

1. *Léxico básico.* Se dice que la función $\varphi : D_\varphi \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es $\mathcal{O}(h^k)$ (se lee “O mayúscula hache ka” y se escribe $\varphi(h) = \mathcal{O}(h^k)$) si existen números positivos h_0, c, k tales que $\forall |h| < h_0 : |\varphi(h)| \leq c|h|^k$. Además se dice que una función p aproxima a otra f con orden h^k si $f(h) = p(h) + \mathcal{O}(h^k)$. Una función f es de clase *ce-ka* en D , (se escribe $f \in C^k(D)$) si tiene en D derivadas continuas hasta el orden k . Se dice que una sucesión de elementos x_n de un espacio métrico converge a x si $\lim_{n \rightarrow \infty} d(x_n, x) = 0$, donde d es la distancia definida en ese espacio; en tal caso se escribe $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$, y la *velocidad de convergencia* queda caracterizada por el número positivo p tal que $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{d(x_{n+1}, x)}{d^p(x_n, x)} = \lambda > 0$ (si $p = 1$ se dice que la convergencia es lineal, si $p = 2$, que es cuadrática). Una velocidad de convergencia p equivale $d(x_{n+1}, x) = \mathcal{O}((d(x_n, x))^p)$. Una función f es α -Lipschitz en el intervalo $[a, b]$ si para cualesquiera $x_1, x_2 \in [a, b]$ se verifica la desigualdad $|f(x_1) - f(x_2)| \leq \alpha|x_1 - x_2|$ y en tal caso se escribe $f \in L_\alpha([a, b])$; si $0 < \alpha < 1$ la función se llama *contractiva* (se dice que es una *contracción*).

- Probar que $\mathcal{O}(h^k) + \mathcal{O}(h^k) = \mathcal{O}(h^k)$, $\mathcal{O}(h^p) + \mathcal{O}(h^q) = \mathcal{O}(h^k)$ con $k = \min\{p, q\}$ y que para cualquier constante $\lambda > 0$ es $\lambda \mathcal{O}(h^k) = \mathcal{O}(h^k)$.
- Mostrar que si $f \in C^{n+1}([a, b])$, $x_0 \in [a, b]$, $x_0 + h \in [a, b]$ y p_n es el polinomio de Taylor de orden n en x_0 de f , entonces $f(x_0 + h) = p_n(h) + \mathcal{O}(h^{n+1})$.
- Proponer una función $C^1(\mathbb{R})$ que no sea $C^2(\mathbb{R})$. ¿Una que siendo $C^2(\mathbb{R})$ no sea $C^3(\mathbb{R})$?
- Determinar la velocidad de convergencia de cada sucesión (todas convergen a cero, excepto la última): $x_n = 1/n$, $y_n = 1/n^2$, $z_n = 10^{-2^n}$, $w_n = 10^{-n^2}$, $\left[u_0 = 2, u_{n+1} = \frac{u_n^2 + 1}{2u_n}\right]$.
- Proponer una función contractiva definida en el intervalo $[0, 1]$; mostrar que toda función de clase $C^1([a, b])$ es $L_\alpha([a, b])$, indicando un tal α .
- Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.

Observación. Las cuestiones básicas de este ejercicio se encuentran el capítulo de apertura de los textos de cálculo numérico de la bibliografía; por ejemplo en *Mathews, J., Fink, K. (2003). Métodos numéricos con Matlab. Madrid: Prentice Hall (incluye códigos) o también en Burden, R., Faires, D. (2002). Análisis Numérico. México D. F.: Thomson.*

2. *Bisección.* El método de la bisección para aproximar una raíz x^* en el intervalo (a, b) de una función $f \in C^1([a, b])$ tal que $f(a)f(b) < 0$ consiste básicamente en la generación de una sucesión convergente x_0, x_1, \dots a la raíz x^* .
- Explicar detalladamente la lógica del método e ilustrarlo mediante un gráfico donde se muestren esquemáticamente los primeros pasos, y probar que una cota del error absoluto cometido al cabo de n iteraciones viene dada por la expresión $|x_n - x^*| < \frac{b-a}{2^{n+1}}$ y que la convergencia es lineal.
 - Como el proceso puede ser infinito (dar un ejemplo en el que ciertamente lo sería), ha de incluirse un criterio de paro para no exceder una dada tolerancia τ_1 a la aproximación de la raíz o al valor de la función τ_2 , que se expresan como $|x_n - x^*| < \tau_1$ o $|f(x_n)| < \tau_2$. Explicar el efecto de estos criterios de detención, y proponer ejemplos que muestren que aislados pueden resultar inapropiados. Obtener un criterio de detención que no requiera la constante verificación en cada iteración de la primera desigualdad.
 - ♣ Implementar el método en el lenguaje de alguna aplicación que le permita al usuario pasar los parámetros f, a, b, τ_1, τ_2 de modo que el programa devuelva a la salida el gráfico de la función f en la zona en que se realizan las aproximaciones, la aproximación finalmente alcanzada para la raíz, el número de iteraciones empleada.
 - Detallar los pasos y algunas iteraciones para resolver las siguientes ecuaciones:
 - $x^3 - 3x^2 + 2x = 0$
 - $e^x = 2 - x$
 - $e^{-x} = x$
 - Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.
3. *Contracciones, punto fijo.* Sea φ una contracción definida en un espacio métrico S completo (como por ejemplo en \mathbb{R} con la métrica $d(x, y) = |x - y|$ euclídea, $\varphi : [a, b] \rightarrow [a, b]$, $\varphi \in L_\alpha([a, b])$, $0 < \alpha < 1$). Se dice que x^* es un *punto fijo* de φ si $\varphi(x^*) = x^*$.

