

Índice

1. Interpolación y aproximación polinomial	3
1.1. Polinomios de Lagrange	3
1.2. Aproximación minimizando error cuadrático medio	4
1.3. Interpolación con método de Hermite	6
1.3.1. Diferencia dividida	6
1.3.2. Para calcular la interpolación	6
1.4. Operadores de diferencia finita con polinomios de Newton	8
1.4.1. Operador de diferencia finita-adelante	8
1.4.2. Operador de diferencia finita-atrás	8
1.4.3. Polinomio de Newton adelante	8
1.5. Error de interpolación	9
1.6. Aproximación usando las funciones como espacio vectorial	10
1.6.1. Producto interno	10
1.6.2. Norma de una función	10
1.6.3. Distancia entre dos funciones	11
1.6.4. Aproximación	11
1.6.5. Número de condicionamiento (Condition number)	12
1.7. Aproximación por conjuntos ortogonales de polinomios	13
1.7.1. Polinomios ortogonales y ortonormales	13
1.7.2. Teorema de la mejor aproximación	13
1.8. Algunos conjuntos de polinomios ortogonales	13
1.9. Interpolación fuera del intervalo de dominio de la familia de polinomios	14
1.10. Anexos	17
1.10.1. Fenómeno de Runge	17
1.10.2. Nodos o puntos de Chebyshev	17
2. Aproximación de integrales	18
2.1. Con interpolación polinomial (Fórmulas cerradas de Newton-Cotes)	18
2.1.1. Fórmula del trapecio	18
2.1.2. Fórmula de Simpson	19
2.1.3. Con más nodos	19
2.2. Fórmulas abiertas de Newton-Cotes	20
2.3. Integración numérica compuesta	21
2.3.1. Regla de Simpson compuesta	21
2.3.2. En general, para buscar el m adecuado de acuerdo al error	21
2.4. Integración de Cuadraturas Gaussianas	22
2.4.1. Error	23
2.4.2. Integrar una función fuera del dominio del polinomio indicado	24

3. Ecuaciones diferenciales	25
3.1. Conceptos básicos	25
3.1.1. Ecuación lineal homogénea y no-homogénea	25
3.1.2. Reducción de orden usando varias variables	27
3.2. Método de Euler	27
3.3. Método de Taylor	29
3.4. Métodos de Runge-Kutta	29
3.5. Métodos multipasos de Adams	29
3.6. Ecuaciones diferenciales parciales	30
3.6.1. Resolución analítica	30
3.6.2. Método de Crank-Nicolson	31
4. Introducción a la teoría de error	33
4.1. Representación de punto flotante	33
4.1.1. Operaciones en punto flotante	34
4.2. Números de condicionamiento	34
5. Ecuaciones no-lineales	36
5.1. Método de la bisección	36
5.2. Método de la falsa posición	38
5.3. Algoritmo de Newton / del punto fijo	39
5.3.1. Caso de una variable	39
5.3.2. Para varias variables: sistema de ecuaciones	40
5.4. Método de Bailey	40
6. Sistemas de ecuaciones lineales	41
6.1. La problemática	41
6.2. Factorización LU	41
6.2.1. Un sistema de ecuaciones usando la factorización LU	42
6.2.2. Una técnica rápida de descomposición	42
6.2.3. Matrices de permutación P-Q para reducir errores de redondeo (pivotes parciales y totales)	43
6.3. Métodos iterativos	44
6.3.1. Método de Jacobi	44
6.3.2. Método de Gauss-Siedel	46
6.3.3. Método S.O.R. (Successive OverRelaxation)	46
A. Apéndice	47
A.1. Ayuda matemática	47
A.1.1. Matriz jacobiana	47
A.1.2. Series de Taylor	47
A.1.3. Invertir matrices / matriz adjunta y determinante	47

A.1.4.	Multiplicación de matrices	49
A.2.	Familias de polinomios	50
A.2.1.	Legendre	50
A.2.2.	Chebyshev	51
A.2.3.	Laguerre	52
A.2.4.	Hermite	53
A.3.	Fórmulas de integración	54
A.3.1.	Fórmulas cerradas de Newton-Cotes	54
A.3.2.	Fórmulas abiertas de Newton-Cotes	55
A.4.	Nodos y coeficientes de integración Gaussiana	55
A.4.1.	Gauss-Chebyshev	55
A.4.2.	Gauss-Legendre	56
A.4.3.	Gauss-Hermite	57
A.4.4.	Gauss-Laguerre	57
A.5.	Resolución de ecuaciones diferenciales	58
A.5.1.	Métodos de un paso	58
A.5.2.	Métodos multipasos - Adams Bashfort	59
A.5.3.	Métodos multipasos - Adams Moulton	60
A.6.	Resolución de ecuaciones no-lineales	61
A.7.	Métodos iterativos para ecuaciones lineales	61

1. Interpolación y aproximación polinomial

Se busca una función polinomial $p(x)$ que pase todos los pares ordenados en el plano cartesiano (x_i, y_i) , y si llega a existir, es única.

Como es una función polinomial, la base de su espacio vectorial debe ser potencias de x , es decir $p(x)$ es una combinación lineal de las siguientes funciones:

$$\{1, x, x^2, x^3, \dots, x^n\}$$

Hay varias formas de llegar a esta aproximación.

1.1. Polinomios de Lagrange

La primera y más sencilla forma de interpolar es usando Polinomios de Lagrange, de modo que se muestre sólo un sumando a la vez cuando se está sobre un punto indicado.

Si tenemos un juego de puntos como el siguiente:

i	1	2	3	4	...	N
x_i	x_1	x_2	x_3	x_4	...	x_N
$f(x_i)$	y_1	y_2	y_3	y_4	...	y_N

Podemos interpolar la función $f(x)$ de la siguiente forma:

$$f(x) \approx L(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \cdot l_i(x)$$

$l_i(x)$ puede considerarse un factor de “ocultamiento”, de modo que sea igual a 1 ó 0 cuando se evalúa en algún punto de la tabla que proporcionamos.

$$\begin{aligned} l_0 &= \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \cdot \frac{x - x_2}{x_0 - x_2} \cdot \frac{x - x_3}{x_0 - x_3} \cdot \dots \\ l_1 &= \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \cdot \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} \cdot \frac{x - x_3}{x_1 - x_3} \cdot \dots \\ l_2 &= \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \cdot \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} \cdot \frac{x - x_3}{x_2 - x_3} \cdot \dots \\ l_i &= \prod_{j=0, i \neq j}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \end{aligned}$$

Y al momento de evaluar, funciona de la siguiente manera. Teniendo ya...

$$L(x) = f(x_0) \cdot l_0(x) + f(x_1) \cdot l_1(x) + f(x_2) \cdot l_2(x) + \dots$$

Al momento de evaluar esta función en un punto de la tabla (digamos x_1), entonces...

$$L(x_2) = f(x_0) \cdot \underbrace{l_0(x_2)}_0 + f(x_1) \cdot \underbrace{l_1(x_2)}_0 + f(x_2) \cdot \underbrace{l_2(x_2)}_1 + \dots = f(x_2)$$

1.2. Aproximación minimizando error cuadrático medio

Si en un plano cartesiano se tiene una cantidad finita de puntos, se puede deducir alguna tendencia central que acomode a una curva. Generalmente corresponden a una medición, por lo que pueden seguir esa tendencia con algún grado de error. Se deducirá de la siguiente manera.

i	1	2	3	4	...	N
x_i	x_1	x_2	x_3	x_4	...	x_N
y_i	y_1	y_2	y_3	y_4	...	y_N

Supongamos que una recta $y = ax + b$ los puede aproximar bien. Nuestras incógnitas entonces serán a y b . Por lo tanto se define una variable *error*, cuya definición es la siguiente:

$$e_i = |y_i - y(x_i)|$$

$$e_i = |y_i - ax_i - b|$$

$$e_i^2 = (y_i - ax_i - b)^2$$

Al provenir de un par de variables aleatorias X y Y , entonces el error también puede interpretarse como tal, y su valor esperado (promedio aritmético), al ser un valor discreto, corresponde a:

$$E[e_i^2] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (e_i^2) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - ax_i - b)^2$$

La minimización del error cuadrático medio se logra haciendo que este valor esperado sea el mínimo posible. Al depender de las dos variables a y b , entonces, se debe cumplir lo siguiente.

$$\frac{\partial \{E[e_i^2]\}}{\partial a} = \frac{\partial \{E[e_i^2]\}}{\partial b} = 0$$

Eso implica que

$$\frac{\partial}{\partial a} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - ax_i - b)^2 = \frac{\partial}{\partial b} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - ax_i - b)^2 = 0$$

Luego (Recordando que la derivada, al ser una operación lineal, puede “entrar” en la sumatoria...

$$\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial a} (y_i - ax_i - b)^2 = \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial b} (y_i - ax_i - b)^2 = 0$$

$$\sum_{i=1}^N -2x_i \cdot (y_i - ax_i - b) = \sum_{i=1}^N -2(y_i - ax_i - b) = 0$$

Teniendo el siguiente sistema de ecuaciones.

$$\left. \begin{aligned} a \cdot \sum_{i=1}^N x_i^2 + b \cdot \sum_{i=1}^N x_i &= \sum_{i=1}^N x_i \cdot y_i \\ a \cdot \sum_{i=1}^N x_i + b \cdot N &= \sum_{i=1}^N y_i \end{aligned} \right|$$

$$\begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_i^2 & \sum_{i=1}^N x_i \\ \sum_{i=1}^N x_i & N \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_i \cdot y_i \\ \sum_{i=1}^N y_i \end{bmatrix}$$

Con a y b despejados, tenemos los coeficientes para la recta que quisimos ajustar: $y = ax + b$

También se puede hacer lo mismo para buscar cualquier función que se pueda ajustar a una lista de puntos, y tenga la cantidad que queramos de coeficientes a encontrar. La variable error cambia un poco.

$$y = f(x_i) \quad \text{con coeficientes} \quad c_1, c_2, c_3, \dots$$

$$e_i = |y_i - f(x_i)| \Rightarrow e_i^2 = (y_i - f(x_i))^2$$

Luego...

$$E[e_i^2] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2$$

$$\frac{\partial \{E[e_i^2]\}}{\partial c_1} = \frac{\partial \{E[e_i^2]\}}{\partial c_2} = \frac{\partial \{E[e_i^2]\}}{\partial c_3} = \dots = 0$$

Y repitiendo el mismo procedimiento que antes, se llega a:

$$\sum_{i=1}^N \left(f(x_i) \cdot \frac{\partial f(x_i)}{\partial c_k} \right) - \sum_{i=1}^N \left(y_i \cdot \frac{\partial f(x_i)}{\partial c_k} \right) = 0 \quad \text{Para cada coeficiente } c_k \text{ a encontrar.}$$

1.3. Interpolación con método de Hermite

Es otra forma de interpolación, en la cual se hace uso, en lugar de más puntos, de la derivada de la función en dichos puntos. El polinomio de Hermite es de grado $2n - 1$, siendo n la cantidad de puntos a tomar.

1.3.1. Diferencia dividida

La definición de diferencia dividida es la siguiente:

$$\text{Diferencia dividida: } f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f(x_i) - f(x_{i+1})}{x_i - x_{i+1}}$$

Cuando se tienen más puntos, esto se convierte en una función recursiva:

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{n-1}, x_n] = \frac{f[x_i, \dots, x_{n-1}] - f[x_{i+1}, \dots, x_n]}{x_i - x_n}$$

Esto es similar al **Operador de diferencia adelante**, visto adelante.

1.3.2. Para calcular la interpolación

Si se tiene la siguiente tabla:

x	x_0	x_1
$f(x)$	f_0	f_1
$\frac{df}{dx}(x)$	f'_0	f'_1

Entonces creamos la siguiente tabla de datos: Se duplican tanto las tablas de variables x y $f(x)$.

z	x_0	x_0	x_1	x_1
$f(z_i)$	f_0	f_0	f_1	f_1

La siguiente fila debe contener las diferencias divididas de la primera fila. Para ello se hace lo siguiente:

$$f[z_{i+1}, z_i] \mid f[x_0, x_0] \quad f[x_1, x_0] \quad f[x_1, x_1]$$

Dado que $f[x_0, x_0]$ resultaría en una división de $\frac{0}{0}$, se hace $f[x_0, x_0] = f'_0$ (su derivada), al igual que $f[x_1, x_1] = f'_1$. Por lo tanto la siguiente fila es:

z	x_0	x_0	x_1	x_1
$f(z_i)$	$f(x_0)$	$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_1)$
$f[z_{i+1}, z_i]$	$\frac{f(x_0)-f(x_0)}{x_0-x_0} \rightarrow f'(x_0)$	$\frac{f(x_1)-f(x_0)}{x_1-x_0}$	$\frac{f(x_1)-f(x_1)}{x_1-x_1} \rightarrow f'(x_1)$	

Y se continúa la tabla recursivamente, hasta llegar al término de esta, con $f[z_3, z_2, z_1, z_0]$. Posteriormente el polinomio de Hermite obtenido será:

$$p(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f[x_1, x_0, x_0](x - x_0)^2 + f[x_1, x_1, x_0, x_0](x - x_0)^2(x - x_1)$$

1.4. Operadores de diferencia finita con polinomios de Newton

Registra incrementos en una serie numérica. Si se tiene puntos $(x_i, f(x_i))$, en donde la diferencia entre dos x_i sea la misma, e igual a h , como por ejemplo en $x_i = \{1, 3, 5, 7, \dots\}$, con $h = 2$ se tiene los siguientes operadores:

1.4.1. Operador de diferencia finita-adelante

- Diferencia k : $\Delta^k f(x_i) = \Delta^{k-1} f(x_{i+1}) - \Delta^{k-1} f(x_i)$
- Diferencia 1: $\Delta f(x_i) = f(x_{i+1}) - f(x_i)$

Propiedades

- Diferencia 2: $\Delta^2 f(x_i) = f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)$
- Diferencia k , no recursiva: $\Delta^k f(x_i) = \sum_{j=0}^k (-1)^j \cdot \binom{k}{j} \cdot f(x_{i+j-k})$

1.4.2. Operador de diferencia finita-atrás

- Diferencia k : $\nabla^k f(x_i) = \nabla^{k-1} f(x_i) - \nabla^{k-1} f(x_{i-1})$
- Diferencia 1: $\nabla f(x_i) = f(x_i) - f(x_{i-1})$

1.4.3. Polinomio de Newton adelante

Usando un polinomio de Newton se puede encontrar un valor aproximado de una función en un punto en que no la hemos definido.

Sea $\mu = \frac{x - x_0}{h}$

$$p_n(x) = f_0 + \mu \Delta f_0 + \frac{\mu(\mu-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \frac{\mu(\mu-1)(\mu-2)}{3!} \Delta^3 f_0 + \dots + \frac{\prod_{i=0}^{N-1} (\mu-i)}{N!} \Delta^N f_0$$

Ejemplo Aproximemos $e^{1,65}$, usando la tabla presentada a continuación.

i	0	1	2
x_i	1,6	1,7	1,8
$f(x_i) = e^{x_i}$	4,9530	5,4739	6,0496

Se puede notar que la separación entre las coordenadas x es $x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = 0,1 \Rightarrow h = 0,1$.

