

Catálogo

Alexis Gavriel Gómez

I. INTRODUCCIÓN

$$s = f(e, p, r)$$

Vector de salida depende de: entradas(tiempo/espacio),
parámetros, ruido.

II. APROXIMACIONES Y ERRORES

$$\frac{df}{dt} = \frac{\Delta f}{\Delta t}$$

Error verdadero

$$E_t = Val.V - Val.Aprox.$$

Error relativo

$$E_{rel} = \frac{E_t}{Val.V}$$

Error relativo %

$$\epsilon_t = E_{rel} * 100 \%$$

Error % aprox

$$\epsilon_a = \frac{E.Aprox}{Val.Aprox} * 100 \%$$

$$\epsilon_a = 1 - \frac{AproxActual}{AproxAnterior} * 100 \%$$

Mientras $|\epsilon_a| > \epsilon_s$

Umbral de Scarborough

$$\epsilon_s = (0,5x10^{2-n}) \%$$

Coma Fija

$$x = \frac{1}{M} \sum_{n=0}^{N-1} b_n 2^n$$

$$M=2^m$$

$$b_0 LSBweight : \frac{1}{M}$$

$$b_{N-1} MSBweight \frac{2^{N-1}}{M}$$

Con signo

$$x = \frac{1}{M} (-b_{N-1} 2^{N-1} + \sum_{n=0}^{N-2} b_n 2^n)$$

DectoBin

1. M
2. M*num
3. -MSB+(sum)

Coma Flotante (IEEE 754)

$$(**)x = (-1)^s x(1, m) x 2^{e-bias}$$

$$bias = 2^{E-1} - 1$$

DecBin

1. bias
2. Dec \rightarrow Bin, mantisa(1,m)
3. e

BinDec

$$(**) \rightarrow bin$$

Tabla I
RANGOS M E

	Simple	Doble
Mantisa	23	52
Exponente	8	11

Tabla II
VALORES IMPORTANTES

$-\infty$	1	11...11	00...00	FF800000 _H
-0	1	00...00	00...00	80000000 _H
+0	0	00...00	00...00	00000000 _H
$+\infty$	0	11...11	00...00	7F800000 _H

Truncamiento

$$\epsilon \geq \frac{|\Delta x|}{|x|}$$

Redondeo

$$\frac{\epsilon}{2} \geq \frac{|\Delta x|}{|x|}$$

Numeric limits

III. ERRORES DE TRUNCAMIENTO

Cancelación por resta

$$f(x_0 + h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} h^n$$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$$

$$R_n = \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} (x - x_0)^k = \int_{x_0}^x \frac{(x-\tau)^n}{n!} f^{(n+1)}(\tau) d\tau$$

Forma de Lagrange

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1}$$

IV. ERRORES DE TRUNCAMIENTO

Diferenciación numérica

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

$$f'(x_i) = \frac{\Delta f_i}{h} + O(h)$$

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

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \underbrace{\frac{f'''(x_i)}{3!} h^2 - \frac{f^{(5)}(x_i)}{5!} h^4 - \dots}_{O(h^2)}$$

La versión hacia adelante

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} - \underbrace{\frac{f'''(x_i)}{3!} h}_{O(h)}$$

La versión hacia atrás es:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^2} + O(h)$$

y la versión centrada

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1}))}{h^2} + O(h^2)$$

Aproximando x:

$$\Delta \tilde{x} = x - \tilde{x}$$

$$f(x) \approx f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x}) + \frac{f''(\tilde{x})}{2}(x - \tilde{x})^2 + \dots$$

Para primer orden

$$\Delta f'(\tilde{x}) \approx |f'(\tilde{x})| \Delta \tilde{x}$$

$$E_x = \frac{x - \tilde{x}}{\tilde{x}}$$

$$N = \frac{E_f}{E_x} = \frac{\tilde{x} f'(\tilde{x})}{f(\tilde{x})}$$

Si la 3^{ra} derivada nunca supera en magnitud a M, entonces

$$E_T = |f'(x_i) - \frac{\tilde{f}(x_{i+1}) - \tilde{f}(x_{i-1}))}{2h}| \leq \frac{\epsilon}{h} + \frac{h^2 M}{6}$$

$$h_{opt} = \sqrt[3]{\frac{3\epsilon}{M}}$$

V. RAICES: MÉTODOS CERRADOS

- Raíces de multiplicidad impar

Método de Bisección

$$f(x_r) = 0 \quad ; \quad x_r \in [x_l, x_u]$$

Error:

$$\epsilon_a = |*| \frac{x_r^{(i)} - x_r^{i-1}}{x_r^{(i)}} 100 \%$$

$$\epsilon_a = |*| \frac{x_u - x_l}{x_u + x_l} 100 \%$$

Número de iteraciones para un error E_d :

$$n = \log_2 \left(\frac{\Delta x^0}{E_d} \right)$$

Forma alterna:

$$\epsilon_a = |*| x_r^{(i)} - x_r^{i-1}$$

Con:

$$\epsilon_s = \frac{x_u - x_l}{2} * \mathcal{E}$$

Método de Interpolación Lineal

Por triángulos semejantes:

$$\frac{f(x_l)}{x_l - x_i} = \frac{f(x_u)}{x_i - x_u}$$

$$x_i = x_u - \frac{f(x_u)(x_l - x_u)}{f(x_l) - f(x_u)}$$

VI. RAICES: MÉTODOS ABIERTOS Y MIXTOS

Iteración de Punto Fijo

Se reformula en:

$$x = g(x)$$

$$x_{i+1} = g(x_i)$$

$$\epsilon_a = \left| * \right| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} 100 \%$$

$$g'(\xi) = \frac{g(x_r) - g(x_i)}{x_r - x_i}$$

$$(x_r - x_{i+1}) = g'(\xi)(x_r - x_i)$$

Si el error verdadero: $E_{t,i} = (x_r - x_i)$

$$E_{t,i+1} = g'(\xi)E_{t,i}$$

Si $|g'(x)| > 1$ diverge

Método de Newton-Raphson

Se calcula la derivada analíticamente o por aproximación de diferencias.

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

$$0 = f'(x_i)(x_r - x_{i+1}) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x_r - x_i)^2$$

Con Error: $E_{t,i} = x_r - x_i$

$$E_{t,i+1} = -\frac{f''(\xi)}{2f'(x_i)}(E_{t,i})^2$$

Converge si: $\left| * \right| \frac{f''(\xi)}{2f'(x_i)} < 1$

Debe verificarse que: $f(x_r) \approx 0$

Método de la Secante

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i}$$

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

$$E_{t,i+1} = \text{const} * E_{t,i}^{1,618}$$

Método de Brent

- Método de bisección
- Método de la secante
- Método de interpolación inversa cuadrática

$$x = \frac{(y - y_{i-1})(y - y_i)(x_{i-2})}{(y_{i-2} - y_{i-1})(y_{i-2} - y_i)} + \frac{(y - y_{i-2})(y - y_i)(x_{i-1})}{(y_{i-1} - y_{i-2})(y_{i-1} - y_i)} + \frac{(y - y_{i-2})(y - y_{i-1})(x_i)}{(y_i - y_{i-2})(y_i - y_{i-1})}$$

Con $x = x_{i+1} \wedge y = 0$

Raíces de Polinomios

- Deflación Polinomial: reducir el polinomio
- Pulir Raíces: buscar la raíz, a partir de la aprox obtenida

Método de Müller

$$x_{i+1} = x_i - \frac{2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

VII. OPTIMIZACIÓN UNIDIMENSIONAL

Para encerrar un extremo se necesita que:

