

INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL

UNIDAD PROFESIONAL INTERDISCIPLINARIA DE BIOTECNOLOGÍA

ACADEMIA DE MATEMÁTICAS APLICADAS

MANUAL DE PRÁCTICAS DEL TALLER DE MÉTODOS NUMÉRICOS

ELABORARON:

I.F. RAMÓN FLORES RODRÍGUEZ

ING. ABELARDO POLICARPO CARLOS

10 DE NOVIEMBRE DE 2016

ÍNDICE

INTRODUCCION.....	3
PRÁCTICAS	
1. Análisis y cálculo del error en métodos numéricos.....	4
2. Mediciones del error en aproximaciones de funciones con la serie de Taylor.....	9
3. Búsqueda de raíces por el método gráfico.....	15
4. Búsqueda de raíces con el método de bisección.....	21
5. Búsqueda de raíces por el método de punto fijo.....	27
6. Búsqueda de raíces por el método de Newton-Raphson.....	31
7. Operaciones de matrices y vectores.....	38
8. Solución de ecuaciones lineales por el método de Gauss-Jordan.....	49
9. Regresión polinomial por cuadrados mínimos.....	61
10. Regresión multilínea por cuadrados mínimos.....	83
11. Interpolación de Lagrange.....	97
12. Diferenciación numérica.....	117
13. Integración numérica.....	139
14. Ecuaciones diferenciales.....	154
Anexos	
I PROBLEMARIOS TIPO	
Problemario uno.....	167
Problemario dos.....	169
Problemario tres.....	171
II EJEMPLOS DE EXAMENES	
1er. Parcial.....	173
2o. Parcial.....	174
3o. Parcial.....	175
Extraordinario.....	176
ETS.....	177
III BIBLIOGRAFÍA.....	178

INTRODUCCIÓN

El presente manual de prácticas, está dirigido a los profesores y alumnos de taller de métodos numéricos, contiene un desarrollo teórico y metodológico de cada método numérico utilizado en las prácticas, el cual es necesario para abordar los temas y resolver los problemas propuestos de cada una de las prácticas que marca el programa de la asignatura. Este manual cubre el 100% de las 14 prácticas del programa de estudio para las 5 carreras (Ingeniería en Alimentos, Ingeniería Ambiental, Ingeniería Biomédica, Ingeniería Biotecnológica e Ingeniería Farmacéutica) impartidas en la UPIBI.

La utilización del presente manual, pretende estandarizar y homogenizar la impartición de la asignatura, de cada uno de los profesores integrantes de la academia de matemáticas aplicadas, para cada una de las prácticas, haciendo énfasis en el marco teórico y la forma de abordar cada tema correspondiente al curso, esto sirve de base para la elaboración y aplicación de los instrumentos de evaluación (exámenes correspondientes a cada parcial, extraordinario y ETS).

Cabe resaltar que la utilización de los métodos numéricos, requiere de la utilización de un lenguaje de programación de alto nivel y de un software enfocado para desarrollar la implementación de los algoritmos matemáticos, los cuales se emplean para resolver problemas de aplicación de ingeniería, ya que frecuentemente nos enfrentamos a problemas cuya solución exacta no es posible o es muy difícil de obtener. Afortunadamente existen métodos numéricos, los cuales proporcionan al ingeniero una solución aproximada, es decir los métodos numéricos nos sirven para resolver problemas aproximando su solución tanto como se quiera a un valor que se obtendría utilizando una solución analítica.

El manual empieza por definir los tipos de errores, para después pasar al desarrollo de los algoritmos. Muchas de las operaciones matemáticas se llevan a cabo a través de la generación de una serie de números (valores iniciales) que a su vez alimentan de nuevo el algoritmo. Esto proporciona elementos suficientes para el siguiente ciclo, para a su vez llegar a la solución pedida. El problema se tiene en determinar el criterio de pare del ciclo o determinar si se está alejando de la solución del problema.

El manual pretende la implementación de métodos numéricos básicos utilizando un lenguaje de programación de alto nivel, pero también se puede utilizar una hoja de cálculo. Los temas están orientados para estudiantes con una base sólida de programación y desarrollo de algoritmos. Usar la hoja electrónica puede ser ventajoso, ya que permite no utilizar elementos de programación, lo cual no siempre es bueno y deseable. Sin embargo las hojas electrónicas tienen sus limitaciones, y en algún momento se tendría que utilizar un software adecuado para el lenguaje simbólico.

PRÁCTICA No. 1

ANÁLISIS Y CÁLCULO DEL ERROR EN MÉTODOS NUMÉRICOS

OBJETIVOS:

El alumno calculará los diferentes tipos de error e identificará su efecto al realizar operaciones numéricas.

INTRODUCCIÓN TEÓRICA

1.1 Análisis e importancia del error.

En el campo de la ingeniería existen infinidad de fenómenos que requieren representarse mediante modelos matemáticos, desafortunadamente la mayoría de estos modelos no tiene una solución exacta o no es fácil hallarla. Los métodos numéricos proporcionan una solución aproximada al problema original. Un método numérico es aquel que obtiene números que se aproximan a los que se obtendrían aplicando la solución analítica de un problema.

En la práctica de la ingeniería y de las ciencias, se maneja una solución aproximada a un problema por las siguientes razones:

- Los modelos matemáticos son aproximados (simplificaciones al problema real).
- No se toman en cuenta todos los factores que afectan a un fenómeno.
- Los modelos matemáticos requieren de parámetros, los cuales la mayoría de las veces provienen de mediciones experimentales y estas, solo tienen una precisión limitada, que depende del instrumento de medición.
- Los parámetros, también pueden provenir de cálculos y estos tienen una precisión limitada que depende tanto del método como del instrumento de cálculo que se utilicen.
- Los modelos matemáticos resultantes son imposibles de resolver por métodos analíticos y se debe de aproximar la solución numéricamente.

Una definición de análisis numérico podría ser “el estudio de los errores en los cálculos”; Error no quiere decir un disparate, equivocación u omisión, sino una discrepancia entre el valor exacto y el calculado, que es consecuencia de la manera con que se manejan los números o fórmulas. Otra definición de análisis numérico podría ser el diseño, uso y análisis de algoritmos, los cuales son conjuntos de instrucciones cuyo fin es calcular o aproximar alguna cantidad o función.

Los métodos numéricos son herramientas para la solución de problemas y se constituyen por técnicas mediante las cuales es posible formular problemas matemáticos de tal forma que puedan resolverse usando operaciones aritméticas. Pueden manejar sistemas de ecuaciones grandes, no linealidades y geometrías complicadas, que son comunes en la ingeniería. También es posible que se utilice algún software disponible que contenga los métodos numéricos, pero el uso inteligente de estos programas depende del conocimiento de la teoría básica de estos métodos.

1.1.1 Definiciones de error

Existen diferentes formas de especificar un error, por principio es una diferencia entre el valor real y un valor aproximado, si esa diferencia es cero no existe error, pero esa diferencia podría ser positiva o negativa, por lo que es necesario tomar el valor absoluto de esa diferencia y se dice que el error es absoluto; Otra forma de definir al error es como una proporción del valor verdadero. Por otra parte los

errores se producen en diversas situaciones, como son las mediciones, el manejo de datos experimentales y al realizar cálculos.

En los métodos numéricos se obtiene un valor aproximado P^* al valor real de la solución P , sin embargo P es desconocido y es el objeto del uso de los métodos numéricos, por lo que se calculan estimaciones del error particulares a cada método numérico.

La mayoría de los métodos numéricos son iterativos, es decir que se repiten de manera sucesiva, en una serie de pasos, de acuerdo a una fórmula o ecuación de recurrencia y en cada iteración se obtienen valores P^* que se espera sean cada vez más cercanos al valor real P , es decir el error estimado va disminuyendo; Pero también se pueden dar casos en que las aproximaciones sucesivas resulten en errores cada vez más grandes, lo cual se puede explicar con los conceptos de convergencia y estabilidad.

Sean k estimaciones sucesivas de P : $P_1^*, P_2^*, P_3^*, P_4^*, P_5^*, P_6^*, P_7^*, \dots, P_k^*$

Un método de aproximaciones sucesivas converge, si la diferencia en valor absoluto de las aproximaciones sucesivas P^* , es cada vez menor a la diferencia anterior, esto es:

$$|P_1^* - P_2^*| > |P_2^* - P_3^*| > |P_3^* - P_4^*| > |P_4^* - P_5^*| > |P_5^* - P_6^*| > |P_6^* - P_7^*| > \dots > |P_i^* - P_{i+1}^*|$$

$|P_i^* - P_{i+1}^*|$ es una estimación del error absoluto, tomando a P_{i+1}^* como una mejor aproximación (en cuyo caso se dice que el método converge). Así se puede obtener una aproximación P_i^* con un error menor a una tolerancia dada ξ :

$$|P_i^* - P_{i+1}^*| \leq \xi$$

Esta expresión es útil como criterio de paro de los métodos numéricos con iteraciones sucesivas.

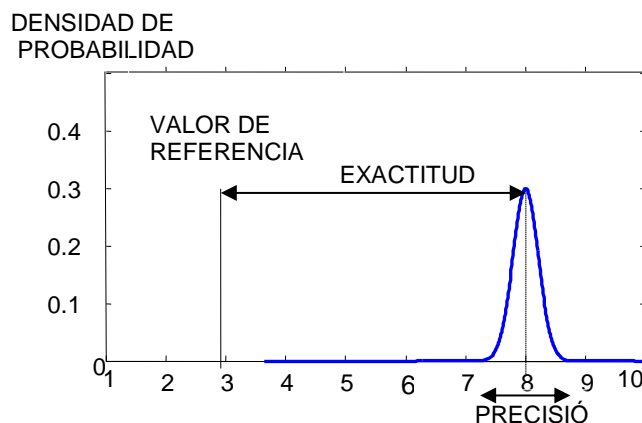
1.1.2 Cifras Significativas

El concepto de cifras significativas se ha desarrollado para designar la confiabilidad de un valor numérico. El número de cifras significativas es el número de dígitos que se puede usar con plena confianza. Por ejemplo podemos calcular un número irracional con varias cifras, pero no expresar todas de ellas y sobre todo las últimas.

Por otro lado, los ceros no siempre son cifras significativas ya que pueden usarse solo para ubicar al punto decimal. Por ejemplo los siguientes números tienen todos 4 cifras significativas: 0.00001985, 0.0001985, 0.001985, 1985, 19.85. Para asegurar que un cero represente una cifra significativa, es común emplear la notación científica. Por ejemplo los siguientes números tienen 3, 4 y 5 cifras significativas: 4.53×10^{-5} , 4.530×10^{-5} y 4.5300×10^{-5} . También se suele poner explícitamente los ceros. Los siguientes números tienen 5 cifras significativas: 19850, 0.019850, 19.850.

1.1.3 Exactitud y precisión.

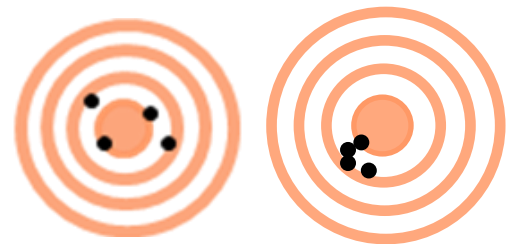
Los errores asociados con los cálculos y mediciones se pueden caracterizar observando su precisión y exactitud. Precisión se refiere a la dispersión del conjunto de valores obtenidos de mediciones repetidas de una magnitud. Cuanto menor es la dispersión mayor la precisión. La exactitud se refiere al grado de aproximación que se tiene de un número o de una medida al valor verdadero que se supone representa, es decir, que tan cerca estamos del valor buscado.



En ingeniería, ciencia, industria y estadística, **exactitud** y **precisión** no son equivalentes. La exactitud de los resultados indica la proximidad de la medición con respecto al valor verdadero, mientras que la precisión se asocia con la repetibilidad o reproductibilidad de la medida.

Ejemplos de precisión y exactitud

Representando varias medidas como disparos hacia un objetivo en una diana, la exactitud describe la proximidad de los disparos al centro de la diana (objetivo), por lo que los disparos que impactan más cerca del centro se consideran más exactos. Cuanto más cerca están las medidas al valor verdadero, más exacto es un sistema. La precisión en este ejemplo, es el tamaño del grupo de disparos, cuanto más cercanos están entre sí los disparos, más preciso será el sistema. La precisión es el grado de repetitividad del resultado. Se podría resumir que exactitud es el grado de veracidad, mientras que precisión es el grado de reproductibilidad.



Alta exactitud y
baja precisión

Alta precisión y
baja exactitud

Un reloj analógico de manecillas, desplaza su minuterero "sólo de minuto en minuto", pero lo hace en absoluta sincronía con el horario oficial o "real" (que es el objetivo). Un segundo reloj utiliza minuterero, segundero, incluso está dotado de un sistema de medición de décimas de segundo, si observamos que su horario no coincide plenamente con el horario oficial o real (que sigue siendo el objetivo de todo reloj), concluiremos que el primer reloj es altamente exacto, aunque no sea preciso, mientras que el segundo, es altamente preciso, aunque no se muestra exacto...al menos en nuestro ejemplo.

1.2 Tipos de error en los cálculos numéricos

Los datos de entrada pueden tener errores inherentes cuando se obtienen con mediciones y experimentalmente, por lo que se atribuyen tanto al instrumento de medición como a las condiciones en que se realiza el experimento. Además al realizar cálculos con estos datos es importante la exactitud, hay dos formas de obtener el tamaño del error de un resultado calculado: El error real y el error relativo

1.2.1 Error real.

Se calcula como la diferencia entre el valor real y un valor aproximado (calculado)

Si P^* (estimación) es una estimación de P (valor verdadero), el error real se calcula: $E_r = P^* - P$

Sin embargo para facilitar el manejo y análisis se emplea el error absoluto : $E_{Abs} = |P^* - P|$

Esta forma de calcular el tamaño del error, depende de la escala de medición, aunque suele ser grave cuando la magnitud del valor verdadero es "muy pequeño".

1.2.2 Error relativo

Si P^* (estimación) es una aproximación a P (valor verdadero), el error relativo se calcula como: $E_R = (P^* - P)/P$; con $P \neq 0$

Porcentaje de error $\%E_R = E_R * 100$

El error relativo es independiente de la escala de medición, al dividirse entre el valor verdadero pero cuando el valor verdadero es cero, el error relativo queda indefinido. El porcentaje del error se obtiene multiplicando el error relativo por cien.

1.2.3 Errores de redondeo

Los errores de redondeo se originan al realizar los cálculos que todo método numérico o analítico requieren y son debidos a la imposibilidad de tomar todas las cifras que resultan de operaciones aritméticas como los productos y los cocientes, teniendo que retener en cada operación el número de cifras que permita el instrumento de cálculo que se esté utilizando. Por ejemplo al calcular el valor de $1/3$, tenemos que quedarnos con la mayor cantidad de cifras posibles que maneje nuestro instrumento de cálculo.

1.2.4 Errores de truncamiento

Los errores de truncamiento se originan por el hecho de aproximar la solución analítica de un problema, por medio de un método numérico. Por ejemplo al evaluar la función exponencial por de la serie de Taylor, se tiene que calcular el $e^x = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots = \sum_{n=0}^{x=n} \frac{x^n}{n!}$ medio valor de la siguiente serie infinita:

Ante la imposibilidad de tomar todos los términos de la serie, se requiere truncar después de cierto número de términos. Esto nos introduce ciertamente un error, que es el error de truncamiento, este es independiente de la manera de realizar los cálculos, sólo depende del método numérico empleado.

