j) - f(x_j, x_k)}{x_i - x_k} \quad (4.9)$$

La n -ésima diferencia dividida es:

$$f(x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0) = \frac{f(x_n, x_{n-1}, \dots, x_2, x_1) - f(x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_1, x_0)}{x_n - x_0} \quad (4.10)$$

Estas diferencias se utilizan para evaluar los coeficientes b_0, b_1, \dots, b_n , los cuales se utilizan para obtener el polinomio de interpolación, el cual es conocido como el polinomio de interpolación por diferencias divididas de Newton. De la ecuación 4.2 se obtiene:

$$f_n(x) = f(x_0) + f(x_1, x_0)(x - x_0) + f(x_2, x_1, x_0)(x - x_0)(x - x_1) + \dots + f(x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0)(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}) \quad (4.11)$$

De manera tabular se podría expresar como se muestra en la tabla 4.2.

Tabla 4.3: Tabla que muestra las diferencias divididas del polinomio de Newton de orden 4

i	x_i	$f(x_i)$	Primero	Segundo	Tercero	Cuarto
0	x_0	$f(x_0)$	$f(x_1, x_0)$	$f(x_2, x_1, x_0)$	$f(x_3, x_2, x_1, x_0)$	$f(x_4, x_3, x_2, x_1, x_0)$
1	x_1	$f(x_1)$	$f(x_2, x_1)$	$f(x_3, x_2, x_1)$	$f(x_4, x_3, x_2, x_1)$	
2	x_2	$f(x_2)$	$f(x_3, x_2)$	$f(x_4, x_3, x_2)$		
3	x_3	$f(x_3)$	$f(x_4, x_3)$			
4	x_4	$f(x_4)$				

4.2.1. Ejemplo del polinomio de Newton

Utilizar la interpolación de polinomios de Newton para interpolar los puntos $x_0 = 1, x_1 = 4, x_2 = 6, x_3 = 5$ a un polinomio de tercer orden para estimar $\ln(2)$.

Tabla 4.4: Datos de las diferencias divididas obtenidas para estimar el valor de $\ln(2)$

i	x_i	$f(x_i)$	$f(x_i, x_{i-1})$	$f(x_i, x_{i-1}, x_{i-2})$	$f(x_i, x_{i-1}, x_{i-2}, x_{i-3})$
0	1	0	0.46209812	-0.05187311	0.00786553
1	4	1.38629436	0.20273255	-0.02041100	
2	6	1.79175947	0.18232156		
3	5	1.60943791			

Donde las diferencias divididas son:

$$b_0 = f(x_0) = 0$$

$$b_1 = f(x_1, x_0) = 0.46209812$$

$$b_2 = f(x_2, x_1, x_0) = -0.05187311$$

$$b_3 = f(x_3, x_2, x_1, x_0) = 0.00786553$$

Y el polinomio resultante queda:

$$f_3(x) = 0 + 0.46209812(x - 1) - 0.05187311(x - 1)(x - 4) + 0.00786553(x - 1)(x - 4)(x - 6)$$

Obteniendo el valor aproximado para $x = 2$, se tiene:

$$f_3(2) = 0.62876858$$

Donde el error es:

$$|e_r| = \left| \frac{0.693147 - 0.62876858}{0.693147} \right| * 100 \% = 9.287888 \%$$

4.2.2. Ejercicios

Usando los valores de la tabla siguiente, calcular el polinomio usando solo los 4 primeros puntos y después calcular otro polinomio usando todos los puntos.

Tabla 4.5: Datos para calcular polinomios de Newton

i	x	$f(x)$
0	1	0
1	3	1.0986122
2	4	1.3862944
3	5	1.6094379
4	6	1.7917595

4.3. Método de interpolación de Lagrange de primer orden

El polinomio de interpolación de Lagrange se puede obtener de manera directa a partir de la formulación del polinomio de Newton. Se hará esto únicamente para el caso del polinomio en primer orden. Para obtener la forma de Lagrange, se reformulan las diferencias divididas. Por ejemplo, la primera diferencia dividida se puede reformular como:

$$f(x_1, x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \quad (4.12)$$

La cual es referida como:

$$f(x_1, x_0) = \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0} \quad (4.13)$$

Por último, al agrupar términos similares y simplificar se tiene la forma del polinomio de Lagrange:

$$f(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) \quad (4.14)$$

La interpolación de polinomios de Lagrange es simplemente una reformulación del polinomio de Newton que evita el cálculo por diferencias divididas. Se puede expresar de manera concisa como:

$$f(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i) \quad (4.15)$$

donde:

$$L_i(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad (4.16)$$

Donde \prod designa el producto de, por ejemplo, cuando $n = 1$ es

$$f(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1) \quad (4.17)$$

Cuando $n = 2$ es

$$f(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2) \quad (4.18)$$

y así sucesivamente.

Para los casos en donde el orden del polinomio se desconozca, el método de Newton tiene ventajas debido a que profundiza en el comportamiento de las diferentes fórmulas de orden superior. En general puede integrarse fácilmente en los cálculos de Newton ya que la aproximación usa una diferencia dividida. De esta forma, desde el punto de vista de cálculo, a menudo, se prefiere el método de Newton.

4.3.1. Ejemplo del método de interpolación de Lagrange

Utilizar la interpolación de polinomios de Lagrange para interpolar los puntos $x_0 = 1, x_1 = 4, x_2 = 6$ a un polinomio de primer orden para estimar $\ln(2)$.

$$x_0 = 1 \quad f(x_0) = 0$$

$$x_1 = 4 \quad f(x_1) = 1.386294$$

$$x_2 = 6 \quad f(x_2) = 1.791759$$

Para $n = 1$ sustituyendo en la ecuación 4.17 los punto se tiene:

$$f(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f(x_1)$$

$$f(x) = \frac{x - 4}{1 - 4}(0) + \frac{x - 1}{4 - 1}(1.386294)$$

para $x = 2$

$$f(2) = \frac{2 - 4}{1 - 4}(0) + \frac{2 - 1}{4 - 1}(1.386294) = 0.462098$$

Donde el error verdadero es:

$$|E_v| = \left| \frac{V_v - V_a}{V_v} \right| = \left| \frac{0.693147 - 0.462098}{0.693147} \right| \times 100 = 33.333333 \%$$

4.4. Métodos de interpolación mediante polinomios de grado n

Cuando n se va incrementando, se obtienen polinomios de mayor grado. Esto hace que en muchas ocasiones el error se minimice y se obtenga una mejor aproximación a los datos que se quieren mostrar mediante un polinomio.

Tomando el ejemplo anterior y usando $n = 2$, se tiene:

$$f(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f(x_0) + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f(x_1) + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f(x_2)$$

$$f(x) = \frac{(x - 4)(x - 6)}{(1 - 4)(1 - 6)}(0) + \frac{(x - 1)(x - 6)}{(4 - 1)(4 - 6)}(1.386294) + \frac{(x - 1)(x - 4)}{(6 - 1)(6 - 4)}(1.791759)$$

Para $x = 2$

$$f(2) = 0.565844$$

Donde el error verdadero es $|E_v| = 18.3659 \%$.

4.5. Método de mínimos cuadrados

En este tipo de aproximación (también llamada aproximación funcional) se trata de encontrar la ecuación de una curva que, aunque no pase por todos los puntos, tenga pocas variaciones, es decir sea suave y pase lo más cerca posible de todos ellos, para ello es necesario aplicar el criterio de mínimos cuadrados. Antes de aplicar este criterio, debe escogerse la forma de la curva que se va a ajustar al conjunto de puntos dado y su ecuación puede obtenerse desde un conocimiento previo del problema, es decir por su interpretación física o en forma arbitraria observando que ecuación conocida describe aproximadamente a esta curva.

4.5.1. Regresión lineal

El ejemplo más simple de aproximación por mínimos cuadrados es el ajuste de un conjunto de datos a una línea recta.

La expresión matemática de una recta es:

$$y = a_0 + a_1x + e \quad (4.19)$$

en donde a_0 y a_1 son coeficientes que representan la intersección con el eje y y la pendiente, respectivamente, e es el error o diferencia entre el modelo y las observaciones. Reordenando, se puede calcular el error como:

$$e = y - a_0 - a_1x \quad (4.20)$$

es decir, es la diferencia entre el valor real de y y el valor aproximado, $a_0 + a_1x$ que predice la ecuación lineal.

