Introducción

Cálculo Numérico: describir, analizar y desarrollar algoritmos numéricos que permitan solucionar problemas matemáticos en los cuales están involucradas cantidades numéricas.

Se aplica cuando:

- El problema no posee solución analítica (como $\int_0^\pi \sqrt{1+\cos(x)^2}dx$)
- El procedimiento para hallar la solución es excesivamente complicado
- O excesivamente costoso

Veremos cómo resolver numéricamente ecuaciones, sistemas de ecuaciones, cálculo de extremos, integrales, ...
También estudiaremos cómo interpolar datos, es decir, a partir de valores en puntos conocidos, obtener una función (simple) que tenga esos mismos valores.

Error

- **Error**: toda aproximación a de un valor real r lleva asociada un error.
  - **Error absoluto**: $E = r - a$
  - **Error relativo**: $e = \frac{E}{r}$ (interpretable en %)
- **Cifras decimales significativas**: Decimos que una aproximación a de un valor real r tiene n cifras decimales significativas si

$$|r - a| \leq 0,5 \cdot 10^{-n}.$$

  Otra definición que se usa en la literatura es que el error relativo (en valor absoluto) sea inferior a $0,5 \cdot 10^{-n}$

Ej: Redondear el número $r = 35.47486$ mediante una aproximación con cuatro cifras decimales significativas, es equivalente a tomar la aproximación $a = 35.4749$, pues:

$$|35.47486 - 35.4749| = 0.00004 = 0.4 \cdot 10^{-4} < 0.5 \cdot 10^{-4}$$

Ejemplos

- Ej: 1.0 es una aproximación con 2 cifras significativas de 1.004

Ejemplos

- Ej: 1.0 es una aproximación con 2 cifras significativas de 1.004
- Ej: 1.0 es una aproximación con 3 cifras significativas de 0.9996.

Ejemplos

- Ej: 1.0 es una aproximación con 2 cifras significativas de 1.004
- Ej: 1.0 es una aproximación con 3 cifras significativas de 0.9996.
- Ej: $a_1 = 1.4142$, $a_2 = 1.4142567$ son aproximaciones a $\sqrt{2}$ con cuatro cifras decimales significativas.

Ejemplos

- Ej: 1.0 es una aproximación con 2 cifras significativas de 1.004
- Ej: 1.0 es una aproximación con 3 cifras significativas de 0.9996.
- Ej: $a_1 = 1.4142$, $a_2 = 1.4142567$ son aproximaciones a $\sqrt{2}$ con cuatro cifras decimales significativas.
- Ej: ¿Cuántas cifras decimales significativas poseen las siguientes aproximaciones de π?
  - $a_1 = 3.141593$
  - $a_2 = 3.14159320$
  - $a_3 = 1.14159328$

Fuentes de error

(E1) Error humano. Son aquellos que se producen por ejemplo, por errores en operaciones, transcripción de datos, o al programar.

(E2) Error en el modelado. Los modelos matemáticos que se utilizar para modelar el mundo físico no son siempre exactos.

(E3) Error de medición. Debido al margen de error de los aparatos de medición.

(E4) Error por la aritmética de coma flotante.

(E5) Error de aproximación matemática.

Error de aproximación matemática

Los **errores de aproximación** o **errores de truncamiento** son debido a la imposibilidad de evaluar de modo exacto muchas funciones (exponenciales, logaritmos, funciones trigonométricas, etc)

Para evaluar e^x, el ordenador sustituye la función por una aproximación suya mediante el polinomio de Taylor:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \ldots + \frac{\xi^n}{n!}, \quad \xi \in (0, x).$$

Al descartar el último término se produce un error.

Propagación de errores

Al operar con dos aproximaciones que tienen un cierto error, los errores se propagan, aumentando en algunos casos (y disminuyendo en otros).