Otra forma de referirse al error de truncamiento es cuando no se toman todas las cifras de un número y sólo se toma una parte y se ignora el resto, por ejemplo el número 7.4562314, al truncarlo con tres decimales quedaría como 7.456 (que en este caso coincide con el error de redondeo)

DESARROLLO:

1.- Indica que tipo de error es y porque pertenece a esa clasificación:

Expresión	Tipo de error	Descripción
$\pi = 3.1416$		
$\pi = 3.1415$		
$\frac{2}{3} = 0.66666666$		
$\frac{2}{3} = 0.6666667$		

2.- Tomar los valores de $a=1345.61$, $b=0.00052$ y $c=-0.00049$ y usando sólo cuatro cifras decimales para expresar el resultado final, calcula los distintos tipos de error al ejecutar las operaciones que se indican:

Operaciones	Valor correcto	Valor fix4	Error absoluto	Error relativo	% de error
$a + b$					
$b \cdot c$					
b/c					
$\frac{a-b}{\frac{c}{a}}$					

3.- Partiendo de la forma de aproximar el error en métodos de iteraciones sucesivas, establece una forma de calcular el error relativo aproximado.

4.- Si se mide la altura de una mesa y se reporta 0.95 metros cuando la medida real es de 0.91 metros, también se mide un puente peatonal y se reporta de 52.56 metros pero la medida real es de 54.56 metros. Calcula los errores absoluto y relativo para cada caso, compáralos y contesta cual forma de medir el error es más adecuada y porque.

5.- Explica porque los números en la computadora no pueden ser tan pequeños como se desee.

6.- Da un ejemplo del error de redondeo en una suma de números de diferente magnitud.

7.- Explica brevemente y da un ejemplo de la propagación de errores bajo el producto.

PRÁCTICA No. 2

MEDICIONES DEL ERROR EN APROXIMACIONES DE FUNCIONES CON LA SERIE DE TAYLOR

OBJETIVOS:

El alumno empleará el polinomio de Taylor para aproximar el valor de una función y medir las diferentes formas de error.

INTRODUCCIÓN

1.3 APLICACIONES DEL CÁLCULO DEL ERROR

El polinomio de Taylor $P(x)$ permite calcular una aproximación al valor de una función $f(x)$, desde un valor cercano a x , que llamaremos x_0 , mientras más cercano sea el valor de x_0 a x , será menor el error porque la aproximación de $P(x_0)$ a $f(x)$ será mejor. En esta sección se empleará el polinomio de Taylor para determinar una aproximación de $f(x)$, aunque también se podrá determinar el valor de $f(x)$, a fin de aplicar los cálculos de las diferentes formas el error.

1.3.1 SERIE DE TAYLOR

Si $f(x)$ es una función analítica, con un infinito número de derivadas, en el punto x_0 , entonces se puede proponer la siguiente expresión

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n = a_0 + a_1(x - x_0)^1 + a_2(x - x_0)^2 + a_3(x - x_0)^3 + \dots$$

Conocida como serie polinomial, la cual indica que la función $f(x)$ se puede escribir mediante un polinomio de grado infinito. Para determinar el valor de los respectivos coeficientes a_n de la serie se puede proceder de la siguiente manera:

Para $n=0$, evaluando la función $f(x)$ en $x = x_0$

$$f(x_0) = a_0(x_0 - x_0)^0$$

$$f(x_0) = a_0 \quad \text{Por lo tanto} \quad a_0 = f(x_0)$$

Para $n=1$, Derivando primero la función $f(x)$ respecto de x , y aplicando la propiedades lineales de la derivada

$$f'(x_0) = \frac{d}{dx} [a_0 + a_1(x - x_0)^1 + a_2(x - x_0)^2 + a_3(x - x_0)^3 + \dots]$$

$$f'(x_0) = \left[\frac{d}{dx}(a_0) + \frac{d}{dx}(a_1(x - x_0)^1) + \frac{d}{dx}(a_2(x - x_0)^2) + \frac{d}{dx}(a_3(x - x_0)^3) + \dots \right]$$

$$f'(x_0) = 0 + a_1 + 2a_2(x - x_0)^1 + 3a_3(x - x_0)^2 + 4a_4(x - x_0)^3 + \dots$$

Evaluando la derivada $f'(x)$ en $x = x_0$

$$f'(x_0) = a_1 + 2a_2(0)^1 + 3a_3(0)^2 + 4a_4(0)^3 + \dots$$

$$f'(x_0) = a_1 \quad \text{por lo tanto} \quad a_1 = f'(x_0)$$

Para $n=2$, obteniendo la segunda derivada de la función $f(x)$ respecto de x , y aplicando la propiedades lineales de la derivada

$$f''(x_0) = \frac{d}{dx}(f'(x)) = \frac{d}{dx}[a_1 + 2a_2(x-x_0)^1 + 3a_3(x-x_0)^2 + 4a_4(x-x_0)^3 + \dots]$$

$$f''(x_0) = 2a_2 + (2)(3)a_3(x-x_0)^1 + (3)(4)a_4(x-x_0)^2 + (4)(5)a_5(x-x_0)^3 + \dots$$

Evaluando la segunda derivada $f''(x)$ en $x = x_0$

$$f''(x_0) = 2a_2 + (2)(3)a_3(x_0-x_0)^1 + (3)(4)a_4(x_0-x_0)^2 + (4)(5)a_5(x_0-x_0)^3 + \dots$$

$$f''(x_0) = 2a_2 + (2)(3)a_3(0)^1 + (3)(4)a_4(0)^2 + (4)(5)a_5(0)^3 + \dots$$

$$f''(x_0) = 2a_2 \quad \text{por lo tanto} \quad a_2 = \frac{1}{2}f''(x_0)$$

El proceso se repite para obtener cada uno de los coeficientes a_n , el resultado general es

$$a_n = \frac{1}{n!}f^{(n)}(x_0), \text{ entonces la fórmula general para la serie es: } f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

Puesto que el coeficiente se divide entre $n!$, la relevancia de los términos va disminuyendo rápidamente, además, no es posible considerar una suma infinita, solo se podrá considerar n términos, por lo que la serie se divide en dos partes $f(x) = P(x) + R(x)$

$$\text{Donde: } P(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n$$

$$R(x) = \dots + \frac{f^{(n+1)}(x_0)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} + \frac{f^{(n+2)}(x_0)}{(n+2)!}(x-x_0)^{n+2} + \dots$$

Así, si una función es continua y diferenciable dentro del intervalo de interés, puede ser escrita como una serie de potencias+ finita, o serie de Taylor, que se utiliza para transformar funciones ya conocidas y diferenciables a unas de más fácil manejo.

Existen ciertas observaciones que deben conocerse al aplicar esta fórmula, por ejemplo, para tener una mejor aproximación de la función a un intervalo $[a, b]$, el valor de x_0 debe elegirse lo más cercano posible al centro de dicho intervalo. De esta manera se minimiza la contribución máxima del término $(x-x_0)^{n+1}$ del residuo en el cálculo de $R(x)$ entre $a < x < b$. $P(x)$ es un polinomio de orden n llamado polinomio de Taylor, y $R(x)$ es el residuo. Como los coeficientes del polinomio dependen de $1/n!$, la parte importante del desarrollo en serie se encuentra en $P(x)$. Mientras que el valor del término $R(x)$ puede aproximarse a:

$$R(x) = \frac{f^{(n+1)}(E)}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1} \quad \text{para algún valor } E, \text{ tal que } x_0 < E < x,$$

El valor de $R(x)$ permite determinar cuántos términos se requieren para lograr una estimación “razonable” de $f(x)$, según una tolerancia especificada. Aunque el valor de E no se conoce con exactitud, pues sólo se sabe que está entre x_0 y x . Por otra parte se requiere que se pueda obtener la $(n+1)$ -ésima derivada de $f(x)$.

1.3.2 MEDICIONES DEL ERROR EN APROXIMACIONES DE FUNCIONES CON LA SERIE DE TAYLOR

El término $R(x) = \frac{f^{(n+1)}(E)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1}$ se relaciona con el error al buscar un valor de E que maximice el

valor absoluto de $R(x)$: $Error = \max \left| \frac{f^{(n+1)}(E)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1} \right|$, para algún valor $E \in [x, x_0]$

DESARROLLO

EJEMPLO 1: Obtener

- La serie de Taylor de la función exponencial $f(x)=e^x$ alrededor del punto $x_0 = 0$.
- Los polinomios de grado 2, 3 y 4 para aproximar la función exponencial
- Estima el valor de la función exponencial con los polinomios de Taylor de grado 2, 3 y 4 en el valor $x = 1$
- Calcula el error relativo verdadero de cada estimación con los polinomios del inciso (b).
- Determine el error máximo esperado para cada aproximación de los polinomios de orden 2, 3 y 4 a la función exponencial.

SOLUCIÓN

(a) La fórmula del desarrollo de Taylor es $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$

Es necesario calcular primero las n derivadas $f^{(n)}(x)$, para $n=1, 2, \dots$, y evaluarla en $x_0=0$ así pues,

$$n=0 \quad e^x \quad f^{(0)}(x_0) = f^{(0)}(0) = e^0 = 1$$

$$n=1 \quad \frac{d}{dx}(e^x) = e^x \quad f^{(1)}(x_0) = f^{(1)}(0) = e^0 = 1$$

$$n=2 \quad \frac{d^2}{dx^2}(e^x) = e^x \quad f^{(2)}(x_0) = f^{(2)}(0) = e^0 = 1$$

$$n=3 \quad \frac{d^3}{dx^3}(e^x) = e^x \quad f^{(3)}(x_0) = f^{(3)}(0) = e^0 = 1$$

$$\dots \quad \dots \quad \dots$$

$$n \quad \frac{d^n}{dx^n}(e^x) = e^x \quad f^{(n)}(x_0) = f^{(n)}(0) = e^0 = 1$$

Sustituyendo en la serie general con $x_0 = 0$:

$$e^x \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (x - 0)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}$$

Por lo tanto: $e^x \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \dots$

Como se puede observar a partir de los resultados previos, se puede obtener un resultado general para un valor de n .

b) Los polinomios de aproximación de grado 2, 3 y 4 a la función exponencial son:

Para $n = 2$ (Polinomio de segundo grado) $P_2(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!}$

Para $n = 3$ (Polinomio de tercer grado) $P_3(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!}$

Para $n = 4$ (Polinomio de cuarto grado) $P_4(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!}$

(c) Para estimar el valor de la función exponencial, se evaluarán los polinomios de Taylor de grado 2, 3 y 4 en el valor $x = 1$

Para $n = 2$ (Polinomio de segundo grado) $P_2(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + 1 + \frac{1^2}{2!} = 2.5$

Para $n = 3$ (Polinomio de tercer grado) $P_3(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + 1 + \frac{1^2}{2!} + \frac{1^3}{3!} = 2.6667$

Para $n = 4$ (Polinomio de cuarto grado) $P_4(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + 1 + \frac{1^2}{2!} + \frac{1^3}{3!} + \frac{1^4}{4!} = 2.7083$

(d) Para calcular el error relativo verdadero de cada estimación con los polinomios del inciso anterior, se parte del valor verdadero de $e^1 = 2.7183$ y se aplica la fórmula del error relativo: $E_R = (P^* - P)/P$ que se reporta en la siguiente tabla:

N	Estimación (P)	Error relativo	Error máximo esperado
2	2.5000	$E_R = \left \frac{2.5000 - 2.7183}{2.7183} \right = 0.0803$	$Error = \left \frac{e^{0.5}}{3!} (1)^3 \right = 0.2747$
3	2.6667	$E_R = \left \frac{2.6667 - 2.7183}{2.7183} \right = 0.0190$	$Error = \left \frac{e^{0.5}}{4!} (1)^4 \right = 0.0687$

4	2.7083	$E_R = \left \frac{2.7083 - 2.7183}{2.7183} \right = 0.0037$	$Error = \left \frac{e^{0.5}}{4!} (1)^5 \right = 0.0137$
---	--------	--	--

(e) De acuerdo al resultado previo, en el cual para el intervalo $[0, x]$ será máximo para $E=x>0$, tomando $E = 0.5$, sabiendo que $f^{(n+1)}(x) = e^x$ y aplicando la fórmula de $R(x)$

$$ERROR = \max \left| \frac{f^{(n+1)}(E)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1} \right| = \max \left| \frac{e^x}{(n+1)!} 1^{n+1} \right| = \left| \frac{e^E}{(n+1)!} \right|, \text{ para algún } E \in [x, x_0]$$

Los resultados son reportados en la tabla anterior.

EJEMPLO 2

- (a) Halle el polinomio de Taylor para la función: $f(x)=\ln x$, en $x=1$, con $n=4$
- (b) Calcule el valor de $\ln(2)$ con el polinomio de aproximación de cuarto orden ($n=4$)
- (c) Estime el error porcentual aproximado de la aproximación del inciso anterior

SOLUCIÓN

(a) La fórmula del desarrollo de Taylor es $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$
para $n=0 \rightarrow f(x)=\ln(x) \rightarrow f(x_0)=\ln(1)=0$

$$\text{para } n=1 \rightarrow f'(x) = \frac{1}{x} \rightarrow f'(x_0) = \frac{1}{1} = 1$$

$$\text{para } n=2 \rightarrow f''(x) = -\frac{1}{x^2} \rightarrow f''(x_0) = -\frac{1}{(1)^2} = -1$$

$$\text{para } n=3 \rightarrow f'''(x) = \frac{2}{x^3} \rightarrow f'''(x_0) = \frac{2}{(1)^3} = 2$$

$$\text{para } n=4 \rightarrow f^{IV}(x) = -\frac{(3)(2)}{x^4} \rightarrow f^{IV}(x_0) = -\frac{3!}{(1)^4} = -6$$

Sustituyendo en la fórmula del polinomio de Taylor, con $n=4$:

$$P(x) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n = 0 + \frac{1}{1!} (x-1) - \frac{1}{2!} (x-1)^2 + \frac{2}{3!} (x-1)^3 - \frac{6}{4!} (x-1)^4$$

$$P(x) = (x-1) - \frac{1}{2} (x-1)^2 + \frac{1}{3} (x-1)^3 - \frac{1}{4} (x-1)^4$$

Este resultado se puede generalizar para $n>0$, observando que

$$n \rightarrow f^{(n)}(1) = (-1)^{n+1} \frac{(n-1)!}{1^n} \rightarrow (-1)^{n+1} (n-1)!$$

sustituyendo en la fórmula general

$$\ln(x) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x-x_0)^n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} (n-1)!}{n!} (x-1)^n = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} (x-1)^n$$

Por lo tanto: $\ln(x) \approx \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} (x-1)^n$

(b) evaluando en el polinomio de Taylor con $n=4$ y $x=2$

$$\ln(x) \cong (x-1) - \frac{1}{2}(x-1)^2 + \frac{1}{3}(x-1)^3 - \frac{1}{4}(x-1)^4$$

$$\ln(2) \cong (2-1) - \frac{1}{2}(2-1)^2 + \frac{1}{3}(2-1)^3 - \frac{1}{4}(2-1)^4 = 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} = \frac{7}{12} = 0.58333$$

(c) El residuo para este caso con $n+1=5$ es: $\left| \frac{f^{(n+1)}(E)}{(n+1)!} (x-x_0)^{n+1} \right|$, donde $E \in [1, 2]$,

para el cálculo del error se busca el valor de E , para este caso particular $E=1.5$,

$$R(x) = \left| \frac{f^{(n+1)}(E)}{(n+1)!} (x-x_0)^{n+1} \right| = \left| \frac{(-1)^{4+2} \left(\frac{1}{1.5} \right)^{4+1}}{(4+1)!} (1)^{4+1} \right| = \left| \frac{1}{1.5^5 * 5} \right| = 0.02634,$$

El error porcentual aproximado $e_{\%} = \left| \frac{0.02634}{0.58333} \right| * 100 = 45.15 \%$

DESARROLLO:

- Obtenga la gráfica de la función e^x y de los valores de las aproximaciones con los polinomios de Taylor de orden 2, 3 y 4. Escriba sus comentarios sobre el proceso de aproximación.
- Con la serie de Taylor de la función exponencial alrededor del punto $x_0=0$, calcular una aproximación con un polinomio de grado 5 para aproximar la función exponencial en $x=1$
- Calcula el error relativo verdadero de la estimación del inciso b)
- Calcula el error relativo aproximado de la estimación del inciso b)
- ¿Porqué los valores obtenidos en c) y d) son diferentes y cómo se puede disminuir esa diferencia?