Una forma de obtener un mejor ajuste es minimizar la suma de cuadrados de los residuos, S_r , de la siguiente manera:

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i)^2 \quad (4.21)$$

Para encontrar los valores de a_0 y a_1 que minimicen la ecuación 4.21 se debe derivar esta ecuación con respecto a los coeficientes indicados, es decir:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i) \quad (4.22)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n [(y_i - a_0 - a_1x_i)x_i] \quad (4.23)$$

Para generar un mínimo, se igualan estas derivadas a cero y se expresan como un conjunto de dos ecuaciones lineales con dos incógnitas a_0 y a_1 .

$$\begin{aligned} na_0 + \sum x_i a_i &= \sum y_i \\ \sum x_i a_0 + \sum x_i^2 a_i &= \sum x_i y_i \end{aligned} \quad (4.24)$$

Si se resuelve este sistema se obtiene:

$$a_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad (4.25)$$

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x} \quad (4.26)$$

donde \bar{y} y \bar{x} son las medias aritméticas de y y x respectivamente.

El error estándar de aproximación $S_{y/x}$, que indica el error para los valores predichos de y correspondientes a los valores particulares de x y permite cuantificar la dispersión alrededor de la línea de regresión, se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}} \quad (4.27)$$

Para cuantificar la eficiencia del ajuste, que es particularmente útil en la comparación de varias regresiones, se utilizan el coeficiente de determinación r^2 y el de correlación r , que es la raíz cuadrada del coeficiente anterior.

El coeficiente de determinación se calcula como sigue:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \quad (4.28)$$

donde: $S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2$ es la cantidad de dispersión en la variable dependiente que existe antes de la regresión.

La diferencia entre las dos cantidades cuantifica la mejora en la reducción del error debido al modelo de la línea recta.

Para un ajuste perfecto $S_r = 0$ y $r^2 = 1$, así la línea recta explica un 100 % de la variabilidad.

El algoritmo para regresión lineal es el que se muestra en la figura 4.5.1.

4.5.2. Ejemplo de regresión lineal

Encontrar la ecuación de regresión lineal para los datos de la tabla siguiente que representan las temperaturas (x) y las ventas (y) de bebidas refrescantes de cierta compañía.

x	5	7	10	12	16	20	23	27	19	14	9	6
y	9	11	15	16	20	24	27	29	22	20	14	9

Se formula la tabla 4.5.2 para obtener los valores de a_0 y a_1 .

	x	y	xy	x^2
	5	9	45	25
	7	11	77	49
	10	15	150	100
	12	16	192	144
	16	20	320	256
	20	24	480	400
	23	27	621	529
	27	29	783	729
	17	22	374	289
	14	20	280	196
	9	14	126	81
	6	9	54	36
Suma	166	216	3502	2834
Media	13.833	18		

Algoritmo para Regresión lineal

Considerando la siguiente notación:

n : número de datos o puntos definidos de la función tabular

x_i : valor de la variable independiente (i varía de 1 a n)

y_i : valor de la variable dependiente

S_x : suma de los valores de x_i

S_y : suma de los valores de y_i

X^2 : suma de cuadrados de x_i

Y^2 : suma de cuadrados de y_i

XY : suma del producto

x_m : valor medio de x

y_m : valor medio de y

a_1 : pendiente

a_0 : término independiente

Paso 1: Para $i = 1, \dots, n$, seguir los pasos 2 a 4

Paso 2: calcular la suma de los valores de x como: $S_x = \sum x_i$

Paso 3: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la suma de los valores de y como: $S_y = \sum y_i$

Paso 4: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la suma de cuadrados de x como: $X^2 = \sum x_i^2$

Paso 5: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la suma de cuadrados de y como: $Y^2 = \sum y_i^2$

Paso 6: Hacer $x_m = S_x/n$

Paso 7: Hacer $y_m = S_y/n$

Paso 8: Calcular a_1 mediante la fórmula: $a_1 = (n \sum XY - S_x S_y) / (n \sum X^2 - S_x^2)$

Paso 9: Calcular a_0 mediante la fórmula: $a_0 = y_m - a_1 x_m$

Paso 10: la SALIDA es a_0 y a_1

PARAR

Figura 4.1: Algoritmo para regresión lineal.

$$a_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$a_1 = \frac{(12)(3502) - (166)(216)}{(12)(2834) - (166)^2}$$

$$a_1 = 0.9559826$$

Para obtener el valor de a_0 , se realizan las siguientes operaciones:

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x}$$

$$a_0 = 18 - (0.9559826)(13.833)$$

$$a_0 = 4.7755735$$

Para calcular el valor de R^2 , primero se obtiene la tabla 4.5.2 con los valores de S_r y S_t .

e_i^2	St_i
0.308565441	81
0.218511328	49
0.441693325	9
0.061189521	4
0.00508308	4
0.010977531	36
0.056086455	81
2.518901563	121
0.946187383	16
3.388064428	4
0.385122968	16
2.284539481	81
$S_r = 10.6249225$	$S_t = 502$

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

$$r^2 = \frac{502 - 10.6249225}{502}$$

$$r^2 = 0.9788348$$

4.5.3. Linealización de regresiones

En el caso de tener relaciones no lineales se pueden hacer transformaciones que expresen los datos de manera que sean compatibles con la regresión lineal. A continuación se presentan algunos ejemplos.

Modelo exponencial

$$y = d_1 e^{b_1 x} \quad (4.29)$$

en donde d_1 y b_1 son constantes. Para linealizar este modelo se aplican logaritmos naturales, es decir:

$$\ln y = \ln d_1 + b_1 \ln e \quad (4.30)$$

En una gráfica semilogarítmica de $\ln y$ con x se genera una línea recta con pendiente b_1 y ordenada al origen: $\ln d_1$.

Modelo de ecuación elevada a una potencia

$$y = d_2 x^{b_2} \quad (4.31)$$

En donde d_2 y b_2 son coeficientes, puede linealizarse mediante logaritmos en base 10, o sea:

$$\log y = b_2 \log x + \log d_2 \quad (4.32)$$

de forma que en una gráfica logarítmica de $\log y$ y $\log x$ se genera una línea recta con pendiente b_2 y ordenada al origen $\log d_2$.

Modelo de crecimiento a saturación

$$y = d_3 \frac{x}{b_3 + x} \quad (4.33)$$

Los coeficientes d_3 y b_3 son constantes y puede linealizarse si se invierte la ecuación 4.33, es decir:

$$\frac{1}{y} = \frac{b_3}{d_3 x} + \frac{1}{d_3} \quad (4.34)$$

Una gráfica de $\frac{1}{y}$ con $\frac{1}{x}$ será lineal, con pendiente b_3/d_3 y ordenada al origen $1/d_3$.

4.5.4. Regresión polinomial

El procedimiento de mínimos cuadrados se puede extender fácilmente y ajustar los datos a un polinomio de m -ésimo grado.

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_m x^m \quad (4.35)$$

En este caso la suma de cuadrados de los residuos es:

$$S_r = \sum_{i=0}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \dots - a_m x_i^m)^2 \quad (4.36)$$

Siguiendo el procedimiento anterior, se deriva la ecuación con respecto a cada uno de los coeficientes del polinomio, para obtener:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \dots - a_m x_i^m) \quad (4.37)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \dots - a_m x_i^m) x_i \quad (4.38)$$

...

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \dots - a_m x_i^m) x_i^m \quad (4.39)$$

Si estas ecuaciones se igualan a cero y se reordenan se obtiene un conjunto de ecuaciones normales:

$$\begin{array}{cccccccc} na_0 & + & a_1 \sum x_i & + & a_2 \sum x_i^2 & + & \dots & + & a_m \sum x_i^m & = & \sum y_i \\ a_0 \sum x_i & + & a_1 \sum x_i^2 & + & a_2 \sum x_i^3 & + & \dots & + & a_m \sum x_i^{m+1} & = & \sum x_i y_i \\ a_0 \sum x_i^2 & + & a_1 \sum x_i^3 & + & a_2 \sum x_i^4 & + & \dots & + & a_m \sum x_i^{m+2} & = & \sum x_i^2 y_i \\ \dots & & & & & & & & & & \\ a_0 \sum x_i^m & + & a_1 \sum x_i^{m+1} & + & a_2 \sum x_i^{m+2} & + & \dots & + & a_m \sum x_i^{2m} & = & \sum x_i^m y_i \end{array} \quad (4.40)$$

El error de regresión polinomial se calcula con:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}} \quad (4.41)$$

Y el coeficiente de determinación con:

$$r^2 = \frac{S_v - S_r}{S_v} \quad (4.42)$$

4.5.5. Ejemplo de regresión polinomial

Utilizar el mismo ejemplo anterior para encontrar el polinomio de orden 2.