Por ejemplo, si sumamos dos números a_1, a_2 con errores E_1, E_2, entonces

$$r_1 + r_2 = a_1 + E_1 + a_2 + E_2 = (a_1 + a_2) + E_1 + E_2,$$

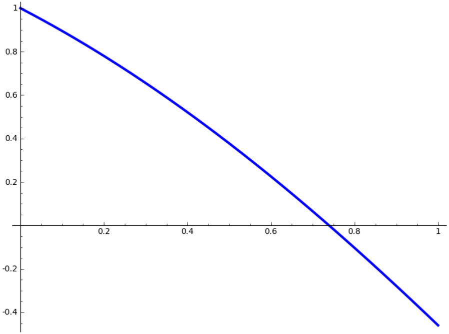
es decir, los errores se suman. Y si los multiplicamos:

$$r_1 * r_2 = (a_1 + E_1)(a_2 + E_2) = (a_1 a_2) + (E_1 a_2 + E_2 a_1 + E_1 E_2) \approx (a_1 a_2) + (E_1 a_2 + E_2 a_1)$$

Por ejemplo, como consecuencia del error de coma flotante y de la propagación de errores, tenemos que

$$1 + 10^{-16} = 1!!!$$

Planteamiento del problema



Tenemos una función $f(x)$ **continua** en un intervalo $[a, b]$.

Se cumple que $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos en el intervalo.

Entonces el Teorema de Bolzano nos asegura la existencia de una raíz.

Los métodos de dos puntos tratan de reducir la anchura del intervalo manteniendo el cambio de signo.

Método de la bisección

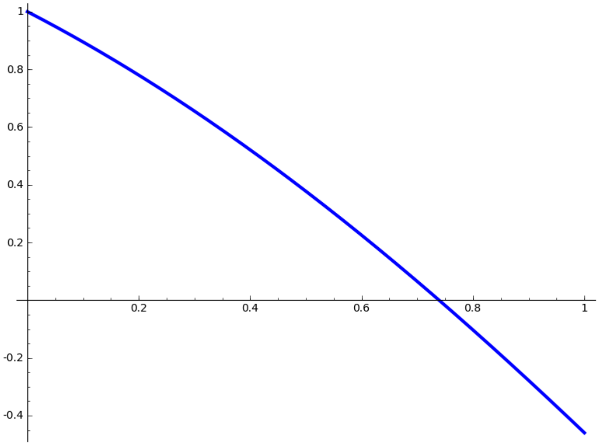
El algoritmo de la bisección es el siguiente:

1. Calculamos $c = \dfrac{a+b}{2}$, el punto medio del segmento $[a, b]$.
2. Calculamos $f(c)$ y lo comparamos con $f(a)$ y $f(b)$.
   - Si $f(a)$ y $f(c)$ tienen distinto signo, tomamos $[a, c]$ como nuevo segmento y volvemos al paso 1.
   - Si $f(c)$ y $f(b)$ tienen distinto signo, tomamos $[c, b]$ como nuevo segmento y volvemos al paso **??**.
3. Repetimos el proceso tantas veces como sea necesario hasta estar en el margen de error fijado.
   - Podemos establecer un error máximo permitido (0.01, 0.005, 0.0001,...)
   - o bien una precisión de d cifras decimales (equivale a un error máximo de $0.5 \cdot 10^{-d}$).

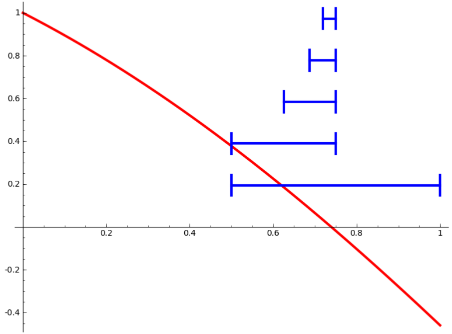
Método de la bisección

Ejemplo 1: $f(x) = -x + \cos(x)$, $[a, b] = [0, 1]$.

$f(a) = 1$, $f(b) = -0.459698$



Método de la bisección



Ejemplo 1: $f(x) = -x + \cos(x)$, $[a, b] = [0, 1]$.

$f(a) = 1$, $f(b) = -0.459698$

- c=0.5, $f(c) = 0.377582$ $[a, b]$=[0.5,1].
- c=0.75, $f(c) = -0.018311$, $[a, b]$=[0.5,0.75].
- c=0.625, $f(c) = 0.185963$, $[a, b]$=[0.625,0.75].