Determine un polinomio de Taylor de tercer orden para la función $f(x) = e^x \cos x$ entorno al punto $x_0 = 0$

- Use el polinomio de tercer orden para aproximar $f(0.5)$.
- Calcula el error verdadero porcentual y el error aproximado porcentual
- Muestra la gráfica de la función en el intervalo $[0, 2]$ y de la aproximación

7.- Determina el polinomio de Taylor de tercer orden para la función $f(x) = (x-1) \ln x$ respecto al punto $x_0 = 1$

- Usa el polinomio de tercer orden para aproximar el valor de la función en $X=0.5$
- Calcula el error relativo verdadero.
- Calcula el error relativo aproximado y analiza el resultado.

PRÁCTICA No. 3

BÚSQUEDA DE RAÍCES POR EL MÉTODO GRÁFICO

OBJETIVOS:

Reconocer de manera gráfica la solución de ecuaciones no lineales de una variable.

Obtener la gráfica de una función mostrando sus raíces en un intervalo (a, b).

INTRODUCCIÓN

2.1 Método grafico de búsqueda de raíces.

La gráfica de una función $f(x)$ es una curva en el plano xy , las raíces corresponden a los valores de x que cumplen con $f(x)=0$, gráficamente son las intersecciones con el eje de las abscisas. Por lo tanto, para obtener la raíz de una función se debe proceder a obtener la respectiva gráfica en un intervalo (a, b), que contenga una raíz de $f(x)$ y a partir de la observación de la gráfica y utilizando herramientas de MATLAB, aproximarse al valor más adecuado de la raíz.

2.1.1 Gráfica de funciones.

Las gráficas de dos dimensiones en Matlab, se hacen por el método tabular, se debe declarar un vector con los datos de x y otro con los valores de y , teniendo cuidado de que la dimensión de los vectores sea la misma, pues se están graficando pares de puntos (x, y). A continuación se ofrece un resumen de los principales comandos para hacer graficas en MATLAB.

Comando	Descripción	Salida
<code>x= -3:0.01:3;</code>	Crea un vector llamado x con valores reales con variación de una centésima. El vector se llena con valores desde -4.0 hasta 4.0 con distancias 0.01	x -3 -2.9 -2.8 ...0...2.8 2.9 3
<code>y=x.*tan(1/x)</code>	Genera el vector con los valores de $f(x)=x \tan(1/x)$, evaluados en cada valor de x	1.0390 1.0393 1.0396... ... 1.0393 1.0390 1.0388
<code>plot(x,y)</code>	Realiza la gráfica respecto a los valores contenidos en (x, y).	Dibuja la gráfica con los datos (x, y) por el método tabular
<code>plot(x,y,'-r')</code>	Realiza la gráfica respecto a los valores contenidos en (x,y), con una línea punteada en color rojo (r red)	Dibuja la gráfica en la ventana de gráficos a partir de los valores (x,y).
Grid	Dibuja las líneas entre cada punto de la escala de la gráfica (rejilla)	Cuadricula la grafica
Title	Title ('función de prueba')	Aparece como título de la gráfica: "función de prueba"
hold on	Permite continuar dibujando en la gráfica, comúnmente llamado encimar sobre la misma grafica	Activa el poder transponer datos a la gráfica ya existente.
hold off	Desactiva el comando hold on	Desactiva el poder transponer datos a la gráfica existente.
<code>xlabel('texto')</code>	Coloca una etiqueta o mensaje sobre el eje x de la gráfica actual. Por ejemplo: <code>xlabel('Valores en x')</code>	Despliega "valores en x " sobre el eje x de la gráfica.
<code>ylabel('texto')</code>	Coloca una etiqueta o mensaje sobre el eje y de la gráfica actual. Por ejemplo: <code>ylabel('Valores en y')</code>	Despliega "valores en y " sobre el eje y de la grafica
<code>gtext('texto')</code>	<code>gtext('texto')</code> Coloca un texto donde se indique con el ratón	Despliega el texto en el punto seleccionado con el ratón.
help comando	help plot	Muestra información sobre el comando plot

2.1.2 Localización de intervalos con una raíz con uso de una computadora.

Una función puede tener o no tener raíces reales, cuando no tiene raíces reales, se dice que la función no tiene solución real y gráficamente, se refiere a que la curva de $f(x)$ no se intersecta con el eje de las x , que es el punto donde se cumple que $f(x)=0$; Por otra parte existen funciones con múltiples raíces, por ejemplo, en el caso de las funciones polinomiales se pueden tener tantas raíces como es el grado del polinomio, así una polinomio de cuarto grado puede tener como máximo cuatro raíces, en el caso de las funciones cíclicas como las trigonométricas pueden haber infinidad de raíces. Es importante tener una idea de la forma de la gráfica de la función, a fin de observar algún intervalo que contenga una raíz. Considere el siguiente ejemplo:

DESARROLLO:

Ejecuta los comandos propuestos para la solución del siguiente ejemplo:

Ejemplo 1 : Encuentre de manera gráfica una raíz de la función $f(x)=x+\ln(x)$

SOLUCION: Para obtener la gráfica se utiliza el paquete MATLAB, las instrucciones necesarias para obtener la gráfica se listan a continuación:

```
>> x = 0.5:0.001:1;    % La variable x se define de 0.5 a 1 con incrementos de 0.001
>> y = x+log(x);      % Se evalúa la función y se genera el vector con los valores de f(x)
>> plot(x,y, 'b-', 'LineWidth', 2) % Gráfica la función con línea de color azul y 2 puntos de ancho
>> title('Gráfica de la función y=x+ln(x)') % Título de la gráfica
>> xlabel('x') % Etiqueta del eje x
>> ylabel('y') % Etiqueta del eje y
>> grid % Coloca un entramado o red
```

La gráfica se muestra en la figura 1, en la cual se observa que existe una raíz en el intervalo (0.55, 0.60), la raíz se puede considerar como el punto medio del intervalo, $x_r=(0.55+0.60)/2 = 0.5750$, con un error máximo igual a la mitad del ancho del intervalo, en este caso $\text{error}=(0.60-0.55)/2=0.0250$.

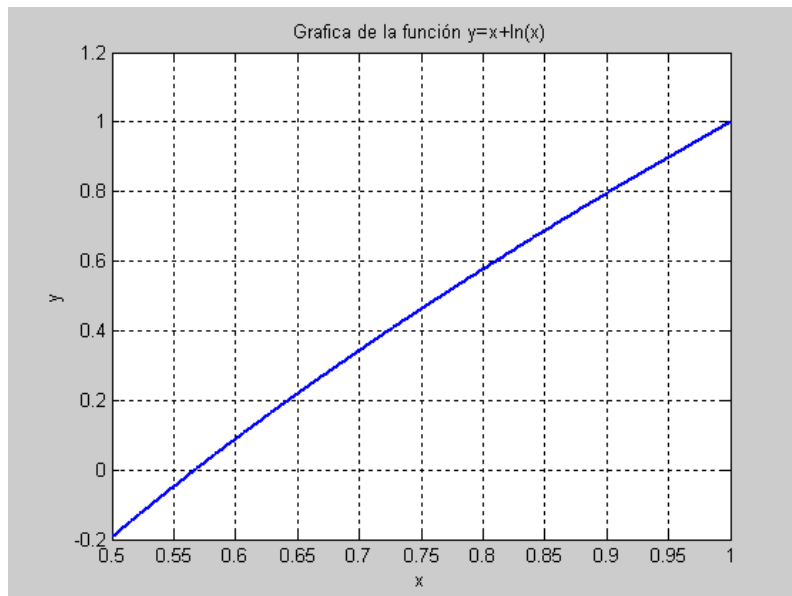


Figura 1. Gráfica de la función $y=x+\ln(x)$ en el intervalo $[0.5, 1]$.

Por otra parte, MATLAB cuenta con herramientas que permiten acercarse a la región de interés con bastante resolución (Zoom in) en la ventana de gráficos.

La figura 2 Muestra un primer acercamiento a la región donde se encuentra la raíz, en este caso esta se encuentra en el intervalo (0.566, 0.568), así se tiene ahora que $x_r = (0.566 + 0.568)/2 = 0.5670$ y $\text{error} = (0.568 - 0.566)/2 = 0.0010$.

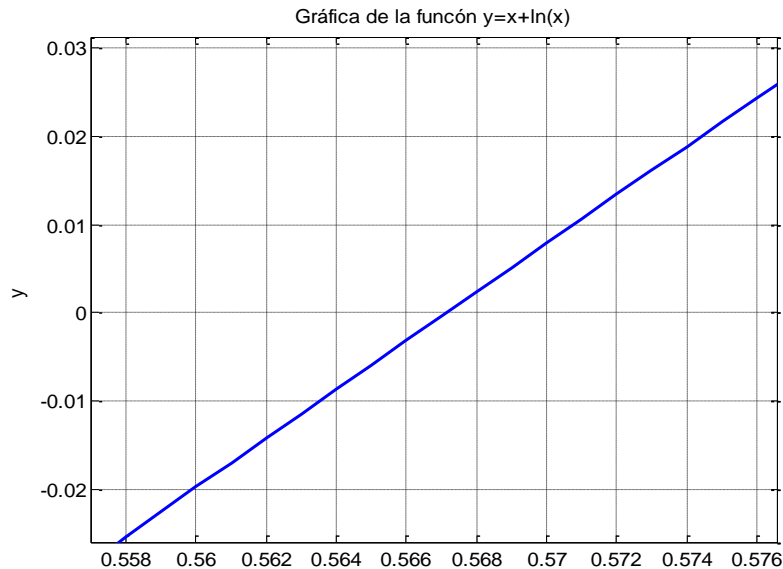


Figura 2. Primer acercamiento a la gráfica de la función $y = x + \ln(x)$.

El proceso puede continuar más veces, sin embargo, tiene un límite, en la figura 3 se muestra el caso límite para el caso de la figura 1. En el eje x no se observa cambio de los valores mostrados (son los mismos), por lo que la raíz buscada se considera $x_r = 0.5671$. El error no se puede calcular a partir del intervalo, en este caso se considera como la mitad de la mínima resolución mostrada en la gráfica, en este caso, $\text{error} = 0.0001/2 = 0.00005$.

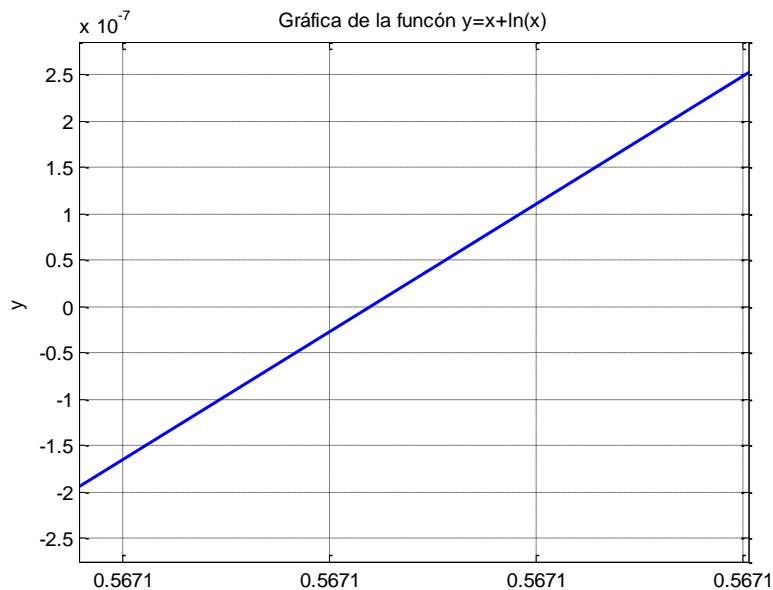


Figura 3. Caso extremo de acercamiento a la gráfica de la función $y = x + \ln(x)$

Otra forma de incrementar la resolución de la gráfica es volver a ejecutar los comandos para obtener la gráfica, cambiando los valores de x a los valores del intervalo de interés, y ajustando los incrementos, de manera que mejore la resolución, en este caso (0.55, 0.60) con incrementos de 0.001. Una forma muy rápida de repetir estos comandos es usar la flecha de desplazamiento hacia arriba que presenta los comandos escritos con anterioridad.

```
>> x = 0.55:0.001:0.60; % La variable x se define de 0.55 a 0.60 con incrementos de 0.001
>> y = x*log(x); % Se evalúa la función y se genera el vector con los valores de f(x)
>> plot(x,y, 'b-', 'LineWidth', 2) % Gráfica de la función con línea continua de color azul,
                                % con de 2 puntos de ancho
>> title('Gráfica de la función y=x*ln(x)') % Título de la gráfica
>> xlabel('x') % Etiqueta eje x
>> ylabel('y') % Etiqueta eje y
>> grid % Coloca un entramado o red
```

El método gráfico es sencillo de aplicar cuando se cuenta con un paquete gráfico, pero está limitado en su resolución, en este caso la máxima resolución es cuatro cifras decimales, por lo que si se requiere una mayor exactitud y precisión, se debe recurrir a los métodos numéricos, los cuales se darán a conocer en las secciones siguientes.

1.2.3. Aproximación gráfica de la raíz para una precisión dada.

Recordando que la precisión se refiere al número de cifras significativas en una cantidad, se pide determinar una aproximación a la raíz con un número de cifras significativas, lo cual depende de la capacidad de graficación del programa usado.

Ejemplo 2: Obtener la gráfica de la función $y=x \sin x^2$ y dar una aproximación a la primera raíz positiva con 3 cifras significativas.