Por lo tanto $\mu = \frac{x - x_0}{h} = \frac{1,65 - 1,6}{0,1} = 0,5$

Se busca un polinomio de Newton adelante de segundo orden, al ser $n = 3$.

$$p_2(x) = f(x_0) + \mu \cdot \Delta f(x_0) + \frac{\mu(\mu - 1)}{2!} \Delta^2 f(x_0)$$

Reemplazamos...

$$p_2(x) = f(x_0) + \mu \cdot (f(x_1) - f(x_0)) + \frac{\mu(\mu - 1)}{2!} (f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0))$$

$$e^{1,65} \approx 4,9530 + 0,5 \cdot 0,5209 - 0,125 \cdot 0,0548$$

$$e^{1,65} \approx 5,2066$$

En realidad se tiene que $e^{1,65} = 5,2070$. La aproximación que encontramos tiene un error de unas 4 milésimas.

Ojo! Cuando se tienen polinomios de grado demasiado alto (5 para arriba) hay que tener precaución de que este sea demasiado sensible a cambios en los coeficientes altos. Entonces, una idea inteligente sería interpolar los puntos definiendo por partes una curva. Es decir...

$$p(x) = \begin{cases} p_1(x) & \text{para } x_0 \leq x \leq x_1 \\ p_2(x) & \text{para } x_1 < x \leq x_2 \end{cases}$$

1.5. Error de interpolación

Para cualquier interpolación polinomial, siendo:

- n la cantidad de puntos que fueron interpolados,
- $]a, b[$ el intervalo en donde estos puntos x_i se encuentran, siendo a el menor y b el mayor de ellos,
- $f^{(n)}(x)$ la derivada de orden n de la función original en el punto x .

Existe un ζ_x , algún punto cualquiera del intervalo $x \in]a, b[$ en el que el error de interpolación en un punto x es...

$$E(x) = f(x) - p^*(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})}{n!} \cdot f^{(n)}(\zeta_x)$$

Si tenemos a $f^{(n)}(\zeta_x)$ acotado, es decir, $|f^{(n)}(x)| \leq M$ para $x \in [a, b]$, entonces se puede decir que:

$$E(x) \leq \frac{\overbrace{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1})}^{\phi(x)}}{n!} \cdot M$$

1.6. Aproximación usando las funciones como espacio vectorial

Lo bueno de definir las funciones como espacios vectoriales es que nos permite usarlas como base para aproximar otras funciones, algo así como las series de Taylor (aproximación por polinomios) y las de Fourier (aproximación por senos y/o cosenos de distintas frecuencias)

Entonces, sea \mathcal{V} el espacio vectorial de todas las funciones en el intervalo $[a, b]$, se dice que este espacio vectorial es $\mathcal{C}[a, b]$.

1.6.1. Producto interno

El producto interno en el espacio $\mathcal{C}[a, b]$ es una especie de análogo al producto punto, pero entre dos funciones. ¿Por qué? Se entrega dos funciones y devuelve un escalar. El producto interno entre dos funciones $f(x)$ y $g(x)$ se evalúa como sigue:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b w(x) f(x) g(x) dx$$

Donde $w(x)$ es una función “peso” (la cual se asume que $w(x) = 1$ a menos que se diga lo contrario).

1.6.2. Norma de una función

La norma de un vector se puede definir como la raíz cuadrada del producto punto de ese vector por él mismo. Con el producto punto se puede definir lo mismo.

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle} = \sqrt{\int_a^b f^2(x) dx}$$

1.6.3. Distancia entre dos funciones

Se puede construir esta definición a través de la definición de norma y construyendo una función distancia: $d(x) = g(x) - f(x)$

$$\|d\| = \|g - f\| = \sqrt{\langle (g - f), (g - f) \rangle}$$

Esta definición de distancia también se puede aprovechar para aproximar funciones.

1.6.4. Aproximación

Se puede buscar una función polinomial $p(x)$ que aproxime de la mejor manera posible a $f(x)$. Esto se puede hacer buscando...

$$p(x) = \sum_{k=0}^n a_k \cdot x^k \quad \text{tal que} \quad \|f(x) - p(x)\| \text{ sea mínimo.}$$

Por lo tanto, se trata de un problema de minimizar la siguiente expresión:

$$E(x) = \int_b^a \left(f(x) - \sum_{k=0}^n a_k \cdot x^k \right)^2 dx$$

Y se debe encontrar el conjunto $(a_0, a_1, a_2, \dots, a_n)$ que haga que...

$$\frac{\partial E}{\partial a_0} = \frac{\partial E}{\partial a_1} = \frac{\partial E}{\partial a_2} = \dots = \frac{\partial E}{\partial a_n} = 0$$

La forma de proceder es bastante similar a la del método de mínimos cuadrados, obteniendo las siguientes ecuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial a_i} \int_b^a (f(x) - (a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots))^2 dx = 0$$

$$\int_b^a (f(x) - (a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots)) \cdot x^i dx = 0 \quad \text{para } i \in \{0, 1, 2, \dots, n\}$$

Por lo tanto la ecuación final queda como sigue.

$$\int_b^a x^i \cdot (a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots) dx = \int_b^a x^i \cdot f(x) dx \quad \text{para } i \in \{0, 1, 2, \dots, n\}$$

Ejemplo Sea $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ continua, hallar un polinomio de cuarto grado que la aproxime.

Se tiene que $n = 4$ por lo que se tiene un sistema de 5 ecuaciones y 5 incógnitas.

$$\int_1^0 x^0 (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4) dx = b_0$$

$$\int_1^0 x^1 (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4) dx = b_1$$

$$\int_1^0 x^2 (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4) dx = b_2$$

$$\int_1^0 x^3 (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4) dx = b_3$$

$$\int_1^0 x^4 (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + a_4 x^4) dx = b_4$$

Tras resolver se tiene que:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 \\ 1/4 & 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 \\ 1/5 & 1/6 & 1/7 & 1/8 & 1/9 \end{bmatrix}}_{\text{Matriz de Hilbert 5x5}} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

1.6.5. Número de condicionamiento (Condition number)

Es una forma de medir qué tan sensible es la aproximación es a pequeños errores en los puntos entregados.

En la matriz obtenida en el ejemplo, se buscan los eigenvalores (valores propios) de la matriz, es decir, todos los escalares λ que cumplan la siguiente ecuación, en donde I es la matriz identidad de tamaño correspondiente.

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

Luego se procede a obtener el número de condicionamiento κ de la matriz A de la siguiente forma:

$$\kappa(A) = \frac{\lambda_{\text{máx}}}{\lambda_{\text{mín}}}$$

Generalmente un $\kappa < 1000$ está bien. Si supera eso, se dice que la matriz está mal acondicionada y un pequeño error dentro de los puntos de entrada de la aproximación haría que la

aproximación cambie radicalmente. En el caso de la matriz de Hilbert...

$$\lambda = \{3,2879 \cdot 10^{-6}, 3,0590 \cdot 10^{-4}, 1,1407 \cdot 10^{-2}, 2,0853 \cdot 10^{-2}, 1,5671\}$$

$$\kappa(A) = \frac{1,5671}{3,2879 \cdot 10^{-6}} = 476607,25$$

Es una matriz de condicionamiento muy mala, por lo que hay que buscar aproximaciones mejores a $\{1, x, x^2, \dots\}$

1.7. Aproximación por conjuntos ortogonales de polinomios

1.7.1. Polinomios ortogonales y ortonormales

Un conjunto de polinomios **ortogonales** cumplen con que **el producto interno entre cada uno de ellos y el resto es 0**. Es decir...

$$\langle p_i, p_j \rangle = \begin{cases} C & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases}$$

Si $C = 1$ se dice que este conjunto de polinomios es **ortonormal**.

1.7.2. Teorema de la mejor aproximación

Se dice que se puede tener una aproximación de $f(x)$ óptima con $p^*(x)$ en un intervalo dado $[a, b]$, (teniendo el conjunto de polinomios ortogonales $p_i(x)$) si es que se hace que:

$$p^*(x) = \underbrace{\frac{\langle f, p_0 \rangle}{\|p_0\|}}_{c_0} p_0(x) + \underbrace{\frac{\langle f, p_1 \rangle}{\|p_1\|}}_{c_1} p_1(x) + \dots + \underbrace{\frac{\langle f, p_n \rangle}{\|p_n\|}}_{c_n} p_n(x)$$

Donde los c_i se denominan **Coefficientes de Fourier**.

Ojo Dependiendo del polinomio usado, aquí, para sacar el producto interno $w(x)$ no necesariamente es 1.

Nota Las series de Fourier son una aplicación de este teorema, usando como bases senos y cosenos de distintas frecuencias. ($p_i(x) = \sin(\omega \cdot ix), \cos(\omega \cdot ix)$, con $\omega = \frac{2\pi}{T}$)

1.8. Algunos conjuntos de polinomios ortogonales

En el apéndice se encuentran los de:

- Chebyshev (intervalo $] -1, 1[$)

- Legendre (intervalo $[-1, 1]$)
- Laguerre (intervalo $[0, +\infty[$)
- Hermite (intervalo $]-\infty, +\infty[$)

Ejemplo Interpolan la función $f(x) = \operatorname{erf}(x)$ en el intervalo $x \in]-1, 1[$ usando polinomios de grado 3 de Chebyshev.

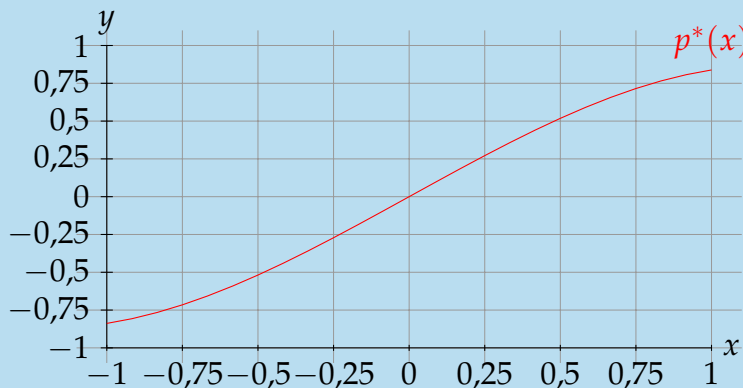
Se tiene como base los polinomios de Chebyshev (ver apéndice). Dados que estos están definidos en el mismo intervalo en el cual se desea interpolar la función $f(x)$ no es necesario efectuar ningún cambio de variable. Por lo tanto:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= \frac{\langle f, C_0 \rangle}{\langle C_0, C_0 \rangle} = \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 w(x) f(x) C_0(x) dx = \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 \frac{\operatorname{erf}(x) dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0 \\
 a_1 &= \frac{\langle f, C_1 \rangle}{\langle C_1, C_1 \rangle} = \frac{2}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 w(x) f(x) C_1(x) dx = \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 \frac{\operatorname{erf}(x) \cdot x dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{2}{\pi} \cdot 1,42054 = 0,904344 \\
 a_2 &= \frac{\langle f, C_2 \rangle}{\langle C_2, C_2 \rangle} = \frac{2}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 w(x) f(x) C_2(x) dx = \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 \frac{\operatorname{erf}(x) \cdot (2x^2 - 1) dx}{\sqrt{1-x^2}} = 0 \\
 a_3 &= \frac{\langle f, C_3 \rangle}{\langle C_3, C_3 \rangle} = \frac{2}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 w(x) f(x) C_3(x) dx = \frac{1}{\pi} \cdot \int_{-1}^1 \frac{\operatorname{erf}(x) \cdot (4x^3 - 3x) dx}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{2}{\pi} \cdot -0,10385 = -0,066113
 \end{aligned}$$

Con ello se tiene, finalmente, que

$$\operatorname{erf}(x)_{x \in]-1, 1[} \approx 0,904344x - 0,066113(4x^3 - 3x)$$

El gráfico del polinomio interpolado es el siguiente:



1.9. Interpolan fuera del intervalo de dominio de la familia de polinomios

Tomemos un ejemplo. Supongamos que se quiere interpolar una función $f(x)$ en un intervalo $x \in]0, 8[$ usando polinomios de Chebyshev. Como la interpolación usando Chebyshev

sólo está definida en el intervalo $] - 1, 1[$, se debe recurrir a pasos previos para extraer el producto interno.

Se define el producto interno entre el intervalo $] - 1, 1[$ (o según corresponda, dependiendo de la familia de polinomios), usando una nueva variable $u =] - 1, 1[$. Tanto la función peso, como el factor polinomio y el diferencial están definidos respecto a u .

$$\frac{\langle f, C_n \rangle}{\langle C_n, C_n \rangle} = \frac{2}{\pi} \cdot \int_{u=-1}^{u=1} w(u) f(x) C_n(u) du$$

Luego, se busca una transformación lineal que nos permita convertir la variable u a x , usando los límites de integración deseados. Es decir, se trata de despejar los coeficientes de la ecuación $u = ax + b$, usando...

$$\text{Para } u \in] - 1, 1[\rightarrow x \in]0, 8[$$

$$\begin{array}{l} -1 = a \cdot 0 + b \\ 1 = a \cdot 8 + b \end{array}$$

Obteniendo como resultado:

$$u = \frac{x}{4} - 1 \quad x = 4x + 4 \quad du = \frac{1}{4} dx$$

Haciendo los reemplazos de u a x , se obtiene:

$$\frac{\langle f, C_n \rangle}{\langle C_n, C_n \rangle} = \frac{2}{\pi} \cdot \int_{x=0}^{x=8} w\left(\frac{x}{4} - 1\right) f(x) C_n\left(\frac{x}{4} - 1\right) \frac{1}{4} dx$$

Y luego se resuelve la integral. En el caso de polinomios de Chebyshev, esto resultaría en:

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\langle f, C_0 \rangle}{\langle C_0, C_0 \rangle} = \frac{1}{4\pi} \cdot \int_{x=0}^{x=8} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{4} - 1\right)^2}} f(x) 1 dx \\ a_1 &= \frac{\langle f, C_1 \rangle}{\langle C_1, C_1 \rangle} = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{x=0}^{x=8} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{4} - 1\right)^2}} f(x) \left(\frac{x}{4} - 1\right) dx \\ a_2 &= \frac{\langle f, C_2 \rangle}{\langle C_2, C_2 \rangle} = \frac{1}{2\pi} \cdot \int_{x=0}^{x=8} \underbrace{\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{4} - 1\right)^2}}}_{w(u)} f(x) \underbrace{\left[2\left(\frac{x}{4} - 1\right)^2 - 1\right]}_{C_2(u)} dx \end{aligned}$$

Ejemplo Interpolan la función $f(x) = \sqrt{x}$ en el intervalo $x \in]0, 1[$ usando polinomios de grado 3 de Chebyshev.

Se define el dominio $u \in]-1, 1[$ y $x \in]0, 1[$. Con ello, se puede sacar una transformación lineal que consiste en:

$$u = 2x - 1 \quad x = \frac{u + 1}{2} \quad du = 2 dx$$

Con estos datos se puede sacar el producto interno:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{\langle f, C_n \rangle}{\langle C_n, C_n \rangle} = \frac{1}{\|C_n\|} \cdot \int_{u=-1}^{u=1} w(u) \cdot C_n(u) \cdot \sqrt{x} du \\ &= \frac{1}{\|C_n\|} \cdot \int_{x=0}^{x=1} w(2x-1) \cdot C_n(2x-1) \cdot \sqrt{x} 2dx \end{aligned}$$

Ahora se sacan las integrales.