Máximo: $f(\alpha) > f(x_l) \wedge f(\alpha) > f(x_u)$

Mínimo: $f(\beta) < f(x_l) \wedge f(\beta) < f(x_u)$

Sección Dorada

- Encierra extremo: $[x_l, x_u]$
- Se necesitan otros dos puntos.
- $l_0 = x_u - x_l$
- $l_0 = l_1 + l_2$
- $\frac{l_1}{l_1+l_2} = \frac{l_2}{l_1}$
- Con: $R = l_2/l_1$
- $R^2 + R - 1 = 0$

Ejemplo máximo:

- Si $f(x_1) > f(x_2) \gg [x_2, x_u]$
- Si $f(x_2) > f(x_1) \gg [x_l, x_1]$
- $\Delta x = (1 - R)(x_u - x_l)$
- $\epsilon_a = (1 - R) \left| \frac{x_u - x_l}{x_{opt}} \right| 100\%$

Iterpolación Parabólica

- Con los 3 puntos, interpolar parábola
- El máximo es la siguiente aproximación
- $x_4 = \frac{1}{2} * \frac{f(x_1)(x_2^2 - x_3^2) + f(x_2)(x_3^2 - x_1^2) + f(x_3)(x_1^2 - x_2^2)}{f(x_1)(x_2 - x_3) + f(x_2)(x_3 - x_1) + f(x_3)(x_1 - x_2)}$

Método de Newton

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

Debe verificarse el signo de $f''(x)$ para asegurar extremo correcto.

Método de Brent

Combina sección dorada con interpolación parabólica. Necesita:

- Intervalo Inicial
- x mejor extremo hasta el momento
- w segundo mejor extremo
- v valor anterior de w
- u último valor evaluado de la función

Se intenta interpolación con x,v,w. Se utiliza el paso trasanterior.

VIII. OPTIMIZACIÓN MULTIDIMENSIONAL

- uniobjetivo y multiobjetivo
- con o sin gradiente
- heurísticos

Métodos sin gradiente

Convergencia Lenta

Búsqueda Aleatoria

- Se generan muchos números aleatorios
- Se selecciona el valor máximo
- Funciona con discontinuidades y funciones sin derivadas
- No se atasca en extremos locales
- Principio de los heurísticos

Método de Powell

- Explota las direcciones patrón (apuntan al máximo)

Simplex en bajada

- Tiene d + 1 vértices
- Se inicia con un simplex de volumen no nulo
- Se busca el vértice que posee el menor valor
- Se refleja el vértice
- Se expande o contrae el vértice

Métodos con gradiente

El gradiente indica la dirección de mayor cambio de la función.

$$\nabla f(\underline{x}) = \left[\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_3}, \dots \right]$$

Los extremos ocurren donde $\nabla f(x) = 0$ El equivalente a la segunda derivada multidimensional es la **Matriz Hessiana**.

$$H(x) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{vmatrix}.$$

Para los extremos $\nabla f(x) = 0$

- Si $|H| > 0$ y $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} > 0$, entonces f(x,y) tiene un mínimo.
- Si $|H| > 0$ y $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} < 0$, entonces f(x,y) tiene un máximo.
- Si $|H| < 0$, entonces f(x,y) tiene un punto de silla.

Máxima Inclinación

Seguir la dirección del gradiente para maximizar, o la opuesta para minimizar.

$$x_{i+1} = x_i + \nabla f(x_i) \arg \underbrace{\min}_s f(x_i \pm s \nabla f(x_i))$$

Problema: Efecto zig-zag.

Regla Δ

$$\text{Paraevitarelzig} - \text{zag}.x_{i+1} = x_i \pm \underbrace{\lambda \nabla f(x_i)}_{\Delta} = x_i \pm \Delta$$

- Signo - para minimizar
- Signo + para maximizar
- Se debe elegir λ correctamente

Gradientes Conjugados

Asumiendo una superficie cuadrática.

$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0)^T \nabla f(x_0) + \frac{1}{2} (x - x_0)^T \mathbf{H}(x_0) (x - x_0)$$

$$d_i^T \nabla f(x_{i+1}) = 0$$

$$x_{i+1} = x_{i+1} + \lambda d_{i+1}$$

$$d_{i+1}^T H(x_{i+1}) d_i = 0$$

$$d_{i+1} = \pm \nabla f(x_{i+1}) + \beta_i d_i$$

$$\beta_i = \frac{(\nabla f(x_{i+1}))^T \nabla f(x_{i+1})}{\|\nabla f(x_i)\|^2}$$

Método de Newton

$$x_{i+1} = x_i - H^{-1}(x_i) \nabla f(x_i)$$

Método de Lavenberg-Marquardt

$$\tilde{H}_i = H_i + \alpha_i I$$

IX. ÁLGEBRA LINEAL

Matriz de n x m:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{bmatrix}$$

Vector columna:

$$X = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$$

Vector fila:

$$X^T = [a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_n]$$

Matriz Transpuesta

Si $B = A^T$, entonces $b_{ij} = a_{ji}$

Matriz es **simétrica** si $A = A^T$

Matriz Diagonal

Si $A_{n \times n}$ es diagonal, $a_{ij} = 0, \forall i \neq j$

Matriz Identidad

Si $A_{n \times n}$ es identidad:

$$a_{ij} = 1, \forall i = j$$

$$a_{ij} = 0, \forall i \neq j$$

Matriz Triangular Superior

Si $A_{n \times n}$ es Triangular superior o derecha:

$$a_{ij} = 0, \forall i > j$$

Matriz Triangular Inferior

Si $A_{n \times n}$ es Triangular inferior o izquierda:

$$a_{ij} = 0, \forall i < j$$

Matriz a bandas

Tiene todos los elementos cero, excepto una banda centrada en la diagonal. Cuando el ancho de la banda tiene tres diagonales la matriz se denomina **tridiagonal**.

Producto Escalar

$$s\mathbf{A} \Rightarrow A_{ij} = s \cdot A_{ij}$$

Producto Punto entre Vectores

Producto interno

$$x \cdot y = x^T y = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

Producto Externo

Con X de tamaño n, y un Y de tamaño m

$$xy^T = \begin{bmatrix} x_1y_1 & x_1y_2 & \dots & x_1y_m \\ x_2y_1 & x_2y_2 & \dots & x_2y_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_ny_1 & x_ny_2 & \dots & x_ny_m \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

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

Producto Matricial

$$C = A_{n \times m} \cdot B_{m \times l}$$

$$C = AB = \begin{bmatrix} a_{1:}^T \\ a_{2:}^T \\ \vdots \\ a_{n:}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{:1} & a_{:2} & \dots & a_{:l} \end{bmatrix}$$

$$C = \begin{bmatrix} a_{1:b:1} & a_{1:b:2} & \dots & a_{1:b:l} \\ a_{2:b:1} & a_{2:b:2} & \dots & a_{2:b:l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n:b:1} & a_{n:b:2} & \dots & a_{n:b:l} \end{bmatrix}$$

Propiedades del producto matricial:

- **NO** conmutativo $AB \neq BA$
- Asociativo $(AB)C = A(BC)$
- Distributivo $(A+B)C = AC + BC$

Inversa de una matriz

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

Matriz ortogonal

$$A^{-1} = A^T$$

Determinante de una matriz

$$|A| = \sum_{j=1}^n a_{fj} |A_{fj}|$$

donde A_{fj} es la matriz adjunta de a_{fj} dada por $(-1)^{f+j} M_{fj}$,
y M_{fj} es el menor complementario de a_{fj} .