SOLUCIÓN: Para conocer la forma general de la gráfica, se ejecutan los siguientes comandos:

Comandos en MATLAB

```
>> x=-5:0.01:5;
>> f=x.*sin(x.^2);
>> plot(x,f,'m');
>> grid;
>> title('Gráfica de la función y=x*sen(x^2)')
>> xlabel('x');
>> ylabel('f');
```

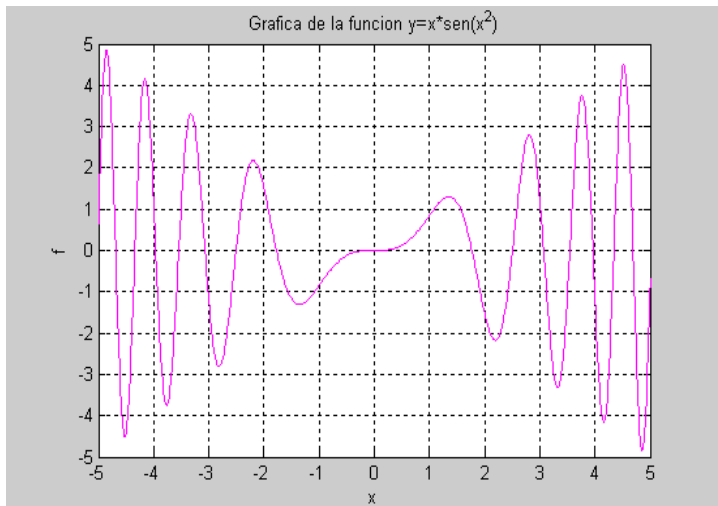


Figura 3 Gráfica de $y=x \sin x^2$ en intervalo $(-5, 5)$

La función es cíclica por lo que se espera que tenga raíces múltiples, de hecho una raíz es $x=0$. Como se puede ver de la gráfica, la función tiene infinitas raíces y la primera raíz positiva se encuentra en el intervalo $(1, 2)$, la estimación de la raíz, que se puede hacer por la inspección visual de la gráfica, $r=1.5$

con un error máximo de 0.5. Para ver con mayor resolución la gráfica de la función en el intervalo (0, 2) se ejecutan los siguientes comandos:

Comandos en MATLAB

```
>> x=0:0.0001:2;
>> f=x.*sin(x.^2);
>> plot(x,f,'m');
>> grid;
>> title('Gráfica de la función y=x*sen(x^2)')
>> ylabel('f');
>> f=x.*sin(x.^2);
```

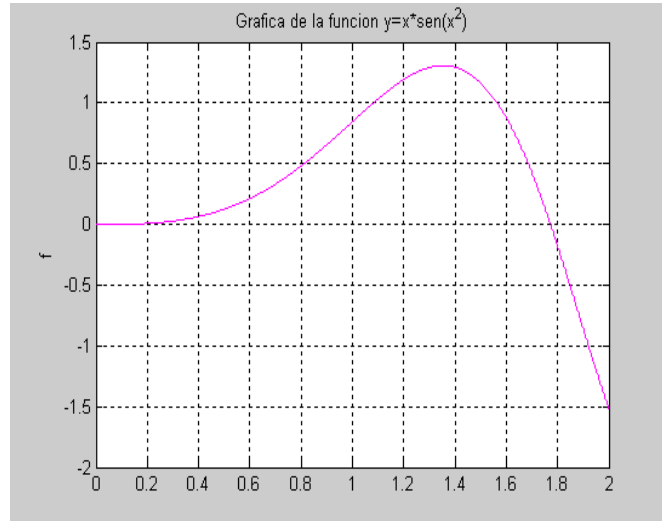


Figura 4 Gráfica de $y=x \sin x^2$ en intervalo (0, 2)

De la gráfica de la figura 4, se observa que la primera raíz positiva se encuentra en el intervalo (1.6, 1.8), por lo que la aproximación que se puede hacer para la raíz es de $r=1.65$ con un error máximo de 0.1. Al seguir reduciendo el intervalo de graficación se obtienen las figuras 5, 6, 7 y 8:

De la figura 5 se puede estimar la raíz de la función como $r=1.77$ y se tienen dos cifras significativas es decir que se tiene plena certeza de que la raíz tiene los valores 1.7, con un error máximo de 0.01.

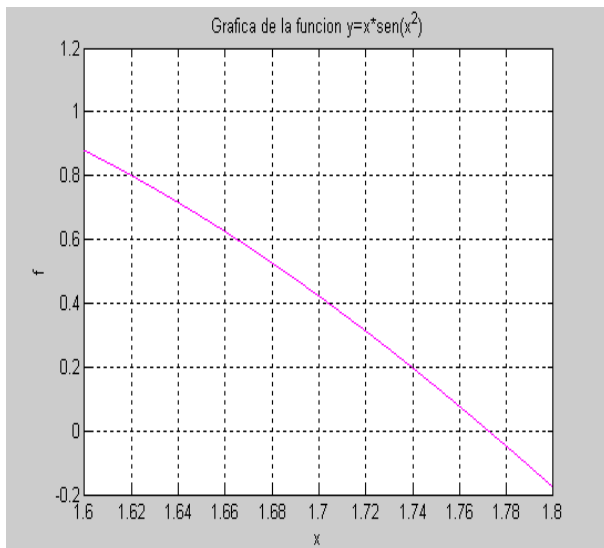


Figura 5 Gráfica de $y=x \sin x^2$ en (1.6, 1.8)

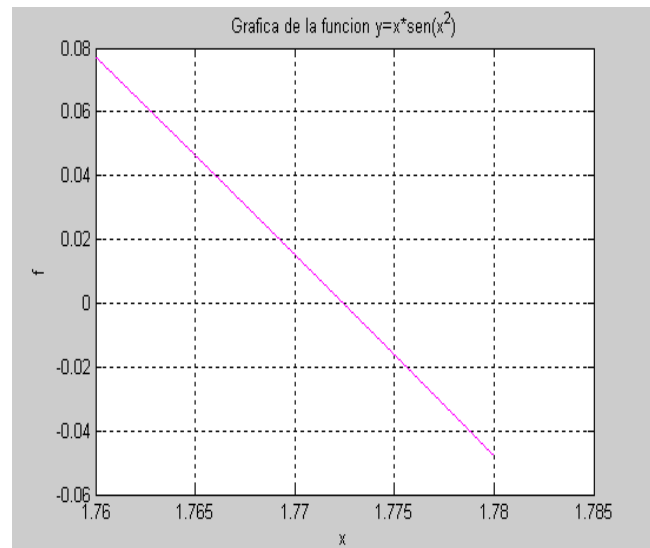


Figura 6 Gráfica de $y=x \sin x^2$ en (1.77, 1.775)

De la figura 6 se puede estimar la raíz de la función como $r=1.7725$ y se tienen tres cifras significativas es decir que se tiene plena certeza de que la raíz tiene los valores 1.77, con un error máximo de 0.0025. Por lo tanto se ha respondido a la pregunta del ejercicio. Se continuará haciendo ajustes a la gráfica a fin de que el alumno considere los límites de graficación:

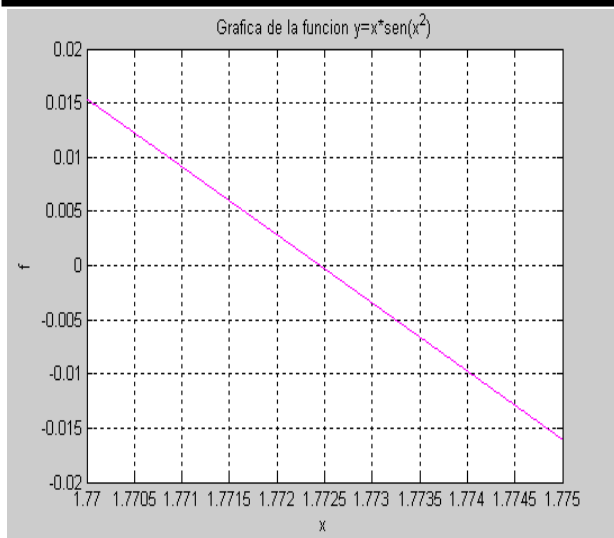


Figura 7 Gráfica de $y=x \text{ sen } x^2$ en $(1.6, 1.8)$

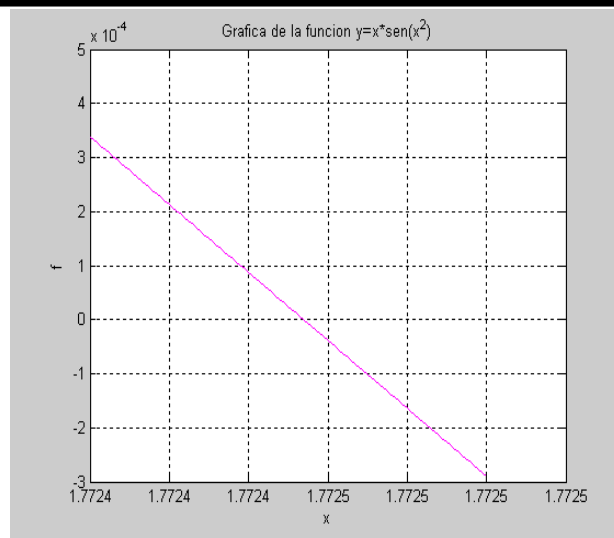


Figura 8 Gráfica de la función en $(1.77, 1.775)$

De la figura 7 se puede estimar la raíz de la función como $r=1.77225$ y se tienen cuatro cifras significativas, es decir que se tiene plena certeza de que la raíz tiene los valores 1.772, con un error máximo de 0.00025.

De la figura 8 se puede estimar la raíz de la función como $r=1.77245$ y se tienen cinco cifras significativas, es decir que se tiene plena certeza de que la raíz tiene los valores 1.7724, con un error máximo de 0.00005. Se observa que para esta gráfica se repiten valores en la escala del eje horizontal, lo que nos indica que MATLAB en las gráficas, ya no puede diferenciar los valores del orden de diez milésimas.

TAREA

Contesta lo que se te pide en los dos siguientes ejercicios:

1. Para la función $f(x) = \text{sen}10x + \cos3x$
 - a) Muestra el esbozo de la gráfica en el intervalo $[0,5]$
 - b) Determina cuantas raíces tiene la función en el intervalo $[0,5]$
 - c) Determina la raíz más cercana a $x=4$ con una precisión de 0.001 (4 cifras significativas)
 - d) Muestra la raíz en el intervalo $[4.22, 4.25]$
 - e) Estima el valor de la raíz verdadera con tres cifras decimales
2. Para la función $f(x) = -2 + 7x - 5x^2 + 6x^3$
 - a) Muestra el esbozo de la gráfica en el intervalo $[-5, 5]$
 - b) Determina cuantas raíces tiene la función en el intervalo $[-5, 5]$
 - c) Determina la raíz más cercana a cero con una precisión de 0.001 (5 cifras significativas)
 - d) Muestra la raíz en un intervalo de amplitud 0.05
 - e) Estima el valor de una raíz verdadera con el mayor número de cifras significativas y muestra la gráfica (límite de graficación en MATLAB)

PRÁCTICA No. 4

BUSQUEDA DE RAICES CON EL MÉTODO DE BISECCIÓN

OBJETIVOS:

Identificar y desarrollar los pasos del algoritmo de bisección para la solución de ecuaciones no lineales de una variable

Calcular el error en el algoritmo de bisección para la solución de ecuaciones no lineales de una variable

INTRODUCCIÓN

2.2 Métodos de intervalos

Aunque los métodos gráficos son útiles para observar las raíces y se pueden hacer estimaciones del valor de la raíz, tienen la desventaja de ser poco precisos, por lo que se emplearán para conocer la forma de la gráfica de $f(x)$ y poder dar una aproximación al valor de la raíz.

Los métodos de búsqueda de raíces pueden acotar un intervalo en el cual se tiene una raíz, y este intervalo se va reduciendo hasta un nivel de precisión dado o una tolerancia del error especificado

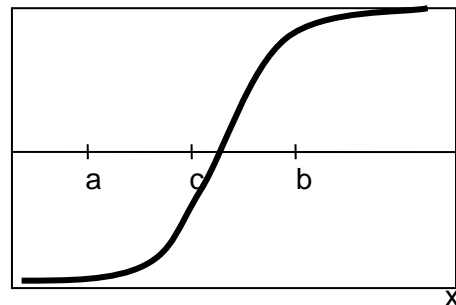
El método de bisección se dice que es un método cerrado, porque aproxima el valor de la raíz a través de intervalos cada vez más pequeños, en los que se contiene una raíz

2.2.1 Método de bisección

El método de bisección es un método para encontrar las raíces de una función. El método de bisección es conocido también como método de corte binario, método de partición en dos intervalos iguales o método de Bolzano. El método de bisección es un método de búsqueda incremental, en el cual el intervalo se divide siempre en dos sub-intervalos iguales, se evalúa la función sobre los extremos de uno de los sub-intervalos y si la función cambia de signo al ser evaluada en los valores extremos, se toma el punto medio de dicho intervalo como la aproximación a la raíz. El proceso se repite hasta obtener una mejor aproximación.

En general $f(x)$ tiene una raíz real en (a,b) si se cumplen las siguientes condiciones:

- $f(x)$ es real
- $f(x)$ es continua
- $f(x)$ es monótona
- $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos que se cumple si: $f(a) * f(b) < 0$



Estas condiciones se aprovechan para localizar un sub-intervalo donde la función tenga una raíz al observar el signo del producto de la función evaluada en sus extremos, para lo cual se divide el intervalo en dos subintervalos iguales, calculando el punto medio c del intervalo y rastrear en uno de los subintervalos, por ejemplo (a, c) si el signo del producto $f(a) * f(c) < 0$ para determinar si la raíz está en ese subintervalo.

Para aclarar el criterio de la búsqueda de la raíz se tienen las siguientes reglas:

- a) Si $f(a) * f(c) < 0$ Existe una raíz en el sub-intervalo (a, c)
- b) Si $f(a) * f(c) > 0$ No existe una raíz en el sub-intervalo (a, c)
- c) Si $f(a) * f(c) = 0$ c es la raíz.

El proceso se repite y la aproximación a la raíz mejora cada vez más a medida que los subintervalos se dividen en intervalos más y más pequeños.

Cálculo del error

El tamaño del intervalo es $a-b$ y después de cada iteración se reduce a la mitad, entonces después de n iteraciones, el tamaño original se abra reducido hasta $(a-b)/2^n$. Se requiere estimar el error de manera que no incluya el conocimiento previo de la raíz verdadera, al dividir el intervalo (a, b) en dos partes iguales y tomar como aproximación el punto medio c , el error máximo aproximado sería $E_a = (c_i - a_i) = (b_i - c_i) = (a_i - b_i)/2^i$ en la i -ésima iteración. Una forma de calcular el error relativo aproximado E_a es de la siguiente manera: $E_a = |(c_i - c_{i-1})/c_i| = |(a_i - c_i)/c_i|$, c_i se usa para renombrar el extremo del intervalo de la próxima iteración y también representa la aproximación a la raíz de la iteración actual, y c_{i-1} es el valor de la raíz de la iteración anterior. Se usa el valor absoluto ya que, en general importa solo la magnitud del error aproximado E_a . Cuando $|E_a|$ es menor que un valor previamente fijado, se terminan de repetir los cálculos y el programa se detiene.

Algoritmo de la bisección

Paso 1. Obtener la gráfica de la función y observar los puntos de x dónde existe una raíz.

Paso 2. Escójase los valores iniciales a y b que corresponden a un intervalo que sabemos que contiene una raíz

Paso 3. Se puede verificar que existe raíz si $f(a) * f(b) < 0$

Paso 4. Obtener aproximación a la raíz c , como: $c = (a + b) / 2$

Paso 5. Evaluar $f(a) * f(c)$ para determinar en que sub-intervalo queda la raíz:

- a) Si $f(a) * f(c) < 0$ la raíz se encuentra en (a, c) hacer $b = c$.
- b) Si $f(a) * f(c) > 0$ la raíz se encuentra en (c, b) hacer $a = c$.
- c) Si $f(a) * f(c) = 0$ la raíz es igual a c y se terminan los cálculos.