- (a) Probar que toda contracción es continua, y que la sucesión dada por $x_n = \varphi(x_{n-1}), n = 1, 2, \dots, x_0 \in S$ es convergente al único punto fijo de φ en S y establecer las siguientes acotaciones, observando que la primera de ellas equivale decir que $d(x_{n+1}, x^*) = \mathcal{O}(d(x_n, x^*))$.

$$d(x_{n+1}, x^*) \leq \alpha d(x_n, x^*), \quad d(x_n, x^*) \leq \alpha^n d(x_0, x^*), \quad d(x_n, x^*) \leq \frac{\alpha^n}{1-\alpha} d(x_0, x_1)$$

- (b) En particular, si $\varphi \in C^1([a, b])$, satisface $0 < \max\{|\varphi'(x)| : x \in [a, b]\} < 1$, y llamando α a este máximo la primera expresión se escribe como $|x_{n+1} - x^*| \leq \alpha |x_n - x^*|$, mostrando el carácter lineal de la convergencia. Probar que, si $\varphi \in C^2([a, b])$, $\varphi'(x^*) = 0$, la convergencia de la iteración de punto fijo pasa a ser cuadrática (un modo sencillo resulta a partir del desarrollo de Taylor de φ alrededor de x^*).
- (c) Ilustrar en sendos gráficos los conceptos y el comportamiento de atractor de x^* para funciones φ de clase $C^1([a, b])$ con $\max\{|\varphi'| < 1\}$ (y entonces, contracciones), recorriendo las situaciones: $\forall x \in (a, b) : -1 < \varphi'(x) < 0$, $\forall x \in (a, b) : 0 < \varphi'(x) < 1$. ¿comportamiento con $\varphi'(x^*) = 0$?
- (d) Analizar los posibles comportamientos con $\varphi'(x^*) = \pm 1$ y los seguros comportamientos con $|\varphi'(x^*)| > 1$.
- (e) ♣ Escribir un código que permita al usuario ingresar $a, b, \phi, \alpha, x_0, \tau_1 > 0, \tau_2 > 0$ y que al cabo de N iteraciones devuelva la aproximación x_N de x^* con error $|x_N - x^*|$ menor que τ_1 y que mantenga $|f(x_N)| < \tau_2$.
- (f) Mostrar algunos pasos del procedimiento en los siguientes problemas (observar que en los dos primeros el punto fijo es de cálculo directo, sin necesidad de iteraciones).
- Hallar $x \in (-1/2, 1/2)$ tal que $x = x^2$ con semilla $x_0 = 0.4$. Si fuera $x_0 = 0.9$ ¿es convergente la iteración de punto fijo? (Observar que no se cumple que $|\varphi'(0.9)| < 1$).
 - Hallar $x \in (1, 2)$ tal que $x = \frac{2}{3}x + \frac{1}{x^2}$ con semilla $x_0 = 1$.
 - Hallar x tal que $x = e^{-x}$, con semilla $x_0 = 0$
 - Hallar $x \in (0, 1/2)$ tal que $x = \cos(\pi x)$ con semilla $x_0 = 1/4$.
- (g) Explicar cómo se puede transformar el problema de hallar una solución de la ecuación $f(x) = 0$ mediante una iteración de punto fijo $x = \varphi(x)$, con f de clase $C^1([a, b])$, $f(a) < 0, f(b) > 0, 0 < k_1 \leq f'(x) \leq k_2$, definiendo la función $\phi(x) = x - \lambda(x)f(x)$.
- (h) Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.

Observación. Además de los textos ya mencionados, una visión más profunda de este apartado puede verse en *Kolmogorov, A. N., Fomin, S. V. (1975). Elementos de la teoría de funciones y del análisis funcional. Moscú: Mir.*

4. *Newton-Raphson.* Se quiere resolver la ecuación en la incógnita x dada por $f(x) = 0$, siendo $f \in C^2([a, b])$, $f(a)f(b) < 0$, con f'' de signo constante en $[a, b]$.

- (a) Probar que existe y es única la raíz x^* de la ecuación $f(x) = 0$ y efectuar gráficos que presenten las situaciones posibles (1) $\forall x \in (a, b) : f''(x) > 0, f(a) < 0, f(b) > 0$, (2) $\forall x \in (a, b) : f''(x) > 0, f(a) > 0, f(b) < 0$, (3) $\forall x \in (a, b) : f''(x) < 0, f(a) < 0, f(b) > 0$, (4) $\forall x \in (a, b) : f''(x) < 0, f(a) > 0, f(b) < 0$.
- (b) Llamando x_0 al extremo del segmento $[a, b]$ donde el signo de f y de f'' es el mismo, sea ω el segmento cuyos extremos son los puntos x_0 y x^* . Probar que en tal caso, todos los términos de la sucesión

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

se encuentran en ω y la sucesión converge monótonamente a la raíz x^* . Interpretar geoméricamente el método. Observar que en el segmento ω la función f' es monótona, con $0 < m_1 = |f'(x^*)| = \min\{|f'(x)| : x \in \omega\} \leq f'(x) \leq \max\{|f'(x)| : x \in \omega\} = |f'(x_0)| = M_1$, y sea $M_2 = \max\{|f''(x)| : x \in \omega\} > 0$.

- (c) Partiendo de Taylor $0 = f(x^*) = f(x_{n-1}) + f'(x_{n-1})(x^* - x_{n-1}) + \frac{1}{2}f''(\xi)(x^* - x_{n-1})^2, \xi \in \omega$ y llamando $\beta = \frac{M_2}{2m_1}$, probar que la convergencia es cuadrática, obteniendo que $|x^* - x_n| \leq \beta |x^* - x_{n-1}|^2$ (esto, admitiendo que $f'(x^*) \neq 0$).
- (d) Mostrar que este método es un particular caso de punto fijo, en que la ecuación $f(x) = 0$ resulta equivalente a la ecuación $x = \varphi(x)$ siendo $\varphi(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$ donde se tiene garantizado que $\varphi'(x^*) = 0$, y por continuidad, que existe un entorno $E(x^*)$ de x^* tal que cualquiera sea $x \in E(x^*)$ se cumple $|\varphi'(x)| < 1$; probar que el método de punto fijo, de convergencia lineal para $\varphi'(x^*) \neq 0$, pasa a tener convergencia cuadrática con $\varphi'(x^*) = 0$.
- (e) Si la raíz x^* fuese de multiplicidad $m > 1$ (y entonces $f'(x^*) = 0$) se pierde la convergencia cuadrática (¿por qué?); probar que cada una de las dos estrategias siguientes de punto fijo permiten restablecer la convergencia cuadrática.

