

Universidad de La Salle

Ciencia Unisalle

Ciencias básicas e ingeniería

Catálogo General

8-9-2012

Introducción a los métodos numéricos

Jesús Alfonso Torres Ortega

Universidad de La Salle, Bogotá, jatorres@unisalle.edu.co

Follow this and additional works at: https://ciencia.lasalle.edu.co/edunisalle_ciencias-basicas-ingenieria

Recommended Citation

Torres Ortega, Jesús Alfonso, "Introducción a los métodos numéricos" (2012). *Ciencias básicas e ingeniería*. 16.

https://ciencia.lasalle.edu.co/edunisalle_ciencias-basicas-ingenieria/16

This Libro is brought to you for free and open access by the Catálogo General at Ciencia Unisalle. It has been accepted for inclusion in Ciencias básicas e ingeniería by an authorized administrator of Ciencia Unisalle. For more information, please contact ciencia@lasalle.edu.co.

Documento N.º 74

Introducción a los métodos numéricos

Jesús Alfonso Torres Ortega

Ingeniero químico, MSc, Doctor en Ingeniería

Facultad de Ingeniería

Programa de Ingeniería Ambiental y Sanitaria



UNIVERSIDAD DE LA SALLE

Educar para Pensar, Decidir y Servir

Acreditación Institucional de Alta Calidad

Facultad de Ingeniería

Programa de Ingeniería Ambiental
y Sanitaria

Bogotá D. C.

2012

ISSN: 1900-6187

© 2013

Oficina de Publicaciones

Cra. 5 N.º 59A-44

Teléfono: 3 48 80 00 ext.: 1224-1227

Fax: 2 17 08 85

publicaciones@lasalle.edu.co

Dirección editorial

Guillermo Alberto González Triana

Coordinación editorial

Marcela Garzón Gualteros

Corrección de estilo

Edicsson Quitián

Diagramación

Margoth C. de Olivos

Carátula

Giovanny Pinzón Salamanca

Impresión

Xpress Estudio Gráfico y Digital

Enero del 2013

CONTENIDO

Introducción	9
Antecedentes matemáticos	11
Matemáticas y computadores	11
Lenguajes de alto nivel	13
Error numérico	13
Conceptos básicos	18
Temas para profundización	19
Taller 1	19
Aproximaciones por diferencias finitas	21
Aproximaciones a la primera derivada con diferencias hacia adelante	21
Aproximación a la primera derivada con diferencias hacia atrás	21
Aproximaciones a la primera derivada con diferencias centrales	22
Aproximaciones por diferencias finitas de derivadas de orden superior	23

Caso de aplicación	24
Conceptos básicos	28
Temas para profundización	29
Taller 2	29
Interpolación y regresión	31
Ajuste de datos	31
Regresión por mínimos cuadrados	31
Interpolación y aproximación polinómica	34
Aproximación por mínimos cuadrados	37
Conceptos básicos	39
Temas para profundización	39
Taller 3	40
Integración numérica	43
Diferenciación	43
Integración mediante la regla del trapecio	44
Integración usando la regla de Simpson	44
Conceptos básicos	45



Temas para profundización	45
Taller 4	45
Ecuaciones algebraicas lineales	49
Solución de sistemas de ecuaciones algebraicas lineales	49
Método de la eliminación gaussiana	50
Método de la inversa de una matriz	50
Método del determinante de una matriz	51
Conceptos básicos	52
Temas para profundización	52
Taller 5	53
Aplicaciones prácticas de las técnicas numéricas en ingeniería	55
Modelos matemáticos	55
Taller 6	65
Bibliografía	67