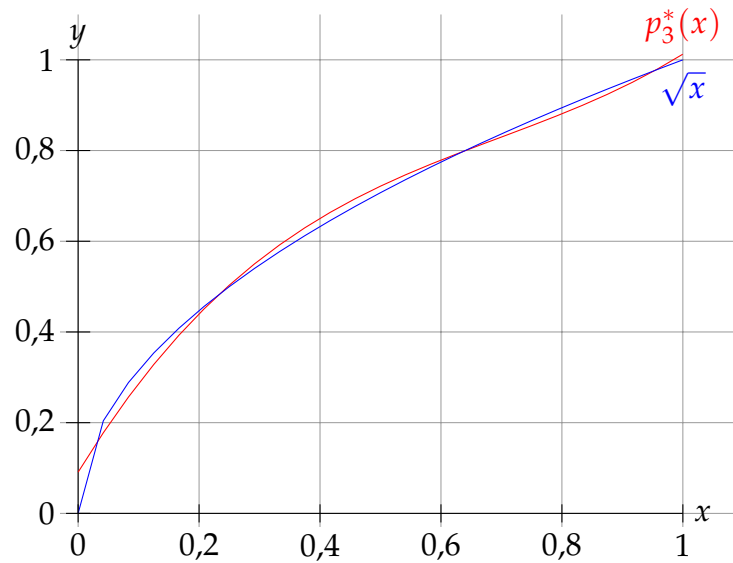
$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{2}{\pi} \int_{x=0}^{x=1} \frac{\sqrt{x} dx}{\sqrt{1 - (2x-1)^2}} \approx 0,63662 \\ a_1 &= \frac{4}{\pi} \int_{x=0}^{x=1} \frac{\sqrt{x} (2x-1) dx}{\sqrt{1 - (2x-1)^2}} \approx 0,424413 \\ a_2 &= \frac{4}{\pi} \int_{x=0}^{x=1} \frac{\sqrt{x} [2(2x-1)^2 - 1] dx}{\sqrt{1 - (2x-1)^2}} \approx -0,084883 \\ a_3 &= \frac{4}{\pi} \int_{x=0}^{x=1} \frac{\sqrt{x} [4(2x-1)^3 - 3(2x-1)] dx}{\sqrt{1 - (2x-1)^2}} \approx 0,036378 \end{aligned}$$

Finalmente, para reconstruir el polinomio interpolado, se usa:

$$p_3^*(x) = a_0 C_0(u) + a_1 C_1(u) + a_2 C_2(u) + a_3 C_3(u)$$

Con lo que las variables u se reemplazan por su equivalente en x , es decir $u = 2x - 1$, obteniendo:

$$\begin{aligned} p_3^*(x) &= 0,63662 + 0,424413 u - 0,084883 (2u^2 - 1) + 0,036378 (4u^3 - 3u) \\ p_3^*(x) &= 1,1641x^3 - 2,4252x^2 + 2,1827x + 0,090946 \end{aligned}$$



1.10. Anexos

1.10.1. Fenómeno de Runge

Como se puede ver, cerca de cero la aproximación es mala, por lo que en este tipo de casos, la mejor opción sería interpolar por tramos y poner las separaciones en los lugares en donde la segunda derivada sea demasiado grande. Aumentar el orden del polinomio buscado, si bien, puede aumentar ligeramente la exactitud, hace a la función demasiado sensible a pequeños cambios de x o de coeficientes.

1.10.2. Nodos o puntos de Chebyshev

Corresponden a los puntos en x en donde el polinomio de Chebyshev de orden n en el intervalo $] -1, 1[$ se hace 0. Estos son, para un n dado:

$$xc_{n,i} = \cos\left(\frac{\pi(2i-1)}{2n}\right)$$

Para un intervalo distinto, se hace una transformación con a y b según corresponda, quedando:

$$xc_{n,i} = b + a \cos\left(\frac{\pi(2i-1)}{2n}\right)$$

Lo notable de estos puntos de Chebyshev es que corresponden a los puntos en los que se puede hacer la interpolación más exacta dado un intervalo.

2. Aproximación de integrales

Se busca aproximar el valor de una integral:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

Para dicho propósito hay varias formas de hacerlo.

2.1. Con interpolación polinomial (Fórmulas cerradas de Newton-Cotes)

Como la integral de un polinomio es muy fácil de sacar, se puede tomar una función en una cantidad de puntos x_i adecuada (llamados **nodos de integración**), interpolarla en una función $p(x)$ y luego sacar la integral exacta de ese polinomio en el intervalo $[a, b]$ que se desee.

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p(x) dx$$

Como $p(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \dots$

$$\int_a^b p(x) dx = \begin{aligned} & c_0 \cdot b + c_1 \cdot \frac{b^2}{2} + c_2 \cdot \frac{b^3}{3} + \dots \\ & - (c_0 \cdot a + c_1 \cdot \frac{a^2}{2} + c_2 \cdot \frac{a^3}{3} + \dots) \end{aligned}$$

Como sabemos que:

$$p(x) = f(x) + E(x)$$

Entonces, en esta forma de integración pasa algo parecido con el error. (Véase la sección de error de interpolación, en 1.5)

$$\int_a^b E(x) dx = \int_a^b \frac{\varphi(x)}{n!} \cdot f^{(n)}(\xi) dx$$

2.1.1. Fórmula del trapecio

Si uno se da cuenta, si se toman sólo los puntos extremos del intervalo $[a, b]$ y el valor de $f(x)$ en a y b , estos puntos se interpolarán en una recta, y nuestra aproximación corresponderá a simplemente sacar el área del trapecio que queda entre esta recta y el eje X.

$$\int_a^b f(x) dx = \underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \cdot \underbrace{\frac{1}{2}(f(b) + f(a))}_{\text{alturas}} - \underbrace{\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)}_{\text{error}}$$

Con ξ = algún x en el intervalo $[a, b]$. Esto sale de la fórmula del error de integración.

2.1.2. Fórmula de Simpson

Si se toma un tercer punto, que corresponde al punto medio entre a y b ($h = \frac{b-a}{2}$), se consigue:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{6} [f(a) + 4f(a+h) + f(b)] - \underbrace{\frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi)}_{\text{error}}$$

Con $\xi = \text{algún } x$ en el intervalo $[a, b]$. Esto sale aproximando con una serie de Taylor de segundo orden a la función alrededor de $x = a + h$.

2.1.3. Con más nodos

También existen fórmulas de Simpson para aproximaciones de más nodos.

Para 4 nodos - Regla de tres octavos de Simpson

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{3h}{8} [f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(b)] - \underbrace{\frac{3h^5}{80} \cdot f^{(4)}(\xi)}_{\text{error}}$$

Para 5 nodos - Regla de dos cuarenta y cinco-avos de Boole

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{2h}{45} \cdot \begin{bmatrix} 7 \\ 32 \\ 12 \\ 32 \\ 7 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f(a) \\ f(a+h) \\ f(a+2h) \\ f(a+3h) \\ f(b) \end{bmatrix} - \underbrace{\frac{8h^7}{945} \cdot f^{(6)}(\xi)}_{\text{error}}$$

Generalización para n nodos Recordemos que estas fórmulas derivan de la interpolación de Lagrange de una función dada. Por lo tanto, con n nodos, y sean...

- $a_i = \int_a^b l_i(x) dx$ (Véase la sección 1.1 para la definición de l_i)
- ξ algún número entre a y b .
- $f(x)$ una función continua y derivable n veces en el intervalo $[a, b]$.

..Con n impar

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^n a_i \cdot f(x_i) - \underbrace{\frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \cdot f^{(n+1)}(\xi) \cdot \int_a^b t \cdot \frac{t!}{(t-n)!} dt}_{\text{error}}$$

...Con n par La fórmula del error cambia a la siguiente:

$$E = \frac{h^{n+1}}{n!} \cdot f^{(n)}(\xi) \cdot \int_a^b \frac{t!}{(t-n)!} dt$$

2.2. Fórmulas abiertas de Newton-Cotes

Son bastante similares a las fórmulas cerradas de Newton-Cotes, pero con la diferencia es que la función no es evaluada en sus extremos (no se usa ni $f(a)$ ni $f(b)$). Son útiles si se quiere aproximar la integral de una función no definida en los extremos, como $\tan(x)$ entre $]-\pi, \pi[$.

$$\text{Haciendo } h = \frac{b-a}{n+1}$$

Para $n = 1$ nodo: Fórmula del rectángulo/punto medio

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a) \cdot f(a+h) - \underbrace{\frac{h^3}{3} f^{(2)}(\xi)}_{\text{error}}$$

Para $n = 2$ nodos: Fórmula del trapecio

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} [f(a+h) + f(a+2h)] - \underbrace{\frac{3h^3}{4} f^{(2)}(\xi)}_{\text{error}}$$

Para $n = 3$ nodos: Regla de Milne

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{3} [2f(a+h) - f(a+2h) + 2f(a+3h)] - \underbrace{\frac{145h^5}{45} f^{(4)}(\xi)}_{\text{error}}$$

Para $n = 4$ nodos:

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{24} \cdot \begin{bmatrix} 11 \\ 1 \\ 1 \\ 11 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f(a+h) \\ f(a+2h) \\ f(a+3h) \\ f(a+4h) \end{bmatrix} - \underbrace{\frac{95h^5}{144} \cdot f^{(4)}(\xi)}_{\text{error}}$$

Nota h^n aumenta cuando $h > 1$, por lo que si el intervalo de integración es grande se arriesga a tener un error demasiado grande. Para ello se usa otro método de integración.

2.3. Integración numérica compuesta

Como el error se hace demasiado grande en el caso de que los intervalos de integración sean grandes (y la interpolación polinomial también), simplemente se divide la función en varios pedacitos pequeños a los cuales se les integra por separado. El criterio de cuántos pedacitos usar es cuánto será el error tolerable.

2.3.1. Regla de Simpson compuesta

Dado que la regla de Simpson ofrece un muy buen equilibrio error de interpolación y complejidad de cálculo, la regla de Simpson compuesta, dividiendo la función a integrar en m pedacitos, usando $h = \frac{b-a}{2m}$ es como sigue:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6m} [f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + 2f(a+4h) + \dots + f(b)]$$

O, en otras palabras...

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6m} \left[f(a) + 2 \sum_{i \text{ pares}}^{2m-1} f(a+ih) + 4 \sum_{i \text{ impares}}^{2m-1} f(a+ih) + f(b) \right]$$

Y su error es:

$$E = \frac{h^4(b-a)}{180} \cdot f^{(4)}(\xi) \quad \text{con } \xi \in [a, b]$$

Y dado que h se reduce al aumentar la cantidad de trozos en los cuales se integra por Simpson, el error también lo hace al aumentar m .

2.3.2. En general, para buscar el m adecuado de acuerdo al error

Generalmente se tiene un error que se quiere minimizar, este es E . Recordemos que el tamaño de cada paso es h , y depende de la técnica de integración que ocupemos y m , la cantidad de pedacitos a dividir el intervalo entre b y a . Por ejemplo, si queremos ocupar la regla de 2/45 (2.1.3) compuesta, sabiendo que esta técnica ocupa:

$$\text{Simple: } h = \frac{b-a}{4} \quad \text{Dos pedacitos: } h = \frac{b-a}{8} \quad m \text{ Pedacitos: } h = \frac{b-a}{4m}$$

Y su error (para la fórmula simple) sería:

$$E_{\text{simple}} = \frac{8h^7}{945} \cdot f^{(6)}(\xi) = \frac{8(b-a)^7}{945 \cdot 4^7} \cdot f^{(6)}(\xi)$$

Este error se multiplica por m para el error de la fórmula compuesta.

$$E_{\text{comp}} = m \cdot E_{\text{simple}} = \frac{m \cdot 8(b-a)^7}{945 \cdot 2^7} \cdot f^{(6)}(\xi)$$

Y se busca m de acuerdo a los requerimientos de error.

2.4. Integración de Cuadraturas Gaussianas

Es un método distinto de integración, que permite encontrar la integral de una función continua en el intervalo $[-1, 1]$. Este método también consiste en una forma de integrar un polinomio aproximado para la función. Entonces, usando n nodos entre -1 y 1 (sin incluirlos), la aproximación de la integral de $f(x)$ entre -1 y 1 es:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i \cdot f(x_i)$$

Por lo tanto, una integral dados límites de integración entre -1 y 1 se puede aproximar usando los métodos de Gauss-Chebyshev y Gauss-Legendre. (Porque los polinomios de Chebyshev están definidos en dicho intervalo)

Los w_i y x_i correspondientes que sirven para la mayoría de los casos (menos de 5 nodos) se pueden encontrar en el apéndice A.4.

Ejemplo Aproximar la siguiente integral usando Gauss-Legendre con tres nodos.

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{x+2}$$

El cálculo exacto de la integral es $\ln(3) = 1,098612$.

Se busca en el apéndice A.4 que para tres nodos tenemos:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \frac{1}{x+2} dx &\approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2) \\ &\approx \frac{5}{9} f(-0,774596) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f(0,774596) \\ &\approx \frac{5}{9} \cdot \frac{1}{1,225404} + \frac{8}{9} \cdot \frac{1}{2} + \frac{5}{9} \cdot \frac{1}{2,774596} \\ &\approx 1,098039 \end{aligned}$$

Su error se puede encontrar usando la fórmula:

$$E = \frac{2^{2n+1} \cdot (n!)^4}{(2n+1) \cdot [(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi)$$

Usando $\xi = \max |x - x_i| = 0,387298$, $n = 3$ (se usó 3 nodos), y $f^{(6)}(\xi) = \frac{720}{(\xi-2)^7}$

$$\max E = 0,00161129$$

2.4.1. Error

No tengo mucha idea de cómo será en los otros grupos de polinomios, pero al menos para Gauss-Legendre, la fórmula del error es (haciendo n la cantidad de nodos):

$$E = \frac{2^{2n+1} \cdot (n!)^4}{(2n+1) \cdot [(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi)$$

Eso nos permite afirmar dos cosas:

- Podemos ocupar ξ como el x que maximice el error, para poder acotarlo.
- Para ciertos polinomios, esta técnica de integración es **exacta** (dado que su derivada de orden $2n$ es cero).

2.4.2. Integrar una función fuera del dominio del polinomio indicado

Para integrar polinomios fuera de lo definido en Chebyshev y Legendre, se debe usar el mismo métodos que se usó en la sección 1.9. Si se tiene:

$$\int_0^6 f(t) dt$$

Y queremos aproximar esa integral usando Gauss-Legendre, entonces tenemos que convertir el espacio $t \in [0, 6]$ a uno $u \in [-1, 1]$ de manera que:

$$\int_{-1}^1 f(u) du$$

Lo podamos integrar de esa manera. Podemos encontrar fácilmente una transformación lineal para convertir de $t \leftrightarrow u$, y esto es en este caso:

$$u = \frac{t}{3} - 1 \quad t = 3(u + 1) \quad du = \frac{1}{3} dt$$

Luego, se encuentra que:

$$\int_{t=0}^{t=6} f(t) dt \stackrel{t \rightarrow u}{=} \int_{u=-1}^{u=1} f(3(u + 1)) 3du = 3 \int_{u=-1}^{u=1} f(3(u + 1)) du$$

Suponiendo que $f(t)$ la tenemos definida solo en algunos puntos, procedemos a buscar cuáles son los nodos x_i de Gauss-Legendre. Para 4 nodos (como sale en A.4), estos son $u = \pm 0,861136$ y $\pm 0,339981$. Los transformamos de vuelta al dominio de la variable t , del siguiente modo.