- i. Hallar $x \in [a, b]$ tal que $x = \varphi(x)$ con $\varphi(x) = x - m \frac{f(x)}{f'(x)}$
- ii. Hallar $x \in [a, b]$ tal que $x = \varphi(x)$ con $\varphi(x) = x - \frac{\mu(x)}{\mu'(x)}$, siendo $\mu(x) = \frac{f(x)}{f'(x)}$ en un entorno reducido de $x \neq x^*$ (y nula en $x = x^*$).

Observación. En este apartado debe recordarse que x^* es una raíz de multiplicidad m de una función f si en un entorno de x^* existe una función h (no nula en x^*) tal que $f(x) = (x - x^*)^m h(x)$, y trabajar esta expresión para probar que $\mu(x)$ tiene una raíz simple en x^* con derivada $1/m$.

- (f) ♣ Escribir un código que permita al usuario ingresar $a, b, \phi, x_0, \tau_1 > 0, \tau_2 > 0$ y que al cabo de N iteraciones devuelva la aproximación x_N de x^* con error $|x_N - x^*|$ menor que τ_1 y que mantenga $|f(x_N)| < \tau_2$.
- (g) Probar que la siguiente sucesión converge cuadráticamente a la raíz enésima positiva del número positivo a dado: $\sqrt[n]{a}, a > 0$ (con qué semilla x_0).

$$x_{k+1} = \frac{1}{n} \left[(n-1)x_k + \frac{a}{x_k^{n-1}} \right], \quad x_0 = ?$$

- (h) La función $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = xe^{-x}$ tiene una única raíz, que es 0. Escribir la sucesión del método de Newton y determinar *todas* las semillas admisibles (esto es todos los $x_0 \in \mathbb{R}$ tales que la iteración $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ converge a 0).
- (i) Un modo de acelerar la convergencia de una sucesión que converge linealmente, es el procedimiento de *Aitken* que transforma la sucesión original x_n en la sucesión $\hat{x}_n = x_n - \frac{1}{2} \frac{(\Delta x_n)^2}{\Delta^2 x_n}$, donde la diferencia progresiva Δx_n se define por $\Delta x_n = x_{n+1} - x_n$ y las de orden superior por $\Delta^{k+1} x_n \stackrel{\text{def}}{=} \Delta^k(\Delta x_n), k = 1, 2, \dots$. Dada la sucesión del método de Newton para hallar la única raíz de $f(x) = x^2 - 2x + 1$ con semilla $x_0 = 0$ (¿de qué orden es esta convergencia?), acelerar su convergencia con el método de Aitken y comparar las velocidades.
- (j) Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.

Observación. Además de los múltiples ejemplos expuestos en la bibliografía, se hallan varias aplicaciones en *Hoffman, J. (2023). Numerical Methods for Engineers and Scientists. New York: McGraw-Hill.*

5. *Interpolación.* El problema de aproximar los valores de una función f , de la que son conocidos sus valores $f(x_k)$ en los $n+1$ puntos x_0, x_1, \dots, x_n exige la construcción del polinomio de Lagrange L_n de grado a lo sumo n tal que $L_n(x_k) = f(x_k), k = 0, 1, \dots, n$. En un punto cualquiera x se tendrá que $f(x) = L_n(x) + R_n(x)$, donde $R_n(x)$ es el error introducido por la interpolación en ese punto. Por simplicidad de notación se toma $f_k \stackrel{\text{def}}{=} f(x_k), k = 0, 1, \dots, n$.

- (a) Probar la existencia y unicidad del polinomio interpolador, mostrando que las siguientes son las expresiones explícitas de los polinomios interpoladores $L_1(x), L_2(x)$.

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} f_0 + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} f_1$$

$$L_2(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} f_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} f_1 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} f_2$$

y que el polinomio de orden n está dado por $L_n(x) = \sum_{k=0}^n p_{nk}(x) f_k$, siendo los polinomios $p_{nk}(x)$ dados por:

$$p_{nk}(x) = \frac{(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_k - x_0) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)}$$

Probar que debe tenerse, a modo de control, que $\sum_{k=0}^n p_{nk}(x) = 1$.

- (b) Mostrar que si no se conoce nada acerca de la regularidad de f nada puede decirse del error R_n con el que se hace la aproximación $f(x) \approx L_n(x)$. Si, en cambio, se supone que $f \in C^{n+1}([a, b])$, con todos los nodos x_0, x_1, \dots, x_n contenidos en $[a, b]$, obtener la siguiente acotación del error *local* en un dado x , siendo M_{n+1} el máximo de $|f^{n+1}|$ en el intervalo $[a, b]$ (¿cuál es la cota del error global?).

$$|R_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega_n(x)|, \quad \text{siendo } \omega_n(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

Ayuda: Escribir $R_n(x) = \omega_n(x)r_n(x)$, fijar $x \in [a, b], x \neq x_k$ y analizar la función de t definida por $\varphi(t) \stackrel{\text{def}}{=} L_n(t) + \omega_n(t)r_n(x) - f(t)$, que se anula en $n+2$ puntos de $[a, b]$, para llegar a que $(n+1)!r_n(x) - f^{(n+1)}(\xi) = 0$, para algún desconocido $\xi(x) \in (a, b)$.

