Métodos numéricos

Teoría del error

Rodrigo Barrera

Para determinar la incertidumbre de una medición, debe examinarse la naturaleza de los errores que afectan el experimento. Existen muchos tipos distintos de errores que pueden ocurrir en un experimento, pero en general se agrupan en dos categorías: **errores aleatorios** y **errores sistemáticos.**

Los errores aleatorios suelen deberse a errores humanos y accidentales. Los errores accidentales son provocados por cambios en las condiciones experimentales que están fuera del control del experimentador; algunos ejemplos son vibraciones en los equipos, cambios en la humedad, temperaturas fluctuantes, etc.

Los errores humanos incluyen errores de cálculo al analizar los datos, lecturas incorrectas de instrumentos o un sesgo personal al suponer que ciertas lecturas son más confiables que otras.

Por su propia naturaleza, los errores aleatorios no pueden cuantificarse exactamente, ya que su magnitud y efecto sobre los valores experimentales varían en cada repetición del experimento. Por ello, comúnmente se emplean métodos estadísticos para obtener una estimación de estos errores.

Un error sistemático es aquel que ocurre de manera constante en una sola dirección cada vez que se realiza el experimento; es decir, el valor medido será siempre mayor (o menor) que el valor real.

Los errores sistemáticos se originan comúnmente por defectos en los instrumentos o por el uso de técnicas de medición inadecuadas. Por ejemplo, medir con el extremo desgastado de una regla, usar un instrumento mal calibrado o ignorar incorrectamente los efectos de la viscosidad, resistencia del aire o fricción, son factores que pueden provocar un desplazamiento sistemático del resultado experimental.

Aunque la naturaleza y magnitud de los errores sistemáticos son difíciles de predecir en la práctica, siempre debe intentarse cuantificar su efecto cuando sea posible. En cualquier experimento, se debe procurar eliminar tantos errores aleatorios y sistemáticos como sea posible. La calibración y ajuste adecuados del equipo ayudan a reducir los errores sistemáticos, dejando únicamente los errores accidentales y humanos como causa de la variabilidad en los datos. Aunque existen métodos estadísticos para reducir los errores aleatorios, resulta poco útil reducirlos más allá del límite de precisión del instrumento de medición.

Cuando se realizan varias mediciones independientes de una cantidad, el resultado esperado que se debe reportar está representado por el promedio de dichas mediciones. Para un conjunto de datos experimentales que contiene N elementos o mediciones, dado por $\{S_1, S_2, S_3, \ldots, S_N\}$, el promedio $\bar{S}$ o valor esperado S se calcula mediante la fórmula:

$$\bar{S} \equiv \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i = \frac{S_1 + S_2 + S_3 + \cdots + S_N}{N}$$

La razón por la que se le llama valor esperado se debe a que el promedio representa la mejor aproximación disponible al valor verdadero de la cantidad que se mide. A veces se le denomina la mejor estimación del valor real.

Los datos $\{S_1, S_2, S_3, \ldots, S_N\}$ están dispersos en torno al valor medio o promedio. Una medida de esta dispersión es la **desviación estándar**, que se define como:

$$\Delta S \equiv \sqrt{\frac{1}{N-1}\left(\sum_{i=1}^{N} S_i^2 - N\bar{S}^2\right)} = \sqrt{\frac{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + \cdots + S_N^2 - N\bar{S}^2}{N-1}}$$

Mientras más pequeña sea la desviación estándar, más agrupados estarán los datos en torno al promedio.

Si hay un gran número de datos distribuidos normalmente (es decir, con distribución gaussiana), el análisis estadístico muestra que aproximadamente el 68.3% de ellos caerá dentro del intervalo $[\bar{S} - \Delta S,\ \bar{S} + \Delta S]$.

Si los errores sistemáticos se han reducido al máximo posible, los errores aleatorios dominarán y, por lo tanto, limitarán la precisión del resultado final.

Existen dos formas claras de reducir el efecto de los errores aleatorios y mejorar la precisión de un resultado experimental:

- Eliminar la mayoría de los errores aleatorios inherentes al experimento;
- Obtener tantos datos como sea razonable, incrementando así N y, por lo tanto, reduciendo la variabilidad en $\bar{S}$.

La desviación estándar es una medida de la **precisión** de un experimento: mientras más pequeño sea ΔS, mayor será la precisión de la mejor estimación. Una forma de reportar la precisión del valor experimental es mediante el uso del **porcentaje de desviación estándar**, dado por:

$$\Delta S\% = \frac{\Delta S}{\bar{S}} \times 100\%$$

Desafortunadamente, el promedio y la desviación estándar no indican nada sobre la **exactitud** de la medición, es decir, cuán cercano está el valor experimental (o promedio) al valor verdadero.

En otras palabras, un experimento puede arrojar valores muy precisos y consistentes sin necesariamente acercarse al valor verdadero. Esto ocurre frecuentemente cuando el equipo no ha sido calibrado correctamente o cuando no se han reducido adecuadamente los errores sistemáticos.