Propiedades de la determinante

- $|sA| = s^n |A|$
- $|I| = 1$
- $|AB| = |A||B|$
- $|I| = |A||A^{-1}| \rightarrow |A^{-1}| = 1/|A|$

Traza de una matriz

Suma de los elementos de la diagonal

$$tr(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii}$$

Sistemas de ecuaciones en notación matricial

$$Ax = b$$

X. ELIMINACIÓN DE GAUSS

Regla de Cramer

$$x_i = \frac{|A + (b - a_{i1})u_i^T|}{|A|}$$

Eliminación de Gauss simple

La i -ésima ecuación se sustituye por el resultado de restar la primera ecuación multiplicada por a_{i1}/a_{11}

Luego se elimina la siguiente con la segunda ecuación multiplicada por a'_{i2}/a'_{22}

La **sustitución hacia atrás** parte de x_n que se despeja directamente como:

$$x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}$$

resultado que se puede utilizar en la $(n-1)$ -ésima ecuación para despejar x_{n-1} .

$$x_i = \frac{b_i^{(n-1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}^{i-1} x_j}{a_{ii}^{(i-1)}}$$

para $i = n-1, n-2, \dots, 1$

El determinante se puede calcular multiplicando los elementos de la diagonal de la matriz resultante.

Pivoteo Parcial y escalamiento

- Intercambia filas i y τ de modo que el quede el coeficiente $a_{\tau i}$ de mayor magnitud arriba, antes de la eliminación.
- Se pueden escalar para que el mayor coeficiente sea 1, pero puede inducir errores.
- Si se requiere el determinante, sí se realiza el escalamiento.

Gauss-Jordan

- Elimina la incógnita de todas las otras ecuaciones, no solo las subsecuentes. Finaliza con una matriz identidad.
- Se puede utilizar para resolver varios sistemas simultáneos y calcular la matriz inversa al mismo tiempo.

XI. DESCOMPOSICIÓN LU E INVERSIÓN

Asúmase que A se puede descomponer en:

$$A = LU$$

$$Ax = b$$

$$LUx = b$$

$$L(Ux) = b$$

$$Ly = b$$

Para: $Ly = b$

$$y_1 = \frac{b_1}{l_{11}}$$

$$y_i = \frac{1}{l_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \right]$$

Para: $Ux = y$

$$x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}$$

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}} \left[y_i - \sum_{j=i+1}^n u_{ij} x_j \right]$$

- Para L, $l_{ii} = 1$.

- Se puede aprovechar los espacios en blanco de la matriz creada para almacenar los factores.

- El pivoteo es necesario para asegurar estabilidad.

Algoritmo de Doolittle

$$- f_{ij} = \frac{a_{ij}^{j-1}}{a_{jj}^{j-1}} \quad i > j$$

- Con la diagonal de L igual a 1.

Algoritmo de Crout

Con la diagonal de U igual a 1.

$$-) l_{i1} = a_{i1} \quad i = 1 \dots n$$

$$-) u_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}} \quad j = 2 \dots n$$

Y para $j=2 \dots n-1$

$$-) l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i = j \dots n$$

$$-) u_{jk} = \frac{a_{jk} - \sum_{i=1}^{j-1} l_{ji} u_{ik}}{l_{jj}}, \quad k = j+1 \dots n$$

$$-) l_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk} u_{kn}$$

Normas Vectoriales

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^p \right)^{1/p}$$

$p = 2$: norma euclídea

$p = 1$: norma de cuerdas de ciudad

$p \rightarrow \infty$: norma magnitud máxima

Normas Matriciales

Norma de Frobenius

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}$$

La norma 2 o espectral

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{max}}$$

donde λ_{max} es el mayor valor propio de $A^T A$, es decir, el mayor valor λ_i asociado a un vector propio e_i que satisface: $(A^T A)e_i = \lambda_i e_i$

Número de condición
 $cond(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$

Refinamiento iterativo:

- Para $Ax = b$, descomponga $A = LU$
- Resolver $LUx = b$, con $Ly = b$, y luego $U\tilde{x} = y$
- Calcular $\tilde{b} = A\tilde{x}$
- Calcular $\delta b = \tilde{b} - b$
- Si $\|\delta b\| < \tau$ con el umbral τ , termine
- Resuelva $LU\delta x = \delta b$ con $L\delta y = \delta b$ y luego $U\delta x = \delta y$
- Refinar el valor $\tilde{x} \leftarrow \tilde{x} - \delta x$
- Repetir desde paso 3

XII. MATRICES ESPECIALES Y EL MÉTODO DE GAUSS-SEIDEL

Algoritmo de Thomas

Supóngase que se tiene un sistema tridiagonal.

El algoritmo de Thomas es una descomposición LU optimizada.

Descomposición de Cholesky

Aplica para matrices simétricas $A = A^T$.

Matrices definidas positivas, $x^T A x > 0$.

$$A = LL^T$$

En donde L^T equivale a la matriz U de la descomposición LU.

A L se le conoce como la raíz cuadrada de A.

$$l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2}$$

$$l_{ki} = \frac{1}{l_{ii}} \left(a_{ki} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} l_{kj} \right) \quad i = 1, 2, \dots, k-1$$

No requiere pivoteo, es numéricamente estable.

Descomposición QR

$$A = QR$$

R es triangular superior.

Q es ortogonal ($Q^T = Q^{-1}$).

$$Ax = b$$

$$QRx = b$$

$$Rx = Q^T b$$

Calcular $b' = Q^T b$

Sustituir hacia atrás $Rx = b'$

- Requiere el doble de operaciones que LU
- Alta estabilidad, para matrices mal condicionadas
- Q se encuentra con transformaciones de Householder

$$Q = I - 2 \frac{uu^T}{u^T u} = I - 2 \frac{uu^T}{\|u\|^2} = I - 2\bar{u}\bar{u}^T$$

con $\bar{u} = u / \|u\|$

Gauss Seidel
Método iterativo

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j \right)$$

$$x_n = \frac{1}{a_{nn}} \left(b_n - \sum_{j=1}^{n-1} a_{nj} x_j \right)$$

Criterio de Convergencia

- Criterio Relativo

$$|\epsilon_{a,i}| = \left| \frac{x_i^j - x_i^{j-1}}{x_i^j} \right| 100\% < \epsilon_s$$

- Criterio Absoluto

$$|E_{a,i}| = |x_i^j - x_i^{j-1}| < E_s$$

La relajación es una modificación para mejorar convergencia. si se produce \tilde{x}_i^k , entonces el valor actualizado:

$$x_i^k = \lambda \tilde{x}_i^k + (1 - \lambda) x_i^{(k-1)}$$

Gauss-Seidel puro : con $\lambda = 1$

Con $0 < \lambda < 1$ se obtiene subrelajación (se amortiguan oscilaciones).

Con $1 < \lambda < 2$ se obtiene sobrerrelajación, que asume que el nuevo valor se mueve en la dirección correcta y se acelera el movimiento.

XIII. DESCOMPOSICIÓN EN VALORES SINGULARES

DVS: Descomposición en Valores Singulares.

SVD: Singular Value Decomposition.

$$A = U W V^T$$

A: matriz mxn.

U: matriz mxn de columnas ortogonales

$$U^T U = I$$

W: matriz diagonal con n valores singulares no negativos

V: matriz cuadrada nxn de columnas y filas ortogonales

$$V^T V = I \quad V V^T = I$$

Solución única

Si A es cuadrada nxn y con rango n, entonces A es no-singular e invertible; $Ax = b$ tiene una única solución para cada b y solo el 0 se mapea a 0.

En este caso, se prefiere utilizar LU

Múltiples o no soluciones

Si A tiene nulidad mayor que cero (rango menor que n):

- La mayoría de vectores b no producen solución.
- Algunos vectores b tienen como solución un subespacio completo.