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.	Etapas en la solución de problemas de ingeniería	12
Figura 2.	El ejemplo de las dianas explica el concepto de <i>exactitud</i> y <i>precisión</i>	15
Figura 3.	Representación gráfica del error total	18
Figura 4.	Esquema de aproximaciones con diferencias divididas finitas de la primera derivada	22
Figura 5.	Descripción de las fuerzas que operan sobre un cuerpo en caída libre	25
Figura 6.	Secuencia de eventos en la aplicación de una ecuación diferencial para resolver problemas de ingeniería	25
Figura 7.	Representación del problema 3	53
Figura 8.	Esquema de un evaporador de doble efecto, problema es	54
Figura 9.	Curva de calibración	59
Figura 10.	Mezclado	60
Figura 11.	Destilación	61
Figura 12.	Balance de masa en un volumen infinitesimal incluyendo las condiciones límite	62
Figura 13.	Perfiles de velocidad en regímenes laminar y turbulento para el líquido y el gas, respectivamente	63
Figura 14.	Diagrama de los símbolos usados en un segmento para el análisis de transferencia de energía	64
Figura 15.	Sistema con dos ramas	65

INTRODUCCIÓN

A diferencia de los cálculos de termodinámica, fisicoquímica, hidráulica, entre otros, que se enseñan rigurosamente, los cálculos de balances se presentan de manera intuitiva y son revisados nuevamente en los cursos terminales de la carrera de Ingeniería, en donde generalmente se presupone que los estudiantes dominan los métodos numéricos, por lo tanto, al carecer de los conocimientos sistemáticos de apoyo, enfrentan los problemas que requieren sus proyectos solamente a base de persistencia. Los ingenieros, en general, tratan problemas cuya formulación matemática no siempre llega a una solución analítica. Las soluciones analíticas tienen un alcance práctico limitado, ya que los problemas reales implican condiciones y procesos complejos, luego, han de resolverse por métodos numéricos.

Los métodos numéricos son un medio para fortificar la comprensión de las matemáticas, ya que su propósito principal es reducir las matemáticas superiores a operaciones aritméticas básicas, y poseen la facultad de manejar sistemas de ecuaciones considerables que son frecuentes en la práctica de la ingeniería, por lo cual, constituyen el tipo de cálculo que con mayor periodicidad efectúan los ingenieros.

Anteriormente a la creación del computador, se gastaba más en la técnica misma de solución de los problemas, en vez de aplicar mayor esfuerzo sobre la definición del problema y su interpretación. Actualmente, los algoritmos y los métodos numéricos suministran una opción para muchos cálculos complejos.

Es probable que durante sus estudios tenga la oportunidad de valerse de un *software* disponible comercialmente que contenga métodos numéricos, el uso racional de estos programas está sujeto al discernimiento de la teoría básica en la que se fundamentan los cálculos numéricos. Con el presente texto se busca facilitar la conceptualización y la introducción de los métodos numéricos como una alternativa de solución de problemas que involucren el modelamiento; de esta forma el estudiante adquiere la capacidad de visualizar las aplicaciones de estas técnicas en todos los

campos de la ingeniería. Con este escrito se busca facilitar en los estudiantes la adquisición y apropiación del conocimiento, la adopción de actitudes y el desarrollo de habilidades para aplicar los métodos numéricos, repasando en los primeros capítulos la teoría matemática en la que reposa la algorítmica numérica. Los siguientes capítulos permitirán reconocer las características generales de las técnicas numéricas para la solución de problemas que involucren ajuste de datos y un sistema de ecuaciones algebraicas lineales. Finalmente, se introduce al estudiante en el modelamiento matemático a través de las aplicaciones prácticas de algunas técnicas numéricas en diversos problemas ingenieriles.



ANTECEDENTES MATEMÁTICOS

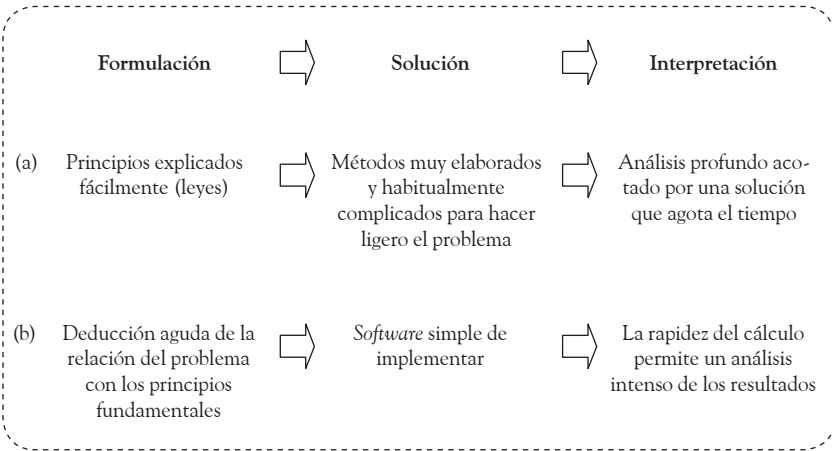
Objetivo: familiarizarse con los métodos numéricos reconociendo cómo el cálculo aritmético puede introducir y amplificar el error.