Paso 6. Decídase si la nueva aproximación es tan exacta como se desea (sí se cumple con tolerancia o error máximo). Si es así, entonces los cálculos terminan, de otra manera, regresar al paso 4.

DESARROLLO

Ejecuta los comandos para resolver el siguiente ejemplo, podrás comparar tus resultados con los resultados mostrados y resolver tus dudas con los profesores del curso

Ejemplo 1: Calcular una raíz para la función $f(x) = \sqrt{3}x^3 + \pi x^2 - \frac{1}{6}x + 1$ con un error máximo de 0.001.

En un intervalo de longitud de 0.5.

Paso 1. De la gráfica de la función se observa que existe una raíz muy cerca de $x = -2$.

Comandos MATLAB

```
>> x=-10:0.2:10;
>> y=sqrt(3)*x.^3+pi*x.^2-(1/6)*x+1;
>> plot(x,y,'r'); grid;
>> title (' grafica de la función');
>> xlabel ('eje x'); ylabel ('eje y');
```

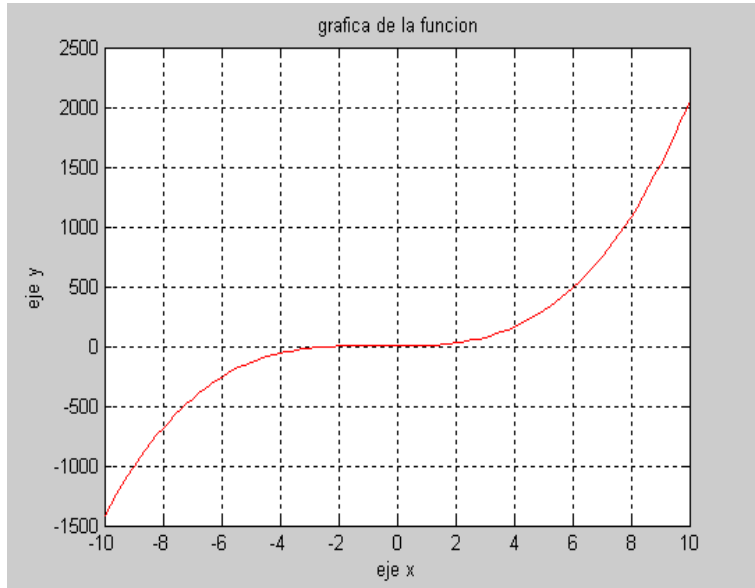


Figura 1 Grafica de $f(x) = \sqrt{3}x^3 + \pi x^2 - \frac{1}{6}x + 1$ en $(-10, 10)$

Paso 2. Escójanse los valores iniciales a y b que corresponden a un intervalo de amplitud 0.5 y que sabemos que contiene una raíz por ejemplo $(-2.2, -1.7)$

Paso 3. Se verifica que existe raíz porque $f(-2.2) * f(-1.7) = -1.8709 * 1.853 = -3.4667 < 0$

Paso 4. Obtener una aproximación a la raíz, $c = (-2.2 + (-1.7)) / 2 = -1.95$ que define los sub-intervalos $(-2.2, -1.95)$ y $(-1.95, -1.7)$ ¿En cuál sub-intervalo queda la raíz?

Paso 5. Evaluando $f(-2.2) * f(-1.95) = -1.8709 * 0.4280 = -0.8007$ Como $f(a) * f(c)$ es negativo, la raíz se encuentra en $(-2.2, -1.95)$ entonces ahora $b = -1.95$. El nuevo intervalo (a, b) es $(-2.2, -1.95)$

Paso 6. El error máximo especificado es 0.001 y error máximo aproximado por el método de bisección es: $E_a = (-1.7 - (-2.2)) / 2 = 0.25$, el error máximo especificado aún no se cumple porque $E_a > E_m$, por lo que se repite el proceso a partir del paso 4

Paso 4'. La siguiente aproximación se determina como: $c = (-2.2 + (-1.95)) / 2 = -2.075$ que define los sub-intervalos $(-2.2, -2.075)$ y $(-2.075, -1.95)$ ¿En cuál sub-intervalo queda la raíz?

Paso 5' Evaluando $f(-2.2) * f(-2.075) = -1.8709 * -0.6021 = 1.1264$, cómo es positivo, la raíz se encuentra en el intervalo $(-2.075, -1.95)$ entonces ahora $a = -2.075$. el nuevo intervalo (a, b) es $(-2.075, -1.95)$

Paso 6' El error máximo aproximado se calcula como: $E_a = (-1.95 - (-2.075)) / 2 = 0.125$, el error máximo aún no se cumple porque $E_a > E_m$, por lo que se vuelve a repetir el proceso a partir del paso 4

Para saber cuántas iteraciones se debe realizar para cumplir con el error máximo especificado, se

puede despejar n de la formula $E_a = \frac{a - b}{2^n}$.

Para facilitar el proceso de cálculo se registran los resultados en una tabla como la siguiente:

# ite	a	B	c	fa*fc	Ea
0	-2.2	-1.7	-1.95	-0.8007	0.25
1	-2.2	-1.95	-2.075	1.1264	0.125
2	-2.075	-1.95	-2.0125	0.0352	0.0625
3	-2.0125	-1.95	-1.9813	-0.0112	0.03125
4					
5					
6					
7					
8					
9					

La raíz es= -2.0057 en 9 iteraciones

Contesta con tus propias palabras las siguientes preguntas:

1. Explique brevemente como identifica el método de bisección si en un intervalo hay una raíz
2. Explica brevemente en qué consiste el método de bisección
3. Explica brevemente 3 iteraciones del método de bisección de manera gráfica
4. Describe la forma de calcular el error relativo porcentual en éste método

1. Escribe los comandos de MATLAB y muestra el esbozo de la gráfica en el intervalo $[-2, 2]$

Comandos de MATLAB	Forma de la gráfica

3. Determina un intervalo (valores iniciales) de amplitud 0.01 que contenga a la primera raíz no trivial (la más cercana a cero).

4. Aplicando el método de bisección, determina el valor de la primera raíz no trivial con una precisión de 0.01 (Llena la tabla de iteraciones sucesivas)

# de iteración	a	B	c	fa*fc	Ea
0					
1					

2					
3					
4					
5					
6					
7					
8					
9					

5. Reporta el número de iteraciones realizado para cumplir con la tolerancia, la aproximación de la raíz y el error obtenido
6. Cuántas iteraciones se requieren para cumplir con una tolerancia de 0.00001 para un intervalo de amplitud 0.1 (aplicar fórmula para determinar el número de iteraciones)
7. Realiza el diagrama de flujo del programa del algoritmo de bisección.
8. Codifica el programa que corresponde al algoritmo de bisección
9. Ejecuta el programa de bisección, para la función $f(x) = 0.065x^5 - 9x^4 + 45x^3 - 88x^2 + 82.3x - 26$
 - a) Determina cuantas raíces reales tiene la función
 - b) Muestra el esbozo de la gráfica en la que se observen sus raíces (gráfica de la función en color verde y de las raíces con asterisco rojo)
 - c) Determina un intervalo (valores iniciales) de amplitud 0.001 que contenga a la raíz más grande.
 - d) Determina el valor de la raíz más grande con una precisión de 0.00001, por el método de bisección.
 - e) Reporta el número de iteraciones realizado para cumplir, la tolerancia, la aproximación de la raíz y el error obtenido
 - f) Cuántas iteraciones se requieren para cumplir con una tolerancia de 0.00001 para un intervalo de amplitud 0.01 (desarrollar y aplicar fórmula para determinar el número de iteraciones)

PRÁCTICA No. 5

BÚSQUEDA DE RAÍCES POR EL MÉTODO DE PUNTO FIJO.

OBJETIVO

Aplicar el método de punto fijo para la obtención de raíces de funciones de forma $f(x)=0$.
Desarrollar un programa para el algoritmo del método de punto fijo en MATLAB.
Determinar las condiciones necesarias para la convergencia del método de punto fijo.
Describir las limitaciones del método para encontrar raíces.

INTRODUCCIÓN TEÓRICA

2.3.1 Método de punto fijo

Un punto fijo de una función $g(x)$ es un número real x tal que: $x = g(x)$, esta definición constituye la base del método de punto fijo y puede utilizarse para resolver funciones del tipo $f(x)=0$. Entonces, a partir de la ecuación $f(x)=0$, se obtiene la forma $x=g(x)$, esto se puede lograr de dos formas:

- 1) Simplemente despejando alguna x de $f(x)=0$.
- 2) Sumando x a ambos miembros de la ecuación $f(x)=0$, se tendrá, $x=x+f(x)$, de donde $g(x)=x+f(x)$.

Es necesario observar que la función $g(x)$ para un problema particular $f(x)=0$ no es única, por ejemplo, para el caso de la función $f(x)=x+\ln(x)$

- 1) Despejando x se obtiene $x=-\ln(x)$, de donde $g(x)=-\ln(x)$

Por otra parte, se puede aplicar la exponencial en ambos miembros de donde resulta $x=e^{-x}$ de donde se obtiene $g(x)=e^{-x}$

- 2) Sumando x en ambos miembros en $x+\ln(x)=0 \rightarrow x+\ln(x)+x=0+x$ al despeja x resulta $x=2x+\ln(x)$ de donde se obtiene: $g(x)=2x+\ln(x)$

El método de punto fijo requiere de un punto inicial x_0 , para iniciar el proceso de búsqueda de la raíz, posteriormente se aplica iterativamente la regla $x_i=g(x_{i+1})$

$$x_1=g(x_0)$$

$$x_2=g(x_1)$$

$$x_3=g(x_2)$$

... ..

El proceso termina cuando se satisfaga la aproximación deseada mediante el error propuesto o en algunos casos hasta encontrar el punto fijo de manera exacta.

Gráficamente el método de punto fijo se puede representar como la intersección de dos curvas, una formada con $y=x$ (función identidad) y otra con $y=g(x)$ (función recursiva); la raíz de $f(x)$ corresponde con la abscisa del punto de intersección de ambas funciones (punto fijo). La siguiente figura muestra el proceso de convergencia hacia el punto fijo.

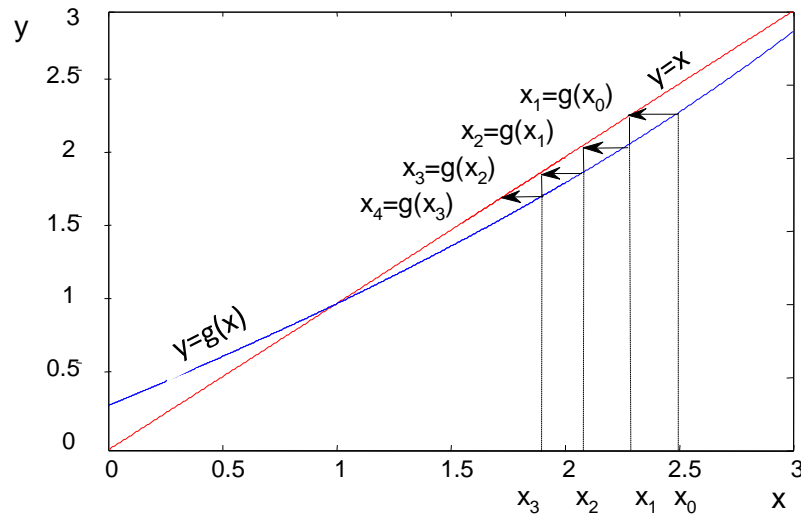


Figura 1 Proceso de convergencia hacia el punto fijo

En la figura se parte de un valor x_0 y se evalúa $x_1=g(x_0)$, que corresponde a trazar una línea vertical hacia la función $g(x)$; Se toma el valor de x_1 como nueva aproximación, que equivale gráficamente, a trazar una línea horizontal hasta intersectar con la función identidad, se repite el proceso, ahora evaluando $x_2=g(x_1)$, para obtener el valor de x_2 , trazando una línea vertical sobre x_1 hasta $g(x)$ y otra línea horizontal hacia la recta $y=x$. Trazar una línea vertical hacia la función $g(x)$ desde el punto x_2 , representa evaluar $g(x)$ en x_2 , para obtener x_3 , esto es: $x_3=g(x_2)$, al trazar la línea horizontal hasta $y=x$ se toma como nuevo valor a x_3 . El proceso anterior se repite hasta lograr la aproximación deseada.

Criterio de convergencia

Aplicando el teorema del valor medio en el intervalo acotado por x_n y x_{n-1} , se tiene que existe un valor x

que pertenece a ese intervalo, tal que: $g'(x) = \frac{g(x_n) - g(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$

De acuerdo con lo que establece el método del punto fijo: $x_n=g(x_{n-1})$; $x_{n+1}=g(x_n)$

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

El método converge si se presenta la desigualdad: $|x_{n+1} - x_n| < |x_n - x_{n-1}|$

así que, para que el método converja a la raíz buscada, se debe cumplir que $|g'(x)| < 1$

En la figura 2 se muestra gráficamente el caso de divergencia del método de punto fijo en el cual se tiene $|g'(x)| > 1$.

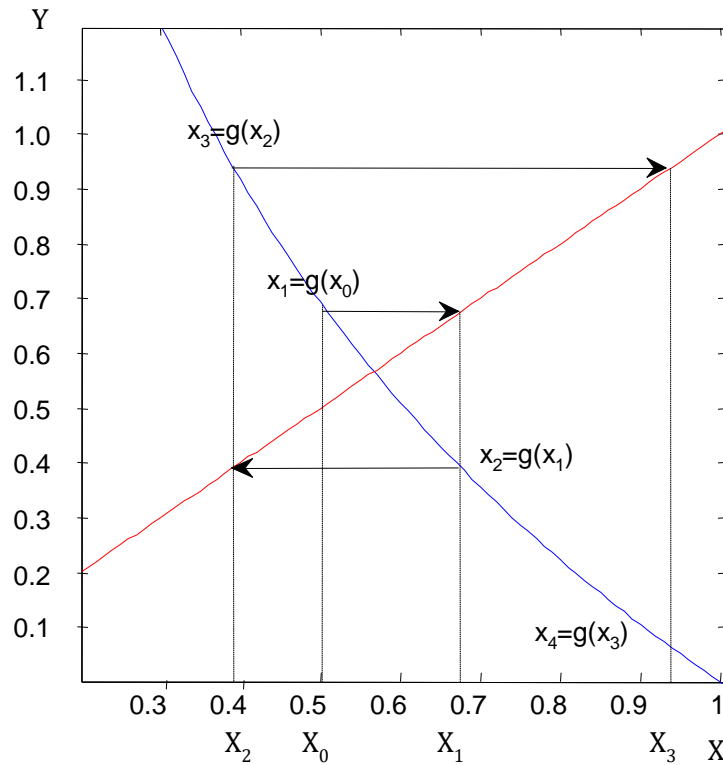


Figura 2. Gráfica del proceso de divergencia del método de punto fijo.