DVS de matrices cuadradas

- Si A es cuadrada, U, W y V también lo son.

- Puesto que las matrices son ortogonales o diagonales, la inversa se calcula:

$$A^{-1} = V [\text{diag}(1/w_j)] U^T$$

- Problema si $w_j \approx 0$

- Número de condición se define como:

$$\kappa = \max(w_j) / \min(w_i)$$

- Si $\kappa \rightarrow \infty$ entonces A es singular.

- Si $\kappa \gg 0$ y $1/\kappa \approx 0$ entonces A es mal condicionada.

Solución de sistema homogéneo

Planteado como: $Ax = 0$

Solución de sistema con nulidad mayor que cero

Si b está en el alcance de A, y la nulidad de A no es cero, entonces el sistema posee infinitas soluciones, si se suma cualquier vector n del espacio nulo.

Se busca la solución de menor norma $\|x\|_2$:

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

$$x = V [\text{diag}(1/w_j)] (U^T b)$$

donde para $w_j \approx 0$ se sustituye en la matriz diagonal inversa $1/w_j \rightarrow 0$, anulando así todo aporte del espacio nulo.

Solución fuera del alcance de A

Se encuentra una solución que minimiza:

$$r \equiv \|Ax - b\|$$

con r el residuo de la solución. Forzando $1/w_j \rightarrow 0$ se denomina la inversa de Moore-Penrose, o la Pseudoinversa de A , denotada con: A^+

- Si todo $w_j \neq 0$, la solución $x = A^+b$ resuelve el sistema no singular.

- Si algunos $w_j = 0$, la solución $x = A^+b$ devuelve la mejor solución. retorna el vector x más pequeño que resuelve el sistema, o si no existe solución, el que produce el menor residuo.

XIV. INTERPOLACIÓN

- **Interpolación** si $x \in [x_0 : x_{n-1}]$
- **Extrapolación** si $x < x_0$ ó $x > x_{n-1}$

Interpolación Lineal Newton

- Se unen dos puntos adyacentes para formar una recta.
- $f_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x-x_0)$

Interpolación Cuadrática Newton

- Se unen tres puntos.
- $f_2(x) = b_0 + b_1(x-x_0) + b_2(x-x_0)(x-x_1)$
- equivalente a $a_2x^2 + a_1x + a_0$

con

$$a_2 = b_2$$

$$a_1 = b_1 - b_2x_0 - b_2x_1$$

$$a_0 = b_0 - b_2x_0 + b_2x_0x_1$$

- con los coeficientes:

$$b_0 = f(x_0)$$

$$b_1 = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

$$b_2 = \frac{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}}{x_2-x_0}$$

b_2 es la aproximación de $f''(x_0)$

Para polinomios de n -ésimo grado con $n+1$ puntos:

$$f_n(x) = b_0 + b_1(x-x_0) + \dots + b_n(x-x_0)(x-x_1)$$

$$b_1 = f[x_1, x_0] = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$$

$$b_2 = f[x_2, x_1, x_0] = \frac{f[x_0, x_1]-f[x_1, x_2]}{x_1-x_2}$$

Polinomios de interpolación de Lagrange

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

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

XV. TRAZADORES/SPLINES

- Usa polinomios de grado inferior para subconjuntos de puntos
- Eliminan oscilaciones entre puntos muestreados

Trazadlineales

- El segmento entre x_i y x_{i+1} :

$$f(x) = f(x_i) + \left(\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \right) (x - x_i)$$

- Desventaja: si la función es continua, la primera derivada es discontinua en los nodos.

Trazadores cuadráticos

- Ventaja: Continuidad en la primera derivada.
- Desventaja: Se percibe discontinuidad en la segunda derivada.
- En cada intervalo $[x_{i-1}, x_i]$ la función se interpola con:

$$f_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i$$

- Los valores en los nodos deben ser iguales.

$$a_i x_i^2 + b_i x_i + c_i = f(x_i)$$

$$a_{i+1} x_i^2 + b_{i+1} x_i + c_{i+1} = f(x_i)$$

Para los extremos:

$$a_1 x_0^2 + b_1 x_0 + c_1 = f(x_0)$$

$$a_n x_n^2 + b_n x_n + c_n = f(x_n)$$

$$f'(x) = 2a_i x + b_i$$

Se elige

$$f''(x_0) = 0$$

$$a_1 = 0$$

$$\begin{bmatrix} x_0^2 & x_0 & 1 & & & & \\ x_1^2 & x_1 & 1 & & & & \\ & & & x_1^2 & x_1 & 1 & \dots \\ 2x_1 & 1 & & -2x_1 & -1 & & \\ & & & x_2^2 & x_2 & 1 & \dots \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & \dots & x_n^2 & x_n & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \\ c_1 \\ a_2 \\ b_2 \\ c_2 \\ \vdots \\ a_n \\ b_n \\ c_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_1) \\ f(x_1) \\ 0 \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{bmatrix}$$

Trazadores Cúbicos

- Requieren 4n ecuaciones.

Derivación optimizada

- El polinomio cúbico es

$$f_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i$$

$$f_i(x) = 3a_i x^2 + 2b_i x + c_i$$

$$f_i''(x) = 6a_i x + 2b_i$$

- La segunda derivada está dada por los segmentos de recta:

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

Y se obtiene:

$$(x_i - x_{i-1})f''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1})f''(x_i) + (x_{i+1} - x_i)f''(x_{i+1}) = 6 \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} - 6 \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

Interpolación bilineal

- Se estima interpolación lineal en x con y=y₁ fijo.

$$f(x_i, y_1) = \frac{x_i - x_2}{x_1 - x_2} f(x_1, y_1) + \frac{x_i - x_1}{x_2 - x_1} f(x_2, y_1)$$

- Se estima interpolación lineal en x con y=y₂ fijo.

$$f(x_i, y_2) = \frac{x_i - x_2}{x_1 - x_2} f(x_1, y_2) + \frac{x_i - x_1}{x_2 - x_1} f(x_2, y_2)$$

- Entre ambos puntos interpolados se aplica interpolación lineal en y.

$$f(x_i, y_i) = \frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} f(x_i, y_1) + \frac{y_i - y_1}{y_2 - y_1} f(x_i, y_2)$$

Se sintetizan las ecuaciones anteriores en:

$$f(x_i, y_i) = \frac{x_i - x_2}{x_1 - x_2} \frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} f(x_1, y_1) + \frac{x_i - x_1}{x_2 - x_1} \frac{y_i - y_2}{y_1 - y_2} f(x_2, y_1) + \frac{x_i - x_2}{x_1 - x_2} \frac{y_i - y_1}{y_2 - y_1} f(x_1, y_2) + \frac{x_i - x_1}{x_2 - x_1} \frac{y_i - y_1}{y_2 - y_1} f(x_2, y_2)$$

XVI. REGRESIÓN

Regresión Lineal mínimos cuadrados

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (a_0 + a_1 x_i))^2$$

Derivando el error con respecto a a₀ e igualando a cero:

$$n a_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) a_1 = \sum_{i=1}^n y_i$$

con respecto a a₁:

El error estándar de la estimación es:

$$\left(\sum_{i=1}^n x_i \right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^n x_i^2 \right) a_1 = \sum_{i=1}^n x_i y_i$$

$$s_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}}$$

El coeficiente de determinación r² se define como:

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

con S_t es la varianza de los datos

$$S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2$$

con \bar{y} = promedio.