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} u = 0,861136 \\ u = 0,339981 \\ u = -0,339981 \\ u = -0,861136 \end{bmatrix} \stackrel{u \rightarrow t}{=} \begin{bmatrix} t = 5,58341 \\ t = 4,01994 \\ t = 1,98006 \\ t = 0,41659 \end{bmatrix}$$

Luego, para obtener la integral, multiplicamos cada uno por su peso correspondiente.

$$\int_0^6 f(t) dt \approx 3 \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 0,347855 \\ 0,652145 \\ 0,652145 \\ 0,347855 \end{bmatrix}^T}_{\text{Pesos}} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} f(t = 5,58341) \\ f(t = 4,01994) \\ f(t = 1,98006) \\ f(t = 0,41659) \end{bmatrix}}_{\text{Nodos}}$$

Probemos para $f(t) = t^3$. Esta integral exacta daría como valor 324.

$$\int_0^6 t^3 dt \approx 3 \cdot \begin{bmatrix} 0,347855 \\ 0,652145 \\ 0,652145 \\ 0,347855 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} 174,06 \\ 64,962 \\ 7,7631 \\ 0,072298 \end{bmatrix} = 324$$

3. Ecuaciones diferenciales

Una ecuación diferencial ordinaria es del tipo:

$$\frac{d^n x}{dt^n} = f\left(t, x(t), \frac{dx}{dt}, \frac{d^2 x}{dt^2}, \dots, \frac{d^{n-1} x}{dt^{n-1}}\right) = 0$$

En el cual, la misión es encontrar cuál es la función $x(t)$ que la resuelve. En general la función $x(t)$ a encontrar tiene n grados de libertad. Para reducirlas y hacer que $x(t)$ sea única, se emplean condiciones iniciales.

$$x(?) = ? \quad \frac{dx}{dt}(?) = ? \quad \frac{d^2 x}{dt^2}(?) = ? \quad \dots$$

Al resolverlas numéricamente no se busca exactamente la fórmula de $x(t)$ sino **un conjunto de puntos que pertenezcan a $x(t)$** , suponiendo que la ecuación diferencial rige en un intervalo $a \leq t \leq b$.

3.1. Conceptos básicos

3.1.1. Ecuación lineal homogénea y no-homogénea

Se dice que un sistema *no está forzado* (es homogéneo) si es que solo tiene términos que dependen de $y(t)$ o sus derivadas. Es decir, siendo p un polinomio:

$$p\left(\frac{d^n y}{dt^n} + \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} + \dots + y\right) = 0$$

En cambio, sería no-homogénea si ocurre esto:

$$p\left(\frac{d^n y}{dt^n} + \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} + \dots + y\right) = f(t)$$

Para resolver una no-homogénea consideramos un $y(t) = h(t) + g(t)$, donde $h(t)$ sería la solución de la homogénea y $g(t)$ la de la no-homogénea, quedando

$$p\left(\frac{d^n (h+g)}{dt^n} + \frac{d^{n-1} (h+g)}{dt^{n-1}} + \dots + (h+g)\right) = f(t)$$

Luego quedan dos ecuaciones que resolvemos por separado: La homogénea:

$$p\left(\frac{d^n h}{dt^n} + \frac{d^{n-1} h}{dt^{n-1}} + \dots + h\right) = 0$$

Y la no-homogénea quedaría:

$$p \left(\frac{d^n g}{dt^n} + \frac{d^{n-1} g}{dt^{n-1}} + \dots + g \right) = f(t)$$

La solución de $g(t)$ depende de la forma de $f(t)$. Por ejemplo, si $f(t)$ es polinomial, la función que buscamos $g(t)$ debe tener una forma polinomial, así que reemplazamos y buscamos coeficientes. Luego se suma.

Ojo Las soluciones de la no-homogénea $g(t)$ cumplen por sí solas, pero para tenerlas todas se hace necesario sumarles las soluciones de la homogénea $h(t)$ para tenerlas todas.

Ejemplo Resolver:

$$\frac{dy}{dt} + 5y(t) = 3t^2$$

Separamos en $y(t) = h(t) + g(t)$, teniendo:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dh}{dt} + 5h(t) &= 0 \\ \frac{dg}{dt} + 5g(t) &= 3t^2 \end{aligned} \right\}$$

No-homogénea Reemplazamos $g(t)$ con un polinomio de grado 2: $g(t) = At^2 + Bt + C$, teniendo así:

$$5At^2 + (5B + 2A)t + (5C + B) = 3t^2$$

Resolvemos el sistema:

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 0 \\ 0 & 1 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A \\ B \\ C \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Con lo que quedaría:

$$g(t) = \frac{3}{5} t^2 - \frac{6}{25} t + \frac{6}{125}$$

Lo cual *ya es* una solución, pero falta sumarle las que salen de las homogéneas. Encontramos $h(t)$. Teniendo en cuenta de que $\frac{d}{dt}\{e^{Ct}\} = C \cdot e^{Ct}$, la solución es:

$$h(t) = C \cdot e^{-5t}$$

Y las soluciones de esta EDO serían:

$$y(t) = g(t) + h(t) = C \cdot e^{-5t} + \frac{3}{5} t^2 - \frac{6}{25} t + \frac{6}{125}$$

3.1.2. Reducción de orden usando varias variables

Si se tiene, una ecuación de segundo orden (debemos hacer el coeficiente de la derivada de mayor orden = 1) como:

$$\frac{d^2y}{dt^2} + 2 \frac{dy}{dt} + 3y(t) = f(t)$$

Creamos nuestra variable $x(t)$, de modo que

$$\frac{dy}{dt} = x(t)$$

Con esto:

$$\frac{dx}{dt} + 2x(t) + 3y(t) = f(t)$$

Y podemos elaborar un sistema de ecuaciones con estas dos, de modo que, si:

$$\mathbf{x}(t) = \begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \end{bmatrix} \quad \frac{d\mathbf{x}}{dt} = \begin{bmatrix} \frac{dx(t)}{dt} \\ \frac{dy(t)}{dt} \end{bmatrix}$$

Debemos resolver:

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = - \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \mathbf{x}(t) + \begin{bmatrix} f(t) \\ 0 \end{bmatrix}$$

Y eso lo podemos resolver con cualquier método que sirva para ecuaciones de primer orden.

3.2. Método de Euler

Con el método de Euler se busca un conjunto aproximado de puntos que pertenezcan a $y(t)$.

$$\frac{dy}{dt} = f(y, t) \quad \text{Con } t \in [a, b] \text{ y condición inicial } y(a) = y_0$$

Donde $f(y, t)$ puede ser cualquier función que se nos ocurra que dependa de y y t . Se fija además una cantidad N de iteraciones a resolver. Como se tiene N pasos, se tendrá $N + 1$ puntos equidistantes en el intervalo $[a, b]$, es decir:

$$t_i = \{a, (a + h), (a + 2h), \dots, b\} \quad \text{Con } h = \frac{b - a}{N}$$

Con ello, se define un y_i que aproximará a los $y(x_i)$ correspondientes, cuyos valores se pueden sacar empleando una ecuación recursiva.

$$y_0 = y(a)$$

$$y_i = y_{i-1} + h \cdot f(t_{i-1}, y_{i-1})$$

Con lo que básicamente el incremento por paso es la derivada en cada punto anterior t_{i-1} (dado que $\frac{dy}{dt} = f(y, t)$)

Ejemplo Usar método de Euler para encontrar $y(t)$ entre $t \in [0, 4]$, con $N = 10$, en la ecuación diferencial:

$$\frac{dy}{dt} = t + 4$$

Con valor inicial $y(0) = 5$.

Tenemos 11 puntos: $t_i = \{0, 0,5, 1, \dots, 4\}$ Tenemos, entonces, que $y_0 = 5$ (por valor inicial proporcionado). En cada punto $f(t_{i-1}, y_{i-1}) = t_{i-1} + 4$

Sacamos:

- $y_1 = y_0 + 0,5 \cdot \text{derivada en } t_0 = 5 + 0,5 \cdot 4 = 7$
- $y_2 = y_1 + 0,5 \cdot \text{derivada en } t_1 = 7 + 0,5 \cdot 4,5 = 9,25$
- $y_3 = y_2 + 0,5 \cdot \text{derivada en } t_2 = 9,25 + 0,5 \cdot 5 = 11,75$

Mientras tanto, para comparar, se puede sacar fácilmente la $y(t)$ exacta en este caso, la cual corresponde a $y(t) = \frac{x^2}{2} + 4x + 5 + C$ (Por valor inicial $C = 0$). Entonces:

$$y_0 = 5 \quad y_1 = 7,125 \quad y_2 = 9,5 \quad y_3 = 12,125$$

El método de Euler es muy impreciso, dado que para cada iteración se hace una aproximación de la recta en dicha función y luego se incrementa la función en ese sentido, así que mientras más rápido crezca la primera derivada, más mala será esta aproximación.

3.3. Método de Taylor

En el método anterior sólo se aproximaba la función ocupando una línea recta. Pero usando la aproximación de Taylor (derivando parcialmente respecto a t), tenemos que una aproximación de t_{i-1} alrededor de (t_{i-1}, y_{i-1}) sería:

$$y(t) \approx y(t_{i-1}) + \frac{dy}{dt}(t_{i-1}) \cdot (t - t_{i-1}) + \frac{1}{2!} \frac{d^2y}{dt^2}(t_{i-1}) \cdot (t - t_{i-1})^2 + \dots$$

Contando con eso, y con la ecuación original ($\frac{dy}{dt} = f(t, y)$), derivando ambas (parcialmente) en tiempo, podemos tener que:

$$\frac{d^2y}{dt^2} = \frac{\partial f}{\partial t} \quad \frac{d^3y}{dt^3} = \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} \quad \dots$$

Si se reemplaza eso en la expansión de Taylor (y hacemos $t = t_i$), tenemos que:

$$y(t_i) \approx y(t_{i-1}) + f(t_{i-1}, y_{i-1}) \cdot \underbrace{(t_i - t_{i-1})}_h + \frac{1}{2!} \frac{\partial f}{\partial t}(t_{i-1}, y_{i-1}) \cdot \underbrace{(t_i - t_{i-1})^2}_{h^2} + \dots$$

El error depende de cuánto queramos expandir esa serie de Taylor. Como sabemos que por cada término se va sumando 1 a las potencias de h , entonces el error sería (si dejásemos de expandir la serie hasta cuando lleguemos al h^k)

$$E = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} \cdot \frac{\partial^k f}{\partial t^k}(\xi, y(\xi))$$

Siendo ξ un número entre t_{i-1} y t_i , y $y(\xi)$ un número entre y_{i-1} y y_i .

3.4. Métodos de Runge-Kutta

Sólo ocupen las fórmulas que aparecen en el apéndice A.5.1. Las formas de sacar estos métodos son demasiado complicadas y hasta yo no las pude entender. Sólo sé que la clave radica en la aproximación de Taylor multivariable cerca de (t_i, y_i) de $f(t, y)$.

$$\begin{aligned} f(t, y) \approx & f(t_i, y_i) + \frac{\partial f}{\partial t}(y_i, t_i) \cdot (t - t_i) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}(y_i, t_i) \cdot (t - t_i)^2 \\ & + \frac{\partial f}{\partial y}(y_i, t_i) \cdot (y - y_i) + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial t}(y_i, t_i) \cdot (y - y_i)(t - t_i) + \dots \\ & + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(y_i, t_i) \cdot (y - y_i)^2 \end{aligned}$$

3.5. Métodos multipasos de Adams

Tampoco sé cómo se obtienen. Sólo ocupen las fórmulas del apéndice A.5.2 y A.5.3.

3.6. Ecuaciones diferenciales parciales

El problema de las ecuaciones diferenciales parciales, es que variando un poco el tipo de ecuación, varía mucho la forma en la que se resuelven. Pero empezaremos con una sencilla. En el caso que se tenga una ecuación diferencial parcial como la ecuación del calor unidimensional (en el caso de varias dimensiones, reemplazar por el laplaciano)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F(x)$$

En este tipo de ecuaciones se parte de una función en tiempo cero $u(0, x) = f(x)$ como condición inicial (a diferencia de las ecuaciones diferenciales ordinarias donde se parte con un punto conocido).

3.6.1. Resolución analítica

Muchas veces este tipo de ecuaciones se puede resolver usando el método de **variables separables**, de modo que al derivar parcialmente un factor, el otro pase como constante.¹

$$u(t, x) = U_T(t) \cdot U_X(x)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial u}{\partial t} = U_X(x) \cdot \frac{\partial U_T}{\partial t} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = U_T(t) \cdot \frac{\partial^2 U_X}{\partial x^2}$$

Con eso, reemplazando en la EDP, queda

$$U_X(x) \cdot \frac{\partial U_T}{\partial t} = \alpha^2 \cdot (U_T(t) \cdot \frac{\partial^2 U_X}{\partial x^2})$$

Entonces para resolver el factor $U_T(t)$, se disfraza a todas las variables que no dependan de t como un factor λ , de modo que hacemos:

$$\frac{\partial U_T}{\partial t} = \alpha^2 \underbrace{\left(\frac{\partial^2 U_X / \partial x^2}{U_X(x)} \right)}_{\lambda_x} \cdot U_T(t) \Rightarrow \frac{\partial U_T}{\partial t} = \alpha^2 \lambda_x \cdot U_T(t)$$

Y esa ecuación se puede resolver como una **Ecuación diferencial de una sola variable**, dependiente solo de t . De un modo parecido podemos hacer lo mismo para la variable x .

$$\frac{\partial^2 U_X}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha^2} \underbrace{\left(\frac{\partial U_T / \partial t}{U_T(t)} \right)}_{\lambda_t} \cdot U_X(x) \Rightarrow \frac{\partial^2 U_X}{\partial x^2} = \frac{1}{\alpha^2} \lambda_t \cdot U_X(x)$$

Luego de resolver cada una, multiplicamos los resultados que nos queden, y tenemos nuestra solución $u(t, x)$.²

¹La verdad no estoy seguro si esto permite obtener las soluciones únicas de la EDP, pero al menos permite obtener algunas, y eso por el momento basta.

²Ahora, dependiendo del valor de α esta solución puede ser oscilante o exponencial-decreciente, pero eso ya es tarea de las EDO, pueden resolverlas ocupando métodos tradicionales, Laplace o lo que más les guste.