Calculo del error en el método de punto fijo

En este método se emplea una ecuación recursiva, que cada vez que se evalúa se espera como resultado, un valor más próximo al valor verdadero de la raíz, de manera que x_{i+1} es una mejor aproximación que x_i ,

por lo que el error relativo aproximado se calcula de la siguiente forma:

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right|$$

ALGORITMO DE PUNTO FIJO

Para obtener un valor aproximado de la solución de $f(x)$ por el método de punto fijo se realizan los siguientes pasos:

1. Obtener la gráfica de $f(x)$, a fin de observar su forma y ubicar visualmente las raíces de la función.
2. Obtener la función recursiva $g(x)$, despejando x en $f(x)$ ó sumando x a $f(x)=0$.
3. Proponer un valor x_0 aproximado a la raíz r .
4. Calcular la primera aproximación a la raíz con $x_{i+1}=g(x_i)$.
5. Calcular el error aproximado, considerando x_{i+1} como mejor aproximación que x_i , a la raíz:

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right|$$

6. Comparar el valor del error aproximado ε_a con la tolerancia ε especificada previamente, en caso de no cumplirse $\varepsilon_a \leq \varepsilon$ regresar al paso, hasta cumplir con la tolerancia.
7. Puede darse el caso que la función $g(x)$ diverja del punto fijo, en cuyo caso el error aproximado se va haciendo más grande y se tendrá que cambiar la función recursiva $g(x)$.

Los resultados de la aplicación del algoritmo de punto fijo, se pueden resumir en una tabla, como la siguiente:

No de iteración	x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right $
1	x_0	$x_1=g(x_0)$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_1 - x_0}{x_1} \right $
2	x_1	$x_2=g(x_1)$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_2 - x_1}{x_2} \right $
3	x_2	$x_3=g(x_2)$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_3 - x_2}{x_3} \right $
....
N	x_{n-1}	$x_n=g(x_{n-1})$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n} \right $

PRÁCTICA No. 6

BÚSQUEDA DE RAÍCES POR EL MÉTODO DE NEWTON RAPHSON

OBJETIVO GENERAL

- Aplicar el método de Newton Raphson para obtener raíces con una aproximación en cifras correctas deseadas.
- Desarrollar el programa de Newton Raphson en MATLAB
- Cálculo del error y su relación con la convergencia del método de Newton Raphson.
- Establecer las condiciones necesarias para la obtener raíces mediante el método de Newton Raphson

INTRODUCCIÓN TEÓRICA

Método de Newton-Raphson

El método de Newton-Raphson es uno de los más poderosos y utilizados para encontrar raíces de funciones de la forma $f(x)=0$, además, estas raíces pueden ser reales o complejas; aunque, es necesario conocer en el caso de las raíces complejas si estas lo son. La idea básica del método de Newton-Raphson, está basado en aproximar la función $f(x)$ mediante una recta tangente de forma en que se muestra en la figura 1.

La forma de la ecuación de la recta tangente con pendiente m que pasa por el punto (x_0, y_0) es $y = m(x - x_0) + y_0$

La pendiente de la recta en el punto (x_0, y_0) se puede determinar a partir de $m = f'(x_0)$, y sabiendo además que x_0 es un punto tangente a $f(x)$, esto es, $y_0 = f(x_0)$, la ecuación queda como:

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

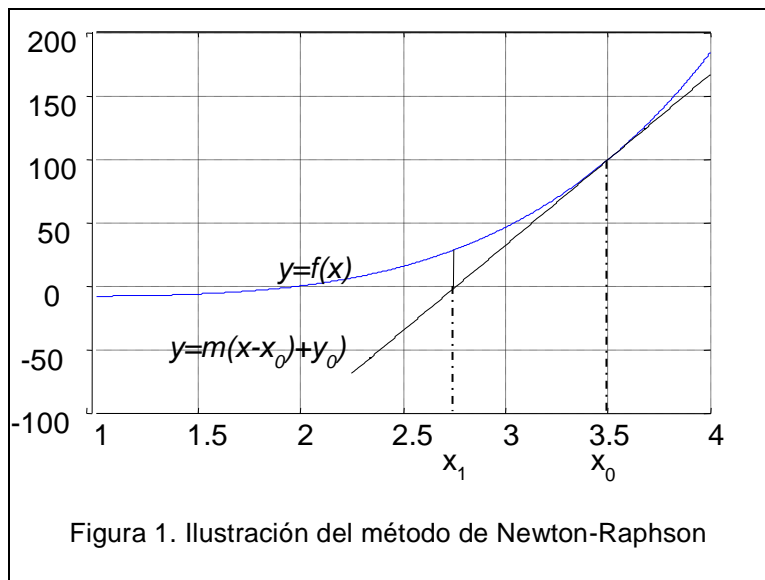
Siguiendo la gráfica de la recta, hasta $y=0$, se hace $x=x_1$, y la ecuación se expresa por:

$$0 = f'(x_0)(x_1 - x_0) + f(x_0); \text{ despejando } x_1:$$

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}; \text{ } x_1 \text{ se considera la primer aproximación a la raíz de } f(x).$$

El proceso anterior se puede repetir utilizando el punto x_1 para obtener la siguiente aproximación, en este

$$\text{caso } x_2, \text{ mediante la ecuación } x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$$



Generalizando el resultado se tiene la ecuación recursiva:
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

De tal forma que la ecuación recursiva es :
$$g(x_{n+1}) = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Criterio de convergencia

El cálculo del erro aproximado del método de Newton Raphson, procede de la misma forma que el método de punto fijo, inclusive se puede afirmar que la diferencia con el método de punto fijo es la forma de obtener la función recursiva $g(x)$, con la cual se calcula la siguiente aproximación, de acuerdo con la relación: $x_n = g(x_{n-1})$ ó $x_{n+1} = g(x_n)$. El método converge, sí cada vez que se evalúa $g(x)$ se obtiene como resultado un valor más cercano al valor verdadero de la raíz, de manera que x_{i+1} es una mejor aproximación que x_i , por lo que el error relativo aproximado se calcula de la siguiente forma:

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right|$$

Por lo que el método converge si al realizar la siguiente iteración, ε_a es cada vez más pequeño.

ALGORITMO DE PUNTO FIJO

Para obtener un valor aproximado de la solución de $f(x)$ por el método de Newton Raphson, se realizan los siguientes pasos:

8. Obtener la gráfica de $f(x)$, a fin de observar su forma y ubicar visualmente las raíces de la función.
9. Obtener la función recursiva $g(x)$, obteniendo $f'(x)$, sustituyendo y simplificando en

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

10. Proponer un valor x_0 aproximado a la raíz r .
11. Calcular la primera aproximación a la raíz con $x_{i+1} = g(x_i)$.

12. Calcular el error aproximado, con la siguiente formula
$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right|$$

13. Comparar el valor del error aproximado ε_a con la tolerancia ε especificada previamente, en caso de no cumplirse $\varepsilon_a \leq \varepsilon$ regresar al paso 4, hasta cumplir con la tolerancia.
14. Puede darse el caso que la función $g(x)$ diverja del punto fijo, en cuyo caso el error aproximado se va haciendo más grande y no se podrá localizar la raíz de $f(x)$.

Los resultados de la aplicación del algoritmo de punto fijo, se pueden resumir en una tabla, como la siguiente:

No de iteración	x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right $
1	x_0	$x_1=g(x_0)$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_1 - x_0}{x_1} \right $
2	x_1	$x_2=g(x_1)$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_2 - x_1}{x_2} \right $
....
N	x_{n-1}	$x_n=g(x_{n-1})$	$\varepsilon_a = \left \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n} \right $

DESARROLLO

a) Determina una raíz para la función $y=x+\ln(x)$, por el método de Newton Raphson, con una tolerancia de $\varepsilon = 10^{-5}$

1. Se obtiene un perfil de la gráfica, para proponer una aproximación x_0 a la raíz de la función. Se ejecutan las siguientes instrucciones en MATLAB en la ventana de comandos.

Comandos en MATLAB

```
>> x=0.2:0.01:1.1;
>> y=x+log(x);
>> plot(x,y,'b-', 'LineWidth',2)
>> grid on
>> xlabel('x')
>> ylabel('y')
>> title('Función f(x)=x+ln(x)')
```

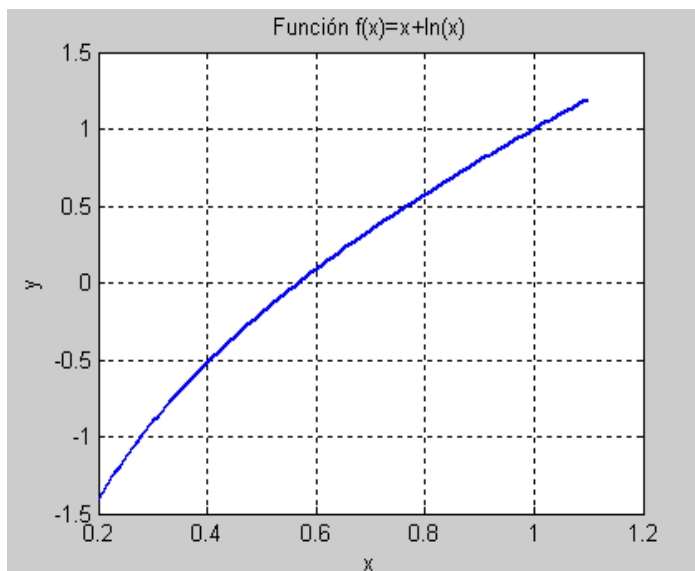


Figura 2 Gráfica de $y= x+\ln(x)$ en intervalo $[0.2, 1.1]$

2. Para obtener la función recursiva $g(x)$, es necesario calcular la derivada de la función $f(x)=x+\ln(x)$

, esto es, $f'(x)=1+\frac{1}{x}$ entonces, la fórmula recursiva para este problema particular es

$$g(x_{n+1}) = x_n - \frac{x_n + \ln(x_n)}{1 + \frac{1}{x_n}}$$

3. De la observación de la gráfica se propone un valor de x como primera aproximación, en este caso $x_0=1$.

4. Cálculo de la primera aproximación de la raíz ($n=0$) $\rightarrow x_1 = 1 - \frac{1 + \ln(1)}{1 + \frac{1}{1}} = \frac{1}{2} = 0.500000$

5. Cálculo del error : $\varepsilon_a = \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right| = \left| \frac{x_1 - x_0}{x_1} \right| = \left| \frac{1 - 0.5}{0.5} \right| = 1$

15. No se cumple que $\varepsilon_a \leq \varepsilon$, por lo que se repite el proceso a partir del paso 4

4'. Cálculo de la segunda aproximación a la raíz ($n=1$)

$$x_2 = 0.5 - \frac{0.5 + \ln(0.5)}{1 + \frac{1}{0.5}} = 0.56438239$$

5' Cálculo del error aproximado $\varepsilon_a = \left| \frac{x_2 - x_1}{x_2} \right| = \left| \frac{0.56438239 - 0.5}{0.56438239} \right| = 0.11407583$

6'. No se cumple $\varepsilon_a \leq \varepsilon$, se vuelve a repetir el proceso a partir del paso 4.

4''. Cálculo de la tercera aproximación a la raíz ($n=2$):

$$x_3 = 0.56438239 - \frac{0.56438239 + \ln(0.56438239)}{1 + \frac{1}{0.56438239}} = 0.56713998$$

5''. Se calcula el error aproximado

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_3 - x_2}{x_3} \right| = \left| \frac{0.56713998 - 0.56438239}{0.56713998} \right| = 0.00486053$$

6''. No se cumple $\varepsilon_a \leq \varepsilon$, se vuelve a repetir el proceso a partir del paso 4.

4'''. Cálculo de la cuarta aproximación a la raíz ($n=3$):

$$x_4 = 0.56713998 - \frac{0.56713998 + \ln(0.56713998)}{1 + \frac{1}{0.56713998}} = 0.56714329$$

5'''. Cálculo del error aproximado

$$\varepsilon_a = \left| \frac{x_4 - x_3}{x_4} \right| = \left| \frac{0.56714329 - 0.56713998}{0.56714329} \right| = 0.0000075869$$

6". Se compara el valor aproximado del error $\varepsilon_a=0.0000075$, con el de la tolerancia especificada $\varepsilon=0.00001$, como ya se cumple $\varepsilon_a \leq \varepsilon$, termina el proceso y se reporta la aproximación al valor de la raíz como: $r \approx 0.567143$, con un error aproximado de 0.00000705. Los resultados se resumen en la siguiente tabla:

Una observación importante es que con cuatro aproximaciones se obtiene una raíz con una muy buena aproximación en, comparación con la obtenida con el método de punto fijo, el cual para tener aproximadamente la misma exactitud requiere de 17 recursiones, (ver practica previa). Lo anterior muestra que el método de Newton-Raphson tiene una alta velocidad de convergencia.

No de iteración	x_i	$x_{i+1}=g(x_i)$	$\varepsilon_a = \frac{ x_{i+1} - x_i }{x_{i+1}}$
1	1	0.5	1
2	0.5	0.56438239	0.11407583
3	0.56438239	0.56713998	0.00486053
4	0.56713998	0.56714329	0.000007586

En la siguiente tabla se muestran las instrucciones que se deben ejecutar desde la ventana de comandos de Matlab, para obtener los resultados de la aplicación del método de Newton Raphson

Comandos de Matlab para aplicar el método de Newton Raphson a la función $y=x+\ln x$

```
>> xn=1;
>> gx=xn-(xn+log(xn))/(1+1/xn)
gx =
    0.500000000000000
>> ea=abs((gx-xn)/gx)
ea =
    1
>> xn=gx;
>> gx=xn-(xn+log(xn))/(1+1/xn)
gx =
    0.56438239351998
>> ea=abs((gx-xn)/gx)
ea =
    0.11407583627554
>> xn=gx;
>> gx=xn-(xn+log(xn))/(1+1/xn)
gx =
    0.56713898771506
>> ea=abs((gx-xn)/gx)
ea =
    0.00486052670472
>> xn=gx;
>> gx=xn-(xn+log(xn))/(1+1/xn)
gx =
    0.56714329039937
>> ea=abs((gx-xn)/gx)
ea =
    7.586591222695360e-006
>> xn=gx;
>> gx=xn-(xn+log(xn))/(1+1/xn)
gx =
    0.56714329040978
>> ea=abs((gx-xn)/gx)
ea =
    1.836357817418341e-011
```

- b) El diagrama de flujo del método de Newton-Raphson es mostrado en la figura 3. Utilizando este diagrama de flujo, codifica el programa en Matlab para resolver el ejemplo anterior $x+\ln(x)=0$; Se debe respetar la nomenclatura empleada en el diagrama y como salida se debe observar la tabla de resultados. Supóngase que se requiere una aproximación a la raíz de la función con una exactitud de 8 cifras decimales correctas. Para conseguir la aproximación indicada (y tal vez más) se propone un valor de control $\varepsilon=0.000000001$ y un valor inicial $x_0=1$.

El método de Newton-Raphson tiene una gran velocidad de convergencia comparado con los métodos de bisección y de punto fijo, sin embargo, la velocidad de convergencia se ve alterada cuando la raíz corresponde a un mínimo o cuando se interpone un mínimo entre el valor de inicio x_0 y la raíz buscada.

La figura 4 muestra el caso en que el método Newton-Raphson falla si no se tiene cuidado, en este caso se da una aproximación cercana a un mínimo.