Unidad 5

Integración numérica

La integración de una función dentro del ámbito de la ingeniería tiene tantas aplicaciones que es una herramienta indispensable. Una integral representa un área bajo la curva sobre el eje horizontal, acotada por un intervalo. La función a integrarse, en general deberá tener una de las tres formas siguientes.

1. Una función simple y continua tal como un polinomio, una función exponencial o una función trigonométrica.
2. Una función complicada y continua que es difícil o imposible de integrar directamente.
3. Una función tabulada en donde los valores de y se dan en un conjunto de puntos discretos, como es el caso, a menudo, de datos experimentales.

5.1. Método analítico

Las fórmulas o ecuaciones de Newton-Cotes son esquemas de integración numérica donde se reemplaza una función complicada con una función aproximada o fácil de integrar:

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b f_n(x)dx \quad (5.1)$$

donde $f_n(x)$ es un polinomio de la forma:

$$f_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n \quad (5.2)$$

donde n es el orden del polinomio.

La integral se puede aproximar mediante una serie de polinomios aplicados por pedazos a la función o datos sobre segmentos de longitud constante como se muestra en las figuras 5.1 y 5.2.

Se disponen de formas cerradas y abiertas de las ecuaciones de Newton-Cotes. Las formas cerradas son aquellas en las que se conocen los datos al inicio y al final del intervalo de la integración (figura 5.3). Las formas abiertas son aquellas en las cuales los límites de integración se extienden más allá del intervalo de los datos conocidos.

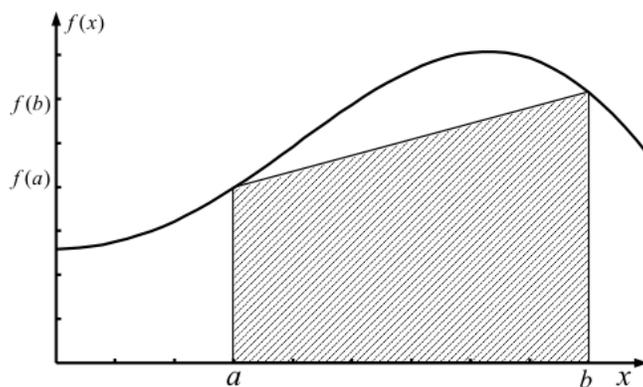


Figura 5.1: Estimación de una integral mediante una línea recta.

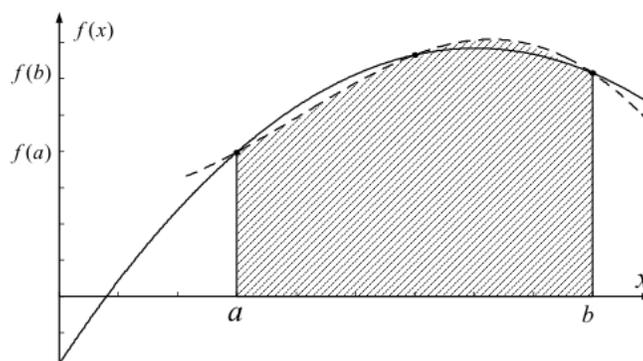


Figura 5.2: Estimación de una integral mediante una parábola.

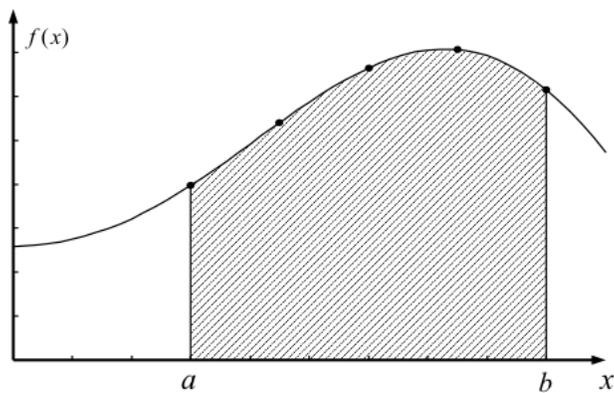


Figura 5.3: Forma cerrada de la estimación de una integral.

5.2. Método de la Regla del Trapecio

Es la primera forma o método de integración de Newton-Cotes. La integral aproximada es:

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a) \quad (5.3)$$

Geoméricamente el método trapezoidal es un equivalente a aproximar gráficamente el área de un trapezoide bajo la recta que una a $f(a)$ y $f(b)$, como se puede observar en la figura 5.4.

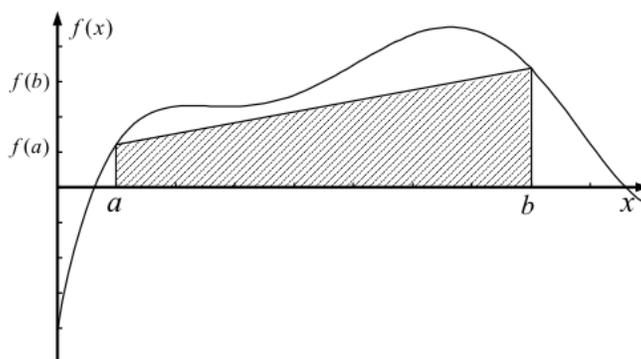


Figura 5.4: Método de la regla del trapecio.

El error aproximado está dado por:

$$E_a = -\frac{(b - a)^2}{12} \int_a^b f''(x)dx \quad (5.4)$$

5.2.1. Ejemplo del método de la regla del trapecio

Utilice el método de integración trapezoidal para integrar numéricamente la función

$$f(x) = 400x^5 - 900x^4 + 675x^3 - 200x^2 + 25x + 0.2$$

desde $a = 0$ y $b = 0.8$. El valor verdadero es 1.640533.

Evalutando a y b en $f(x)$ se tiene:

$$a = 0, f(a) = 0.2$$

$$b = 0.8, f(b) = 0.232$$

Sustituyendo en los valores en la regla trapezoidal se tiene:

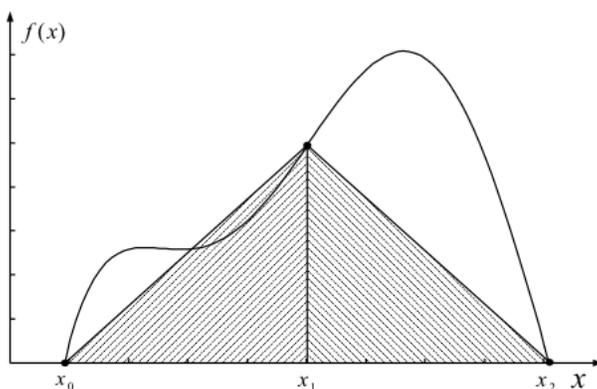


Figura 5.5: Regla del trapecio para dos segmentos.

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a) \cong \frac{0.2 + 0.232}{2}(0.8 - 0) = 0.1728$$

$$E_a = -\frac{(0.8 - 0)^2}{12} \int_0^{0.8} f''(x)dx = 2.56$$

$$\text{donde } \int_0^{0.8} f''(x)dx = \int_0^{0.8} (8000x^3 - 10800x^2 + 4050x - 400)dx = -48$$

El error verdadero es:

$$E_v = \left| \frac{1.640533 - 0.1728}{1.640533} \right| \times 100\% = 89.47\%$$

5.2.2. Aplicación múltiple de la regla trapezoidal

Para mejorar la exactitud de la regla trapezoidal se divide el intervalo de integración de a a b en un número n de segmentos y se aplica el método en cada uno de los nuevos segmentos, como se observa en las figuras 5.5, 5.6 y 5.7.

Con lo cual se tiene que la regla trapezoidal múltiple es:

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(x_0) + 2 \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n}(b - a) \quad (5.5)$$

De donde $(b - a)$ es la anchura del intervalo de integración, y la división es la altura promedio del trapecio.

Para calcular la anchura de los nuevos intervalos se tiene que $h = \frac{b - a}{n}$.