r es el coeficiente de correlación

Si los datos siguen la tendencia exponencial

$$y = \alpha e^{\beta x}$$

Se aplica ln, para obtener:

$$\ln y = \ln \alpha + \beta x$$

Si los datos siguen la tendencia de razón de crecimiento

$$y = \alpha \frac{x}{\beta + x}$$

$$\frac{1}{y} = \frac{\beta}{\alpha x} + \frac{1}{\alpha}$$

Ajuste Cuadrático

$$y = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + e$$

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2$$

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

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

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

Generalizando

Para un polinomio de orden m se plantea un sistema de $m+1$ incógnias.

$$\begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^m \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^{m+1} \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 & \cdots & \sum x_i^{m+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^m & \sum x_i^{m+1} & \sum x_i^{m+2} & \cdots & \sum x_i^{2m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \sum x_i^2 y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^m y_i \end{bmatrix}$$

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

XVII. INTEGRACIÓN NUMÉRICA

Regla del trapecio

El área entre a y b , está dada por:

$$(b-a) \frac{f(a)+f(b)}{2}$$

Se puede expresar el polinomio de interpolación de newton como:

$$f_n(x) = \frac{\Delta^2 f(x_0)}{n! h^n} (x-x_0)(x-x_0-h) \dots (x-x_0-[n-1]h) + R_n$$

- Se utilizan $n+1$ puntos equiespaciados con distancia $h = \frac{b-a}{n}$

- La integral $I = \sum_{i=1}^n h \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}$

- Con $h = (b-a)/n$

$$I = (b-a) \frac{1}{2n} \left(f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right)$$

El Error:

$$E_a = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''$$

Regla de Simpson

- Se aumenta la precisión utilizando polinomios de orden superior equiespaciados.

Simpson 1/3

Con $h = (b-a)/2$

En donde $(b-a)$ es el ancho

$$I \approx h \frac{1}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

Error:

$$E_t = \frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\xi)$$

El resultado será exacto para polinomios cúbicos.

Separando la integral en segmentos se obtiene:

$$I \approx \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \cdot \frac{1}{3n} \underbrace{\left[f(x_0) + 4 \sum_{i=1,3,5,\dots}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{j=2,4,6,\dots}^{n-2} f(x_j) + f(x_n) \right]}_{\text{altura promedio}}$$

Con un error estimado:

$$E_a = \frac{(b-a)^5}{180n^4} f^{(4)}(x)$$

- Para un número impar de segmentos se utiliza **Simpson 3/8**

Con $h = (b-a)/3$

$$I \approx \frac{3}{8} h [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(4)}(\xi)$$

Integración con segmentos desiguales

Se modifica la regla del trapecio

$$I = h_1 \frac{f(x_0)+f(x_1)}{2} + h_2 \frac{f(x_1)+f(x_2)}{2} + \dots$$

$$\dots + h_n \frac{f(x_{n-1})+f(x_n)}{2}$$

XVIII. INTEGRACIÓN NUMÉRICA

Fórmulas de Newton-Cotes de integración abierta

Los límites se extienden más allá del intervalo de datos. Con un paso:

$$h = \frac{b-a}{n}$$

Los puntos están en $x_i = a + ih$

Integración de Romberg

Se basa en la **extrapolación de Richardson**.

Al realizar dos aproximaciones de integrales, una con el doble de segmentos (la mitad del paso) que la otra. $h_2 = h_1/2$

$$I \approx \frac{4}{3}I(h_2) - \frac{1}{3}I(h_1)$$

De forma general:

$$I_{j,k} \approx \frac{4^{k-1}I_{j+1,k-1} - I_{j,k-1}}{4^{k-1} - 1}$$

- K indica el nivel de integración ($k = 1$ trapecio)

- La aplicación sistemática de la ecuación se denomina:

integración de Romberg

Criterio de terminación

$$|\epsilon_a| = \left| \frac{l_{1,k} - l_{2,k-1}}{l_{1,k}} \right|$$

- El algoritmo de Romberg es el método de preferencia si se tienen funciones suaves sin singularidades

Cuadratura Adaptativa

- Ajusta el tamaño de paso tal que se usen pasos pequeños en intervalos de variación rápida, y pasos mayores si la función cambia lentamente.

XIX. INTEGRALES IMPROPIAS Y DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

Integrales Impropias - Una integral es impropia si:

- Su integrando tiende a un valor finito en los límites de integración pero no puede ser evaluado en esos límites.
- Su límite superior es ∞ o su límite inferior es $-\infty$
- Hay una singularidad en alguno de sus límites.
- Tiene una singularidad integrable en un lugar dentro del intervalo de integración.

Para el caso 2, se recurre a un cambio de variable.

Si el intervalo incluye al origen, se divide la integral.

Regla del valor medio extendida.

$$\int_a^b f(x) \approx h \sum_{i=1}^n f\left(a + h\left[i - \frac{1}{2}\right]\right)$$

Con $h = (b - a)/n$

Diferenciación Numérica

Aproximación con diferencias hacia atrás:

$$f'(x) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

$$f''(x) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^2}$$

Juntando la última ecuación con la aproximación de la serie de Taylor se obtiene:

Para las aproximaciones hacia atrás con $O(h^2)$

Primera derivada

$$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{2h}$$

Segunda derivada

$$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3}))}{h^2}$$

Para las aproximaciones centradas con $O(h^4)$

Primera derivada

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{12h}$$

Segunda derivada

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{12h^2}$$

Extrapolación de Richardson

Para dos tamaños de paso se cumple:

$$D \approx D(h_2) + \frac{1}{(h_1/h_2)^2 - 1} [D(h_2) - D(h_1)]$$

Con $h_2 = h_1/2$:

$$D \approx \frac{4}{3}D(h_2) - \frac{1}{3}D(h_1)$$

Derivada con datos irregularmente espaciados

$$f'(x) = f(x_{i-1}) \frac{2x - x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} + f(x_i) \frac{2x - x_{i-1} - x_{i+1}}{(x_{i-1} - x_i)(x_i - x_{i+1})} + f(x_{i+1}) \frac{2x - x_{i-1} - x_i}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)}$$

Permite calcular la derivada en cualquier valor de X

Se mantiene la exactitud de la diferencia centrada.

Los procesos de derivación amplifican el ruido en los datos.

Si el ruido proviene del proceso de medición, reducir el paso empeora la situación.

Se prefiere utilizar regresión por mínimos cuadrados si se conoce el patrón de la función.

Si se desconoce, se asume algún polinomio a partir de los datos.

XX. ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

- Ecuaciones Diferenciales **ordinarias**: Solo **una** variable independiente.
- Ecuaciones Diferenciales **parciales**: **varias** variables independientes.

Una EDO de orden mayor a uno se replantea como sistema de orden 1.

Se puede resolver de forma analítica únicamente las EDO lineales.

Métodos de Runge-Kutta

Resuelven ecuaciones de la forma $\frac{dy}{dx} = f(x, y)$, con solución $y(x)$.

En general, la estructura de la solución es:

$$y_{i+1} = y_i + \phi * h$$

En donde:

ϕ es la pendiente.

h es el tamaño de paso.

Método de Euler

Se aproxima la derivada al inicio de un intervalo, y se asume constante en él.

El i-ésimo intervalo inicia en x_i y termina en $x_i + h$.

La solución se aproxima con $y_{i+1} = y_i + \phi h$ (Taylor).

Con la ecuación:

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

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

entonces, con el método de Euler:

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

Cálculo del error

Sea $y(x)$ la solución de la ecuación: $y' = f(x, y)$, con derivadas continuas.