- (c) Determinar una cota del error de una interpolación lineal cualquiera entre x_0 y x_1 de una función de clase $C^2([a, b])$. Si se quiere una estimación del error que incluya, además del truncamiento, los errores de redondeo, deben tenerse en cuenta. Determinar, a modo de ejemplo, una cota del error cometido al interpolar entre dos valores de una tabla con nodos equiespaciados a distancia $1/100$ una función f cuya segunda derivada es menor que 1, si tanto los valores de la tabla como el valor obtenido por la interpolación están redondeados simétricamente con cuatro decimales.
- (d) Probar que para una función de clase $C^3([a, b])$ con nodos x_0, x_1, x_2 equidistantes (contenidos en ese intervalo) una distancia h una cota del error global es $\mathcal{O}(h^3)$ (específicamente, obtener la cota $\forall x \in [a, b] : R_2(x) \leq \frac{M_3 h^3}{9\sqrt{3}}$, siendo M_3 una cota superior de $|f'''|$ en el intervalo cerrado). Rehacer, ahora para cuatro nodos y una función de clase $C^4([a, b])$.
- (e) Determinar el polinomio interpolador de los datos $(-1, 0), (0, 0), (1, 0), (2, 6)$.
- (f) Determinar cotas del error local en $x = 116$ y del error global en $[100, 144]$ en una interpolación con los tres nodos $x_0 = 100, x_1 = 121, x_2 = 144$ de la función $f(x) = \sqrt{x}$.
- (g) ♣ Implementar un código que para un ingreso de $n+1$ nodos equiespaciados x_0, x_1, \dots, x_n con sus ordenadas f_0, f_1, \dots, f_n una distancia h devuelva el polinomio $L_n(x)$ junto a una cota de error global.
- (h) Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.

Observación. Un tratamiento de los polinomios interpoladores que permite ampliar el panorama limitado de este ejercicio puede verse en *Volkov, E. (2020). Métodos numéricos. Moscú: Mir.*

6. *Derivación numérica.* Si en la definición de derivada de una función f se considera sólo el cociente incremental $\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ el número obtenido ¿se puede considerar una aproximación de la derivada? En tal caso, ¿Con qué orden de aproximación? En este apartado se consideran las cuestiones conexas con esta pregunta; la notación considerará $x_k \stackrel{\text{def}}{=} x_0 + kh, f_k \stackrel{\text{def}}{=} f(x_k), k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, donde $h > 0$ es el paso del método.

- (a) Probar el siguiente lema: si $f \in C([a, b]), \xi_k \in [a, b]$, entonces existe $\xi \in [a, b]$ tal que $\sum_{k=1}^n f(\xi_k) = n f(\xi)$.
- (b) Interpretar geométricamente cada una de las tres aproximaciones siguientes y probar que son del orden indicado, introduciendo el tipo de regularidad necesaria para tales estimaciones (Una vez establecidas esas hipótesis, un modo sencillo de alcanzar estas estimaciones es partir del desarrollo de Taylor de f centrado en x_0 de un orden adecuado, truncando con el resto en forma de Lagrange, y luego de operar, aplicar el lema del apartado anterior).

$$f'_0 \approx \frac{f_1 - f_0}{h}, \mathcal{O}(h) \quad f'_0 \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}, \mathcal{O}(h^2) \quad f''_0 \approx \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2}, \mathcal{O}(h^2)$$

- (c) Los métodos de derivación numérica introduce, además del error propio de la discretización, los errores propios del cálculo mismo: los primeros disminuyen con h , mientras que los segundos aumentan con h . Probar que el valor óptimo h^* para cada uno de los tres casos anteriores es el que se indica, suponiendo que en el cálculo de los valores de la función el error es a lo sumo δ y dar una estimación del error total ϵ alcanzado para cada uno de esos pasos óptimos (se utiliza la habitual notación M_k como cota superior de $|f^{(k)}|$ en el intervalo que corresponda en cada acotación).

$$h^* = 2\sqrt{\frac{\delta}{M_2}}, \epsilon \leq 2\sqrt{\delta M_2} \quad h^* = \sqrt[3]{\frac{3\delta}{M_3}}, \epsilon \leq \frac{1}{2}\sqrt[3]{9\delta^2 M_3} \quad h^* = \sqrt[4]{\frac{48\delta}{M_4}}, \epsilon \leq 2\sqrt{\frac{\delta M_2}{3}}$$

- (d) Derivar numéricamente la función $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}, f(x) = x^2$ en el intervalo $[0, 1]$ utilizando un paso $h = 0.25$ utilizando las expresiones de diferencia progresiva y diferencia centrada para la derivada primera, y diferencia centrada para la derivada segunda. Obtener los errores efectivos y compararlos con las cotas dadas por las estimaciones. ¿Cuál sería el paso óptimo si se admite que el error de redondeo produce tres cifras significativas? Repetir para $f(x) = x^3$.
- (e) Obtener expresiones aproximadas para las derivadas parciales hasta el segundo orden de un campo escalar f de dos variables. Idem para derivada tercera de una función escalar f .

(f) Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.

7. *Integración numérica.* Se trata de dar un valor aproximado \hat{I} al número $I = \int_a^b f(x) dx$, de modo que $I \approx \hat{I}$, obteniendo el orden de la aproximación. En este apartado se tratan cuatro aproximaciones: rectángulos, trapecios, Simpson, Montecarlo (designadas, respectivamente, con $\hat{I}_r, \hat{I}_t, \hat{I}_s, \hat{I}_m$).

(a) *Lema.* Probar el siguiente lema del valor medio generalizado para integrales: Si f, g son funciones de clase $C([a, b])$, con $g(x) \geq 0$ para todo x en el intervalo $[a, b]$, entonces existe $\xi \in [a, b]$ tal que $\int_a^b f(x) g(x) dx = f(\xi) \int_a^b g(x) dx$.

Ayuda: siendo f continua en el compacto $[a, b]$ tiene un máximo M y un mínimo m tal que $\forall x \in [a, b] : m \leq f(x) \leq M$ y como g es positiva en $[a, b]$ es $\forall x \in [a, b] : mg(x) \leq f(x)g(x) \leq Mg(x)$ y entonces también $\forall x \in [a, b] : m \int_a^b g(x) dx \leq \int_a^b f(x) g(x) dx \leq M \int_a^b g(x) dx$ y tomando en cuenta que $\int_a^b g(x) dx \geq 0$ queda muy cerca la desigualdad que se quiere probar...