En muchos experimentos, es deseable indicar la exactitud total del valor experimental final reportando algún tipo de **error porcentual**.

Si la cantidad medida tiene un valor teórico (o verdadero) conocido, entonces la exactitud del valor experimental se expresa como una razón entre el error y el valor teórico:

$$\text{Error\%} = \left| \frac{\text{Valor experimental} - \text{Valor teórico}}{\text{Valor teórico}} \right| \times 100\%$$

Sin embargo, en muchos experimentos el valor verdadero de la cantidad medida es desconocido. En tales casos, puede ser útil comparar dos resultados obtenidos por métodos distintos para calcular un **porcentaje de diferencia**.

Si los dos valores experimentales se representan por S_1 y S_2, entonces el **porcentaje de diferencia** se define como:

$$|S_1 - S_2|\% \equiv \left| \frac{S_1 - S_2}{\frac{S_1+S_2}{2}} \right| \times 100\%$$

Si un experimento se realiza correctamente, tomando cuidado de reducir los errores aleatorios y sistemáticos al máximo posible, los errores porcentuales serán correspondientemente pequeños. empleados.

La magnitud de estos errores dependerá en gran medida de la precisión de los instrumentos utilizados. Esto implica que, mientras en algunos casos un error del 5% o 10% puede ser aceptable, en otros casos puede indicar que el experimento fue mal ejecutado. Por lo tanto, el **éxito de un experimento**, en términos de error porcentual, solo puede evaluarse considerando el método e instrumentación empleados.

Propagación de errores

En muchos experimentos, las cantidades que se miden directamente no son las de interés final. Dado que toda medición tiene incertidumbres asociadas, cualquier cantidad calculada también tendrá una incertidumbre relacionada con las incertidumbres de las mediciones directas.

El procedimiento utilizado para estimar el error de las cantidades calculadas se denomina **propagación de errores**.

Propagación de errores (continuación)

Considere primero el caso general. Supóngase que las variables $A, B, C, \dots$ representan cantidades medibles independientes que se usan para calcular una cantidad U.

Dado que U es una función de $A, B, C, \dots$, puede escribirse como:

$$U = f(A, B, C, \dots)$$

Las mediciones de $A, B, C, \dots$ proporcionan estimaciones de los valores esperados, escritos como $\bar{A}, \bar{B}, \bar{C}, \dots$, junto con las incertidumbres asociadas $\Delta A, \Delta B, \Delta C, \dots$ para cada variable.

4 Propagación de errores (continuación)

Para encontrar el valor esperado o mejor estimación de U, se sustituyen los valores esperados de cada variable medida en la ecuación de U:

$$\bar{U} = f(\bar{A}, \bar{B}, \bar{C}, \ldots)$$

Si los errores de $A, B, C, \ldots$ son independientes, aleatorios y suficientemente pequeños, puede demostrarse que la incertidumbre de U está dada por:

$$\Delta U = \sqrt{\left(\frac{\partial U}{\partial A}\right)^2 (\Delta A)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial B}\right)^2 (\Delta B)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial C}\right)^2 (\Delta C)^2 + \cdots}$$

Propagación de errores

Las derivadas parciales se evalúan utilizando los valores esperados $\bar{A}, \bar{B}, \bar{C}, \ldots$ como valores de las variables independientes.

La notación correcta para expresar la estimación final de la cantidad calculada U es:

$$U = \bar{U} \pm \Delta U$$

Errores en métodos numéricos

El error en la resolución de un problema de ingeniería o ciencia puede surgir debido a varios factores:

- **Errores en la técnica de modelado:**
  - Un modelo matemático puede basarse en suposiciones que no son aceptables.
  - Por ejemplo, suponer que la fuerza de arrastre en un automóvil es proporcional a la velocidad del automóvil, cuando en realidad es proporcional al cuadrado de la velocidad, puede introducir errores significativos.
- **Errores en la implementación y medición:**
  - Los errores pueden surgir de fallos en los programas o en la medición de cantidades físicas.

Errores en métodos numéricos (cont.)

Dentro del contexto de los métodos numéricos, los dos tipos de errores principales a considerar son:

1. **Error de redondeo:**
   - Ocurre debido a las limitaciones en la representación de números en la computadora, donde solo se pueden almacenar un número finito de cifras significativas.
2. **Error de truncamiento:**
   - Surge cuando se utilizan aproximaciones para representar operaciones matemáticas continuas, como cuando se corta una serie infinita después de un número finito de términos.

Midiendo el error

Supongamos que tenemos un número a y una aproximación $\tilde{a}$. Vamos a considerar dos formas de medir el error en dicha aproximación.