3.6.2. Método de Crank-Nicolson

Se trata de usar métodos para estimar las derivadas parciales. Discretizando la función-solución $u(t, x)$ en tiempos-espacios (t_i, x_j) , de modo de tener la siguiente notación:

$$u(t_i, x_j) = u_{(i,j)}$$

Las derivadas se aproximan usando diferencias divididas (similar a las diferencias finitas, presentadas en la sección [1.4], pero dividiendo por el *time-step* o *space-step* según corresponda). De ese modo tenemos, usando un *time-step* de Δt , un *space-step* de Δx , y el operador de diferencia finita-adelante que corresponda $\Delta_t u(t, x)$ o $\Delta_x u(t, x)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{\Delta_t u_{(i,j)}}{\Delta t} = \frac{u_{(i+1,j)} - u_{(i,j)}}{\Delta t}$$

Y en el caso de la derivada espacial, se emplea tanto el término espacial hacia adelante como hacia atrás, de modo que tenemos:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\Delta_x^2 u_{(i,j-1)}}{\Delta x^2} = \frac{u_{(i,j+1)} - 2u_{(i,j)} + u_{(i,j-1)}}{\Delta x^2}$$

Además se aproxima esa segunda derivada en el próximo *time-step*. Teniendo:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{\Delta_x^2 u_{(i+1,j-1)}}{\Delta x^2} = \frac{u_{(i+1,j+1)} - 2u_{(i+1,j)} + u_{(i+1,j-1)}}{\Delta x^2}$$

Entonces, lo que se hace para obtener la aproximación usada en Crank-Nicolson es **promediar** ambas aproximaciones.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{1}{2\Delta x^2} \left(\Delta_x^2 u_{(i,j-1)} + \Delta_x^2 u_{(i+1,j-1)} \right)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \approx \frac{1}{2} \left(\frac{u_{(i,j+1)} - 2u_{(i,j)} + u_{(i,j-1)}}{\Delta x^2} + \frac{u_{(i+1,j+1)} - 2u_{(i+1,j)} + u_{(i+1,j-1)}}{\Delta x^2} \right)$$

Y la EDP se transforma en una ecuación discreta. Reemplazamos.

$$\frac{u_{(i+1,j)} - u_{(i,j)}}{\Delta t} = \frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{u_{(i,j+1)} - 2u_{(i,j)} + u_{(i,j-1)}}{\Delta x^2} + \frac{u_{(i+1,j+1)} - 2u_{(i+1,j)} + u_{(i+1,j-1)}}{\Delta x^2} \right)$$

A partir de esto podemos tomar cada estado de la barra en un tiempo t_j como un vector de estados espaciales $\mathbf{w}^{(j)}$, tal como aparece en la figura más adelante.

$$A \cdot \mathbf{w}^{(j+1)} = B \cdot \mathbf{w}^{(j)} + \Delta x \cdot \mathbf{F}_0$$

En donde, hacemos que:

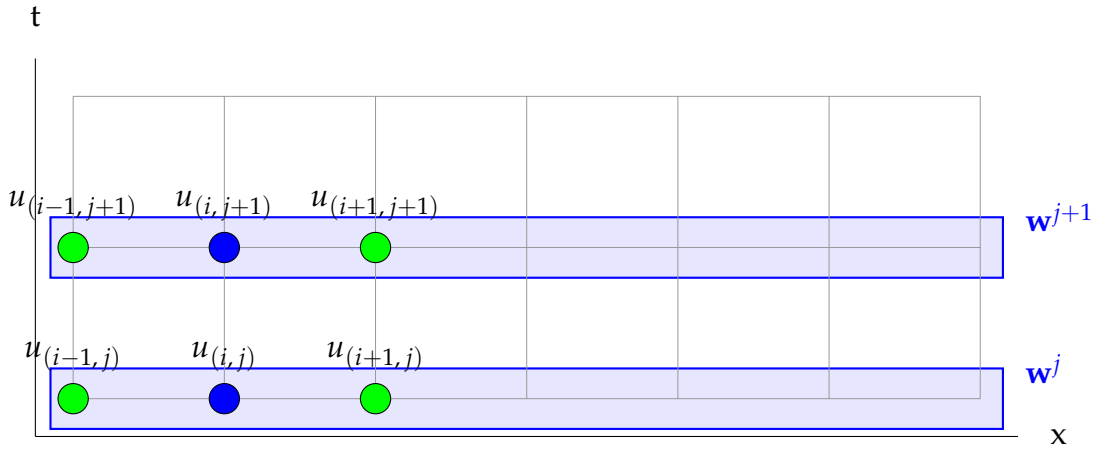
$$\lambda = \alpha^2 \cdot \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

Y las matrices A y B son lo que se denomina **Matriz de Toeplitz**, es decir, todos los términos en las diagonales son iguales.

$$A = \begin{bmatrix} 1+\lambda & -\lambda/2 & 0 & 0 & 0 \\ -\lambda/2 & 1+\lambda & -\lambda/2 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda/2 & 1+\lambda & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & -\lambda/2 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda/2 & 1+\lambda \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1-\lambda & \lambda/2 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda/2 & 1-\lambda & \lambda/2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda/2 & 1-\lambda & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \lambda/2 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda/2 & 1-\lambda \end{bmatrix}$$

Y el vector \mathbf{F}_0 es una condición de forzamiento (Normalmente se hace 0).

Esta figura explica las variables a tomar de una manera más gráfica.



4. Introducción a la teoría de error

Un cálculo puede cometer grandes errores dependiendo de cómo se implementen las operaciones en una máquina y cuántas cifras significativas tienen (qué tan pequeño puede ser el número para que se redondee a cero). Por ejemplo, en el cálculo de...

$$\frac{1 - \cos(x)}{x^2} \quad \text{con } x = 0,000001$$

Dependiendo de que si la calculadora interpreta $1 - \cos(x)$ como 0 o un número muy pequeño el resultado va a variar. En el primer caso el resultado daría cero, pero en realidad, sacando un límite podemos conocer aproximadamente el resultado real, usando:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos(x)}{x^2} = 0,5$$

Por lo que debería dar un resultado cercano a 0,5.

4.1. Representación de punto flotante

Esta representación es la que se usa en su mayoría en los computadores para guardar los números decimales. Esta usa una *mantisa* a y un *exponente* b , de modo que:

$$N = a \cdot 10^b \quad \text{con } \frac{1}{10} \leq |a| < 1 \quad \{a, b\} \in \mathbb{Z}$$

En el caso de una máquina, que usa un sistema binario (base 2), esto se cambia a esto.

$$N = a \cdot 2^b \quad \text{con } \frac{1}{2} \leq |a| < 1 \quad \{a, b\} \in \mathbb{Z}$$

En el caso del tipo de dato *double* del lenguaje C, se usa 64 bits para representar estos números de punto flotante. El primer bit se usa para almacenar el signo del número, los 11 siguientes para representar el exponente (al cual le restamos 1024 para poder representar exponentes negativos), y los 52 bits restantes para representar la mantisa. Por lo tanto tenemos que:

$$|a| \leq 2^{52} - 1 \quad -1024 \leq b \leq 1023$$

Además, en el caso de la máquina tenemos una cantidad limitada de bits para representar a y b , con lo que, aparte, tenemos un número máximo a representar, un número mínimo a representar y variados problemas de redondeo. Para pensarlo mejor, la mantisa se asocia a las *cifras significativas* de un número. Teniendo una mantisa de $a = 4$, con base 10, tenemos cuatro cifras significativas, con las cuales podemos representar números como 0,001234, 4321, o 31,24. Ahí es el exponente el que varía.

4.1.1. Operaciones en punto flotante

Al sumar dos números con distinto exponente, tenemos el problema de que en muchos casos necesitamos una mantisa más grande para representar el resultado. Como por ejemplo, sumando dos números con mantisa 4...

$$32,01 + 0,5462 = 32,5562$$

Por lo que necesitamos 6 cifras significativas para representarlo bien. Como solo tenemos mantisa 4, hay que buscar algún mecanismo para poder representar ese número de 6 cifras significativas con solo 4. Se puede lograr mediante dos métodos: truncamiento y redondeo. En estos ejercicios se asumirá que al no tener las cifras significativas suficientes, esto se redondea hacia arriba en el caso de ser mayor o igual a un ,5, o hacia abajo en el caso de un ,4. En esta operación el resultado se truncaría a 33,56 para cumplir con mantisa 4.

Ojo ¡Las propiedades esenciales en los reales (como distributividad y asociatividad) no siempre se cumplen usando punto flotante! Esto es por culpa del error de redondeo al terminar cada operación.

Por ejemplo, la asociatividad. (Anotaremos una operación con punto flotante como $\overset{*}{+}$ o $\overset{*}{-}$). En este ejemplo usaremos truncamiento a mantisa $t = 8$.

$$(a \overset{*}{+} b) \overset{*}{+} c \neq a \overset{*}{+} (b \overset{*}{+} c)$$

Usando $a = 0,23371258 \cdot 10^{-4}$, $b = 0,33678429 \cdot 10^2$, $c = -0,33677811 \cdot 10^2$

$$\begin{aligned} a \overset{*}{+} (b \overset{*}{+} c) &= 0,23371258 \cdot 10^{-4} \overset{*}{+} 0,00000618 \cdot 10^2 \\ &= 0,23371258 \cdot 10^{-4} \overset{*}{+} 0,61800000 \cdot 10^{-3} \\ &= 0,64137126 \cdot 10^{-3} \end{aligned}$$

Mientras...

$$\begin{aligned} (a \overset{*}{+} b) \overset{*}{+} c &= 0,33678452 \cdot 10^2 \overset{*}{+} -0,33677811 \cdot 10^2 \\ &= 0,00000641 \cdot 10^2 \\ &= 0,64100000 \cdot 10^{-3} \end{aligned}$$

Por lo que se puede ver, hay que tener mucho cuidado cuando se opera con números de distinto signo. En las **restas** en punto flotante, cuando se opera con números de exponente muy distinto, se corre el riesgo de perder muchas cifras significativas por redondeo.

4.2. Números de condicionamiento

Esto sirve para ver cuánto arruinaría a la solución del problema pequeños errores de redondeo (propagación del error). Literalmente indica si pequeños cambios en una variable de entrada implican un gran cambio en una variable de salida.

Parte de definir una función $\phi(x)$ que es nuestra aproximación al problema. Asumimos que es exactamente igual en el punto dado x , y en el punto redondeado \tilde{x} es una aproximación de la solución. Tenemos entonces nuestro error normalizado:

$$E_n = \frac{\phi(\tilde{x}) - \phi(x)}{\phi(x)}$$

Y el número de condicionamiento se puede obtener de aproximar la función $\phi(x)$ usando Taylor. Con lo cual se obtiene que el número de condicionamiento para una variable es:

$$E_n \approx \kappa = \left| \frac{x}{\phi(x)} \cdot \frac{d\phi}{dx} \right|$$

Y para varias variables este número de condicionamiento se define como una matriz:

$$A = \begin{bmatrix} \kappa_{11} & \kappa_{12} & \cdots \\ \kappa_{21} & \kappa_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

$$\text{Con } \kappa_{ij} = \left| \frac{x_i}{\phi_j(x)} \cdot \frac{\partial \phi_j}{\partial x_i} \right|$$

Cada uno de los κ debe ser pequeño para que el problema esté bien acondicionado. De lo contrario está mal acondicionado, y se pierde precisión cada vez que se evalúa. **Se dice que por cada orden de magnitud (10^n) se pierde una cifra significativa de precisión.**

Ejemplo Encontrar el factor de condicionamiento de la función $V(r, R)$ y determinar cuál de ambas variables requiere más precisión (cifras significativas) en la fórmula.

$$V(r, R) = \frac{P}{L} \cdot (R^2 - r^2)$$

Tenemos los factores:

$$\kappa_r = \left| \frac{r}{V(r, R)} \cdot \frac{\partial V}{\partial r} \right| \quad \kappa_R = \left| \frac{R}{V(r, R)} \cdot \frac{\partial V}{\partial R} \right|$$

Luego de evaluar...

$$\kappa_r = \left| \frac{-2r^2}{R^2 - r^2} \right| \quad \kappa_R = \left| \frac{2R^2}{R^2 - r^2} \right|$$

Pero esas fracciones son poco sugerentes. Tratemos de manejar un poco mejor estas fracciones para que muestren mejor cómo están acotados los F.C.

$$\kappa_r = \underbrace{\left| 2 - \frac{2R^2}{R^2 - r^2} \right|}_{\geq 0} \quad \kappa_R = \underbrace{\left| 2 + \frac{2r^2}{R^2 - r^2} \right|}_{\geq 2}$$

Por eso, se necesita mayor precisión para nuestra variable R , dado que el factor de condicionamiento tiene una cota inferior mayor. Nótese que a medida de que R se haga más cercano a r , la evaluación de la función tiende a ser cada vez menos precisa.

5. Ecuaciones no-lineales

Este capítulo trata de encontrar soluciones analíticas a ecuaciones (en concreto: función = 0, si se tiene función = algo, debemos buscar (función - algo) = 0). **Ojo! Muchas de estas solo encuentran una solución a la ecuación. Puede haber más, y dependiendo del método usado, pueden encontrar una u otra soluciones!**

5.1. Método de la bisección

Es un algoritmo que busca una solución aproximada dentro de un intervalo inicial, en el cual la imagen de la función al principio y al final sean de distinto signo (para que aprovechemos el Teorema del Valor Medio). A medida que vamos progresando vamos dividiendo este intervalo por la mitad.

El algoritmo Definimos un intervalo de trabajo $[a, b]$, c es el paso siguiente, y ϵ el tamaño mínimo del intervalo con el que queremos trabajar. Como se pueden dar cuenta se puede implementar recursivamente. Se los dejo a ustedes :)

1. Elegimos un intervalo inicial $[a, b]$, con $f(a) \cdot f(b) < 0$ (de distinto signo), y $\epsilon > 0$
2. Hacemos $c = \frac{a+b}{2}$.
 - Terminar si el intervalo es demasiado pequeño $|a - c| < \epsilon$
3. Elegir uno de los dos intervalos tal que:
 - Si $f(a) \cdot f(c) < 0$ (distinto signo), hacer $b = c$.
 - En caso contrario, hacer $a = c$
4. Con este nuevo a y b repetir el algoritmo hasta llegar a la condición de término.

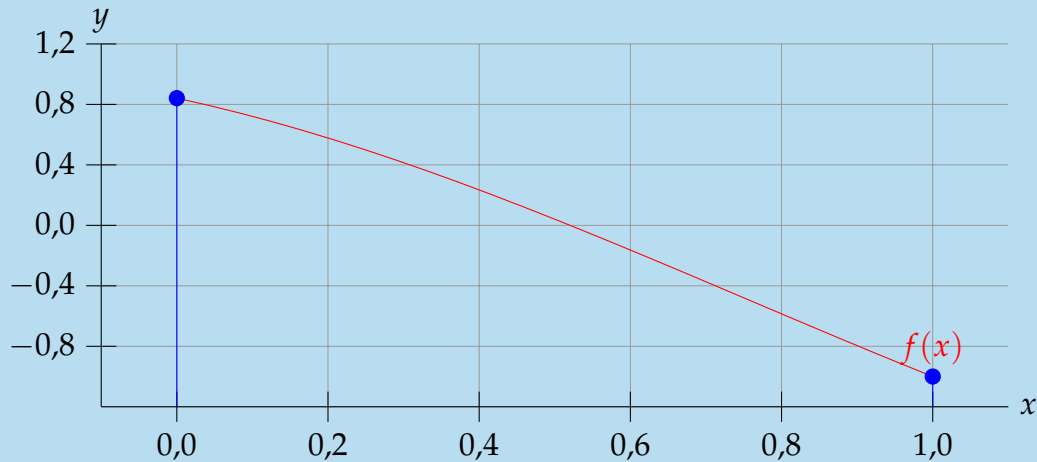
Convergencia El algoritmo converge en N pasos, de modo que el intervalo en el paso N sea de tamaño menor a ϵ .

$$\frac{b-a}{2^N} < \epsilon$$

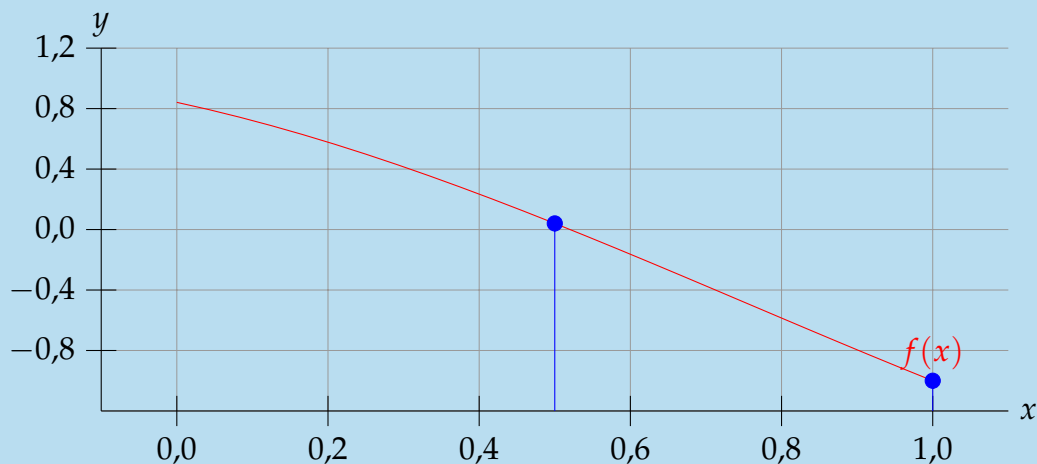
Ejemplo Encontrar un x que cumple que:

$$\sin(1 - x) - x \cos(1 - x) = 0$$

Si se elige un intervalo $[a, b] = [0, 1]$, este cumple con el requisito de $f(0) = 0,841470$ y $f(1) = -1$.