Con series de Taylor se puede obtener:

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

Entonces el error se aproxima con:

$$E_a = \frac{f^{(n)}(x_i, y_i)}{n!}h^n \in O(h^n)$$

Las series de Taylor solo permiten estimar el error de truncamiento local.

No permiten evaluar el error propagado, ni el error global.

Algunas derivadas son difíciles de calcular.

El error de truncamiento global es $O(h)$

Para una aproximación de segundo orden se tiene:

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + \frac{f'(x_i, y_i)}{2!}h^2$$

Con error de truncamiento local:

$$E_a = \frac{f''(x_i, y_i)}{6}h^3$$

Métodos con Taylor de orden superior

$$f'(x_i, y_i) = \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} + \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \frac{dy}{dx}$$

Para derivadas de orden superior se vuelve muy complejo, por lo que hay métodos que utilizan únicamente primeras derivadas para dar un paso.

Para evitar la suposición de que la derivada al inicio del intervalo se mantiene constante existen los métodos: Heun y punto medio.

Método de Heun

Calcula la derivada al inicio y al final del intervalo, para utilizar su promedio.

Con el método de Euler:

$$y'_i = f(x_i, y_i)$$

Se extrapola el **Predictor**

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

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

Integrando en el intervalo y relacionando con la regla del trapecio se obtiene.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i) + f(x_{i+1})}{2}$$

y se obtiene el **Corrector**:

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

Relacionando con la regla del punto medio:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(x_1)$$

Con $x_1 = (a+b)/2$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx hf(x_{i+1/2})$$

Métodos de Runge-Kutta

$$y_{i1} = y_i + \phi(x_i, y_i, h)h$$

donde ϕ es la **función de incremento**.

$$\phi(x_i, y_i, h) = a_1k_1 + a_2k_2 + \dots + a_nk_n$$

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

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

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

\vdots

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

RK de primer orden

El método de RK con $n = 1$ equivale al método de Euler.

RK de segundo orden

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

Con:

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

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

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h + \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} \right) \frac{h^2}{2!}$$

Si se asume un valor conocido de a_2

$$a_1 = 1 - a_2 \quad p_1 = q_{11} = 1/(2a_2)$$

Con $a_2 = 1/2$ se obtiene el método de Heun.

Con $a_2 = 1$ se obtiene el método del punto medio.

Con $a_2 = 2/3$ se obtiene el método de Ralston.

$$y_{i+1} = y_i + ((1/3)k_1 + (2/3)k_2)h$$

Con:

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

$$k_2 = f(x_i + (3/4)h, y_i + (3/4)k_1h)$$

RK de tercer orden

Con $n = 3$:

$$y_{i+1} = y_i + (a_1 k_1 + a_2 k_2 + a_3 k_3)h$$

Con:

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

$$k_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$$

$$k_3 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h + q_{22} k_2 h)$$

Una versión común es:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)h$$

Donde:

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

$$k_2 = f(x_i + (1/2)h, y_i + (1/2)k_1 h)$$

$$k_3 = f(x_i + h, y_i - k_1 h + 2k_2 h)$$

Si $f(x, y)$ solo depende de x , entonces el método se reduce a la regla de Simpson $1/3$.

Error local de $O(h^4)$. Error global $O(h^3)$.

Da resultados exactos cuando la solución es cúbica.

RK de cuarto orden

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

Donde:

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

$$k_2 = f(x_i + (1/2)h, y_i + (1/2)k_1 h)$$

$$k_3 = f(x_i + (1/2)h, y_i + (1/2)k_2 h)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3 h)$$

Si $f(x, y)$ solo depende de x , entonces el método se reduce a la regla de Simpson $3/8$.

Método de Butcher

RK de quinto orden.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{90}(7k_1 + 32k_2 + 12k_4 + 32k_5 + 7k_6)h$$

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

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{4}h, y_i + \frac{1}{4}k_1 h\right)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{4}h, y_i + \frac{1}{8}k_1 h + \frac{1}{8}k_2 h\right)$$

$$k_4 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i - \frac{1}{2}k_2 h + k_3 h\right)$$

$$k_5 = f\left(x_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{16}k_1 h + \frac{9}{16}k_4 h\right)$$

$$k_6 = f\left(x_i + h, y_i - \frac{3}{7}k_1 h + \frac{2}{7}k_2 h + \frac{12}{7}k_3 h - \frac{12}{7}k_4 h + \frac{8}{7}k_5 h\right)$$

Métodos adaptativos de Runge-Kutta

Algoritmos que adaptan el tamaño del paso automáticamente a las tasas de cambio de la función alcanzan mayor exactitud.

Requieren Estimar el error de truncamiento local en cada paso para decidir el cambio de paso.

Para estimar el error

- Usar dos predicciones con diferentes tamaños de paso, pero el RK del mismo orden.

- Usar diferencia entre predicciones con RK de distinto orden.

Método adaptativo de RK

(de mitad de paso)

Error de truncamiento local

$$\Delta = y_2 - y_1$$

Para RK4 el corrector con exactitud de quinto orden es:

$$y_2 \leftarrow y_2 + \frac{\Delta}{15}$$

Método adaptativo de RK Fehlberg

(RK encapsulado)

Reutiliza evaluaciones de RK4 en RK5

Control del tamaño del paso

Se sugiere

$$h_{nuevo} = h_{actual} \left| \frac{\Delta_{nuevo}}{\Delta_{actual}} \right|^\alpha$$

Δ es la exactitud estimada actual y la deseada.

- Si h debe incrementar ($\Delta_{actual} = < \Delta_{nuevo}$) $\rightarrow \alpha = 0,2$
- Si h debe decrementar ($\Delta_{actual} > \Delta_{nuevo}$) $\rightarrow \alpha = 0,25$
- En general se elige:

$$\Delta_{nuevo} = y_{escala}$$

- Para determinar el factor relativo y_{escala} se sugiere:

$$y_{escala} = |y| + \left| h \frac{dy}{dx} \right|$$

XXII. MÉTODOS RÍGIDOS Y DE PASOS MÚLTIPLES

Rigidez

- Sistema rígido: tiene en la solución componentes que cambian rápida y lentamente.
- Componentes de variación rápida son transitorios y dan paso a los lentos.
- Los componentes transitorios determinan el paso a usar en toda la solución.

Métodos Implícitos

Método explícito: y_{i+1} se encuentra en un solo lado de la ecuación.

$$y_{i+1} = y_i - ay_i h$$

Método implícito: y_{i+1} se encuentra se implementa.

$$y_{i+1} = \frac{y_i}{1+ah}$$

$$y_i \rightarrow 0$$

Métodos de pasos múltiples

Método de Heun sin autoinicio

Para mejorar la predicción en $O(h^3)$ se utiliza un paso de $2h$ y se utiliza el valor anterior a y_i

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

Predictor Corrector

Error de truncamiento:

$$E_c = \frac{y_{i+1}^0 + y_{i+1}^m}{5}$$

Se puede reducir el error con el predictor:

$$y_{i+1}^m \leftarrow y_{i+1}^m - E_c$$

Y el modificador:

$$y_{i+1}^0 \leftarrow y_{i+1}^0 + \frac{4}{5}(y_i^m - y_i^0)$$

Predictor:

$$y_{i+1,u}^0 = y_{i-1}^m + f(x_i, y_i^m)2h$$

Modificador del predictor:

$$y_{i+1}^0 \leftarrow y_{i+1,u}^0 + \frac{4}{5}(y_i^m - y_i^0)$$

Corrector:

$$y_{i+1}^j = y_i^m + \frac{f(x_i, y_i^m) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^{j-1})}{2}h$$