Matemáticas y computadores

Los métodos numéricos son técnicas mediante las cuales es posible formular problemas matemáticos, de tal forma que puedan resolverse usando operaciones aritméticas. Aunque los ingenieros, independientemente de la rama de la ingeniería en que se desempeñen, comparten una característica común: invariablemente deben realizar un buen número de tediosos cálculos aritméticos. Los métodos numéricos son una colección de técnicas algebraicas que permiten replantear un problema matemático de manera que se pueda resolver mediante operaciones aritméticas sencillas. Los métodos numéricos se constituyen en instrumentos útiles para programar la solución de problemas ingenieriles. Uno de los mayores avances para la humanidad fue la invención de los computadores en la segunda mitad del siglo XX, lo cual permitió que la solución de problemas en ingeniería se obtuviera en menor tiempo. Los métodos numéricos reúnen dos de las herramientas más valiosas en el desarrollo de la ingeniería: matemáticas y computadores. Podemos definir los *métodos numéricos* (sin ser muy minuciosos) como las matemáticas por computador. No es raro que con el desarrollo de computadores digitales eficientes y rápidos, el papel de los métodos numéricos en la solución de problemas de ingeniería haya aumentado en forma considerable en los últimos años. Además de proporcionar un aumento en la potencia de cálculo, la disponibilidad general de los computadores y su asociación a los métodos numéricos ha influido de manera muy significativa en el proceso de la solución de problemas de ingeniería (figura 1). Aunque las soluciones analíticas aún son muy valiosas, tanto para resolver problemas como para proporcionar una mayor comprensión, los métodos numéricos representan alternativas que aumentan en forma considerable la capacidad de confrontar y resolver los problemas; como resultado, se dispone de más tiempo para aprovechar

las capacidades creativas personales. Por consiguiente, es posible dar más importancia a la formulación de un problema, a la interpretación de la solución y a su incorporación al sistema total, o conciencia “holística” (Chapra y Canale, 2007).

Figura 1. Etapas en la solución de problemas de ingeniería



Nota: a) sin los computadores, b) después de la invención de los computadores.

Fuente: elaboración propia.

Las buenas técnicas de programación incrementan la destreza para adaptar los conocimientos de los métodos numéricos. En resumen, las potencialidades y limitaciones de los cálculos numéricos se aprecian mejor cuando se utilizan estos métodos para resolver los problemas de ingeniería, usando como herramienta un dispositivo electrónico, ya que cuando un programa está almacenado en la unidad aritmética del procesador de un computador, las instrucciones son examinadas una a una y descompuestas en pasos simples que pueden ser desarrollados. La unidad de control usa una unidad aritmética y la memoria para llevar a cabo las instrucciones, y, finalmente, envía la respuesta (solución) a la unidad de salida donde podamos verla (pantalla). Sin embargo, cabe aclarar que el presente texto no está enfocado hacia un curso de programación de computadores.

Lenguajes de alto nivel

Los cuatro superlenguajes pioneros importantes fueron, a saber: Algol (Algorithmic Language), Fortran (Formula Translation), Cobol (Common Business Oriented Language) y PL1 (Programming Language/One). Los dos primeros se usan en problemas científicos, el tercero para aplicaciones en los negocios y el último tanto para trabajo científico como de negocios.