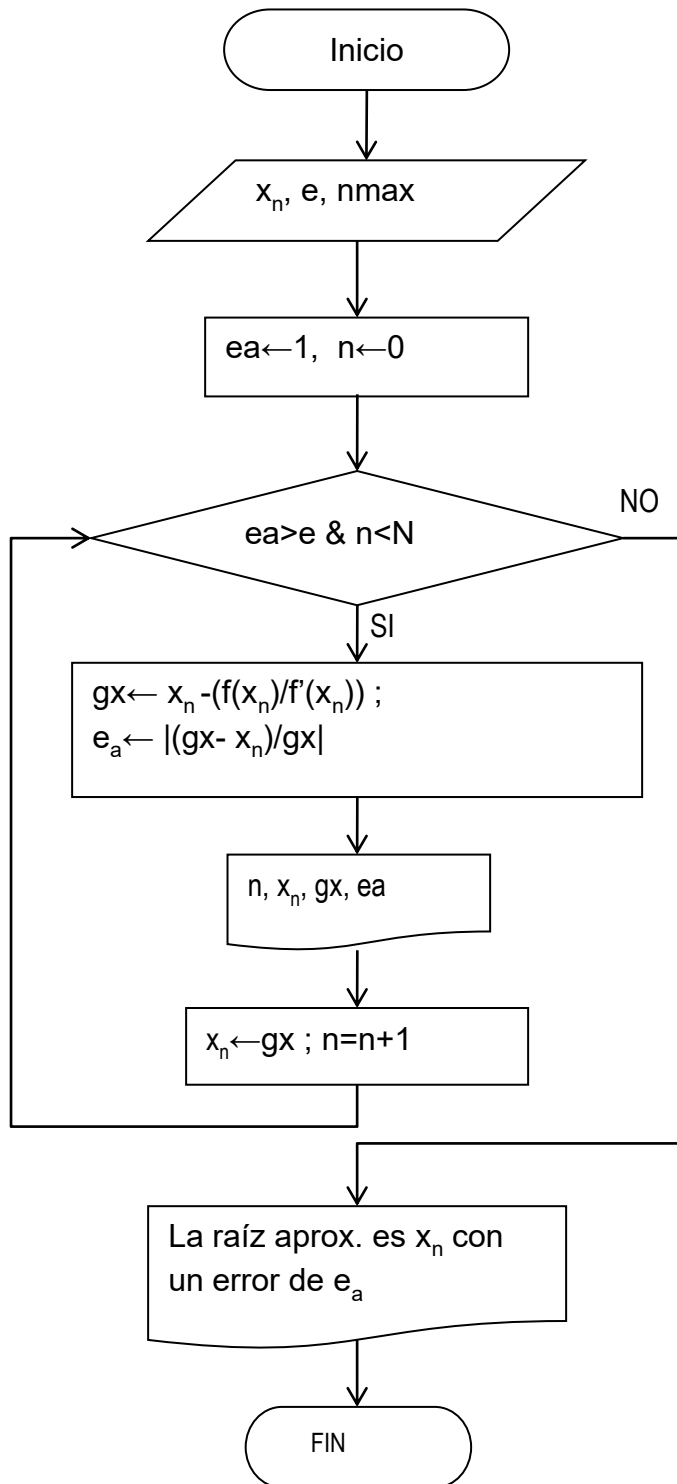


Figura 3. Diagrama de flujo para el método de Newton Raphson

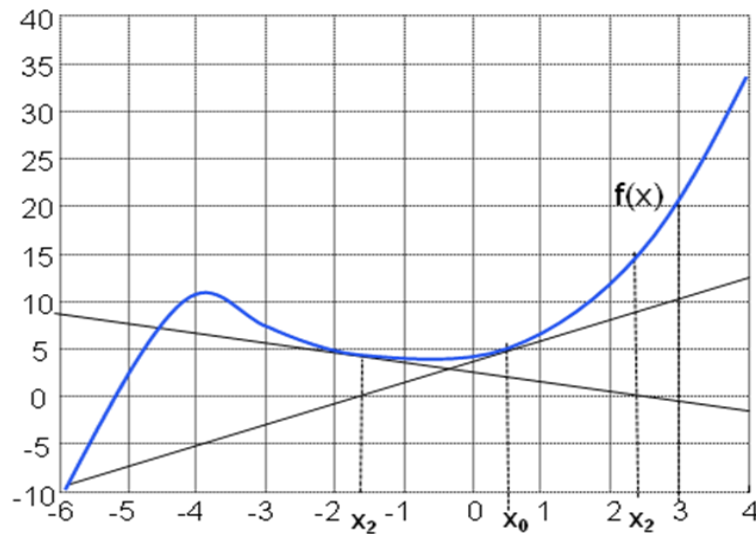


Figura 4. Situación donde el método de Newton-Raphson falla

- c) La función $f(x) = e^x - 3x^2$, tiene tres raíces. Obtenga una gráfica de la función que muestre las raíces.
- d) Modifique su programa para aplicar el método de Newton-Raphson para localizar cada una de las raíces de la función con una aproximación de 6 cifras decimales correctas. Elija usted sus valores adecuados de inicio para aplicar el método de Newton Raphson.
- e) Obtenga todas las raíces reales de la función $f(x) = x^3 - 4x^2 + 9.48$.
- f) Calcule ahora las raíces de la función $f(x) = x^3 - 4x^2 + 9.485$, note que la función es muy parecida a la anterior. ¿Qué sucede ahora con las raíces? Explique.

PRACTICA No. 7

OPERACIONES DE MATRICES Y DE VECTORES.

OBJETIVO GENERAL

- Manejo de las ideas principales en la resolución de ecuaciones no lineales y su importancia práctica.
- Conocer las operaciones básicas de las matrices que se usan para la solución de sistemas de ecuaciones lineales.
- Usar MATLAB para realizar las operaciones básicas entre matrices.

INTRODUCCIÓN TEÓRICA

Vectores

Matlab es un entorno que trabaja con matrices, y un vector se podría considerar como una matriz con una sola fila y una sola columna, de esta forma, una matriz cuyo orden es $1 \times n$ es llamada también vector fila de orden n y una matriz cuyo orden es $m \times 1$ es llamada también vector columna de orden m . Por ejemplo:

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -7 \\ 4 & \sqrt{2} & 5 \end{bmatrix}$$

$$B = [\pi \quad -1/6 \quad 8]$$

$$C = \begin{bmatrix} -2 \\ 9 \end{bmatrix}$$

A matriz de orden 2×3 B vector fila de orden 3 C vector columna de orden 2

Un vector se asigna a una variable como una lista de elementos entre corchetes, separados por coma “,” o espacio, para el caso de un vector fila, y cuando se trata de un vector columna, los elementos son separados por punto y coma “;”. Por ejemplo

```
>>x1=[1,2,3 4 5]
```

```
x1 =
```

```
1 2 3 4 5
```

Asigna en la variable x1 un vector fila con los elementos “1 2 3 4 y 5”, se debe notar que 1, 2 y 3 están separados por coma, mientras que 4 y 5 con espacio.

Un vector fila que expresa una serie o secuencia numérica, puede asignarse con la estructura: *variable = valor inicial : incrementos: valor final*, por ejemplo

```
x2= 1:3:16
x2 =
    1    4    7   10   13   16
```

Para generar un vector de tiempo con elementos de cero a diez y con incrementos de 0.5, se ejecuta la siguiente sentencia, en la ventana de comandos de Matlab:

```
>> t = [0:0.5:10]
t =
    0    0.5    1    1.5    2    2.5    3    3.5    4    4.5    5    5.5    6    6.5    7    7.5    8    8.5    9    9.5   10
```

Para asignar un vector columna, los elementos asignados se declaran como una lista entre corchetes pero se separan por punto y coma “;” por ejemplo:

```
x3=[-8;9;6;5]
x3=
   -8
     9
     6
     5
```

La dimensión de un arreglo se puede obtener con los comandos: *length* o *size*; *length (v)* nos indica la longitud de un vector, es decir el número de elementos que tiene el vector *v*, *size (m)* nos da la dimensión matricial que es expresada por dos números enteros, el primero se refiere al número de filas del arreglo y el segundo al número de columnas y el producto de estos números nos da el total de elementos contenido en un arreglo matricial.

```
>> length(x1)
ans =
     5
>> size(x1)
ans =
     1     5
```

En caso de no realizar una asignación de valores a una variable y sólo ejecutar un comando o realizar una operación sin asignar a una variable, Matlab hace la asignación en la variable *ans* (*answer*), pero sólo se conserva el último valor o valores asignados, como es el caso en la

ejecución anterior del comando `size (x1)`, dónde además, la longitud de `x1` es 5 porque tiene cinco elementos, pero su dimensión es de 1×5 (una fila con cinco columnas).

Al ejecutar el comando de asignación, se muestra la variable y su contenido, (a lo que se le llama `eco`), para que el contenido de la variable creada no se muestre en la pantalla se ejecuta el comando con un punto y coma (;) al final de la instrucción.

Para cambiar un vector fila a un vector columna, se usa el operador apostrofo (') para transponer un arreglo, en este caso cambiar un vector fila en vector columna y viceversa. Por ejemplo:

```
>>x1=x1'
xt1 =
     1
     2
     3
     4
     5
>>x2=x2'
xt2=
     1 47 10 13 16
```

Se debe notar que `x1` es un vector fila, pero `xt1` es un vector columna definido como el traspuesto de `x1`, por lo que tienen los mismos elementos, pero en forma de columna y de manera análoga con `x2` y `xt2`.

Matrices

Una matriz A es un arreglo rectangular de elementos, con m -filas o renglones y n -columnas. A la expresión $m \times n$ se le llama orden de la matriz. En general, una matriz A de orden $m \times n$ se puede representar como

$$A = [a_{ij}], \quad 1 \leq i \leq m, \quad 1 \leq j \leq n$$

donde a_{ij} es el elemento de la matriz A que está en la fila i y en la columna j .

Diremos que dos matrices A y B son iguales, si son iguales entrada a entrada.

$$a_{ij} = b_{ij}, \quad 1 \leq i \leq m, \quad 1 \leq j \leq n$$

Para declarar una matriz en Matlab, se escriben los elementos de las filas separados por coma o por espacio (blanco) y para indicar el inicio de una nueva fila se escribe punto y coma, es decir

que las filas están separadas por punto y coma, en caso de escribir una matriz de forma incompleta, Matlab llenará los espacios faltantes con ceros. Por ejemplo:

```
>> m1=[12 13 14 15;-1 0 3 1; -2,-4,-6,10]
```

```
m1=
```

```
12 13 14 15
-1 0 3 1
-2 -4 -6 10
```

```
>> m2=[2 1 0 -1; 1 -1 1 -1;2 0 0 0]
```

```
m2=
```

```
2 1 0 -1
1 -1 1 -1
2 0 0 0
```

Una vez definidas las variables, es posible combinarlas o usarlas en otras expresiones para generar diversos resultados, por ejemplo:

```
m3=[x1,x2]
```

```
m3=
```

```
1 2 3 4 5 14 7 10 13 16
```

El operador dos puntos (:), se usa para seleccionar una fila o una columna completa, por ejemplo la instrucción `m1(3,4)`, extrae el número que ocupa la posición en las coordenadas (3,4) de la matriz `m1`, que en este caso es 10, mientras que la instrucción `m1 (3,:)`, extrae la fila 3 (completa) de la matriz `m1`, ejecute los siguientes comandos en Matlab:

```
>> e34=m1(3,4)
```

```
e34=
```

```
10
```

```
>> f3 =m1(3,:)
```

```
f3
```

```
-2 -4 -6 10
```

```
>> Mc=[m2;m1]
```

```
Mc =
```

```
2 1 0 -1
1 -1 1 -1
2 0 0 0
```

```

12 13 14 15
-1 0 3 1
-2 -4 -6 10
>> f=[m2(1,2),m1(1,2),m2(1,3),m1(2,2)]
f=
    1    13     0     0
>> m2(1,3)=5; m2(3,2)=5; m2(3,3)=5; m2(3,4)=5
2    1     5    -1
    1    -1     1    -1
    2     5     5     5

```

Operaciones con vectores:

Las operaciones entre escalares y vectores son muy sencillas, al sumar un escalar con un vector se suma el escalar con cada entrada del vector, para la multiplicación de un escalar con un vector se procede análogamente, por ejemplo:

```

>> sx=-3+x1
sx =
-2 -1 0 1 2
>> pe=5*x2
pe=
5 20 35 50 65 80

```

Teóricamente no está definida la suma de un vector con un escalar, sin embargo en Matlab se permite la suma de un número con cada elemento de un arreglo. Cuando se realizan operaciones entre vectores, estos deben ser de la misma dimensión dado que la suma de dos vectores es una suma de arreglos entrada a entrada, es decir que se suman los elementos que ocupan la misma posición en cada vector, por ejemplo definir los vectores a, b y c y realiza las siguientes operaciones:

```

>> a=[0 2 4 6 8 10]; b=[1 3 5 7 9 11]; c=[1;2;3;1;0;2];
>> sab=a+b
sab =
    1    5    9   13   17   21
>> sac=a+c
??? Error using ==> +

```

Matrix dimensions must agree.

```
>> sac=a+c'
sac =
    1  4  7  7  8 12
```

Matlab toma en cuenta que la dimensión de los vectores a sumarse debe ser igual; al realizar la suma de los vectores a y c ($sac=a+c$), se marca un error pues la dimensión de a es (1x6), mientras que la de c es (6x1), lo que se corrige con el operador para trasponer un arreglo, el apostrofe ('); en el ejemplo anterior traspone el vector columna c y lo convierte en un vector fila con dimensión (1x 6) y entonces se realiza la suma.

El producto, cociente y potencia (*, /, ^) entre vectores (arreglos con una dimensión) se hace elemento a elemento, mediante el operador punto (.); Por ejemplo

```
>> b=[10 20 30 45];
>> pb=b^2
??? Error using ==> ^
Matrix must be square.
```

Esta instrucción marca un error porque b cuadrada es $b*b$ y se requiere del operador punto que permita el producto de arreglos, pues cuando se omite el punto en productos, Matlab toma por defecto el producto matricial, y no es este el caso. Para corregir, únicamente se agrega un punto antes del circunflejo que indica la potencia.

```
>> pb=b.^2
pb=
    100  400  900 2025
```

De forma análoga para el cociente de arreglos, se requiere del operador punto para indicar que es una operación entre arreglos, es decir entrada a entrada:

```
>> [2 4 5 8]/[-1 2 1 -4]
??? Error using ==> /
Inner matrix dimensions must agree.
>> [2 4 5 8]./[-1 2 1 -4]
ans =
   -2  2  5 -2
```

Direcccionamiento de vectores

Los elementos de un vector se pueden manipular haciendo referencia de la posición que ocupa dentro del mismo; por ejemplo en un arreglo $ar=[2 \ 4 \ 6 \ 8 \ 10]$, $ar(3)$ se refiere al elemento que ocupa la tercera posición en el vector, en este caso es el número 6. Es posible hacer un vector al direccionar los elementos de otro vector, por ejemplo:

```
>> v=[2, 4, 6, 8];
>> p=2*v
p =
    4    8   12   16
>> c=[v,p]
c =
    2    4    6    8    4    8   12   16
```

El vector p se crea con el doble de cada elemento del vector v , mientras que el vector c se compone por los elementos de v y p .