Y el error aproximado está dado por:

$$E_a = -\frac{(b - a)^2}{12n^2} \int_a^b f''(x)dx \quad (5.6)$$

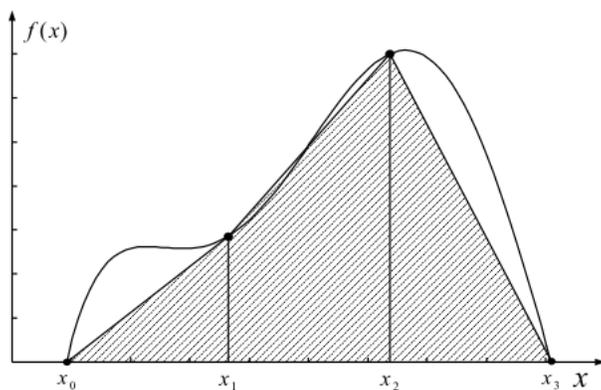
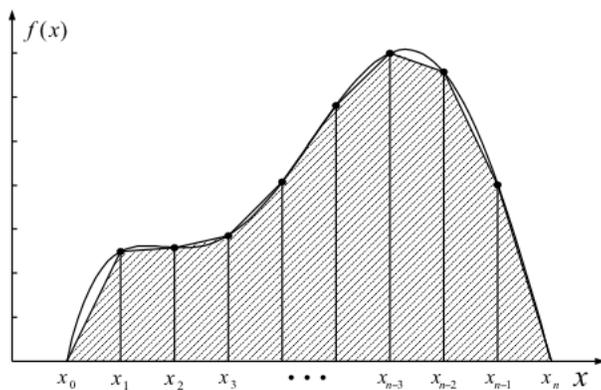


Figura 5.6: Regla del trapecio para tres segmentos.

Figura 5.7: Regla del trapecio para n segmentos.

5.2.3. Ejemplo de la aplicación múltiple de la regla del trapecio

Utilizar el método de integración trapezoidal múltiple para integrar numéricamente la función

$$f(x) = 400x^5 - 900x^4 + 675x^3 - 200x^2 + 25x + 0.2$$

desde $a = 0$ y $b = 0.8$. Utilizando dos y tres segmentos. El valor verdadero es 1.640533.

Para dos segmentos:

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{0.8-0}{2} = 0.4$$

$$x_0 = 0, f(x_0) = 0.2$$

$$x_1 = 0.4, f(x_1) = 2.456$$

$$x_2 = 0.8, f(x_2) = 0.232$$

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(x_0) + 2 \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n} (b-a) = \frac{0.2 + 2(2.456) + 0.232}{2(2)} (0.8-0) = 1.0688$$

$$E_a = -\frac{(0.8-0)^2}{12(2)^2} \int_0^{0.8} f''(x)dx = 0.64$$

$$\text{donde } \int_0^{0.8} f''(x)dx = \int_0^{0.8} (8000x^3 - 10800x^2 + 4050x - 400)dx = -48$$

El error verdadero es:

$$E_v = \left| \frac{1.640533 - 1.0688}{1.640533} \right| \times 100\% = 34.85\%$$

Para tres segmentos:

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{0.8-0}{3} = 0.266667$$

$$x_0 = 0, f(x_0) = 0.2$$

$$x_1 = 0.266667, f(x_1) = 1.432724$$

$$x_2 = 0.533333, f(x_2) = 3.487177$$

$$x_3 = 0.8, f(x_3) = 0.232$$

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{0.2 + 2(1.432724 + 3.487177) + 0.232}{2(3)}(0.8 - 0) = 1.369574$$

$$E_a = -\frac{(0.8 - 0)^2}{12(3)^2} \int_0^{0.8} f''(x)dx = 0.284444$$

$$\text{donde } \int_0^{0.8} f''(x)dx = \int_0^{0.8} (8000x^3 - 10800x^2 + 4050x - 400)dx = -48$$

El error verdadero es:

$$E_v = \left| \frac{1.640533 - 1.369574}{1.640533} \right| \times 100\% = 16.51\%$$

5.3. Método Simpson 1/3 y 3/8

Una manera de mejorar la exactitud del método trapezoidal es usar polinomios de mayor orden para conectar los puntos. Por ejemplo, si existe un punto entre $f(a)$ y $f(b)$, a la mitad, estos puntos se pueden conectar mediante una parábola.

Si hay dos puntos igualmente espaciados entre $f(a)$ y $f(b)$, los cuatro puntos se pueden conectar mediante un polinomio de tercer orden.

A las ecuaciones que se utilizan para calcular las integrales bajo estos polinomios se conocen como reglas de Simpson.

5.3.1. Regla de Simpson 1/3

Utilizando un polinomio de segundo orden se tiene que la aproximación del área bajo la curva mediante tres puntos o una parábola esta dada por (ver figura 5.8):

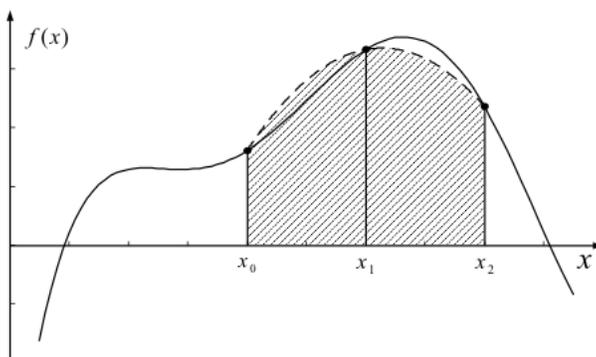


Figura 5.8: Regla Simpson 1/3.

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6}(b - a) \quad (5.7)$$

Para calcular la anchura de los nuevos intervalos se tiene:

$$h = \frac{b - a}{2} \quad (5.8)$$

Y el error aproximado está dado por:

$$E_a = -\frac{(b - a)^4}{2280} \int_a^b f^{IV}(x)dx \quad (5.9)$$

5.3.2. Ejemplo del método Simpson 1/3

Utilizar el método de Simpson 1/3 para integrar numéricamente la función

$$f(x) = 400x^5 - 900x^4 + 675x^3 - 200x^2 + 25x + 0.2$$

desde $a = 0$ a $b = 0.8$.

Obteniendo la anchura:

$$h = \frac{b - a}{n} = \frac{0.8 - 0}{2} = 0.4$$

Por lo tanto:

$$x_0 = 0, f(x_0) = 0.2$$

$$x_1 = 0.4, f(x_1) = 2.456$$

$$x_2 = 0.8, f(x_2) = 0.232$$

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6}(b - a) = \frac{0.2 + 4(2.456) + 0.232}{6}(0.8 - 0) = 1.367467$$

El error verdadero es:

$$E_v = \left| \frac{1.640533 - 1.367467}{1.640533} \right| \times 100 \% = 16.64 \%$$

5.3.3. Regla de Simpson 3/8

Utilizando un polinomio de tercer orden se tiene que la aproximación del área bajo la curva mediante cuatro puntos o una ecuación cúbica esta dada por (figura 5.9):

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8}(b - a) \quad (5.10)$$

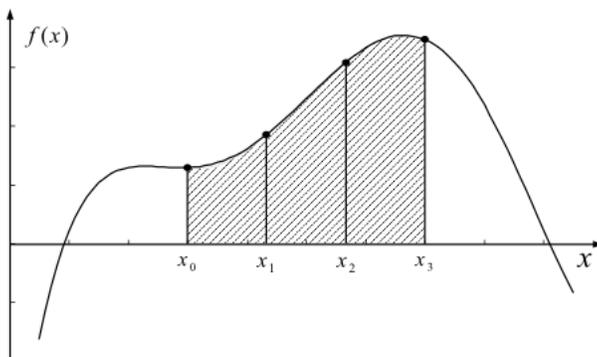


Figura 5.9: Regla Simpson 3/8.

Para calcular la anchura de los nuevos intervalos se tiene que:

$$h = \frac{b - a}{3} \quad (5.11)$$

Y el error aproximado está dado por:

$$E_a = -\frac{(b - a)^4}{6480} \int_a^b f^{IV}(x)dx \quad (5.12)$$

5.3.4. Ejemplo del método Simpson 3/8

Utilizar el método de Simpson 3/8 para integrar numéricamente la función

$$f(x) = 400x^5 - 900x^4 + 675x^3 - 200x^2 + 25x + 0.2$$

desde $a = 0$ a $b = 0.8$.

Obteniendo la anchura:

$$h = \frac{b - a}{n} = \frac{0.8 - 0}{3} = 0.266667$$

Por lo tanto:

$$x_0 = 0, f(x_0) = 0.2$$

$$x_1 = 0.266667, f(x_1) = 1.432724$$

$$x_2 = 0.533333, f(x_2) = 3.487177$$

$$x_3 = 0.8, f(x_2) = 0.232$$

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6}(b - a) =$$

$$\frac{0.2 + 3(1.432724) + 3(3.487177) + 0.232}{8}(0.8 - 0) = 1.519170$$

El error verdadero es:

$$E_v = \left| \frac{1.640533 - 1.519170}{1.640533} \right| \times 100 \% = 21.99 \%$$

5.4. Método de diferenciación

La diferenciación numérica, o aproximación numérica, es un método utilizado para evaluar las derivadas de funciones por medio de valores funcionales de puntos de datos discretos. Si se conocen los valores funcionales de dichos datos discretos, la función se puede expresar de una forma aproximada por medio de una interpolación polinomial. Por lo que, al diferenciar dicho polinomio, se pueden evaluar sus derivadas.