La mitad de ese intervalo es 0,5, entonces buscamos el signo de 0,5. Como $f(0,5) = 0,040634$ es positivo, se repite el algoritmo con el intervalo $[0,5, 1]$, dado que $f(0,5)$ y $f(1)$ tienen distinto signo (y se supone que la función cruza por cero).



El punto medio de este intervalo es 0,75. $f(0,75) = -0,479280$, negativo. Como $f(0,5)$ y $f(0,75)$ son de distinto signo, se repite el algoritmo con este intervalo. Así hasta que se tenga un intervalo bastante pequeño.

5.2. Método de la falsa posición

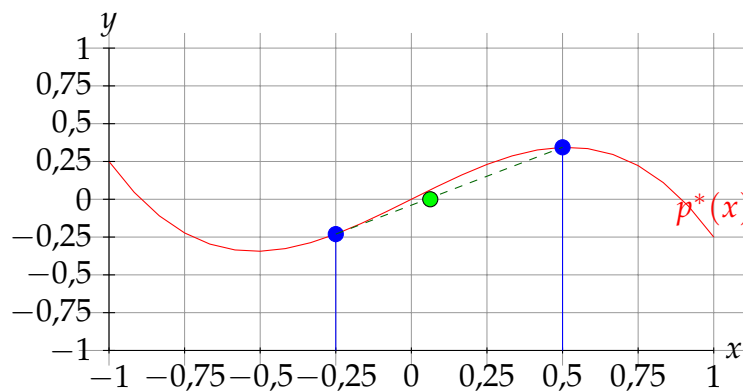
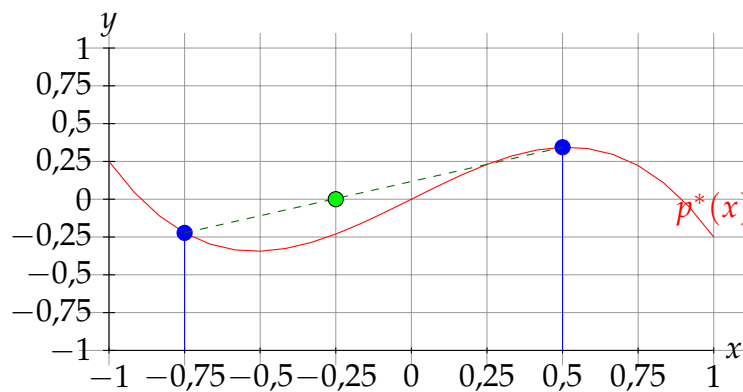
En este se trata de encontrar la solución aproximando con una recta un trozo de la función. Entonces, en una función buscamos un punto c que resulta de la intersección de una recta que pasa por un punto $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$, con el eje x ($y = 0$).

Nuestra recta L se genera usando la ecuación de la recta:

$$L: y - f(a) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a} (x - a)$$

Luego para encontrar su intersección con el eje X hacemos $y = 0$, obteniendo:

$$x = \frac{a f(b) - b f(a)}{f(b) - f(a)}$$



El algoritmo Es similar al de bisección, la diferencia es cómo se subdivide el intervalo. (Paso 2)

Definimos un intervalo de trabajo $[a, b]$, c es el paso siguiente, y ϵ el tamaño mínimo del intervalo con el que queremos trabajar. Como se pueden dar cuenta se puede implementar recursivamente. Se los dejo a ustedes :)

1. Elegimos un intervalo inicial $[a, b]$, con $f(a) \cdot f(b) < 0$ (de distinto signo), y $\epsilon > 0$
2. Hacemos $c = \frac{a f(b) - b f(a)}{f(b) - f(a)}$.
 - Terminar si el intervalo es demasiado pequeño $|c_{\text{actual}} - c_{\text{anterior}}| < \epsilon$
3. Elegir uno de los dos intervalos tal que:
 - Si $f(a) \cdot f(c) < 0$ (distinto signo), hacer $b = c$.
 - En caso contrario, hacer $a = c$
4. Con este nuevo a y b repetir el algoritmo hasta llegar a la condición de término.

5.3. Algoritmo de Newton / del punto fijo

Este algoritmo, en teoría, converge más rápido que los anteriores. Es un método de **convergencia cuadrática**. [Debo mostrar qué significa eso]

5.3.1. Caso de una variable

Este algoritmo emplea la derivada de la función usando series de Taylor. Es distinto a los demás debido a:

- Solo se empieza de un punto inicial, no de un intervalo inicial.
- Por ello, en ecuaciones de más de una solución, es difícil saber con qué puntos iniciales se puede encontrar todas las soluciones.

Como en muchos casos partimos con una aproximación de series de Taylor (o linealización) cerca del punto en el cual empezamos. $f(x_0)$.

$$f(x)_{x \rightarrow x_0} \approx f(x_0) + (x - x_0) \cdot \frac{df}{dx}(x_0)$$

El algoritmo Definimos nuestra función $f(x)$, un punto inicial x_0 , x_1 es el paso siguiente, y ϵ es la tolerancia de nuestras soluciones (que compararemos a $|x_1 - x_0|$, cuánto varía la solución). Como todos los algoritmos hasta la fecha, se puede implementar de forma recursiva en su lenguaje de programación favorito.

1. Elegimos un punto inicial x_0 , y $\epsilon > 0$
2. Hacemos $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{df/dx(x_0)}$.
 - Terminar si $|x_1 - x_0| < \epsilon$, la función varía menos que la tolerancia que definimos.
3. Repetir el algoritmo usando como nuevo x_0 nuestro antiguo x_1 .

5.3.2. Para varias variables: sistema de ecuaciones

Para varias variables recordemos que, al menos en un sistema lineal, necesitamos la misma cantidad de ecuaciones que de incógnitas. Este sistema no es distinto en ese sentido. Tenemos entonces:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_N(\mathbf{x}))$$

Por comodidad anotaré esta función como función vectorial (entrada = un vector, salida = otro vector), porque sale más bonito y podemos ocupar matrices.^{3 4}

Nótese que en el paso 2 del algoritmo de una variable restamos al punto fijo x_0 lo que resulta de $\phi(x_0) \cdot f(x_0)$, donde:

$$\phi(x) = \frac{1}{df/dt(x)}$$

En varias variables el mecanismo es el mismo:

$$\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0 - J_{\mathbf{f}}^{-1}(\mathbf{x}_0) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_0)$$

Donde $J_{\mathbf{f}}(x)$ es la **matriz jacobiana** de la función $\mathbf{f}(\mathbf{x})$. En el apéndice (A.1.1) sale cómo sacarla.

El resto del algoritmo es idéntico: Se elige un punto inicial \mathbf{x}_0 , pero esta vez de varias variables, y se va actualizando de acuerdo a la matriz jacobiana que salga (asumiendo que esta matriz jacobiana es invertible, o sea su determinante sea distinto de cero).

5.4. Método de Bailey

Es un método muy similar al de Newton, pero con una función de incremento un poquito más compleja. Es de convergencia cúbica a diferencia del de Newton que es cuadrática.

Para la función de incremento se toma:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \cdot \left(1 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \cdot \frac{f''(x_0)}{2f'(x_0)} \right)^{-1}$$

³Un vector se define como una matriz con una sola columna y elementos hacia abajo.

⁴Los vectores aquí los designo con letras negritas, como \mathbf{f} y \mathbf{x} , y las matrices con letras mayúsculas.

6. Sistemas de ecuaciones lineales

Un sistema de ecuaciones lineales es uno en donde tenemos el mismo número de ecuaciones que de incógnitas, para que todas estas tengan un valor único tras resolverla (aunque hay casos en que las soluciones son infinitas). Se representan como una multiplicación entre una matriz de coeficientes A por un vector-incógnita \mathbf{x} , el cual da como resultado un vector-resultado \mathbf{b} .

$$A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Ojo! La multiplicación entre matrices NO ES CONMUTATIVA.

6.1. La problemática

Una manera obvia para resolverla es multiplicar a la izquierda por la matriz inversa de A (A^{-1} , que sería distinta de cero si es invertible). Eso, dado que $A \cdot A^{-1} = \text{Matriz identidad}$, efectivamente despejaría nuestro vector de incógnitas, teniendo:

$$\mathbf{x} = A^{-1} \cdot \mathbf{b}$$

Con pocas ecuaciones e incógnitas, la cuestión de invertir la matriz no es tan difícil. Pero si ya tenemos 10 ecuaciones e incógnitas, para invertir la matriz A a mano, que sería de 10×10 , sería algo infinito, ya que para eso habría que calcular determinantes de 9×9 , y para eso calcular más determinantes de 8×8 , y más de 7×7 , y así sucesivamente para calcular miles de determinantes de 2×2 . Hasta un computador se tomaría su tiempo para invertirte una matriz de 20×20 . (Aunque al parecer en Matlab la inversión de matrices no está implementada usando la definición)

6.2. Factorización LU

Es una forma de descomponer una matriz cuadrada en una multiplicación de dos triangulares, para que no tengamos que calcular directamente la inversa de una matriz en el caso de que queramos resolver un sistema de ecuaciones matricial. (Y cuando tenemos un sistema de 20 ecuaciones, la inversión de la matriz A puede tardarse muchísimo al tener que calcular recursivamente determinantes de matrices en cada paso más pequeñas)

Si tenemos:

$$A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Entonces podemos representar a A como una multiplicación de dos matrices $L \cdot U$ (lower y upper, respectivamente). La particularidad de estas dos matrices es su triangularidad.

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}$$

6.2.1. Un sistema de ecuaciones usando la factorización LU

Con lo cual tendríamos una ecuación matricial, a la cual le asignamos una nueva variable auxiliar \mathbf{v} .

$$\underbrace{L \cdot U}_A \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \Rightarrow \quad L \cdot \underbrace{U \cdot \mathbf{x}}_{\mathbf{v}} = \mathbf{b}$$

Con eso tenemos un sistema de dos ecuaciones matriciales:

$$\left| \begin{array}{l} U \cdot \mathbf{x} = \mathbf{v} \\ L \cdot \mathbf{v} = \mathbf{b} \end{array} \right|$$

La gracia es que como U y L son triangulares, si las ecuaciones se resuelven en orden de forma algebraica, las soluciones pueden obtenerse muy rápido.

Ojo! Existen infinitas factorizaciones LU para cada matriz A , por eso, muchas veces podemos restringir el problema (fijando una o más variables en el valor que queramos)

Ojo! (de nuevo) Si el elemento de la esquina a_{11} es cero, la descomposición no se puede hacer. (Pero se puede usar matrices de permutación para hacerlo, como se ve en (6.2.3))

6.2.2. Una técnica rápida de descomposición

Una forma de descomponer una matriz A en una matriz LU es usando operaciones filas.

Intentamos hacer que la matriz A sea una matriz triangular-superior (o sea encontrar la matriz U) usando operaciones filas, mientras que la diagonal de la matriz L hacemos que consista sólo en unos. (Restringimos el problema, porque para cada matriz A existen infinitas factorizaciones LU , buscamos la más conveniente.)

Básicamente, para dejar un elemento como cero en la matriz U , hay que hacer una operación fila. En cada operación se toma una operación fila, se multiplica por un factor $-l_{mn}$ (donde m es el número de fila de destino, y n el de origen) y se suma ese resultado a otra fila. Estos factores, ordenados (y tras cambiar de signo) forman los coeficientes l_{mn} que buscamos.

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

Nótese que la primera fila es idéntica a la primera fila de la matriz A original.
Por ejemplo, en una matriz de 3×3 ...

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} \begin{matrix} \rangle \cdot (-l_{21}) \\ \rangle \cdot (-l_{32}) \end{matrix} \rangle \cdot (-l_{31})$$

Y con los coeficientes l que usamos en las operaciones filas para generar los ceros necesarios, rellenamos en la matriz L .

Ejemplo Descomponer la matriz A en factores LU .

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 6 \\ 2 & -3 \end{bmatrix}$$

Primero, para poder obtener una matriz triangular-superior U , debemos hacer una operación fila $-l_{21}$. Con eso, nos damos cuenta de que para obtener el cero en la primera columna, hay que multiplicar la primera fila por -2 y sumársela.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 6 \\ 2 & -3 \end{bmatrix} \rangle + \underbrace{(-2)}_{-l_{21}} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 6 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 6 \\ 2-2 & -3-12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 6 \\ 0 & -15 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \text{ porque } -l_{21} = -2$$

Comprobación

$$A = LU \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 6 \\ 0 & -15 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 6 \\ 2 & -3 \end{bmatrix}$$

6.2.3. Matrices de permutación P-Q para reducir errores de redondeo (pivotes parciales y totales)

Dado que para resolver un sistema de ecuaciones LU necesitamos hacerlo en un cierto orden (a propósito, porque las matrices L y U son triangulares), un error de redondeo al principio se arrastra por el resto del problema y eso puede traer nefastas consecuencias. Hay una forma de minimizar esto y esto se hace ocupando matrices de permutación P y Q (la primera es para intercambiar el **orden de las filas**, y la segunda para intercambiar el **orden de las columnas**).

Su estructura es:

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

En este caso, la matriz P (la que intercambia de posición las filas) dice:

$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$ es la primera fila:

El 1 en la segunda posición indica que al multiplicar, la segunda fila la trasladamos hacia la primera.

$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$ es la segunda fila:

El 1 en la primera posición indica que al multiplicar, la primera fila la trasladamos hacia la segunda.

$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ es la tercera fila:

Dado que el 1 está dentro de la diagonal de la matriz, la tercera fila permanece inamovible.

La lógica es similar para la matriz Q , con la diferencia de que en lugar de las filas movemos las columnas.

Entonces, luego de acomodar las filas y columnas de la matriz A que correspondan, tendremos la siguiente descomposición LU:

$$PAQ = L \cdot U$$

Cuando se usa sólo la matriz P , se dice que se hace una **factorización LU por pivote parcial**. Si se usa tanto P como Q se usa un **pivote total**. Invertir las matrices de permutación es bastante fácil, por lo que el sistema $Ax = b$ se resuelve de una manera parecida al que se usó con la factorización LU normal.

Consejo En el caso de que aparezca una variable algebraica α como coeficiente dentro de nuestra matriz A , debemos usar la permutación PQ para poner ese coeficiente α en la esquina inferior derecha de la matriz, para que aparezca sólo una vez en la matriz U , cuando se haga la factorización LU .