Error del método de la bisección

- Si partimos de un intervalo $[a, b]$, el error que estamos cometiendo es $E_0 = b - a$.
- Tomamos $c = (a + b)/2$ y pasamos a uno de los intervalos $[a, c]$ ó $[c, b]$. En cualquier caso, el error es la mitad que el anterior: $E_1 = E_0/2 = \frac{b-a}{2}$.
- Si hacemos n iteraciones:

$$E_n = \frac{E_{n-1}}{2} = \frac{E_{n-2}}{2^2} = \ldots = \frac{E_0}{2^n}, \qquad \boxed{E_n = \frac{b-a}{2^n}}$$

De este modo, podemos calcular el número de iteraciones necesarias para conseguir cierta precisión T, imponiendo que $\dfrac{b-a}{2^n} \leq T$ y despejando n en función de T.

Error del método de la bisección

Ejemplo 1: *Queremos estimar el valor de la raíz de $f(x)$, con una precisión de 3 cifras decimales.* Imponemos entonces

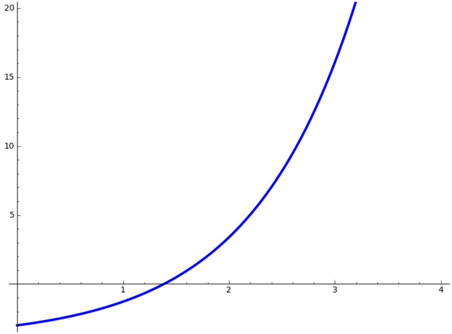
$$\frac{b-a}{2^n} \leq 0.5 \cdot 10^{-3} \rightarrow \ \frac{1}{2^n} \leq 0.0005$$

$$2^n \geq 1/0.0005 = 2000 \ \rightarrow n \geq 10.97 \ \rightarrow n = 11$$

Tenemos que hacer 11 iteraciones del algoritmo de bisección.
Otra forma de estimar el error que estamos cometiendo es ir calculando las diferencias entre los puntos medios de los intervalos: $E_0 = b - a = 1$,

$E_1 = 1/2 = 0.5$, $E_2 = 0.75 - 0.5 = 0.25$, $E_3 = 0.75 - 0.625 = 0.125$,...

Planteamiento del problema



Tenemos una función $f(x)$ **continua** y un punto inicial x_0.

Queremos calcular un cero de $f(x)$ próximo a x_0.

Los métodos de un punto tratan de obtener el cero utilizando información sobre la derivada.

Método de Newton

Partimos de una función $f(x)$ y un punto inicial x_0.

Calculamos el siguiente punto x_1 como el punto en el que la tangente a la gráfica de $f(x)$ en el punto $(x_0, f(x_0))$ corta el eje x.

La ecuación de la tangente es:

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$$

Imponemos que corte el eje x:

$$0 - f(x_0) = f'(x_0)(x_1 - x_0)$$

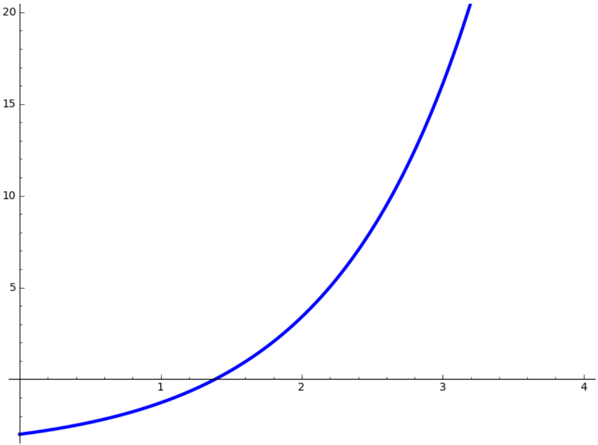
Despejando $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$.

Repitiendo el proceso, $x_2 = x_1 - f(x_1)/f'(x_1)$.

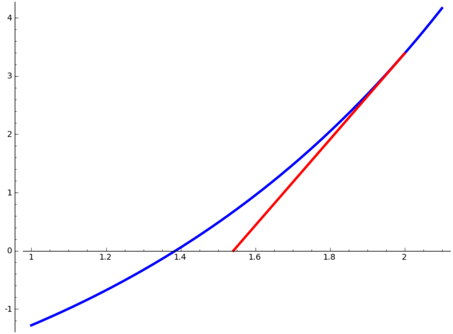
$$\boxed{x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)}$$

Método de Newton: ejemplo

$f(x) = e^x - 4$, $x_0 = 2$



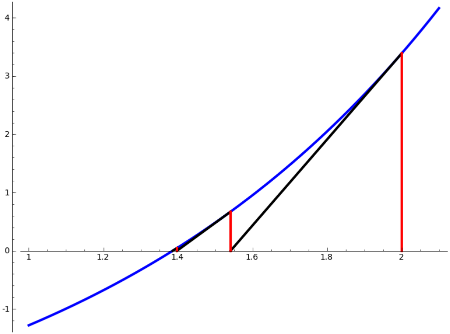
Método de Newton: ejemplo



$f(x) = e^x - 4$, $x_0 = 2$.