Por definición la derivada de una función esta dada por:

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (5.13)$$

5.4.1. Diferenciación hacia adelante, hacia atrás y centrada

Se puede representar gráficamente como se muestra en las figuras 5.10, 5.11 y 5.12.

Lo que sigue es un resumen de las fórmulas de diferenciación que se pueden obtener a partir de desarrollos en serie de Taylor.

Expresiones de primeras diferencias hacia adelante

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2}$$

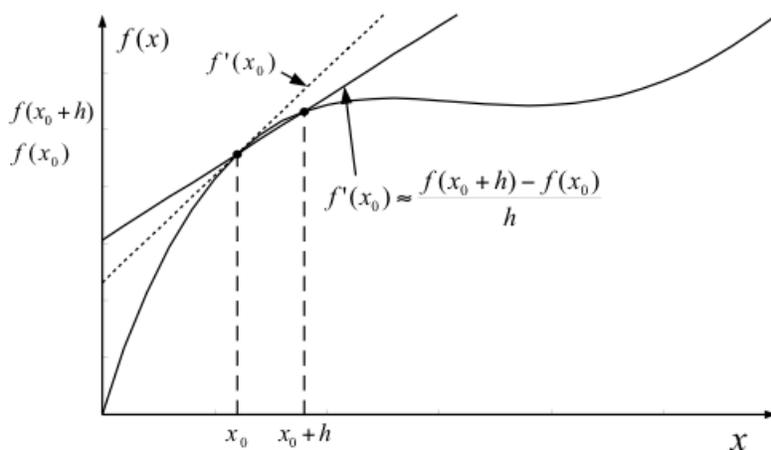


Figura 5.10: Diferenciación hacia adelante.

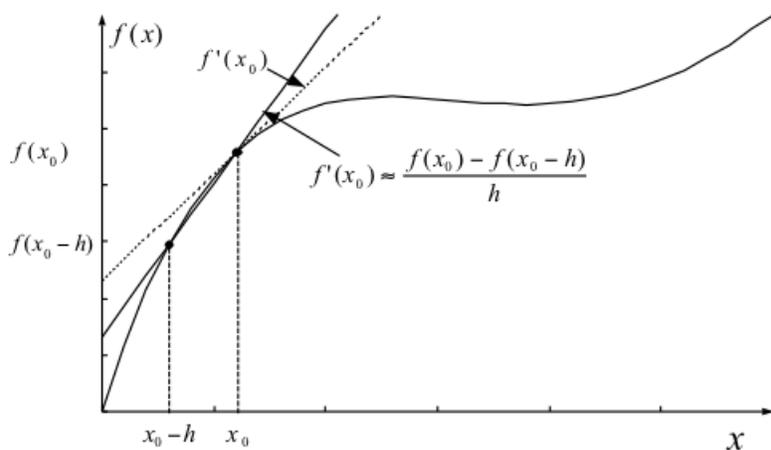


Figura 5.11: Diferenciación hacia atrás.

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

$$f^{IV}(x_0) = \frac{f(x_0 + 4h) - 4f(x_0 + 3h) + 6f(x_0 + 2h) - 4f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^4}$$

Expresiones de primeras diferencias hacia atrás

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

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0) - 2f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{h^2}$$

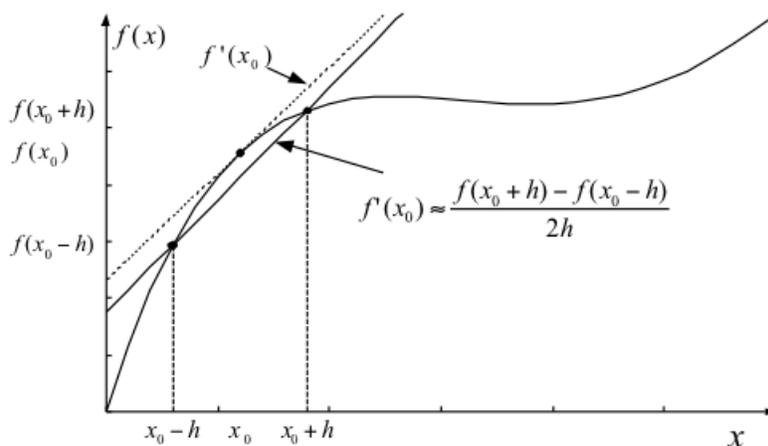


Figura 5.12: Diferenciación centrada.

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

$$f^{IV}(x_0) = \frac{f(x_0) - 4f(x_0 - h) + 6f(x_0 - 2h) - 4f(x_0 - 3h) + f(x_0 - 4h)}{h^4}$$

Expresiones de primeras diferencias centrales

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}$$

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

$$f^{IV}(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 4f(x_0 + h) + 6f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{h^4}$$

5.4.2. Ejemplo de diferenciación numérica

Usar aproximaciones de diferencias finitas hacia adelante, hacia atrás y centradas para estimar la primera derivada en $x = 0.5$ de:

$$-0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$$

Unidad 6

Solución numérica de ecuaciones diferenciales

Sea

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{c}{m}v \quad (6.1)$$

una ecuación diferencial de primer orden, donde:

- g , c y m son constantes,
- v es una variable dependiente,
- t es una variable independiente.

Las ecuaciones diferenciales se dividen en:

- Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO), si poseen una sola variable independiente.
- Ecuaciones diferenciales parciales (EDP), si poseen dos o más variables independientes.

La ecuación

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + c\frac{dx}{dt} + kx = 0 \quad (6.2)$$

es una ecuación diferencial de segundo orden, c y k son constantes. A estas ecuaciones se les conoce como ecuación de segundo grado; en general a las ecuaciones de orden mayor a uno se les conoce como ecuaciones de orden superior.

Las ecuaciones de orden superior se pueden reducir a un sistema de ecuaciones de primer orden definiendo nuevas variables, si:

$$y = \frac{dx}{dt} \quad (6.3)$$

Entonces

$$\frac{dy}{dt} = \frac{d^2x}{dt^2} \quad (6.4)$$

Sustituyendo las ecuaciones anteriores se tiene que

$$m \frac{dx}{dt} + cy + kx \quad (6.5)$$

o

$$\frac{dy}{dt} = \frac{cy + kx}{m} \quad (6.6)$$

La solución matemática de la EDO se puede obtener por separación de variables e integrando, con lo que se obtiene:

$$dv = gdt - \frac{c}{m}vdt \quad (6.7)$$

$$v = \int \left[g - \frac{c}{m}v \right] dt \quad (6.8)$$

Una EDO lineal es aquella que se ajusta a la forma general:

$$a_n(x)y^n + a_{n-1}(x)y^{n-1} + \dots + a_1(x)y + a_0(x) = f(x) \quad (6.9)$$

donde: y^n es la derivada n -ésima de y respecto a x y $a_i(x)$ y $f(x)$ son funciones específicas de x .

6.1. Método de Euler

La primera derivada proporciona una estimación de la pendiente en tal como se observa en la figura 6.1.

De la figura 6.1 se observa que

$$y_{i+1} = y_i + \phi h \quad (6.10)$$

Donde ϕ es la pendiente

$$\phi = f(x_i, y_i) \quad (6.11)$$

Es decir, la función evaluada en los puntos (x_i, y_i) rescribiendo la ecuación 6.11 se tiene que:

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h \quad (6.12)$$

A esta ecuación se le conoce como método de Euler o punto medio de Euler.

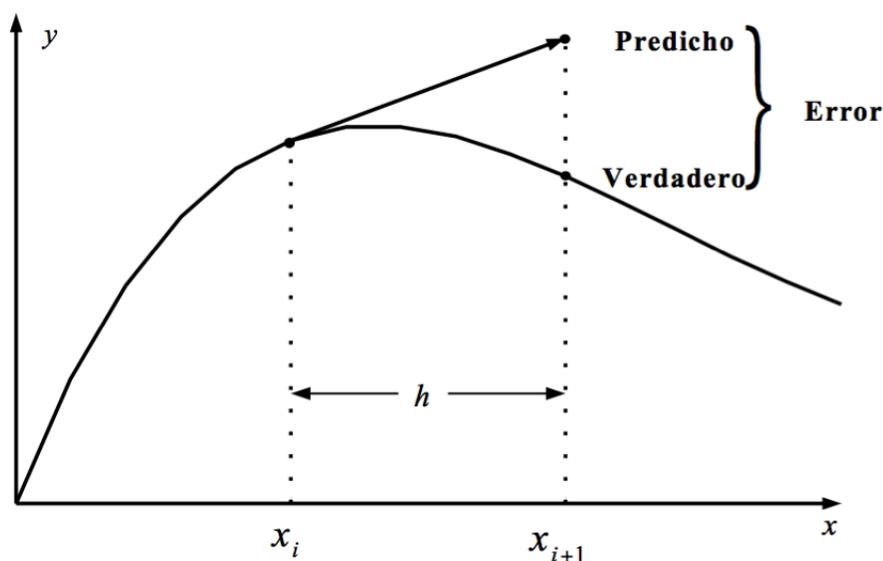


Figura 6.1: Primera derivada para la estimación de una pendiente.