Los lenguajes de alto nivel más populares por cuanto constituyen la base del *software* comercial para uso en computadores personales son Pascal, Mathcad, Matlab, IMSL, Excel, Visual Basic y Visual C++ (Cairo, 2008). Más moderno, el Mathcad puede realizar tareas tanto en modo numérico como en modo simbólico; el Matlab fue desarrollado en principio como un laboratorio de matrices; IMSL consiste de tres librerías: MATH, STAT y SFUN para manejar matrices, estadística y funciones, respectivamente. Excel es una hoja de cálculo funcional producida por Microsoft Visual C++ es un lenguaje de programación diseñado a mediados de los años ochenta por Bjarne Stroustrup; como el Visual Basic, la intención de su creación fue extender el exitoso lenguaje de programación C con mecanismos que permitieran la manipulación de objetos (Cruz, 2007; Fausett, 2003).

Error numérico

Los errores son parte esencial en la comprensión y empleo práctico de los métodos numéricos. Las técnicas desarrolladas por los métodos numéricos tienen la característica de tener errores. Esto se puede considerar contradictorio a primera vista, ya que no concuerda con el concepto que se tiene de un buen mecanismo de ingeniería. En la práctica profesional, los errores resultan costosos y hasta trágicos. Se puede quedar lisiado si un mecanismo o una estructura llegan a romperse.

En general, si algún modelo presenta pequeñas desviaciones en sus resultados, que no afecten notablemente sus estimaciones, bastará con formular un nuevo modelo considerando un factor de seguridad. Sin

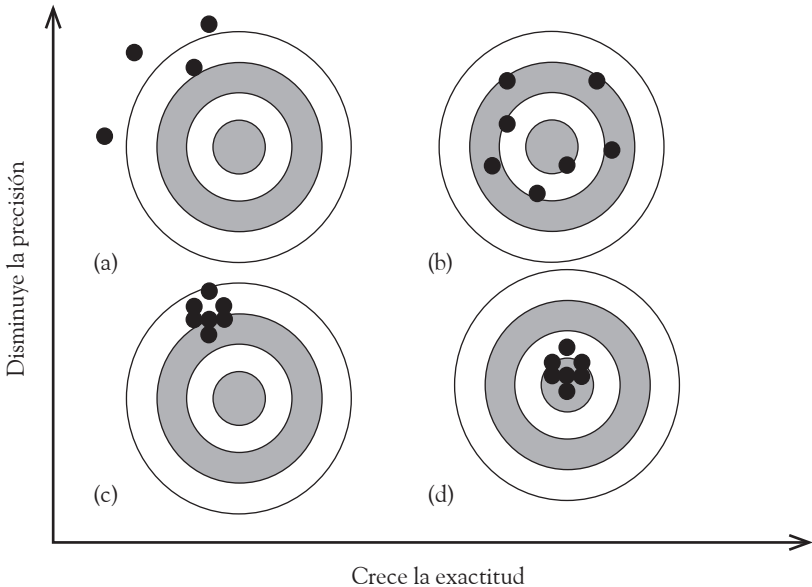
embargo, si su distribución es aleatoria pero se concentra muy próxima a la predicción, entonces, las desviaciones pueden tomarse como insignificantes y el modelo se considerará apropiado. Muchas veces se incorporan errores en un cálculo debido a la incertidumbre en los datos físicos sobre los que se basa el modelo, cuando estos errores pueden presentar inexactitud e imprecisión. Si constantemente se subestiman o sobreestiman las mediciones de los instrumentos, se estarán tomando lecturas inexactas o desviadas. Los errores de medición se pueden cuantificar mediante técnicas estadísticas. Las aproximaciones numéricas pueden introducir errores semejantes en el análisis. Pero la pregunta aquí es: ¿qué error se puede considerar permisible? Cuando se emplea un valor en un cálculo, debe haber seguridad de que pueda usarse con confianza. Las cifras significativas de un número son aquellas que pueden ser usadas confiablemente. El concepto de *cifra* o *dígitos significativos* se ha desarrollado para denominar explícitamente la confiabilidad de un valor numérico. En el estudio de los métodos numéricos las cifras significativas tienen dos implicaciones importantes:

1. Los métodos numéricos producen resultados aproximados, entonces, se deben desarrollar pautas para especificar qué tan precisos son los resultados obtenidos, y una manera de hacerlo es en términos de las cifras significativas. Por ejemplo, se puede acordar que la aproximación es aceptable siempre y cuando sea lógica para tres cifras significativas.
2. Aunque algunas cantidades, tales como e , π o $\sqrt[3]{7}$, representan números específicos, no es posible expresarlos exactamente con un número finito de dígitos, por ejemplo, el número de Euler: $e = 2,7182818284590452353...$ y sigue. Debido a que los computadores almacenan solo un número finito de cifras significativas, tales números jamás se podrán representar con exactitud. A la exclusión del resto de cifras significativas se le conoce como *error de redondeo*. Los errores vinculados con los cálculos y medidas se pueden identificar observando su *exactitud* y *precisión*. Estos conceptos se pueden representar gráficamente usando la analogía de una diana de prácticas para tiro al blanco. Los puntos



negros en cada blanco de la figura 2 se pueden imaginar como las predicciones en una técnica numérica, mientras que el centro del blanco representa el valor verdadero (solución analítica).

Figura 2. El ejemplo de las dianas explica el concepto de *exactitud* y *precisión*



Nota: a) inexacto e impreciso, b) exacto e impreciso, c) inexacto y preciso, d) exacto y preciso.

Fuente: adaptado de Chapra y Canale (2007).

Error de truncamiento

Los errores de truncamiento son aquellos que aparecen al emplear una aproximación en vez de un procedimiento matemático exacto. Para comprender las características de estos errores, se usará una formulación matemática empleada ampliamente en los métodos numéricos para expresar funciones en forma polinomial: las series de Taylor. Aunque la serie de Taylor es útil en la estimación de errores de truncamiento, resulta confuso su empleo. Examinemos el siguiente caso, $v(x)$ se puede expandir en la serie de Taylor del siguiente modo:

$$v(x_{i+1}) = v(x_i) + v'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{v''(x_i)}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 + \dots q_n \quad (1)$$

Ahora, truncando la serie después del término con la primera derivada, se obtiene:

$$v(x_{i+1}) = v(x_i) + v'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + q \quad (2)$$

La ecuación (2) se puede resolver para

$$v'(x_i) = \underbrace{\frac{v(x_{i+1}) - v(x_i)}{t_{i+1} - t_i}}_{\text{Aproximación a primer orden}} - \underbrace{\frac{q_n}{x_{i+1} - x_i}}_{\text{Error de truncamiento}} \quad (3)$$

Con el esquema de la serie de Taylor, se ha encontrado un error de truncamiento asociado con esta aproximación de la derivada. Usando la ecuación (3), se obtiene:

$$\frac{q_n}{x_{i+1} - x_i} = \frac{v(\epsilon)}{2!}(t_{i+1} - t_i) \quad (4) \quad \text{o} \quad \frac{q_1}{x_{i+1} - x_i} = P(x_{i+1} - x_i) \quad (5)$$

Por lo tanto, la estimación de la derivada o la primera parte de la ecuación (3) tiene un error de truncamiento de orden $t_{i+1} - t_i$. En otras palabras, el error en la aproximación, usando derivadas, debería ser proporcional al tamaño del paso; si este se divide a la mitad, el error de la derivada se reduce a la mitad. Un cálculo es numéricamente inestable si la incertidumbre de los valores de entrada aumenta considerablemente por el método numérico. Estas ideas pueden estudiarse usando la serie de Taylor de primer orden:

$$f(x) = f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x}) \quad (6)$$

Esta relación puede emplearse para estimar el error relativo de $f(x)$ como en:

$$\frac{f(x) - f(\tilde{x})}{f(x)} \cong \frac{f'(\tilde{x})(x - \tilde{x})}{f(\tilde{x})} \quad (7)$$

El error relativo de x está dado por $\frac{x - \tilde{x}}{\tilde{x}}$. Un número condicionado puede definirse como la razón de estos errores relativos:

$$\frac{\tilde{x} f'(\tilde{x})}{f(\tilde{x})} \quad (8)$$

El número condicionado suministra una medida de la incertidumbre generada por un valor de x para $f(x)$. Un valor de 1 nos indica que el error relativo de la función es idéntico al error relativo de x . Un valor mayor que 1 nos indica que el error relativo es amplificado, ahora que para un valor inferior a 1 el error relativo disminuye. Funciones con valores amplios indican que están mal condicionados. Para cualquier combinación de factores de la ecuación (8), al incrementarse el valor numérico del número condicionado aumentará la incertidumbre en el cálculo de $f(x)$ (Chapra y Canale, 2007).