- $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0) = 1.54134113294645$

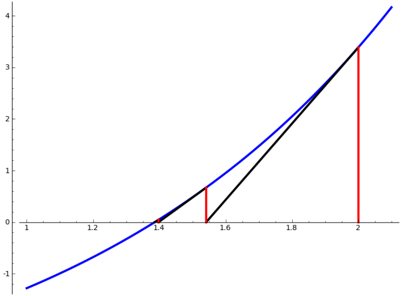
Método de Newton



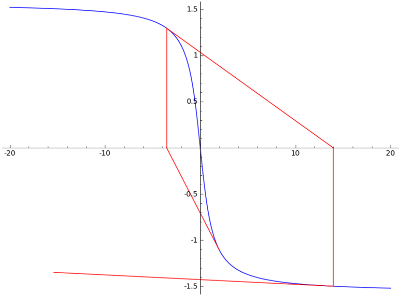
$f(x) = e^x - 4$, $x_0 = 2$.

- $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0) = 1.54134113294645$
- $x_2 = x_1 - f(x_1)/f'(x_1) = 1.39771625526465$
- $x_3 = x_2 - f(x_2)/f'(x_2) = 1.38635934331094$
- En este caso, podemos calcular la solución casi exacta. $x_4 = \log(4) = 1.38629436111989$

Convergencia del método



Convergente



No convergente

Convergencia

Teorema

Sea $f \in \mathcal{C}^2([a,b])$ (segunda derivada continua en $[a,b]$), de la cual sabemos que posee una raíz r en $[a,b]$.

Si $f'(r) \neq 0$, entonces existe un intervalo centrado en r tal que la sucesión $\{x_n\}$ del método de Newton-Raphson converge a la raíz, siempre que el punto inicial x_0 se encuentre dentro de dicho entorno.

Proposición

Sea $f \in \mathcal{C}^2([a,b])$, con una raíz r en $[a,b]$.

Si $f'(r) > 0$, $f''(x) > 0$ (f es estrictamente creciente en r y convexa) para todo $x \in [a,b]$, entonces la sucesión $\{x_n\}$ converge a r para todo valor inicial x_0.

Analogamente si $f'(r) < 0$ y/o $f''(x) < 0$ para todo $x \in [a,b]$ (f estrictamente decreciente y cóncava).

Método de la secante

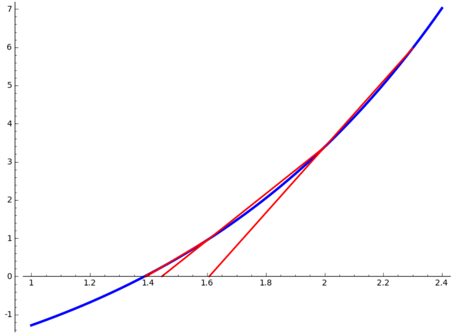
Partimos de una función $f(x)$ y de dos puntos iniciales x_0, x_1. Calculamos el siguiente punto x_2 como el punto en el que la recta (secante) determinada por los puntos $(x_0, f(x_0))$ y $(x_1, f(x_1))$ corta el eje X.
La ecuación de la secante es:

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

Imponemos que corte el eje X: $0 - f(x_0) = \frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}(x_2 - x_0)$
Despejando,
$x_2 = x_0 - f(x_0)\frac{x_1-x_0}{f(x_1)-f(x_0)} = \frac{x_0 f(x_1)-x_1 f(x_0)}{f(x_1)-f(x_0)}$
Repitiendo el proceso,