6.1.1. Ejemplo del método de Euler

Utilizar el método de Euler para resolver la ecuación diferencial $\frac{dy}{dx} = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8.5$, con condiciones iniciales $x = 0, y = 1$, hasta $x = 4$ con paso de iteración de 0.5.

Resolviendo la ecuación diferencial se tiene que la solución real es:

$$y = -0.5x^4 + 4x^3 - 10x^2 + 8.5x + 1$$

Resolviendo usando Euler:

Calculando y_{i+1} se tiene que:

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h$$

$$f(x_0, y_0) = f(0, 1) = (-2)(0)^3 + (12)(0)^2 + (-20)(0) + 8.5 = 8.5$$

$$y_1(0.5) = y_0 + f(x_0, y_0)h = 1 + (8.5)(0.5) = 5.25$$

Se tiene que la aproximación para y_1 es 5.25. Obteniendo el valor real:

$$y(0.5) = (-0.5)(0.5)^4 + (4)(0.5)^3 - (10)(0.5)^2 + (8.5)(0.5) + 1 = 3.21875$$

El error verdadero relativo porcentual es:

$$|E_v| = \left| \frac{3.21875 - 5.25}{3.21875} \right| = 63.11 \%$$

Tabla 6.1: Valores obtenidos por el método de Euler para resolver una EDO.

i	x_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	v_v	$ E_v $
0	0	1	8.50000	1.00000	0.00
1	0.5	5.25000	1.25000	3.21875	63.11
2	1.0	5.87500	-1.50000	3.00000	95.83
3	1.5	5.12500	-1.25000	2.21875	130.99
4	2.0	4.50000	0.50000	2.00000	125.00
5	2.5	4.75000	2.25000	2.71875	74.71
6	3.0	5.87500	2.50000	4.00000	46.88
7	3.5	7.12500	-0.25000	4.71875	50.99
8	4.0	7.00000		3.00000	133.33

Calculando y_2 se tiene:

$$f(x_1, y_1) = f(0.5, 5.25) = (-2)(0.5)^3 + (12)(0.5)^2 + (-20)(0.5) + 8.5 = 1.25$$

$$y_2(1) = y_1 + f(x_1, y_1)h = 5.25 + (1.25)(0.5) = 5.875$$

$$y(1) = (-0.5)(1)^4 + (4)(1)^3 - (10)(1)^2 + (8.5)(1) + 1 = 3$$

El error verdadero relativo porcentual es:

$$|E_v| = \left| \frac{3 - 5.875}{3} \right| = 95.83\%$$

Se continúa sucesivamente $x = \{1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4\}$, de acuerdo al paso utilizado. Los valores obtenidos son valores de la curva que resulta de la ecuación y se muestran en la tabla 6.1. Graficando la solución aproximada y la verdadera se tiene lo que se observa en la grafica 6.2.

6.1.2. Análisis del error para el método de Euler

Los tipos de errores en las ecuaciones diferenciales ordinarias pueden ser de truncamiento y de redondeo, los primeros son causados por las técnicas empleadas para aproximar, estas pueden ser de dos tipos:

- Error local: Es el resultado de aplicar el método en cuestión a un solo paso.
- Error propagado: Resulta de las aproximaciones producidas en los pasos previos.

El error de redondeo es el resultado del número finito de cifras significativas que puede manejar un procesador.

Se puede obtener información sobre la magnitud y propiedades del error de truncamiento al derivar el método de Euler directamente de las series de Taylor:

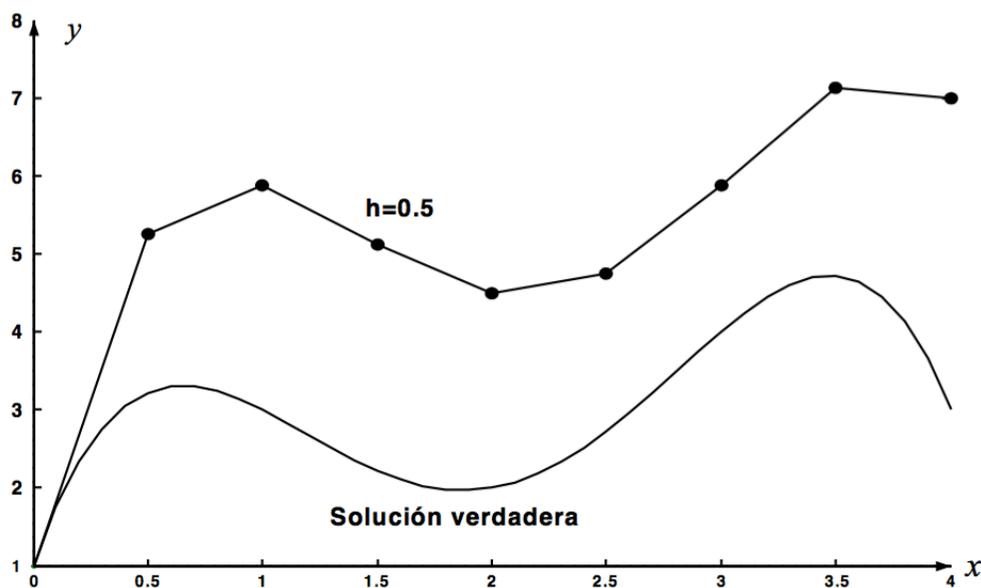


Figura 6.2: Solución aproximada y verdadera de la EDO.

$$y' = f(x, y)$$

donde:

$$y' = \frac{dy}{dx}$$

Si la solución tiene derivadas continuas, entonces se puede representar mediante una expansión en series de Taylor respecto a (x_i, y_i) de la forma:

$$y_{i+1} = y_i + y'_i h + \frac{y''_i}{2!} h^2 + \dots + \frac{y_i^{(n)}}{n!} h^n + R_n \tag{6.13}$$

Donde $h = x_{i+1} - x_i$ y R_n es un término remanente definido por:

$$R_n = \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} h^{n+1}$$

Donde ξ es cualquier punto entre el intervalo definido entre x_i y x_{i+1} .

Una forma alternativa se obtiene al sustituir las ecuaciones anteriores para obtener

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + \frac{f'(x_i, y_i)}{2!} h^2 + \dots + \frac{f^{(n-1)}(x_i, y_i)}{n!} h^n + Oh^{n+1} \tag{6.14}$$

Donde Oh^{n+1} especifica el error de truncamiento local, el cual es proporcional al tamaño del paso elevado a la $(n+1)$ -ésima potencia.

Al comparar la ecuaciones se observa que el método de Euler corresponde a la serie de Taylor e incluyendo el término $f(x_i, y_i)h$. De la comparación se observa que ocurre un error de truncamiento debido a que se aproxima la solución verdadera mediante un número finito de términos de la serie de Taylor.

$$E_v = \frac{f'(x_i, y_i)}{2!}h^2 + \dots + Oh^{n+1} \quad (6.15)$$

A lo cual se obtiene el error de truncamiento local verdadero. Si h es lo suficientemente pequeña, los errores en la ecuación 6.15 disminuyen al elevar el orden de h y el resultado se presenta como:

$$E_a = \frac{f'(x_i, y_i)}{2!}h^2$$

o

$$E_a = Oh^2$$

donde E_a es el error de truncamiento local aproximado.

6.1.3. Ejemplo del cálculo del error del método de Euler

Usar la ecuación $E_v = \frac{f'(x_i, y_i)}{2!}h^2 + \dots + Oh^{n+1}$ para estimar el error del paso inicial del ejemplo se la sección 6.1.1. Utilizarla también para determinar el error debido a cada uno de los términos de orden superior de la serie de Taylor.