(b) *Rectángulos.* Interpretar geoméricamente y probar que si $f \in C^2([-h/2, h/2])$, $h > 0$ el método de los rectángulos para una celda establece que $\int_{-h/2}^{h/2} f(x) dx \approx hf_0$, donde $f_0 = f(0)$, verifica que $\int_{-h/2}^{h/2} f(x) dx = hf_0 + \frac{h^3}{24} f''(\xi)$, $|\xi| \leq h/2$, y que para el intervalo completo $[a, b]$ con la red $x_k = a + kh, k = 0, 1, \dots, n$ siendo $h = \frac{b-a}{n}$, es

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{k=0}^{n-1} f_{k+\frac{1}{2}} + \frac{(b-a)h^2}{24} f''(\xi), \xi \in [a, b],$$

lo que prueba que $I = \hat{I}_r + \mathcal{O}(h^2)$, ya que llamando $M_2 = \max\{|f''(x)| : x \in [a, b]\}$ es $\left| \frac{(b-a)h^2}{24} f''(\xi) \right| \leq \frac{(b-a)M_2}{24} h^2$. Mostrar entonces que valen la siguientes desigualdades que dan cotas inferiores y superiores de la aproximación por rectángulos:

$$\frac{b-a}{24} m_2 h^2 \leq |I - \hat{I}_r| \leq \frac{b-a}{24} M_2 h^2, \text{ con } m_2 = \min\{|f''(x)| : x \in [a, b]\}, M_2 = \max\{|f''(x)| : x \in [a, b]\}$$

Probar que (admitiendo precisión infinita en el cálculo) para lograr una dada tolerancia τ el valor del paso h ha de ser a lo sumo $h_{\max} = 2\sqrt{\frac{6\tau}{(b-a)M_2}}$. ¿cómo debe modificarse este valor si la precisión en el cálculo es δ ?

Observación. Los resultados anteriores pueden obtenerse partiendo del desarrollo de Taylor en $x = 0$ de segundo orden con término residual en la forma de Lagrange de la función $F(x) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^x f(t) dt$ de $F_{\pm 1/2} = F(\pm h/2)$.

(c) *Trapecios.* Interpretar geoméricamente y probar que si $f \in C^2([0, h])$, $h > 0$ el método de los trapecios para una celda establece que $\int_0^h f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f_0 + f_1)$, donde $f_0 = f(0)$, $f_1 = f(h)$, y verifica que $\int_0^h f(x) dx = \frac{h}{2} (f_0 + f_1) - \frac{h^3}{12} f''(\xi)$, $\xi \in [0, h]$, y que para el intervalo completo $[a, b]$ con la red $x_k = a + kh, k = 0, 1, \dots, n$ siendo $h = \frac{b-a}{n}$, es

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} \left(f_0 + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f_k + f_n \right) - \frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi), \xi \in [a, b],$$

lo que prueba que $I = \hat{I}_t + \mathcal{O}(h^2)$, ya que llamando $M_2 = \max\{|f''(x)| : x \in [a, b]\}$ es $\left| \frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi) \right| \leq \frac{(b-a)M_2}{12} h^2$. Mostrar entonces que valen la siguientes desigualdades que dan cotas inferiores y superiores de la aproximación por rectángulos:

$$\frac{b-a}{12} m_2 h^2 \leq |I - \hat{I}_t| \leq \frac{b-a}{12} M_2 h^2, \text{ con } m_2 = \min\{|f''(x)| : x \in [a, b]\}, M_2 = \max\{|f''(x)| : x \in [a, b]\}$$

Probar que (admitiendo precisión infinita en el cálculo) para lograr una dada tolerancia τ el valor del paso h ha de ser a lo sumo $h_{\max} = 2\sqrt{\frac{3\tau}{(b-a)M_2}}$. ¿cómo debe modificarse este valor si la precisión en el cálculo es δ ?

Observación. Los resultados anteriores pueden obtenerse partiendo del desarrollo de Taylor de segundo orden en $x = 0$ con término residual en la forma integral de la función $F(x) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^x f(t) dt$ de $F_1 = F(h)$, esto es $F_1 = F_0 + hF'_0 + \frac{1}{2}hF''_0 + \frac{1}{2} \int_0^h (h-t)^2 F'''(t) dt$ y de la función f , esto es $f_1 = f_0 + hf'_0 + \int_0^h (h-t)f''(t) dt$ y luego aplicando el *Lema* del primer apartado.

- (d) *Simpson*. Interpretar geoméricamente y probar que si $f \in C^4([-h, h])$, $h > 0$ el método de Simpson para una celda establece que $\int_{-h}^h f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f_{-1} + 4f_0 + f_1)$, donde $f_0 = f(0)$, $f_{\pm 1} = f(\pm h)$, y verificar que $\int_{-h}^h f(x) dx = \frac{h}{3} (f_{-1} + 4f_0 + f_1) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$, $\xi \in [-h, h]$, y que para el intervalo completo $[a, b]$ con la red $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \dots, 2n$ siendo $h = \frac{b-a}{2n}$, es

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left(f_0 + 4 \sum_{k=1}^n f_{2k-1} + 2 \sum_{k=1}^{n-1} f_{2k} + f_{2n} \right) - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi), \xi \in [a, b],$$

lo que prueba que $I = \hat{I}_r + \mathcal{O}(h^4)$, ya que llamando $M_4 = \max\{|f^{(4)}(x)| : x \in [a, b]\}$ es $\left| \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi) \right| \leq \frac{(b-a)M_4}{180} h^2$. Mostrar entonces que valen la siguientes desigualdades que dan cotas inferiores y superiores de la aproximación por rectángulos:

$$\frac{b-a}{180} m_4 h^4 \leq |I - \hat{I}_s| \leq \frac{b-a}{180} M_4 h^4, \text{ con } m_4 = \min\{|f^{(4)}(x)| : x \in [a, b]\}, M_4 = \max\{|f^{(4)}(x)| : x \in [a, b]\}$$

Probar que (admitiendo precisión infinita en el cálculo) para lograr una dada tolerancia τ el valor del paso h ha de ser a lo sumo $h_{\max} = \sqrt[4]{\frac{180\tau}{(b-a)M_4}}$. ¿cómo debe modificarse este valor si la precisión en el cálculo es δ ?