6.3. Métodos iterativos

Estos métodos iterativos son de cierto modo similares a los algoritmos de ecuaciones no-lineales que se vieron anteriormente (concretamente el de Newton). Se toma un punto inicial cercano a la solución buscada y luego se va ejecutando muchas veces hasta tener una cercanía lo suficientemente aceptable con la verdadera solución.

6.3.1. Método de Jacobi

Con método de Jacobi se parte desde la base de que tenemos una ecuación:

$$Ax = b$$

Y una adivinación inicial $\mathbf{x}^{(0)}$, desde la cual partiremos nuestro algoritmo.

Entonces cada iteración la hacemos de la siguiente manera: Para la i -ésima ecuación tenemos:

$$a_{nn} \cdot x^{(n)} = a_{n1} \cdot x_1^{(n-1)} + a_{n2} \cdot x_2^{(n-1)} + \dots + b_n$$

Descomposición D-L-U La matriz cuadrada A la podemos descomponer como una resta de una diagonal (D) con una matriz triangular superior (U) y una triangular inferior (L), con lo que tenemos:

$$A = \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix}}_D - \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ -a_{21} & 0 & 0 & 0 \\ -a_{31} & -a_{32} & 0 & 0 \\ -a_{41} & -a_{42} & -a_{43} & 0 \end{bmatrix}}_L - \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & -a_{12} & -a_{13} & -a_{14} \\ 0 & 0 & -a_{23} & -a_{24} \\ 0 & 0 & 0 & -a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_U$$

Con esto podemos transformar el método de Jacobi a la siguiente expresión:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow D\mathbf{x} = (L + U)\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

Y...

$$\mathbf{x} = \underbrace{D^{-1}(L + U)}_{T_J} \mathbf{x} + \underbrace{D^{-1}\mathbf{b}}_{\mathbf{c}_J}$$

Nótese que aquí denominamos a la matriz $D^{-1}(L + U)$ como T_J y a $D^{-1}\mathbf{b}$ como \mathbf{c}_J (coeficientes del método de Jacobi), con lo que tenemos finalmente el método de Jacobi:

$$\mathbf{x}^{(n)} = T_J \cdot \mathbf{x}^{(n-1)} + \mathbf{c}_J$$

Curiosidad La inversa de la matriz D indica qué operaciones fila hay que hacer para que la diagonal de la matriz que corresponda a esa fila deba ser 1. Por eso, ningún elemento de la diagonal debe ser cero. En ese caso la matriz D sería no-invertible, y no se podría ocupar el método de Jacobi.

Criterio de término El algoritmo termina generalmente cuando la **norma** de la diferencia se hace más pequeña que una tolerancia ϵ dada, es decir:

$$\text{Parar si } \|\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}^{(n-1)}\| < \epsilon$$

También se habla de la norma I_∞ , en donde ese criterio hay que simplemente normalizarlo.

$$I_\infty \rightarrow \frac{\|\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}^{(n-1)}\|}{\|\mathbf{x}^{(n)}\|} < \epsilon$$

6.3.2. Método de Gauss-Siedel

Este método es muy parecido al de Jacobi ya que ocupa la misma notación de $A = D - L - U$. La diferencia es que no se opera con la $L + U$ juntas, sino que se separan. Se parte de:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \Rightarrow (D - L)\mathbf{x} = U\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

Entonces, invirtiendo $D - L$...

$$\mathbf{x} = \underbrace{(D - L)^{-1} \cdot U}_{T_G} \mathbf{x} + \underbrace{(D - L)^{-1} \mathbf{b}}_{\mathbf{c}_G}$$

Y se tiene entonces que:

$$\mathbf{x}^{(n)} = T_G \cdot \mathbf{x}^{(n-1)} + \mathbf{c}_G$$

Usando:

$$T_G = (D - L)^{-1} \cdot U \quad \text{y} \quad \mathbf{c}_G = (D - L)^{-1} \cdot \mathbf{b}$$

Se nota que calcular la inversa de $D - L$ es más complejo que calcular la inversa de D solamente, pero se puede llegar a una solución aceptable en pocos pasos.

6.3.3. Método S.O.R. (Successive OverRelaxation)

Este método es similar al de Jacobi y al de Gauss-Siedel. La diferencia es que se inserta un ω , denominado **factor de relajación**. Como tenemos:

$$(D - L - U)\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Entonces, usamos el factor de relajación para multiplicar todo.

$$(\omega D - \omega L - \omega U)\mathbf{x} = \omega \mathbf{b}$$

$$((D - D) + \omega D - \omega L - \omega U)\mathbf{x} = \omega \mathbf{b}$$

$$(D + (\omega - 1)D - \omega L - \omega U)\mathbf{x} = \omega \mathbf{b}$$

Y luego agrupamos:

$$(D - \omega L)\mathbf{x} = ((1 - \omega)D + \omega U)\mathbf{x} + \omega \mathbf{b}$$

Y tras invertir $D - \omega L$ se obtiene:

$$\mathbf{x} = \underbrace{(D - \omega L)^{-1} \cdot ((1 - \omega)D + \omega U)}_{T_{SOR}} \mathbf{x} + \underbrace{\omega (D - \omega L)^{-1} \cdot \mathbf{b}}_{\mathbf{c}_{SOR}}$$

$$\mathbf{x}^{(n)} = T_{SOR} \cdot \mathbf{x}^{(n-1)} + \mathbf{c}_{SOR}$$

A. Apéndice

A.1. Ayuda matemática

A.1.1. Matriz jacobiana

Es una forma de derivar una función de preimagen vector e imagen vector. Si $\mathbf{f}(\mathbf{x})$, y

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_M \end{bmatrix}^T$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}) & f_2(\mathbf{x}) & \cdots & f_N(\mathbf{x}) \end{bmatrix}^T$$

Entonces:

$$J_{\mathbf{f}}(\mathbf{x}) = \begin{matrix} \mathbf{f} \text{ cte. } \rightarrow \\ \left[\begin{array}{cccc} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_M} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_M} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_N}{\partial x_1} & \frac{\partial f_N}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_N}{\partial x_M} \end{array} \right] \end{matrix} \mathbf{x} \text{ cte. } \downarrow$$

A.1.2. Series de Taylor

Permite encontrar una aproximación de una función de $f(t)$ alrededor de un punto t_0 . Esta corresponde a:

$$f(t)_{t \rightarrow t_0} \approx f(t_0) + \frac{\frac{df}{dt}(t_0)}{1!}(t - t_0) + \frac{\frac{d^2f}{dt^2}(t_0)}{2!}(t - t_0)^2 + \frac{\frac{d^3f}{dt^3}(t_0)}{3!}(t - t_0)^3 + \dots$$

A.1.3. Invertir matrices / matriz adjunta y determinante

Cuando se quiere invertir una matriz, tenemos que hacer lo siguiente:

$$M^{-1} = \frac{1}{\|M\|} \cdot (\text{Adj}(M))^T$$

Supongamos que M es una matriz de 4x4, lo que quiere decir que:

$$M = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{bmatrix}$$

Matriz adjunta La matriz de adjuntas la podemos obtener para cada elemento tapando la columna y la fila a la que pertenezca y sacando la determinante de eso. Luego, si corresponde, aplicar un signo 1. En este ejemplo

$$\text{Adj}(M) = \begin{bmatrix} a_{11} & -a_{12} & a_{13} & -a_{14} \\ -a_{21} & a_{22} & -a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & -a_{32} & a_{33} & -a_{34} \\ -a_{41} & a_{42} & -a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Y cada uno de esos lo obtenemos usando:

$$a_{11} = \left\| \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \cancel{m_{11}} & \cancel{m_{12}} & \cancel{m_{13}} & \cancel{m_{14}} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \\ \hline \end{array} \right\| \Rightarrow a_{11} = \left\| \begin{array}{ccc} m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{42} & m_{43} & m_{44} \end{array} \right\|$$

$$a_{12} = \left\| \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \cancel{m_{11}} & \cancel{m_{12}} & \cancel{m_{13}} & \cancel{m_{14}} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \\ \hline \end{array} \right\| \Rightarrow a_{12} = \left\| \begin{array}{ccc} m_{21} & m_{23} & m_{24} \\ m_{31} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{43} & m_{44} \end{array} \right\|$$

$$a_{22} = \left\| \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline m_{11} & m_{12} & m_{13} & m_{14} \\ \cancel{m_{21}} & \cancel{m_{22}} & \cancel{m_{23}} & \cancel{m_{24}} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{42} & m_{43} & m_{44} \\ \hline \end{array} \right\| \Rightarrow a_{22} = \left\| \begin{array}{ccc} m_{11} & m_{13} & m_{14} \\ m_{31} & m_{33} & m_{34} \\ m_{41} & m_{43} & m_{44} \end{array} \right\|$$

Y el signo lo aplicamos usando este patrón:

$$\begin{bmatrix} + & - & + & - \\ - & + & - & + \\ + & - & + & - \\ - & + & - & + \end{bmatrix}$$

Es decir, es de signo (+) si la suma de la posición de la columna y la fila es par, y (-) si es impar.

Determinante Para sacar la determinante es un procedimiento parecido. Se puede tomar cualquier columna o fila para obtenerla (preferentemente usar una que esté llena de ceros). Se aplica la siguiente fórmula, poniendo un i o j fijo y el otro variable en la sumatoria:

$$\|A\| = \sum_{i \text{ o } j=0}^n (-1)^{i+j} a_{ij} M_{ij}$$

Es decir, si tenemos que sacar la determinante de:

$$\|A\| = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 8 & 4 \\ 0 & 3 & 5 \end{vmatrix}$$

Escojo la última fila ya que tiene un cero y me ahorro sacar una determinante. El procedimiento es el siguiente.

$$\begin{bmatrix} + & - & + \\ - & + & - \\ + & \triangle & + \end{bmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 8 & 4 \\ 0 & 3 & 5 \end{vmatrix} = 0 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 8 & 4 \end{vmatrix} + (-1) \cdot 3 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{vmatrix} + 5 \cdot \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 8 \end{vmatrix}$$

$\begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{vmatrix}$

$\begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{vmatrix}$

$\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 8 \end{vmatrix}$

Sacar una determinante de 2x2 es simplemente una fórmula, con lo que queda:

$$\|A\| = 0 \cdot (1 \cdot 4 - 2 \cdot 8) - 3 \cdot (1 \cdot 4 - 2 \cdot 2) + 5 \cdot (1 \cdot 8 - 1 \cdot 2) = 30$$

A.1.4. Multiplicación de matrices

Si se tiene por ejemplo una multiplicación entre las matrices:

$$A \cdot B = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} b_{11} \\ b_{21} \\ b_{31} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} \\ c_{21} \end{bmatrix}$$

Cada elemento de la matriz resultante C se obtiene así:

- c_{11} = Primera fila A x Primera columna B
- c_{21} = Segunda fila A x Primera columna B

Cada elemento en la fila A se multiplica con el correspondiente en la columna B. Y la multiplicación no puede hacerse si las filas de A no tienen la misma cantidad de elementos que las columnas de B. Así:

- $c_{11} = a_{11} \cdot b_{11} + a_{12} \cdot b_{21} + a_{13} \cdot b_{31}$
- $c_{21} = a_{21} \cdot b_{11} + a_{22} \cdot b_{21} + a_{23} \cdot b_{31}$

A.2. Familias de polinomios

A.2.1. Legendre

Legendre - Definido en intervalo de $[-1, 1]$	
Regla de formación <ul style="list-style-type: none"> ▪ $L_0(x) = 1$ ▪ $L_1(x) = x$ ▪ $L_n(x) = \frac{x(2n-1)}{n}L_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n}L_{n-2}(x)$ 	Función peso para ser usada en producto interno $w(x) = 1$
Primeros polinomios $L_0(x) = 1$ $L_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$ $L_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{30}{8}x^2 + \frac{3}{8}$ $L_1(x) = x$ $L_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x$ $L_5(x) = \frac{63}{8}x^5 - \frac{70}{8}x^3 + \frac{15}{8}x$	
Norma: $\langle L_i, L_j \rangle = \int_{-1}^1 L_i(x) L_j(x) dx$ <ul style="list-style-type: none"> ▪ $\langle L_i, L_j \rangle = 0$ si $i \neq j$ (polinomios ortogonales) ▪ $\langle L_i, L_i \rangle = \frac{2}{2i+1}$ 	
Propiedades <ul style="list-style-type: none"> ▪ Evaluados en $x = 1$, $C_n(1) = 1$, para cualquier n. 	

A.2.2. Chebyshev

Chebyshev - Definido en intervalo de $] - 1, 1[$	
Regla de formación <ul style="list-style-type: none"> ▪ $C_0(x) = 1$ ▪ $C_1(x) = x$ ▪ $C_n(x) = 2xC_{n-1}(x) - C_{n-2}(x)$ 	Función peso para ser usada en producto interno $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
Primeros polinomios $C_0(x) = 1 \qquad C_2(x) = 2x^2 - 1 \qquad C_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$ $C_1(x) = x \qquad C_3(x) = 4x^3 - 3x \qquad C_5(x) = 16x^5 - 20x^3 + 5x$	
Norma: $\langle C_i, C_j \rangle = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} C_i(x) C_j(x) dx$ <ul style="list-style-type: none"> ▪ $\langle C_i, C_j \rangle = 0$ si $i \neq j$ (polinomios ortogonales) ▪ $\langle C_0, C_0 \rangle = \pi$ ▪ $\langle C_i, C_i \rangle = \frac{\pi}{2}$ para $i \geq 1$ 	
Propiedades <ul style="list-style-type: none"> ▪ Evaluados en $x = 1$, $C_n(1) = 1$, para cualquier n. ▪ $C_n(x)$ tiene sus n ceros en el intervalo $] - 1, 1[$. ▪ $\int \frac{1}{\sqrt{a^2 - x^2}} dx = \arcsin\left(\frac{x}{a}\right) + C$ ▪ Nodos de Chebyshev: $xc_{n,i} = b + a \cos\left(\frac{\pi(2i-1)}{2n}\right)$ 	

A.2.3. Laguerre

Laguerre - Definido en intervalo de $[0, +\infty[$	
Regla de formación <ul style="list-style-type: none"> ▪ $l_0(x) = 1$ ▪ $l_1(x) = 1 - x$ ▪ $l_n(x) = \frac{2n-1-x}{n}l_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n}l_{n-2}(x)$ 	Función peso para ser usada en producto interno $w(x) = e^{-x}$
Primeros polinomios <div> $l_0(x) = 1$ $l_3(x) = \frac{-1}{6}x^3 + \frac{3}{2}x^2 - 3x + 1$ </div> <div> $l_1(x) = 1 - x$ $l_4(x) = \frac{1}{24}x^4 - \frac{2}{3}x^3 + 3x^2 - 4x + 1$ </div> <div> $l_2(x) = \frac{1}{2}x^2 - 2x + 1$ $l_5(x) = \frac{-1}{120}x^5 + \frac{5}{24}x^4 - \frac{5}{3}x^3 + 5x^2 - 5x + 1$ </div>	
Norma: $\langle l_i, l_j \rangle = \int_0^{+\infty} e^{-x} l_i(x) l_j(x) dx$ <ul style="list-style-type: none"> ▪ $\langle l_i, l_j \rangle = 0$ si $i \neq j$ (polinomios ortogonales) ▪ $\langle l_i, l_i \rangle = 1$ (polinomios ortonormales) 	

A.2.4. Hermite

Hermite - Definido en intervalo de $[-\infty, +\infty]$	
Regla de formación <ul style="list-style-type: none"> ▪ $H_0(x) = 1$ ▪ $H_1(x) = 2x$ ▪ $H_n(x) = 2x H_{n-1}(x) - \frac{d}{dx} H_{n-1}(x)$ 	Función peso para ser usada en producto interno $w(x) = e^{-x^2}$
Primeros polinomios $H_0(x) = 1 \quad H_2(x) = 4x^2 - 2 \quad H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12$ $H_1(x) = 2x \quad H_3(x) = 8x^3 - 12x \quad H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x$	
Norma: $\langle H_i, H_j \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_i(x) H_j(x) dx$ <ul style="list-style-type: none"> ▪ $\langle H_i, H_j \rangle = 0$ si $i \neq j$ (polinomios ortogonales) ▪ $\langle H_i, H_i \rangle = \sqrt{\pi} \cdot 2^i i!$ 	
Propiedades <ul style="list-style-type: none"> ▪ $\int_0^x e^{-t^2} dt = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf}(x)$ ▪ erf es una función <i>impar</i>. ▪ $\operatorname{erf}(0) = 0$ ▪ $\lim_{x \rightarrow -\infty} \operatorname{erf}(x) = -1$ ▪ $\lim_{x \rightarrow \infty} \operatorname{erf}(x) = 1$ 	

A.3. Fórmulas de integración

Sean:

- $[a, b]$ el intervalo de integración
- n la cantidad de nodos de integración
- ξ algún número dentro del intervalo de integración ($a \leq \xi \leq b$)
- h el espacio entre dos nodos.