Del ejemplo se tiene que:

$$f(x, y) = \frac{dy}{dx} = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8.5$$

Con condiciones iniciales $x = 0$, $y = 1$, hasta $x = 4$ con paso de iteración de 0.5. Para este ejemplo se obtiene un E_v de:

$$E_v = \frac{f'(x_i, y_i)}{2!}h^2 + \frac{f''(x_i, y_i)}{3!}h^3 + \frac{f'''(x_i, y_i)}{4!}h^4$$

Donde derivando $f(x, y)$ se tiene:

$$f(x, y) = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8.5$$

$$f'(x, y) = -6x^2 + 24x - 20$$

$$f''(x, y) = -12x + 24$$

$$f'''(x, y) = -12$$

Tomado el punto inicial $x = 0$, se tiene el error para la primera derivada

$$\frac{f'(x_i, y_i)}{2!}h^2 = \frac{-6x^2 + 24x - 20}{2}(0.5)^2 = \frac{(-6)(0) + (24)(0) - 20}{2}(0.5)^2 = -2.5$$

Para la segunda derivada se tiene

$$\frac{f''(x_i, y_i)}{3!} h^3 = \frac{12x + 24}{6} (0.5)^3 = \frac{12(0) + 24}{6} (0.5)^3 = 0.5$$

Para la tercera derivada se tiene

$$\frac{f'''(x_i, y_i)}{4!} h^4 = \frac{-12}{24} (0.5)^4 = -0.03125$$

El error verdadero se obtiene sumando los errores para cada término

$$E_v = -2.5 + 0.5 - 0.03125 = -2.03125$$

Recordando que se sabe el valor verdadero es 3.21875 y que la estimación obtenida con el método de Euler es 5.25.

Valor verdadero = estimación de aproximación + error.

Valor verdadero = 5.25 - 1.03125 = 3.21875.

6.2. Método de Euler mejorado

Una fuente fundamental de error en el método de Euler es que la derivada al principio del intervalo se supone que se aplica a través del intervalo entero. Existen dos modificaciones simples para ayudar a evitar este inconveniente. Las modificaciones en realidad pertenecen a una clase mayor de métodos de solución llamados métodos de Runge-Kutta. Sin embargo ya que tiene una interpretación gráfica sencilla, se presenta antes de la derivación formal de los métodos de Runge-Kutta. Para corregir estas deficiencias se plantean primero el método de Heun y posteriormente los métodos de Runge-Kutta.

6.2.1. Método de Heun

Un método para mejorar la aproximación a la pendiente implica el cálculo de dos derivadas del intervalo, en un punto inicial y otra en un punto final. En seguida se promedian las derivadas y se obtiene una aproximación mejorada de la pendiente en el intervalo completo. Este esquema, llamado método de Heun, se muestran en las figuras 6.3 y 6.4.

La pendiente al principio de un intervalo es

$$y'_i = f(x_i, y_i) \tag{6.16}$$

Se usa para extrapolar linealmente a y_{i+1} :

$$y_{i+1}^0 = y_i + f(x_i, y_i)h \tag{6.17}$$

En el método estándar de Euler se pararía en este punto. Sin embargo en el método de Heun, la y_{i+1}^0 no es la respuesta final si no una predicción intermedia. Esto se debe a que se ha distinguido

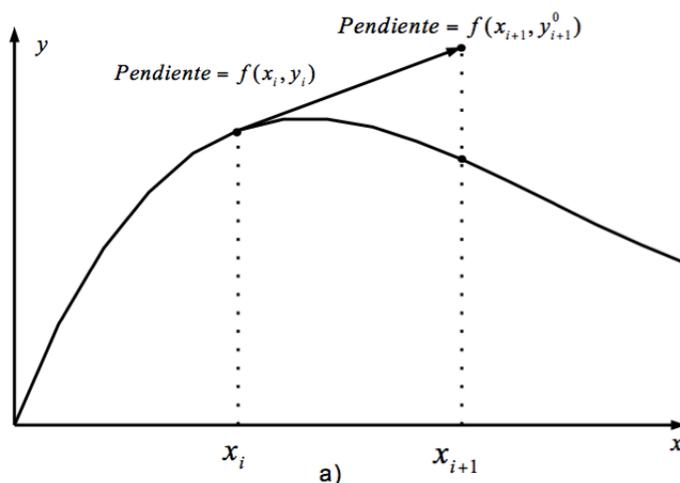


Figura 6.3: Esquema gráfico del método de Heun. a) Predictor.

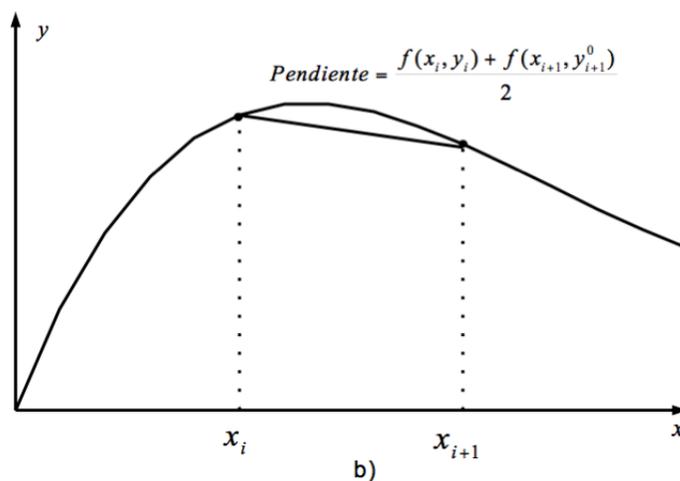


Figura 6.4: Esquema gráfico del método de Heun. b) Corrector.

a esta con el superíndice 0. La ecuación de y_{i+1}^0 se llama ecuación predictora. Proporciona una aproximación de y_{i+1} que permite el cálculo de una pendiente aproximada al final del intervalo:

$$y'_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^0) \tag{6.18}$$

Por lo tanto, se pueden combinar las dos pendientes y obtener una pendiente promedio sobre el intervalo:

$$\bar{y}' = \frac{y'_i + y'_{i+1}}{2} = \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)}{2} \tag{6.19}$$

Esta pendiente promedio se usa para extrapolar linealmente de y_i a y_{i+1} usando el método de

Euler:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)}{2}h \quad (6.20)$$

Que se llama una ecuación correctora.

El método de Heun es un esquema predictor-corrector. Se puede expresar concisamente como:

$$\text{Predictor} \quad y_{i+1}^0 = y_i + f(x_i, y_i)h$$

$$\text{Corrector} \quad y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)}{2}h$$

Nótese que debido a que la ecuación del corrector tiene y_{i+1} en ambos lados del signo igual, esta puede aplicarse para “corregir” en un esquema iterativo. Esto es, se puede usar una aproximación anterior varias veces para proporcionar una aproximación mejorada de y_{i+1} . Se debe entender que este proceso no necesariamente converge a la respuesta correcta, sino converge a una aproximación con un error de truncamiento finito.

El error aproximado esta dado por

$$|E_a| = \left| \frac{\text{Aproximacion actual} - \text{Aproximacion anterior}}{\text{Aproximacion actual}} \right| \times 100\%$$

6.2.2. Ejemplo del método de Heun

Utilizar el método de Heun para resolver numéricamente la ecuación diferencial $y' = 4e^{0.8x} - 0.5y$ desde $x = 0$ a $x = 4$ con un tamaño de paso de 1. La condición inicial en $(x, y) = (0, 2)$.

Donde la solución verdadera es: $y = 3.076923(e^{0.8x} - e^{-0.5x}) + 2e^{-0.5x}$.

Resolviendo la pendiente $f(x_i, y_i)$

$$f(0, 2) = y' = 4e^{0.8x} - 0.5y = 4e^{(0.8)(0)} - (0.5)(2) = 3$$

Estimando el predictor y_{i+1}^0

$$y_{i+1}^0 = y_i + f(x_i, y_i)h = 2 + (3)(1) = 5$$

Estimando la pendiente $f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)$

$$f(1, 5) = 4e^{0.8x} - 0.5y = 4e^{(0.8)(1)} - (0.5)(5) = 6.40216$$

Obteniendo el corrector

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)}{2}h = 2 + \frac{3 + 6.40216}{2}(1) = 6.70108$$

Obteniendo el error relativo porcentual:

$$|E_v| = \left| \frac{6.19463 - 6.70108}{6.19463} \right| \times 100 = 8.18\%$$

Este resultado proporciona un error relativo porcentual de 8.18%, el cual comparado con el método de Euler, es más pequeño aun cuando solo se usó un corrector. De la misma forma se obtienen los valores mostrados en la tabla 6.2. En la figura 6.5 se observa una gráfica con el error verdadero y la aproximación.