$j = 1 \dots m$

Verificación del error

$$|\epsilon_a| = |y_{i+1}^j - y_{i+1}^{j-1}|$$

Estimación del error de corrector $E_c = -\frac{1}{5}(y_{i+1,u}^m - y_{i+1,u}^0)$

Fórmulas de Newton-Cotes

Abiertas

Para $n = 1$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + 2hf_i$$

Para $n = 2$

$$y_{i+1} = y_{i-2} + \frac{3h}{2}(f_i + f_{i-1})$$

Para $n = 3$

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3}(2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2})$$

Cerradas

Para $n = 1$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$$

Para $n = 2$

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$$

Fórmulas de Adams

Abiertas

$$y_{i+1} = y_i + h\left(\frac{3}{2}(f_i - \frac{1}{2}f_{i-1})\right) + \frac{5}{12}h^3 f_i'' + O(h^4)$$

Cerradas

$$y_{i+1} = y_i + h\left(\frac{1}{2}f_{i+1} + \frac{1}{2}f_i\right) - \frac{1}{12}h^3 f_{i+1}'' - O(h^4)$$

XXIII. ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Ecuaciones diferenciales de segundo orden de la forma:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D = 0$$

Con ABC funciones de x e y

D es una función extra dependiente de 1 variable.

Categorías

Elípticas: sistemas de estado estacionario

Parabólicas: variación temporal, propagación

Hiperbólicas: Propagación con respecto al tiempo.

Elípticas

La ecuación de Laplace $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2 + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}} = 0$

usando la **Ley de Fourier de conducción de calor**:

$$q_i = k\rho C \frac{\partial T}{\partial x \partial i}$$

$$T = \frac{H}{\rho CV}$$

Para una malla cuadrada:

$$T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1} = 4T_{i,j}$$

Método de Liebmann

Se resuelve de modo iterativo como:

$$T_{i,j} = [T_{i+1,j} + T_{i-1,j} + T_{i,j+1} + T_{i,j-1}]/4$$

Sobrerelajación ($1 \leq \lambda \leq 2$):

$$T_{i,j}^{nuevo} \leftarrow \lambda T_{i,j}^{nuevo} + (1 - \lambda) T_{i,j}^{anterior}$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} \approx \frac{T_{1,j} - T_{-1,j}}{2\Delta x}$$

$$2T_{1,j} - 2\Delta x \frac{\partial T}{\partial x} + T_{0,j+1} + T_{0,j-1} - 4T_{0,j} = 0$$

Parabólicas

Método Explícito

$$k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{\partial T}{\partial t}$$

La segunda derivada centrada con $O(\Delta x^2)$:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{2\Delta x^2}$$

Próximo instante $l + 1$

$$T_i^{l+1} = T_i^l + \lambda(T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l)$$

Donde $\lambda = k\Delta t/(\Delta x)^2$

Convergencia: conforme Δx y Δt tienden a cero, la solución se aproxima a la solución verdadera.

Estabilidad: los errores se atenúan conforme avanzan las etapas.

Converge y es estable si $\lambda \leq 1/2$ o

$$\Delta t \leq \frac{1}{2} \frac{\Delta x^2}{k}$$

Con $\lambda \leq 1/4$ la solución no oscila.

Con $\lambda \leq 1/6$ se minimizan los errores de truncamiento.

Método Implícito

La derivada se aproxima en un nivel de tiempo posterior.

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{2\Delta x^2}$$

Usando la ecuación de conducción junto a la derivada temporal

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

se obtiene

$$k \frac{T_{i+1}^{l+1} - 2T_i^{l+1} + T_{i-1}^{l+1}}{2\Delta x^2} = \frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\Delta t}$$

Con $\lambda = k\Delta t/(\Delta x)^2$:

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + (1 + 2\lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = T_i^l$$

Con $f_0(t^{l+1})$ describe el cambio de temperatura en la frontera

Para el primer nodo:

$$(1 + 2\lambda)T_1^{l+1} - \lambda T_2^{l+1} = T_1^l + \lambda f_0(t^{l+1})$$

Para el último nodo:

$$-\lambda T_{m-1}^{l+1} + (1 + 2\lambda)T_m^{l+1} = T_m^l + \lambda f_{m+1}(t^{l+1})$$

con $f_{m+1}(t^{l+1})$ describe el cambio en el extremo derecho

Exactitud de $O(h^2)$ espacio, y $O(h)$ tiempo.

El método produce un sistema tridiagonal.

Método de Crank-Nicolson

Exactitud de $O(h^2)$ espacio y tiempo. Utiliza aproximaciones para el tiempo.

$$-\lambda T_{i-1}^{l+1} + 2(1 + \lambda)T_i^{l+1} - \lambda T_{i+1}^{l+1} = \lambda T_{i-1}^l + 2(1 - \lambda)T_i^l + \lambda T_{i+1}^l$$

Primer nodo:

$$2(1 + \lambda)T_1^{l+1} - \lambda T_2^{l+1} = \lambda f_0(t') + 2(1 - \lambda)T_1^l + \lambda T_2^l + \lambda f_0(t^{l+1})$$

Último nodo:

$$-\lambda T_{m+1}^{l+1} + 2(1 + \lambda)T_m^{l+1} = \lambda f_{m+1}(t') + 2(1 - \lambda)T_m^l + \lambda T_{m-1}^l + \lambda f_{m+1}(t^{l+1})$$

También resulta en un sistema tridiagonal.

XXIV. EIGENSISTEMAS

- Sistemas propios, autosistemas
- Forma: $Ax = \lambda x$
- x es el **eigenvector**
- λ es el **eigenvalor**

Expresado de otra forma:

$$(A - \lambda I)x = 0$$

Eso se cumple con $x \neq 0$ cuando $(A - \lambda I)$ es una matriz singular (no invertible). La transformación matricial convierte el plano en una dimensión menor.

$$\det|A - \lambda I| = 0$$

Aplicaciones:

- Análisis de grafos
 - Reducción de dimensiones (patrones)
 - Observabilidad y Controlabilidad
- Diagonalización de matrices

Si se suma τI a la matriz A , los eigenvalores se desplazan τ .

Propiedades de matrices:

- Simétrica: $A = A^T$
 - Ortogonal: $A^T A = A A^T = I$
 - Hermítica o autoadjunta: $A = A^\dagger \leftarrow a_{ij} = a_{ji}^*$
 - Unitaria: $A^\dagger = A^{-1}$
 - Normal: $A^\dagger A = A A^\dagger$
 - Real + Simétrica + Ortogonal = Normal
-
- Eigenvalores de una matriz hermítica son Reales.
 - Eigenvalores de una matriz real no simétrica son reales o complejos conjugados.
 - Eigenvalores de una matriz normal con eigenvalores no degenerados (distintos) son complejos y ortogonales. Engendran un espacio n -dimensional.
 - Eigenvalores de una matriz no normal no son ortogonales. Las matrices son defectuosas.

Eigenvalores derechos

$$Ax = \lambda x$$

$$AX_R = X_R \text{ diag } (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$$

Eigenvalores izquierdos

$$x^T A = \lambda x^T$$

$$X_L A = \text{diag } (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) X_L$$

entonces

$$X_L X_R \text{ diag } (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) =$$

$$\text{diag } (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) X_L X_R$$

Si se normalizan $X_L X_R = I \leftarrow X_L = X_R^{-1}$

Diagonalización

$$AX_R = X_R \text{ diag } (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$$

multiplicando X_R^{-1}

$$X_R^{-1} A X_R = \text{diag } (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$$

Transformación de semejanza

Las transformaciones de semejanza mantienen los eigenvalores.

Las matrices reales y simétrica tienen eigenvectores reales y ortonormales. Una matriz no simétrica se puede reducir a otra con bloques de 2×2 en la diagonal.