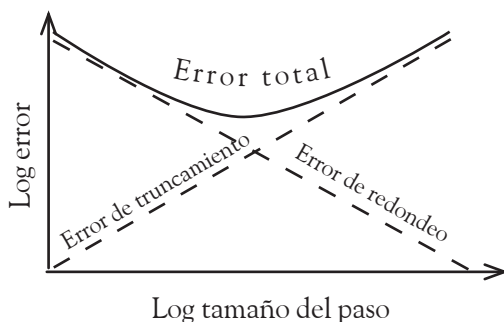
Error numérico total

A la suma de los errores de truncamiento y redondeo se le conoce como *error numérico total*. En general, la única manera de disminuir los errores de redondeo es incrementando el número de cifras significativas. Se recomienda seleccionar un tamaño del paso largo si se quiere disminuir la cantidad de cálculos sin incurrir en la penalización de grandes errores de redondeo. En la figura 3 se muestra una representación del error total en función del error de redondeo y el error de truncamiento que algunas veces son inseparables en un método numérico (Mathews y Fink, 2004).

Hoy en día, resultados numéricos erróneos atribuidos al computador son poco probables, puesto que la mayoría de equivocaciones pueden imputarse a errores humanos por un mal diseño del algoritmo. Aunque las equivocaciones pueden suceder en cualquier momento del proceso de modelación matemática o resolución de un problema, y pueden complementarse con otros componentes del error. Esto se puede controlar solamente con un vasto conocimiento de los principios matemáticos fundamentales, y con un cuidadoso diseño de la solución del problema. Los

errores de formulación o errores de modelamiento pueden ser imputados a un modelo matemático incompleto. Por ejemplo, un error de formulación imperceptible es el hecho de que en la segunda ley de Newton se omiten los efectos relativos de pérdidas de fricción. Se debe estar consciente de estos problemas y analizar que si se está usando un modelo insuficiente, ningún método numérico elaborará los resultados apropiados (Torres, 2000).

Figura 3. Representación gráfica del error total



Fuente: adaptado de Chapra y Canale (2007).

Conceptos básicos

La expansión de Taylor de $f(x)$ cerca de $x = a$ es:

$$Pa(x) = f(a) + \frac{(x_1 - a)}{1!} f'(a) + \frac{(x_1 - a)^2}{2!} f''(a) + \dots + \frac{(x_1 - a)^n}{n!} f^{(n)}(a)$$

Teorema binomial

$$(1 + m)^n = 1 + \frac{n}{1!}m + \frac{n(n-1)}{2!}m^2 + \frac{n(n-1)(n-2)}{3!}m^3 + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{4!}m^4 + \dots + m^n$$

Y esto se cumple en todos los valores de x .

$n! = n(n-1)(n-2)\dots 3 \times 2 \times 1$ (se lee “factorial de n ”)

Error verdadero: $E_t = \text{error verdadero} - \text{aproximación}$

Error relativo aproximado:

$$\varepsilon_a = \frac{\text{aproximación actual} - \text{aproximación anterior}}{\text{aproximación actual}}$$

$$\text{Error relativo verdadero: } \varepsilon_t = \frac{\text{error verdadero} - \text{aproximación}}{\text{error verdadero}}$$

Temas para profundización

Modelos, computadores y análisis del error; ambiente de computación; desarrollo de programas; aproximaciones y errores de redondeo; propagación de errores; varios tipos de error.

Taller 1

1. Defina error numérico total, error de redondeo, error instrumental, error de truncamiento, error relativo porcentual, error relativo aproximado, citando, para cada caso, un ejemplo práctico de ingeniería.
2. Discuta la veracidad de la siguiente afirmación: la precisión apunta a qué tan cercano está el valor calculado o medido del valor verdadero, mientras que la exactitud se refiere a qué tan cercano está un valor individual medido o calculado con respecto a los otros.