Observación. Para obtener la expresión en una celda, basta determinar el polinomio interpolador de Lagrange $L_2(x) = f_0 + \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}x + \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{2h^2}x^2$ y las estimaciones se obtienen partiendo del desarrollo de Taylor de cuarto orden en $x = 0$ con término residual en la forma integral de la función $F(x) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^x f(t) dt$ de $F_{\pm 1} = F(\pm h)$, conjuntamente con el desarrollo de tercer orden de f . El desarrollo de F es $F_{\pm 1} = \pm h f_0 + \frac{h^2}{2} f'_0 \pm \frac{h^3}{6} f''_0 + \frac{h^4}{24} f'''_0 \pm \frac{1}{24} \int_0^h (h-t)^4 f^{(4)}(\pm t) dt$, mientras que el desarrollo de f es $f_{\pm 1} = f_0 \pm h f'_0 + \frac{h^2}{2} f''_0 \pm \frac{h^3}{6} f'''_0 + \frac{1}{6} \int_0^h (h-t)^3 f^{(4)}(\pm t) dt$, y de allí resulta la expresión $F_1 - F_{-1} = \frac{h}{3} (f_{-1} + 4f_0 + f_1) - \frac{1}{24} \int_0^h (h-t)^3 (\frac{h}{3} + t) (f^{(4)}(t) + f^{(4)}(-t)) dt$ y luego tener en cuenta que para $0 \leq t \leq h$ es $(h-t)^3 (\frac{h}{3} + t) \geq 0$ para luego aplicar el *Lema*, que permitirá extraer $\frac{f^{(4)}(\eta) + f^{(4)}(-\eta)}{2} = f^{(4)}(\xi)$, para $\eta \in [0, h]$, $\xi \in [-h, h]$ restando solamente el cálculo rutinario de $\int_0^h (h-t)^3 (\frac{h}{3} + t) dt$.

- (e) Determinar los máximos valores de h para una integración con tolerancia τ por cada uno de los métodos anteriores (rectángulos, trapecios, Simpson), considerando precisión infinita en los cálculos, e indicar cuántos decimales del resultado son significativos.

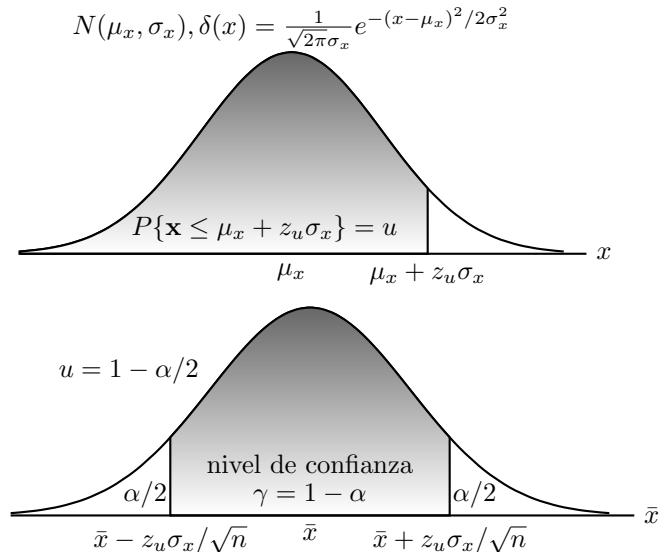
$$\int_0^4 x e^{-x} dx$$

Reconsiderar, ahora suponiendo que solamente tres cifras decimales son retenidas en los cálculos de los valores de la función.

- (f) *Montecarlo 1D*. Los contenidos básicos de probabilidad y estadística son imprescindibles para interpretar el método y estimar sus resultados; para facilitar ese repaso, se condensan a continuación los conceptos mínimos (si fuera necesario, completar con *Borovkov* (1988). Estadística matemática, Estimación de parámetros. Moscú: Mir, o también el más sencillo *Papoulis* (1990). Probability and statistics. New Jersey: Prentice Hall).

La figura muestra la distribución normal de una población con parámetros μ_x y σ_x y densidad de probabilidad δ . En tales condiciones la media muestral $\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k$ es normal $N(\mu_{\bar{x}}, \sigma_{\bar{x}})$ con $\mu_{\bar{x}} = \mu_x$ y $\sigma_{\bar{x}} = \sigma_x / \sqrt{n}$. Si una muestra de una variable aleatoria es suficientemente “grande” el teorema central del límite permite mantener que la media muestral es asintóticamente normal $N(\mu_x, \sigma_x / \sqrt{n})$.

De allí resulta que para estimar el parámetro μ_x de una distribución normal $N(\mu_x, \sigma_x)$ desde una muestra de tamaño n , en el lenguaje de la figura, puede construirse el intervalo de confianza para estimar μ_x con nivel $1 - \alpha$, determinando el percentil z_u (con el significado de la primera figura y el valor $u = 1 - \alpha/2$) resultando así dado por $\bar{x} - z_u \sigma_x / \sqrt{n}$, $\bar{x} + z_u \sigma_x / \sqrt{n}$ (se supone aquí que se conoce la varianza σ_x^2).