Tabla 6.2: Valores obtenidos por el método de Heun para resolver una EDO.

i	x_i	y_v	y_i	$f(x_i, y_i)$	y_{i+1}^0	$f(x_{i+1}, y_{i+1}^0)$	y_{i+1}	$ E_v $
0	0	2.00000	2.00000	3.00000	5.00000	6.40216	6.70108	0.00
1	1.0	6.19463	6.70108	5.55162	12.25270	13.68578	16.31978	8.18
2	2.0	14.84392	16.31978	11.65224	27.97202	30.10670	37.19925	9.94
3	3.0	33.67717	37.19925	25.49308	62.69233	66.78396	83.33777	10.46
4	4.0	75.33896	83.33777					10.62

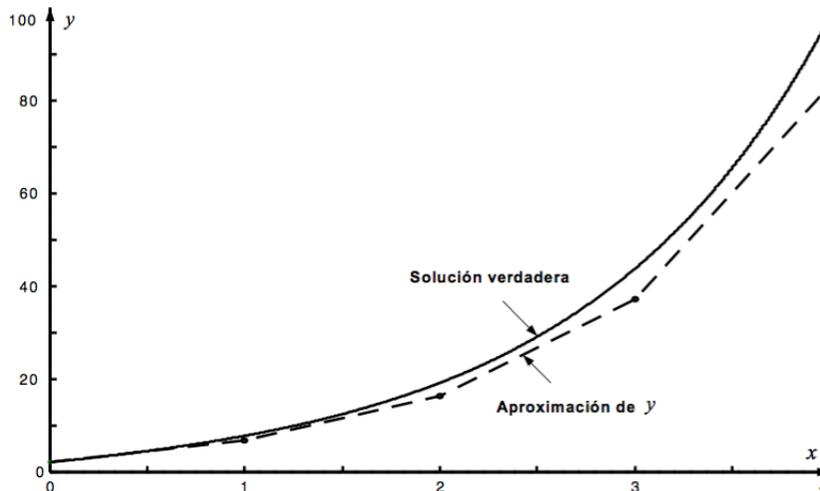


Figura 6.5: Comparación del error verdadero con la aproximación.

6.3. Métodos de Runge-Kutta

Los métodos de Runge-Kutta logran la exactitud del procedimiento de las series de Taylor sin requerir el uso de derivadas superiores. Existen diversas variantes, pero todas tienen la siguiente

forma:

$$y_{i+1} = y_i + \phi(x_i, y_i, h)h \quad (6.21)$$

Donde $\phi(x_i, y_i, h)$ es conocida como la función incremento, la cual puede interpretarse como una pendiente representativa en un intervalo. Esta función se escribe de forma general como:

$$\phi = a_1k_1 + a_2k_2 + \cdots + a_nk_n \quad (6.22)$$

Donde las a son constantes y las k son:

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h)$$

$$k_3 = f(x_i + p_2h, y_i + q_{21}k_1h + q_{22}k_2h)$$

...

$$k_n = f(x_i + p_{n-1}h, y_i + q_{n-1,1}k_1h + q_{n-1,2}k_2h + \cdots + q_{n-1,n-1}k_{n-1}h)$$

Obsérvese que las k son las relaciones de recurrencia; esto indica que k_1 aparece en la ecuación para k_2 , y k_2 aparece en la ecuación para k_3 , etc.

6.3.1. Métodos de Runge-Kutta de segundo orden

La versión de segundo orden para $y_{i+1} = y_i + \phi(x_i, y_i, h)h$ es:

$$y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2)h \quad (6.23)$$

Donde

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + p_1h, y_i + q_{11}k_1h)$$

Los valores para a_1 , a_2 , p_1 y q_{11} son evaluados al igualar el término de segundo orden de $y_{i+1} = y_i + (a_1k_1 + a_2k_2)h$ con la expansión de la serie de Taylor. Para desarrollar esto se obtienen tres ecuaciones con cuatro constantes desconocidas. Dichas ecuaciones son:

$$a_1 + a_2 = 1 \quad a_2p_1 = \frac{1}{2} \quad a_2q_{11} = \frac{1}{2} \quad (6.24)$$

Debido a que se tienen cuatro incógnitas y tres ecuaciones, se propone el valor de una de estas incógnitas para determinar las demás. Por ejemplo, si se propone un valor para a_2 , se obtiene:

$$a_1 = 1 - a_2 \quad p_1 = q_{11} = \frac{1}{2a_2}$$

Debido a que se puede elegir un número infinito de valores para a_2 , existen también un número infinito de métodos o ecuaciones de Runge-Kutta de segundo orden. Las variantes más comunes son: método de Heun de un solo corrector (donde $a_2 = 1/2$), método del punto medio ($a_2 = 1$) y método de Ralston ($a_2 = 2/3$).

6.3.2. Métodos de Runge-Kutta de tercer orden

Se puede llevar una derivación análoga a la del método de segundo orden, para $n = 3$. El resultado de esta derivación es de seis ecuaciones con ocho incógnitas para determinar los parámetros restantes. Una versión común que resulta es

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \right] h \quad (6.25)$$

Donde:

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h\right)$$

$$k_3 = f(x_i + h, y_i - k_1h + 2k_2h)$$

6.3.3. Métodos de Runge-Kutta de cuarto orden

Los Métodos de Runge-Kutta más populares son los de cuarto orden. Como sucede con los métodos de segundo orden. Existe un número infinito de versiones. Se presentan las dos versiones más comunes de este método, la primera versión se basa en la regla de Simpson 1/3 y comúnmente es llamada método clásico de Runge-Kutta como se describe continuación.

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \right] h \quad (6.26)$$

Donde:

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h\right)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h\right)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3h)$$

La segunda se basa en la regla de Simpson 3/8 y se escribe así

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{8}(k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4) \right] h \quad (6.27)$$

Donde:

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{3}h, y_i + \frac{1}{3}k_1h\right)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{3}h, y_i + \frac{1}{3}k_2h\right)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + k_1h - k_2h)$$

Se pueden disponer de fórmulas de Runge-Kutta de orden superior, tales como el método de Butcher, pero en general, la ganancia obtenida en exactitud por métodos de orden superior al cuarto orden se contrapone con la complejidad y esfuerzo de cálculo.

6.3.4. Ejemplo del método de Runge-Kutta

Utilizar el método de Runge-Kutta de cuarto orden clásico para resolver numéricamente la ecuación diferencial $y' = 4e^{0.8x} - 0.5y$ desde $x = 0$ a $x = 4$ con un tamaño de paso de 1. La condición inicial en $(x, y) = (0, 2)$.

Donde la solución verdadera es: $y = 3.076923(e^{0.8x} - e^{-0.5x}) + 2e^{-0.5x}$.

Utilizando las ecuaciones de Runge-Kutta clásico de cuarto orden se calculan las k_n

$$k_1 = f(x_0, y_0) = f(0, 2) = 4e^{(0.8)(0)} - 0.5(2) = 3$$

$$k_2 = f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_1h\right) = f(0.5, 3.5) = 4e^{(0.8)(0.5)} - 0.5(3.5) = 4.21730$$

$$k_3 = f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_2h\right) = f(0.5, 4.10865) = 4e^{(0.8)(0.5)} - 0.5(4.10865) = 3.91297$$

$$k_4 = f(x_0 + h, y_0 + k_3h) = f(1, 5.91297) = 4e^{(0.8)(1)} - 0.5(5.91297) = 5.94568$$

Sustituyendo las k_n obtenemos la siguiente aproximación

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \right] h =$$

$$2 + \left[\frac{1}{6}(3 + 2(4.21730) + 2(3.91297) + 5.94568) \right] (1) = 6.20104$$

Obteniendo le error verdadero

$$|E_v| = \left| \frac{6.19463 - 6.20104}{6.19463} \right| \times 100 = 0.10 \%$$

Y se obtienen los valores mostrados en la tabla 6.3.

Tabla 6.3: Valores obtenidos por el método de Runge-Kutta de cuarto orden para resolver una EDO.

i	x_i	y_i	V_v	k_1	k_2	k_3	k_4	y_{i+1}	$ E_v $
0	0	2.00000	2.00000	3.00000	4.21730	3.91297	5.94568	6.20104	0.00
1	1.0	6.20104	6.19463	5.80165	8.72954	7.99756	12.71283	14.86248	0.10
2	2.0	14.86248	14.84392	12.38089	19.02976	17.36754	27.97769	33.72135	0.13
3	3.0	33.72135	33.67717	27.23203	42.10991	38.39044	62.07423	75.43917	0.13
4	4.0	75.43917	75.33896						0.13