Midiendo el error

La primera medida de error es la más obvia, es esencialmente la diferencia entre a y $\tilde{a}$.
Definición (error absoluto). Supongamos que $\tilde{a}$ es una aproximación al número a. El error absoluto en esta aproximación está dado por $|a - \tilde{a}|$.
Si $a = 100$ y $\tilde{a} = 100.1$, el error absoluto es 0.1, mientras que si $a = 1$ y $\tilde{a} = 1.1$, el error absoluto sigue siendo 0.1. Nótese que si a es una aproximación a $\tilde{a}$, entonces $\tilde{a}$ es una aproximación igualmente buena a a con respecto al error absoluto.

Midiendo el error

Al realizar operaciones aritméticas, los errores de redondeo se propagan. Por ejemplo, el error relativo en la suma de x e y puede aproximarse como:

$$\frac{|x+y-\hat{x}-\hat{y}|}{|x+y|} \approx \frac{|x|}{|x+y|}\epsilon_x + \frac{|y|}{|x+y|}\epsilon_y$$

Error relativo en la suma

```
def error_relativo_suma(x, y, epsilon_x, epsilon_y):

    # Calcular el valor absoluto de x e y
    abs_x = abs(x)
    abs_y = abs(y)
    abs_sum = abs_x + abs_y

    # Calcular el error relativo en la suma
    error_relativo = (abs_x / abs_sum) * epsilon_x + (abs_y / abs_sum) * epsilon_y

    return error_relativo
```

Error relativo recíproco

Supongamos que $\tilde{a}$ es una aproximación de a con un error relativo $r < 1$. Entonces a es una aproximación de $\tilde{a}$ con un error relativo

$$\frac{|a - \tilde{a}|}{|\tilde{a}|} \leq \frac{r}{1 - r}.$$

Demostración (1)

Si $\tilde{a}$ es una aproximación de a con un error relativo r, entonces:

$$\frac{|a - \tilde{a}|}{|a|} \leq r.$$

Queremos encontrar el error relativo de a como aproximación de $\tilde{a}$:

$$\frac{|a - \tilde{a}|}{|\tilde{a}|}.$$

Demostración (2)

Partimos de la desigualdad inicial:

$$|a - \tilde{a}| \leq r|a|.$$

Sumamos $|\tilde{a}|$ a ambos lados:

$$|a| - r|a| \leq |\tilde{a}|,$$

lo que simplifica a:

$$|a|(1 - r) \leq |\tilde{a}|.$$

Demostración (3)

Despejamos $|a|$:

$$|a| \leq \frac{|\tilde{a}|}{1 - r}.$$

Consideramos el error relativo recíproco:

$$\frac{|a - \tilde{a}|}{|\tilde{a}|}.$$

Demostración (4)

Sabemos que:

$$|a - \tilde{a}| \leq r|a|.$$

Sustituyendo la cota de $|a|$:

$$|a - \tilde{a}| \leq r\left(\frac{|\tilde{a}|}{1 - r}\right).$$

Demostración (5)

Dividiendo ambos lados por $|\tilde{a}|$, obtenemos:

$$\frac{|a - \tilde{a}|}{|\tilde{a}|} \leq \frac{r}{1 - r}.$$

Por lo tanto, hemos demostrado que:

$$\frac{|a - \tilde{a}|}{|\tilde{a}|} \leq \frac{r}{1 - r}.$$

Error relativo recíproco

Primero observamos que, dado que

$$1 > r = \frac{|a - \tilde{a}|}{|a|} = \left|1 - \frac{\tilde{a}}{a}\right|,$$

ambos a y $\tilde{a}$ deben tener el mismo signo, pues de lo contrario el lado derecho de esta desigualdad sería mayor que 1. Por otro lado, también tenemos a partir de la desigualdad triangular que

$$1 = \left|1 - \frac{\tilde{a}}{a} + \frac{\tilde{a}}{a}\right| \leq \left|1 - \frac{\tilde{a}}{a}\right| + \left|\frac{\tilde{a}}{a}\right|$$

¿Qué es el truncamiento?

- Truncar un número significa eliminar todas las cifras decimales a partir de una posición dada, sin considerar su valor.
- Es una forma de aproximación que introduce un error sistemático hacia abajo (en valor absoluto).

Ejemplo

$$\text{Truncar } 3.14159 \text{ a } 3 \text{ decimales} \Rightarrow 3.141$$

Truncamiento vs. Redondeo

- **Truncamiento:** elimina cifras sin evaluar su magnitud.
- **Redondeo:** evalúa la cifra siguiente y ajusta la anterior según reglas.

Ejemplo: truncar y redondear a 2 decimales:

$$\text{Número: } 5.6789$$
$$\text{Truncamiento: } 5.67$$
$$\text{Redondeo: } 5.68$$

Error de truncamiento

- El error de truncamiento es la diferencia entre el valor real y su valor truncado.
- Siempre se presenta un sesgo hacia cero.

$$\text{Error} = \text{Valor real} - \text{Valor truncado}$$

$$\text{Ejemplo:} \quad 3.14159 - 3.141 = 0.00059$$