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

Método de la secante



$f(x) = e^x - 4,\ x_0 = 2.3,\ x_1 = 2.$

- $x_2 = \frac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1}{f(x_1) - f(x_0)} = 1.606705$
- $x_3 = \frac{f(x_2)x_1 - f(x_1)x_2}{f(x_2) - f(x_1)} = 1.445250$
- $x_4 = \frac{f(x_3)x_2 - f(x_2)x_3}{f(x_3) - f(x_2)} = 1.392496$
- Recordemos la solución exacta: $\bar{x} = \log(4) = 1.38629436111989$

Error en el método de Newton y de la Secante

Dependiendo de la multiplicidad de la raíz r, la velocidad de convergencia del método varía.
Para estimar el error cometido en cada iteración, tomaremos la fórmula

$$E_n \approx |x_n - x_{n-1}|$$

Método del punto fijo

El objetivo es obtener un **punto fijo** de una función $F(x)$ dada, es decir, un valor $\bar{x}$ tal que $F(\bar{x}) = \bar{x}$.

El problema de calcular un cero de $f(x)$ se puede transformar en obtener un punto fijo de una función $F(x)$ (la transformación no es única).

Partimos de una función $F(x)$ y de un punto inicial x_0.

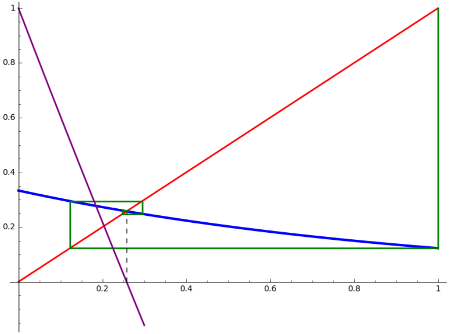
Calculamos el siguiente punto x_1 como la imagen por F de x_0.

$$x_1 = F(x_0)$$

Repitiendo el proceso,

$$\boxed{x_n = F(x_{n-1})}$$

Método del punto fijo



$f(x) = -3x + e^{-x}$ $F(x) = e^{-x}/3$ (gráfica azul), $x_0 = 1$.
La gráfica roja es la identidad, el punto buscado es aquel en el que se cortan.

- $x_1 = F(x_0) = 0.122626$
- $x_2 = F(x_1) = 0.294865$
- $x_3 = F(x_2) = 0.248211$

Los segmentos verdes unen los puntos de la sucesión calculada: $(x_0, F(x_0))$ y $(F(x_0), F(x_0))$

Convergencia y error

Teorema

Supongamos que $F \in \mathcal{C}([a,b])$.

1. *Si* $F(x) \in [a,b]$ *para todo* $x \in [a,b]$, *entonces* F *tiene un punto fijo en* $[a,b]$.
2. *Si además* $F'(x)$ *está definida y es continua en* (a,b) *y* $|F'(x)| < 1$ *para todo* $x \in (a,b)$, *entonces* F *tiene un único punto fijo* $\bar{x}$ *en* $[a,b]$.

Convergencia y error

Teorema

Supongamos que $F \in \mathcal{C}([a,b])$ *verifica:*

1. $F(x) \in [a,b]$ *para todo* $x \in [a,b]$.
2. $F'(x)$ *está definida y es continua en* (a,b) *y* $|F'(x)| \leq K < 1$ *para todo* $x \in (a,b)$.
3. $x_1 \in [a,b]$.

Sea $E_n = |\bar{x} - x_n|$, *donde* $\bar{x}$ *es el único punto fijo de* F *y* x_n *está definido recursivamente por* $x_n = F(x_{n-1})$. *Entonces*

$$E_{n+1} \leq K^n \frac{|x_1 - x_0|}{1-K}.$$

Convergencia y error

Comparemos estos tres ejemplos de problemas de punto fijo.

1. $F(x) = \cos(x)$, $x_0 = 1$

   $|F'(x)| = |-\sin(x)| < 1, x \in (0,1) \Rightarrow$ El método SI converge
2. $F(x) = x^3 - 1$, $x_0 = 1$

   $|F'(x)| = |3x^2|$, que no está acotado por 1 en $(0,1)$, pues $F'(1) = 3$

   $\Rightarrow$ El método no converge
3. $F(x) = (1+x)^{1/3}$, $x_0 = 1$

   $|F'(x)| = \left|1/3(1+x)^{-2/3}\right| < 1/3$ en $(0,1)$, (pues es decreciente) $\Rightarrow$ El método SI converge