El método general diagonaliza la matriz A con la secuencia:

$$A$$

$$P_1^{-1} A P_1$$

$$P_1^{-1} A P_1$$

$$P_2^{-1} P_1^{-1} A P_1 P_2$$

$$P_3^{-1} P_2^{-1} P_1^{-1} A P_1 P_2 P_3$$

Los eigenvectores $X_R = P_1 P_2 P_3 \dots$

Si solo se buscan los eigenvalores basta con reducir la matriz a triangular, ya que en su diagonal se encuentran los eigenvalores.

- Métodos de transformaciones atómicas
- Métodos de factorización

Los métodos permiten

- Encontrar todos los eigenvalores y ningún eigenvector
- Encontrar todos los eigenvalores y algunos eigenvectores
- Encontrar todos los eigenvalores y eigenvectores

- Hacer cero elementos fuera de la diagonal (transformación de Jacobi)

- Hacer cero filas o columnas enteras (transformación de Householder)

- buscar llegar casi a la diagonal, tridiagonal
- Iterar sobre la matriz hasta que el error sea despreciable

Relación con SVD

$$A = X_R \text{ diag } (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) X_L$$

es similar a la descomposición de valores singulares

$$A = U \text{ diag } (w_1, w_2, \dots, w_n) V^T$$

Si la matriz A es simétrica (hermítica compleja), ambas transformaciones son iguales.

Transformaciones de Jacobi

Cada transformación elimina un elemento fuera de la diagonal.

Para matrices reales y simétricas este método siempre funciona.

La rotación básica se describe por:

$$P_{pq} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & c & \cdots & s \\ & & \vdots & 1 & \vdots \\ & & -s & \cdots & c \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Con $c = \cos(\phi)$ y $s = \sin(\phi)$, con ϕ el ángulo de rotación.

- Todos los elementos en la diagonal son 1 excepto dos elementos c en las filas y columnas p y q .

- Todos los elementos fuera de la diagonal son cero excepto dos elementos s y s .

Se matriz anterior se utiliza para transformar la matriz A con

$$A' = P_{pq}^T A P_{pq}$$

$P_{pq}^T A$ cambia las filas p y q .

$A P_{pq}$ cambia las columnas p y q .

Con $r = 1 \dots n$

$$a'_{rp} = ca_{rp} - sa_{rq} \quad r \neq p, r \neq q$$

$$a'_{rq} = ca_{rq} + sa_{rp}$$

$$a'_{pp} = c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sca_{pq}$$

$$a'_{qq} = s^2 a_{pp} + c^2 a_{qq} + 2sca_{pq}$$

$$a'_{pq} = (c^2 - s^2)a_{pq} + sc(a_{pp} - a_{qq})$$

con $\tau = \tan(\phi/2) = s/(1 + c)$

Para considerar la convergencia se suman los valores fuera de la diagonal

$$S = \sum_{r \neq s} |a_{rs}|^2$$

$$S' = S - 2|a_{pq}|^2$$

La secuencia S' decrece monotónicamente.

Cuando el algoritmo converge:

$$D = V^T A V$$

$$V = P_1 P_2 \dots$$

Las columnas de V son los eigenvectores.

$$V' = V P_i$$

Se barre la parte superior de la matriz, que son $n(n-1)/2$

Se necesitan 6 a 10 barridos.

XXV. REDUCCIONES DE GIVENS Y HOUSEHOLDER

Reducción de Givens

Reduce la matriz a una forma tridiagonal.

Elimina en parejas de elementos

$$P_{jk} \text{ anula a } a_{k,j-1}$$

Método de Householder

Convierte a tridiagonal utilizando n-2 transformaciones ortogonales.

Cada transformación elimina la parte requerida de una columna y fila.

El punto de partida es la matriz de Householder P

$$P = I - ww^T$$

Donde w es un vector real con $|w|^2 = 1$ y ww^T es su producto externo.

Si un vector v es ortogonal a w , entonces

$$Pv = v$$

por lo que v es un eigenvector de P con eigenvalor 1.

Puesto que existen n-1 vectores ortogonales a cualquier vector w ,

$$Pw = -w$$

entonces -1 también es un eigenvalor.

Método

$$P = I - \frac{uu^T}{H}$$

$$H = \frac{1}{2}|u|^2$$

Supóngase que x es la primera columna de A .

$$u = x \mp |x|e_1$$

$$e_1 = [1, 0, \dots, 0]^T$$

Se cumple entonces

$$Px = \pm |x|e_1$$

La matriz P pone en cero todos los elementos de x excepto por el primero.

El valor de k es \pm la magnitud del vector $x = [a_{21}, a_{31}, \dots, a_{n1}]^T$

La transformación completa es:

$$A' = PAP, \text{ ya que } P = P^T$$

Para reducir las multiplicaciones

$$p \equiv \frac{Au}{H}$$

$$A' = A - pu^T - up^T + 2Kuu^T$$

$$K = \frac{u^T p}{2H}$$

XXVI. EIGENVALORES Y EIGENVECTORES POR DESCOMPOSICIÓN

Utilizando el método QR

Q: ortogonal

$$A = QR$$

$$A' = Q^T A Q$$

La transformación de semejanza preserva la simetría, la forma tridiagonal y la forma de Hessemberg.

Se prefiere el algoritmo QL debido a redondeo.

$$A' = Q^T A Q = LQ$$

La descomposición QL se realiza por transformaciones de Householder.

XXVII. ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES

El ACP (PCA) es una herramienta del análisis de datos.

Reducir el número de dimensiones de un conjunto de datos, con el afán de revelar estructuras simples previamente ocultas.

Identificar la base con mayor sentido.

Se espera que en esta base sea fácil filtrar el ruido y encontrar estructuras ocultas.

Cada muestra x es un vector en un espacio m -dimensional, con m el número de mediciones tomados.

X es el conjunto de datos.

$$PX = Y$$

La varianza:

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x_i|^2 - |\mu|^2$$

$$\text{Calidad de datos SNR} = \frac{\sigma_{\text{señal}}^2}{\sigma_{\text{ruido}}^2}$$

SNR $\gg 1$ indica mediciones de alta precisión

Matriz de Covarianza

$$A = a_1, a_2, \dots, a_n$$

$$B = b_1, b_2, \dots, b_n$$

$$\sigma_A^2 = \frac{1}{n} \sum_i a_i^2$$

La covarianza entre A y B

$$\sigma_{AB}^2 = \frac{1}{n} \sum_i a_i^2 b_i^2$$

La covarianza mide la dependencia lineal entre dos variables.

$$\sigma_{ab}^2 = \frac{1}{n} a^T b$$

La matriz de covarianza se define como:

$$\Sigma_x = \frac{1}{n} X X^T$$

Se busca que los elementos fuera de la diagonal sean cero.

El ACP asume que los valores son ortonormales. Esto permite encontrar una solución utilizando álgebra lineal.

Encuéntrese una matriz P que transforma a

$$Y = PX$$

$$\Sigma_Y = \frac{1}{n} Y Y^T$$

sea una matriz diagonal.

$$\Sigma_Y = P \Sigma_X P^T$$

Pasos del ACP

- Substraer la media
- Calcular Σ_X
- Calcular Eigenvalores y Eigenvectores de Σ_X
- Construir la matriz de proyección P
- Proyectar los datos con $Y = PX$

Reconstrucción

Para reconstruir se utiliza:

$$y = P(x - \mu)$$

Para reconstruir el dato original x a partir de la representación y hacemos:

$$x \approx \bar{x} = P^T y + \mu$$