A.3.1. Fórmulas cerradas de Newton-Cotes

En este caso $h = \frac{b-a}{n-1}$

# Nodos (n)	Aproximación de $\int_a^b f(x) dx$	Error
2	$\underbrace{(b-a)}_{\text{ancho}} \cdot \underbrace{\frac{1}{2}(f(b) + f(a))}_{\text{alturas}}$ <p>Fórmula del trapecio</p>	$\frac{(b-a)^3}{12} f''(\xi)$
3	$\frac{h}{3} \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f(a) \\ f(a+h) \\ f(b) \end{bmatrix}$ <p>Fórmula de Simpson</p>	$\frac{h^5}{90} \cdot f^{(4)}(\xi)$
4	$\frac{3h}{8} \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f(a) \\ f(a+h) \\ f(a+2h) \\ f(b) \end{bmatrix}$ <p>Fórmula de tres octavos de Simpson</p>	$\frac{3h^5}{80} \cdot f^{(4)}(\xi)$
5	$\frac{2h}{45} \cdot \begin{bmatrix} 7 \\ 32 \\ 12 \\ 32 \\ 7 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f(a) \\ f(a+h) \\ f(a+2h) \\ f(a+3h) \\ f(b) \end{bmatrix}$ <p>Fórmula de dos cuarenta y cinco-avos de Boole</p>	$\frac{8h^7}{945} \cdot f^{(6)}(\xi)$

A.3.2. Fórmulas abiertas de Newton-Cotes

En este caso $h = \frac{b-a}{n+1}$

# Nodos (n)	Aproximación de $\int_a^b f(x) dx$	Error
1	$(b-a) \cdot f(a+h)$ Fórmula del punto medio	$\frac{h^3}{3} f^{(2)}(\xi)$
2	$\frac{b-a}{2} [f(a+h) + f(a+2h)]$ Fórmula del trapecio	$\frac{3h^3}{4} f^{(2)}(\xi)$
3	$\frac{b-a}{3} \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 2 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f(a+h) \\ f(a+2h) \\ f(a+3h) \end{bmatrix}$ Regla de Milne	$\frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi)$
4	$\frac{b-a}{24} \cdot \begin{bmatrix} 11 \\ 1 \\ 1 \\ 11 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f(a+h) \\ f(a+2h) \\ f(a+3h) \\ f(a+4h) \end{bmatrix}$	$\frac{95h^5}{144} \cdot f^{(4)}(\xi)$

A.4. Nodos y coeficientes de integración Gaussiana**A.4.1. Gauss-Chebyshev**

Para aproximar:, con n nodos:

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

Todos los w_i valen $\frac{\pi}{n}$

Para $n = 2$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,7071067$	1,570796

Para $n = 3$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,866025$	1,047198
0	1,047198

Para $n = 4$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,923880$	0,785398
$\pm 0,382683$	0,785398

Para $n = 6$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,965926$	0,523599
$\pm 0,707107$	0,523599
$\pm 0,258819$	0,523599

Para $n = 5$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,951057$	0,628319
$\pm 0,587785$	0,628319
0	0,628319

Para $n = 7$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,974928$	0,448799
$\pm 0,781831$	0,448799
$\pm 0,433883$	0,448799
0	0,448799

A.4.2. Gauss-Legendre

Para $n = 2$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,577350$	1,000000

Para $n = 4$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,861136$	0,347855
$\pm 0,339981$	0,652145

Para $n = 6$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,932470$	0,171324
$\pm 0,661209$	0,360762
$\pm 0,238619$	0,467914

Para $n = 3$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,774596$	0,555556
0	0,888889

Para $n = 5$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,906180$	0,236927
$\pm 0,538470$	0,478629
0	0,568889

Para $n = 7$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,949108$	0,129485
$\pm 0,741531$	0,279705
$\pm 0,405845$	0,381830
0	0,417959

Error Para n nodos, con $\phi(x)$ el máximo error (véase 1.5):

$$E = \frac{2^{2n+1} \cdot (n!)^4}{(2n+1) \cdot [(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi)$$

Usando $\xi = \max |x - x_i|$

A.4.3. Gauss-Hermite

Para $n = 2$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 0,707107$	0,886227

Para $n = 4$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 1,650680$	0,081313
$\pm 0,524648$	0,804914

Para $n = 6$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 2,350605$	0,004530
$\pm 1,335849$	0,157067
$\pm 0,436077$	0,724630

Para $n = 3$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 1,224745$	0,295409
0	1,181636

Para $n = 5$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 2,020183$	0,019953
$\pm 0,958572$	0,393619
0	0,945309

Para $n = 7$ nodos	
x_i	w_i
$\pm 2,651961$	0,000972
$\pm 1,673552$	0,054515
$\pm 0,816288$	0,425607
0	0,810265

A.4.4. Gauss-Laguerre

Para $n = 2$ nodos	
x_i	w_i
3,144214	0,146447
0,585786	0,853553

Para $n = 4$ nodos	
x_i	w_i
9,395071	0,000539
4,536620	0,038888
1,745761	0,357419
0,322548	0,603154

Para $n = 3$ nodos	
x_i	w_i
6,289945	0,010389
2,294280	0,278518
0,415775	0,711093

Para $n = 5$ nodos	
x_i	w_i
12,640801	0,000023
7,085810	0,003612
3,596426	0,075942
1,141340	0,398667
0,263560	0,521756

A.5. Resolución de ecuaciones diferenciales

Para resolver:

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

Siendo:

- $y(a)$ La condición inicial.
- t_0, t_1, \dots Instantes de tiempo en que se evalúa la EDO.
- h El espacio entre dos instantes de tiempo.
- $f(t, y)$ Cualquier función que esté en términos de t y la función buscada $y(t)$ sin derivar.
- y_0, y_1, \dots Aproximación de la función en los instantes de tiempo.
- ξ Algún número que se encuentra entre los últimos dos instantes de tiempo evaluados.
- $y(t_0), y(t_1), \dots$ La función exacta evaluada en dichos instantes.

Entonces, asumiendo que $y_0 = y(a)$, condición inicial, los incrementos $I = y_i - y_{i-1}$ para cada método son:

$f(t, y)$ se anota $f\left(\begin{bmatrix} t \\ y \end{bmatrix}\right)$ para evitar confusiones.

A.5.1. Métodos de un paso

- Método de Euler, error $O(h^2)$

$$I = h \cdot f\left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix}\right)$$

$$\text{Error: } \frac{h^2}{2} \cdot \frac{d^2y}{dt^2}(\xi)$$

- Método de Taylor (de orden k), error $O(h^{k+1})$

$$I = h \cdot f\left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix}\right) + \frac{h^2}{2!} \cdot \frac{\partial f}{\partial t}\left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix}\right) + \frac{h^3}{3!} \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}\left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix}\right) + \dots$$

$$\text{Error: } \frac{h^{k+1}}{(k+1)!} \cdot \frac{\partial^k f}{\partial t^k}(\xi, y(\xi))$$

- Runge-Kutta del punto medio, error $O(h^3)$

$$I = h \cdot f\left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + \frac{h}{2} \\ y_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot f(t_{i-1}, y_{i-1}) \end{bmatrix}\right)$$

- Euler modificado, error $O(h^3)$

$$I = \frac{h}{2} \cdot \left(f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix} \right) + f \left(\begin{bmatrix} t_i \\ y_i + hf(t_{i-1}, y_{i-1}) \end{bmatrix} \right) \right)$$

- Heun, error $O(h^3)$

$$I = \frac{h}{4} \cdot \left(f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix} \right) + 3f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + \frac{2h}{3} \\ y_{i-1} + \frac{2h}{3} \cdot f(t_{i-1}, y_{i-1}) \end{bmatrix} \right) \right)$$

- RK3 (variedad 1), error $O(h^4)$

$$I = \frac{h}{9} \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} k_1 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix} \right) & k_2 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + \frac{h}{2} \\ y_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot k_1 \end{bmatrix} \right) \\ k_3 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + \frac{3h}{4} \\ y_{i-1} + \frac{3h}{4} \cdot k_2 \end{bmatrix} \right) \end{aligned}$$

- RK3 (variedad 2), error $O(h^4)$

$$I = \frac{h}{6} \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} k_1 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix} \right) & k_2 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + \frac{h}{2} \\ y_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot k_1 \end{bmatrix} \right) \\ k_3 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + h \\ y_{i-1} + h(2k_2 - k_1) \end{bmatrix} \right) \end{aligned}$$

- RK4, error $O(h^5)$

$$I = \frac{h}{6} \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} k_1 \\ k_2 \\ k_3 \\ k_4 \end{bmatrix} \quad \begin{aligned} k_1 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} \\ y_{i-1} \end{bmatrix} \right) & k_2 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + \frac{h}{2} \\ y_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot k_1 \end{bmatrix} \right) \\ k_3 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + \frac{h}{2} \\ y_{i-1} + \frac{h}{2} \cdot k_2 \end{bmatrix} \right) & k_4 &= f \left(\begin{bmatrix} t_{i-1} + h \\ y_{i-1} + h \cdot k_3 \end{bmatrix} \right) \end{aligned}$$

A.5.2. Métodos multipasos - Adams Bashfort

Dado que en los métodos multipasos se emplean varios pasos atrás, se suele ocupar un método de un solo paso (muchas veces se indica ocupar Euler) para estimar dichos pasos y luego seguir con un multipasos. Si hacemos que $f_{n-k} = f(t_{n-k}, y_{n-k})$, entonces:

- De 1 paso:

$$I = h \cdot f_{n-1} + \underbrace{\frac{1}{2}h^2 \cdot y^{(2)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

- De 2 pasos:

$$I = \frac{h}{2} \cdot \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f_{n-1} \\ f_{n-2} \end{bmatrix} + \underbrace{\frac{5}{12}h^3 \cdot y^{(3)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

- De 3 pasos:

$$I = \frac{h}{12} \cdot \begin{bmatrix} 23 \\ -16 \\ 5 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f_{n-1} \\ f_{n-2} \\ f_{n-3} \end{bmatrix} + \underbrace{\frac{3}{8}h^4 \cdot y^{(4)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

- De 4 pasos:

$$I = \frac{h}{24} \cdot \begin{bmatrix} 55 \\ -59 \\ 37 \\ -9 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f_{n-1} \\ f_{n-2} \\ f_{n-3} \\ f_{n-4} \end{bmatrix} + \underbrace{\frac{251}{720}h^5 \cdot y^{(5)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

A.5.3. Métodos multipasos - Adams Moulton

Estos métodos también se denominan *estimador-corrector*, dado que para estimar el paso actual también se necesita una estimación *previa* del paso actual.

- De 1 paso:

$$I = h \cdot f_n - \underbrace{\frac{1}{2}h^2 \cdot y^{(2)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

- De 2 pasos:

$$I = \frac{h}{2} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f_n \\ f_{n-1} \end{bmatrix} - \underbrace{\frac{1}{12}h^3 \cdot y^{(3)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

- De 3 pasos:

$$I = \frac{h}{12} \cdot \begin{bmatrix} 5 \\ 8 \\ -1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f_n \\ f_{n-1} \\ f_{n-2} \end{bmatrix} - \underbrace{\frac{1}{24}h^4 \cdot y^{(4)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

- De 4 pasos:

$$I = \frac{h}{24} \cdot \begin{bmatrix} 9 \\ 19 \\ -5 \\ 1 \end{bmatrix}^T \cdot \begin{bmatrix} f_n \\ f_{n-1} \\ f_{n-2} \\ f_{n-3} \end{bmatrix} - \underbrace{\frac{19}{720}h^5 \cdot y^{(5)}(\xi_n)}_{\text{error}}$$

A.6. Resolución de ecuaciones no-lineales

■ Con un intervalo inicial

- **Bisección:** Dividir el intervalo por la mitad, y elegir el intervalo que contiene un cruce por cero. Iterar hasta alcanzar un ϵ .

$$c = \frac{a + b}{2}$$

- **Falsa posición:** Unir ambos puntos con una recta y encontrar dónde esa recta cruza por cero. Luego evaluar cuál de los dos intervalos contiene un cruce por cero. Iterar hasta alcanzar un ϵ .

$$c = \frac{a \cdot f(b) - b \cdot f(a)}{f(b) - f(a)}$$

■ De punto fijo

- **Newton:** Restarle al punto actual el incremento encontrado I . Iterar hasta que el incremento sea menor a un epsilon $|I| < \epsilon$.

$$I = \frac{f(x_{i-1})}{df/dx(x_{i-1})}$$

- **Newton multivariable:** La función de incremento cambia ligeramente. Iterar hasta que la norma del incremento sea menor a un epsilon $\|\mathbf{I}\| < \epsilon$.

$$\mathbf{I} = J_f^{-1}(x_{i-1}) \cdot \mathbf{f}(\mathbf{x}_{i-1})$$

- **Bailey:** Cambia el incremento respecto al de Newton.

$$I = \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \cdot \left(1 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} \cdot \frac{f''(x_0)}{2f'(x_0)} \right)^{-1}$$

A.7. Métodos iterativos para ecuaciones lineales

Para resolver el sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Todas las formas iterativas son $\mathbf{x}^{(n)} = T \cdot \mathbf{x}^{(n-1)} + \mathbf{c}$. La matriz A se asume descompuesta en sumandos $D - L - U$. Recordemos que la matriz T es cuadrada, por lo que se tiene la definición de:

Radio Espectral El radio espectral de la matriz T corresponde al valor propio de mayor valor absoluto.

■ Método de Jacobi:

$$T = D^{-1}(L + U) \quad \mathbf{c} = D^{-1}\mathbf{b}$$

■ **Método de Gauss-Siedel:**

$$T = (D - L)^{-1} \cdot U \qquad \mathbf{c} = (D - L)^{-1}\mathbf{b}$$

■ **Método S.O.R.** (con un factor ω dado...)

$$T = (D - \omega L)^{-1} \cdot ((1 - \omega)D + \omega U) \qquad \mathbf{c} = \omega(D - \omega L)^{-1}\mathbf{b}$$