El objetivo es dar un intervalo de confianza de nivel $1 - \alpha$ para la integral $I = \int_a^b f(x) dx$, para lo que se debe determinar en primer lugar un estimador puntual \hat{I}_m de I . Se admite que la función es integrable de cuadrado integrable en el compacto $[a, b]$, lo que se logra justificando conceptualmente y ejecutando operativamente los siguientes pasos:

- i. Partiendo de una muestra de n números pseudoaleatorios x_1, x_2, \dots, x_n de la variable x con distribución uniforme en $[a, b]$, y entonces con densidad de probabilidad:

$$\delta(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{si } x \notin [a, b] \end{cases},$$

la variable $y = f(x)$ es también una variable aleatoria y por definición su media es

$$\mu(y) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x) dx = \int_a^b f(x) \frac{1}{b-a} dx = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) dx = \frac{I}{b-a}$$

Como, por otra parte, la media muestral de y es $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n y_k = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(x_k)$, combinando los dos resultados queda que un estimador puntual de $I/(b-a)$ es \bar{y} , o escrito de otro modo:

$$I \approx \hat{I}_m = \frac{b-a}{n} \sum_{k=1}^n f(x_k)$$

- ii. Ahora, la varianza (observando que la primera integral existe por hipótesis de ser f de cuadrado integrable), que es claramente desconocida (pues involucra el número I que se pretende estimar, además de la integral del cuadrado de f , que tampoco se conoce a priori); sin embargo, dado que la varianza interviene ampliando los extremos del intervalo de confianza, se puede estimarla por arriba, haciendo una sobrestimación de $\int_a^b f^2(x) dx$ y una subestimación (por ejemplo por 0) de la integral $\int_a^b f(x) dx$.

$$\sigma^2(y) = \mu(y^2) - \mu^2(y) = \int_a^b f^2(x) \frac{1}{b-a} dx - \left(\int_a^b f(x) \frac{1}{b-a} dx \right)^2 = \int_a^b f^2(x) \frac{1}{b-a} dx - \frac{I^2}{(b-a)^2}$$

- iii. Por los resultados anteriores deducir que el intervalo de confianza de nivel $1 - \alpha$ para I , con z_u el percentil de $u = 1 - \alpha/2$ está dado por

$$\left(\hat{I}_m - (b-a)z_u \frac{\sigma(y)}{\sqrt{n}}, \hat{I}_m + (b-a)z_u \frac{\sigma(y)}{\sqrt{n}} \right)$$

- iv. Observar que con tamaños de muestras de los órdenes que suelen usarse para las estimaciones Montecarlo, la varianza muestral $s^2(y)$ dada por

$$s^2(y) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (y_k - \bar{y})^2$$

es un estimador insesgado de la varianza poblacional $\sigma^2(y)$ y entonces se reemplaza sin mayor error en la expresión del intervalo quedando entonces:

$$\left(\hat{I}_m - (b-a)z_u \frac{s(y)}{\sqrt{n}}, \hat{I}_m + (b-a)z_u \frac{s(y)}{\sqrt{n}} \right)$$

Observación. si la muestra no es grande, habría de utilizarse la distribución de Student, reemplazando el percentil z_u por el percentil t_u para $n-1$ grados de libertad.

- v. Desarrollar las modificaciones necesarias para aplicar la misma estrategia al cálculo de integrales ν -dimensionales ($\nu = 1, 2, \dots$) adecuando las expresiones de las estimaciones.
- vi. Analizar por qué la técnica Montecarlo es más eficiente que cualquiera de las técnicas anteriores para integrales múltiples. ¿Y cómo resulta la comparación en recintos de integración unidimensionales?
- vii. Determinar una cantidad de números pseudoaleatorios que aseguren un intervalo de confianza de nivel 0.997 a la estimación \hat{I}_m de la integral $I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$ cuyo ancho no exceda de 1/100.

- viii. La integral doble de la función $f : D \rightarrow \mathbb{R}^2$, siendo $D = [-1, 1] \times [-1, 1]$ vale, evidentemente, π . Determinar una cantidad de números pseudoaleatorios que aseguren un intervalo de confianza de nivel 0.997 de amplitud 0.50 a la estimación \hat{I}_m de la integral $= \iint_D f(x, y) dx dy$.

$$f(x, y) = \begin{cases} 1 & \text{si } x^2 + y^2 \leq 1 \\ 0 & \text{si } x^2 + y^2 > 1 \end{cases}$$

- ix. Sea $f : D \subset \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ tal que $f(x, y) = \begin{cases} 3 & \text{si } x \geq |y| \\ 1 & \text{si } x < |y| \end{cases}$, siendo $D = [0, 1] \times [0, 1]$. Calcular el valor exacto de la integral $I = \iint_D f(x, y) dx dy$.

k	1	2	3	4	5
x_k	0.8	0.3	0.8	0.7	0.7
y_k	0.3	0.3	0.5	0.8	0.1

Determinar si I pertenece al intervalo de confianza de nivel 95% de la estimación Montecarlo obtenida de la muestra de $(x_k, y_k), k = 1, 2, \dots, 5$ con distribución de probabilidad uniforme en D (el percentil $t_{0.975}$ para 4 grados de libertad es $t_{0.975, 4} = 2.78$, la varianza muestral de una variable aleatoria ω es $s^2(\omega) = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^n (\omega_k - \bar{\omega})^2$).

- (g) ♣ Implementar un código que reciba $f, a, b, \text{method}, h$ y devuelva una aproximación a $\int_a^b f(x) dx$ y una estimación del error.
- (h) Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.
8. *El problema de Cauchy.* Se trata de dar una solución numérica al problema de hallar en el intervalo cerrado $I = [a, b]$ una función $x = x(t)$ tal que satisfaga el problema de valor inicial (pvi) dado por la ecuación diferencial $\dot{x} = f(x, t)$ con la condición inicial $x_0 = x(a)$ (se sabe que si f es un campo escalar de clase C^q en un compacto que cubre el gráfico de la solución, ésta existe, es única y tiene un grado más de regularidad que f ; esto es, se tratará en todo caso de un pvi bien planteado). La solución numérica se obtiene discretizando el intervalo I con $n + 1$ nodos equiespaciados $h = \frac{b-a}{n}$, resultando la red $t_k = t_0 + kh, k = 1, 2, \dots, n$ y asignando en tales puntos valores aproximados x_0, x_1, \dots, x_n , mediante algún algoritmo.
- (a) *Euler.* Se generan los valores aproximados en la red con $t_0 = a, t_k = t_0 + kh, k = 1, 2, \dots, n$ mediante $x_{k+1} = x_k + hf(x_k, t_k), k = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Interpretar geoméricamente el método, probar que, siendo f de clase C^1 en un compacto que contiene al gráfico de la solución, es localmente $\mathcal{O}(h^2)$ y globalmente $\mathcal{O}(h)$. Proponer un pvi bien planteado y mostrar la evolución de algunos pasos.
- (b) *Heun.* Se generan los valores aproximados en la red con $t_0 = a, t_k = t_0 + kh, k = 1, 2, \dots, n$ mediante una secuencia de dos pasos en cada avance:

$$\text{Heun} \quad \begin{cases} \hat{x}_{k+1} &= x_k + hf(x_k, t_k), & (\text{predictor}) \\ x_{k+1} &= x_k + \frac{h}{2}(f(x_k, t_k) + f(\hat{x}_{k+1}, t_{k+1})), & (\text{corrector}) \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Si se introduce la expresión del predictor en el término del corrector la secuencia completa queda resumida en:

$$x_{k+1} = x_k + \frac{h}{2}(f(x_k, t_k) + f(x_k + hf(x_k, t_k), t_k + h)), \quad t_0 = a, t_k = t_0 + kh, \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Interpretar geoméricamente el método, probar que, siendo f de clase C^2 en un compacto que contiene al gráfico de la solución, es localmente $\mathcal{O}(h^3)$ y globalmente $\mathcal{O}(h^2)$. Proponer un pvi bien planteado y mostrar la evolución de algunos pasos.

Observación. Para la prueba del orden local del método puede partirse del desarrollo de Taylor de la función compuesta $f(x_k + hf(x_k, t_k), t_k + h)$ considerada como función de h (esto es manteniendo x_k, t_k fijos).

- (c) *Runge Kutta de cuarto orden.* Se generan los valores aproximados en la red con $t_0 = a, t_k = t_0 + kh, k = 1, 2, \dots, n$ mediante una secuencia de cuatro pasos en cada avance

$$\begin{cases} r_1 &= hf(x_k, t_k) \\ r_2 &= hf(x_k + \frac{r_1}{2}, t_k + \frac{h}{2}) \\ r_3 &= hf(x_k + \frac{r_2}{2}, t_k + \frac{h}{2}) \\ r_4 &= hf(x_k + r_3, t_k + h) \\ x_{k+1} &= x_k + \frac{1}{6}(r_1 + 2r_3 + 2r_3 + r_4), \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Interpretar geoméricamente el método, probar que, siendo f de clase C^4 en un compacto que contiene al gráfico de la solución, es localmente $\mathcal{O}(h^5)$ y globalmente $\mathcal{O}(h^4)$. Proponer un pvi bien planteado y mostrar la evolución de algunos pasos.

- (d) *Taylor de orden N* . Se avanza desde x_k hasta x_{k+1} mediante el polinomio de Taylor de orden N en el punto (x_k, t_k) .

$$x_{k+1} = x_k + h \frac{d}{dt} x(t_k) + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2}{dt^2} x(t_k) + \cdots + \frac{h^N}{N!} \frac{d^N}{dt^N} x(t_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Indicar hipótesis para la función f y obtener la expresión recursiva que permite el cálculo de cada una de las derivadas $\frac{d^i}{dt^i} x(t_k)$, $i = 1, 2, \dots, N$. El método es de orden local $\mathcal{O}(h^{N+1})$, y un orden menor global $\mathcal{O}(h^N)$. Mostrar los dos primeros pasos para resolver $\dot{x} = f(x, t) = 2e^{-x}t$, $x(0) = 0$ con Taylor de orden 2, con $h = 1/2$.

- (e) *Derivadas parciales*. El problema de Cauchy aquí consiste en hallar un campo escalar $u(x, t)$ de clase C^2 en el recinto $-\infty < x < \infty$, $0 \leq t \leq T$ que satisfaga la ecuación diferencial $\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} + a \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} = 0$ con la condición inicial $u(x, 0) = g(x)$, siendo a, T constantes positivas, g una función escalar acotada de clase $C^2(\mathbb{R})$. La red de discretización se efectúa con paso $h > 0$ relativo a x , paso $\tau = T/m$ (con $m \in \mathbb{N}$) relativo a t , siendo $x_k = kh$, $t_j = j\tau$ es ahora $\omega = \{(x_k, t_j) : k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; j = 0, 1, \dots, m\}$. Llamando $u_{k,j} = u(x_k, t_j)$ y planteando el esquema de diferencias con $u_t(x_k, t_j) \approx \frac{u_{k,j+1} - u_{k,j}}{\tau}$, $u_x(x_k, t_j) \approx \frac{u_{k,j} - u_{k-1,j}}{h}$, obtener la solución numérica dada por:

$$u_{k,j+1} = (1 - r)u_{k,j} + ru_{k-1,j}, \quad \text{siendo } r \stackrel{\text{def}}{=} a \frac{\tau}{h} \quad \text{que, por estabilidad, debe ser } r < 1$$

Explicar cómo se utiliza la expresión anterior y resolver algunos nodos de la primera capa ($j = 1$) del problema para $T = 4$, $a = 2$, $g(x) = x$.

- (f) ♣ Implementar un código que reciba $f, a, b, x_0, \text{method}, h$ (si el método es Taylor, debe recibir también N) y devuelva una aproximación a la solución al problema de hallar en el intervalo cerrado $I = [a, b]$ una función $x = x(t)$ tal que satisfaga el problema de valor inicial (pvi) dado por la ecuación diferencial $\dot{x} = f(x, t)$ con la condición inicial $x_0 = x(a)$.
- (g) Para cada ítem, formularle a la AI una pregunta y analizar la respuesta recibida.