Operaciones con matrices

Producto de una matriz con un escalar

En el conjunto de las matrices de orden $m \times n$ se define la multiplicación de un escalar α (donde α es un número real) por una matriz A como:

$$\alpha A = [\alpha a_{ij}], \quad 1 \leq i \leq m, \quad 1 \leq j \leq n$$

Al multiplicar un escalar por una matriz se multiplica el escalar por cada uno de los elementos de la matriz

Suma de matrices

La suma de matrices se realiza elemento a elemento, por lo que se requiere que sean de la misma dimensión. La suma de matrices se define como:

$$A + B = [a_{ij} + b_{ij}], \quad 1 \leq i \leq m, \quad 1 \leq j \leq n$$

Por ejemplo, sean A y B matrices del mismo orden 2×3

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -7 \\ 4 & \sqrt{2} & 5 \end{bmatrix} \text{ y } B = \begin{bmatrix} -5 & 9 & 6 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1/2 \end{bmatrix}$$

y sea $\alpha = 2$ un número real, entonces

$$\alpha A = 2 \begin{bmatrix} 3 & 0 & -7 \\ 4 & \sqrt{2} & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (2)(3) & (2)(0) & (2)(-7) \\ (2)(4) & (2)(\sqrt{2}) & (2)(5) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 0 & -14 \\ 8 & 2\sqrt{2} & 10 \end{bmatrix}$$

Mientras que la suma de A y B es:

$$A + B = \begin{bmatrix} 3 & 0 & -7 \\ 4 & \sqrt{2} & 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -5 & 9 & 6 \\ 1 & -\sqrt{2} & 1/2 \end{bmatrix}$$

$$A + B = \begin{bmatrix} 3 + (-5) & 0 + 9 & -7 + 6 \\ 4 + 1 & \sqrt{2} + (-\sqrt{2}) & 5 + 1/2 \end{bmatrix}$$

$$A + B = \begin{bmatrix} -2 & 9 & -1 \\ 5 & 0 & 11/2 \end{bmatrix}$$

Matriz nula

Una matriz es llamada nula si todos sus elementos son cero, por ejemplo la matriz N de orden 2×3

$$N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

y se denota como $N=0$ y entonces $A + N = A$.

Propiedades de la multiplicación por escalar y de la suma de matrices.

Sean A, B, C matrices de orden $m \times n$ y sean α, β números reales

- I. $A + B = B + A$
- II. Existe la matriz nula 0 de orden $m \times n$ tal que $A + 0 = A$
- III. Existe $-A$ tal que $A + (-A) = 0$
- IV. $A + (B + C) = (A + B) + C$
- V. $\alpha(A + B) = \alpha A + \alpha B$
- VI. $(\alpha + \beta)A = \alpha A + \beta A$
- VII. $(\alpha\beta)A = \alpha(\beta A)$

Producto de matrices

Sean $A = [a_{ij}]$ una matriz de orden $m \times n$ y $B = [b_{ij}]$ una matriz de orden $n \times p$, entonces la multiplicación de A por B es la matriz $C = [c_{ij}]$ de orden $m \times p$ cuyos elementos se determinan por $c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}$ para toda i, j , esto es:

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{in}b_{nj} \text{ para toda } i, j.$$

Observemos lo siguiente:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{n1} & \cdots & b_{np} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{m1} & \cdots & c_{mp} \end{bmatrix}$$

Para calcular el elemento c_{11} de la matriz producto, consideramos los elementos de la fila 1 de la matriz A y los elementos de la columna 1 de B , así

$$c_{11} = a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} + \cdots + a_{1n}b_{n1}$$

Para determinar el elemento c_{12} de la matriz producto, consideramos los elementos de la fila 1 de A y los elementos de la columna 2 de B , así

$$c_{12} = a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} + \cdots + a_{1n}b_{n2}$$

En general, para obtener el elemento c_{ij} de la matriz producto, consideramos los elementos de la fila i de A y los elementos de la columna j de B , así

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \cdots + a_{in}b_{nj}$$

Debemos notar, que para multiplicar dos matrices el número de columnas de la primera debe ser igual al número de renglones de la segunda.

Ejemplo 4

Sean $A = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 4 & 5 \end{bmatrix}$ una matriz de orden 2×2 y $B = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 7 & -8 & 5 \end{bmatrix}$ una matriz de orden 2×3 . Obtener AxB .

Notemos en primer lugar que si podemos hacer la multiplicación de A por B , pues el número de columnas de A es 2, y es igual al número de renglones de B que también es 2. Así el producto será una matriz C de orden 2×3 .

$$AxB = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ 4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 7 & -8 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & c_{22} & c_{23} \end{bmatrix}$$

Donde

$$c_{11} = (3)(0) + (-1)(7) = -7 ; \text{ fila 1 de } A, \text{ columna 1 de } B$$

$$c_{12} = (3)(2) + (-1)(-8) = 14 ; \text{ fila 1 de } A, \text{ columna 2 de } B$$

$$c_{13} = (3)(1) + (-1)(5) = -2; \text{ fila 1 de } A, \text{ columna 3 de } B$$

$$c_{21} = (4)(0) + (5)(7) = 35; \text{ fila 2 de } A, \text{ columna 1 de } B$$

$$c_{22} = (4)(2) + (5)(-8) = -32; \text{ fila 2 de } A, \text{ columna 2 de } B$$

$$c_{23} = (4)(1) + (5)(5) = 29; \text{ fila 2 de } A, \text{ columna 3 de } B$$

$$\text{Por lo tanto } Ax B = \begin{bmatrix} -7 & 14 & -2 \\ 35 & -32 & 29 \end{bmatrix}$$

La multiplicación de matrices, a diferencia de la suma, no es conmutativa, esto es, $Ax B \neq Bx A$

Por ejemplo

$$Ax B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 3 \\ 6 & 6 \end{bmatrix}$$

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

Por lo tanto $Ax B \neq Bx A$

Si bien la multiplicación de matrices no es conmutativa, es asociativa y distributiva con respecto a la suma, esto es, si $Ay A_1, Bx B_1$, y C son matrices de ordenes $m \times n$, $n \times p$, y $p \times q$ respectivamente, entonces

$$Ax (Bx C) = (Ax B)x C$$

$$(A + A_1)x B = Ax B + A_1x B \text{ ó } Ax (B + B_1) = Ax B + Ax B_1$$

Matriz cuadrada

Cuando en una matriz A el número de filas sea igual al número de columnas (digamos n), la llamaremos matriz cuadrada de orden n . Si $A = [a_{ij}]$ es una matriz cuadrada de orden n , a los elementos $a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}$ se les llama elementos de la diagonal principal de la matriz A . Una matriz cuadrada de orden n cuyos elementos en la diagonal principal son todos uno y ceros en las demás posiciones es llamada matriz identidad de orden n , se denota por I_n , por ejemplo:

$$I_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \text{ matriz identidad de orden 3}$$

Observemos que si A es una matriz cuadrada de orden n , entonces $A I_n = I_n A = A$

Matriz inversa

Diremos que la matriz A tiene inversa si existe una matriz B tal que $AB = BA = I_n$, a la matriz B se le llama la inversa de la matriz A y se denota por A^{-1} ($B = A^{-1}$). Si una matriz A tiene inversa se dice que es invertible.

Para que una matriz A sea invertible debe ser cuadrada, pero hay que tener cuidado porque no toda matriz cuadrada es invertible. Una matriz cuadrada A que no es invertible es llamada matriz singular. Por ejemplo

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 1 \\ 4 & 2 & 6 \\ 7 & 6 & 5 \end{bmatrix} A^{-1} = \begin{bmatrix} -13/10 & -7/10 & 11/10 \\ 11/10 & 2/5 & -7/10 \\ 1/2 & 1/2 & -1/2 \end{bmatrix}$$

Al calcular AXA^{-1} se tiene que

$$AXA^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = I_3,$$

Por lo cual A es invertible y su inversa es A^{-1} ,

TAREA.

Declaración de vectores:

- Declara un arreglo con los elementos 2, 5, 8, 11,...,50, 53
- Obtener una tabla de los valores de la función $f(x) = 3x^2+x-2$, para los valores de $x = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$
- Obtener el producto de los siguientes arreglos:

$$v1 = (2, -4, 3, 5) \quad y \quad v2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \\ -2 \end{pmatrix}$$

- Obtener el cociente de $v2$ entre $v1$ y guardar el resultado en una variable $c1$.
- Calcular la raíz cuadrada de $v2$, y explicar la advertencia que hace matlab, sobre las raíces de números negativos así como su tratamiento en el resultado.
- Realiza las siguientes asignaciones en matlab:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 9 & 10 & 11 & 12 \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad c = [1, 1, 1, 1]$$

- Ejecuta la asignación $m1 = [A, b]$ y explica cómo se realiza la concatenación de A con b .
- Ejecuta la asignación $m2 = [A; b]$ y explica: porqué no es válida la concatenación de A con b y a que se refiere el mensaje de error de matlab.
- Ejecuta la asignación $m3 = [A; c]$ y explica cómo se realiza la concatenación de A con c .
- Hacer un programa que lea dos matrices del mismo orden $n \times m$ y las sume, la lectura y la suma ha de ser elemento por elemento.

PRÁCTICA No. 8

SOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES POR EL MÉTODO DE GAUSS-JORDAN

OBJETIVOS:

Expresar en forma matricial un sistema de ecuaciones lineales y aplicar las operaciones básicas de matrices equivalentes para obtener su solución por los métodos de Gauss, de Gauss-Jordan y por la matriz inversa.

INTRODUCCIÓN

Un sistema de ecuaciones lineales

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2$$

...

$$a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n = b_m$$

se puede representar matricialmente por los coeficientes numéricos como:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

o simplemente: $A \times X = B$

La matriz $\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$ es llamada matriz de coeficientes del sistema y la matriz, mientras que

$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} & b_m \end{bmatrix}$ es llamada matriz aumentada.

Interpretación grafica de la solución de sistemas de ecuaciones lineales.

Sea un sistema de dos ecuaciones lineales $\begin{cases} a_{11}x + a_{12}y = b_1 & (l_1) \\ a_{12}x + a_{22}y = b_2 & (l_2) \end{cases}$

La solución de un sistema de dos ecuaciones lineales, corresponde a un valor de x que satisface a ambas ecuaciones. De manera gráfica corresponde a un valor común a ambas líneas, es decir a un punto de intersección de las rectas.

La gráfica de dos ecuaciones lineales con solución única, es de dos líneas concurrentes, porque las dos rectas se cortan en un solo punto.

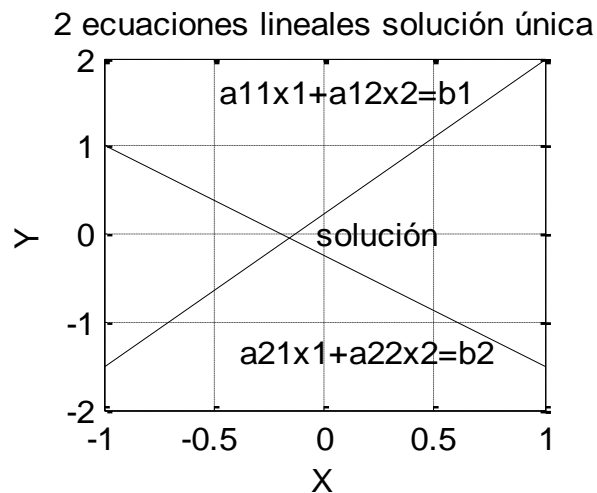


Figura 8.1 Solución única en un sistema de dos ecuaciones lineales

Cuando el sistema no tiene solución, no hay intersección de las rectas, lo que corresponde a líneas paralelas, las cuales no se tocan, y tienen la misma pendiente pero diferente ordena al origen.

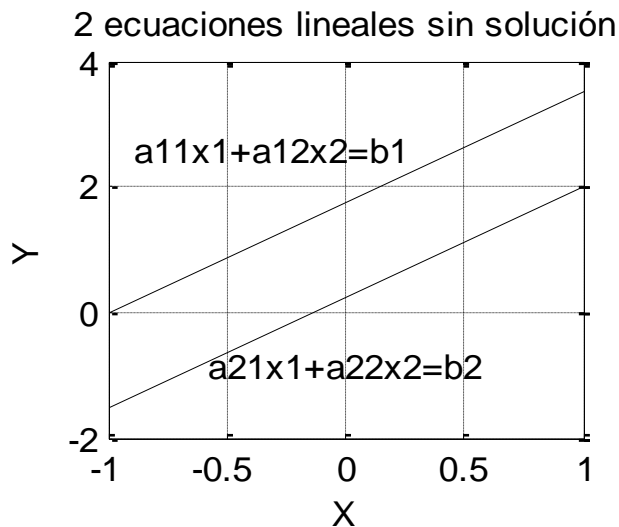


Figura 8.2 Sistema de dos ecuaciones lineales sin solución

Un tercer caso corresponde a la infinidad de soluciones, cuando una línea recta esta sobre la otra, de modo que se tiene infinidad de puntos de intersección, esto ocurre cuando la ecuación de una de las rectas es múltiplo de la otra.

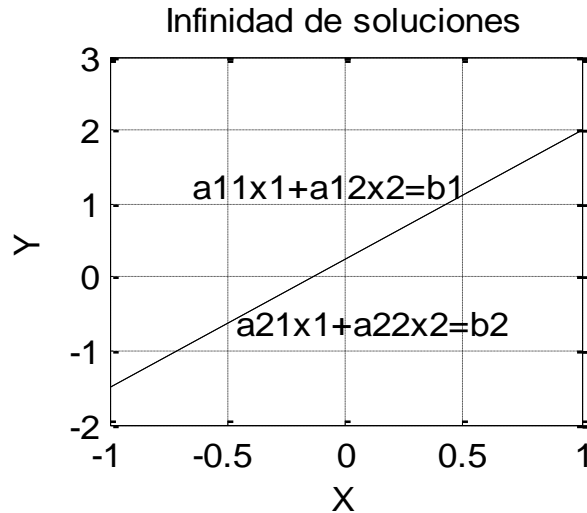


Figura 8.3 Sistema de dos ecuaciones lineales con infinitad de soluciones

Solución de sistemas de ecuaciones con el método de Gauss (forma escalonada y sustitución inversa)

Un método para resolver sistemas de ecuaciones lineales consiste en transformar la matriz aumentada, mediante operaciones elementales de renglón, a la forma escalonada y finalmente despejar para obtener el valor de las incógnitas. Las operaciones elementales de renglón son:

- i. Intercambiar renglón A_i por el renglón A_r , $A_i \leftrightarrow A_r$
- ii. Sustituir el renglón A_i , por el producto del renglón A_i por una constante c , $c * A_i \rightarrow A_i$
- iii. Sustituir en el renglón r , por la suma de n veces el renglón A_i con el renglón A_r , $n * A_i + A_r \rightarrow A_r$

Por ejemplo, resolver el sistema de ecuaciones, por el método de Gauss

$$\begin{cases} 3x + 4y + z = 10 \\ 2x + 3y + 4z = 9 \\ x + 2y + 3z = 6 \end{cases}$$

Primero se escribe la matriz A de coeficientes de forma aumentada y después se reduce a la forma escalonada

$$A = \begin{bmatrix} 3 & 4 & 1 & 10 \\ 2 & 3 & 4 & 9 \\ 1 & 2 & 3 & 6 \end{bmatrix}$$

Intercambiando el renglón 1 con el renglón 3

$$\begin{bmatrix} 3 & 4 & 110 \\ 2 & 3 & 49 \\ 1 & 2 & 36 \end{bmatrix} A_1 \leftrightarrow A_3 \begin{bmatrix} 1 & 2 & 36 \\ 2 & 3 & 49 \\ 3 & 4 & 110 \end{bmatrix}$$

Para hacer cero el elemento $A(2,1)$, se sustituye el renglón 2 por la suma de 2 veces el renglón 1 con el renglón 2:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 36 \\ 2 & 3 & 49 \\ 3 & 4 & 110 \end{bmatrix} -2A_1 + A_2 \rightarrow A_2 \begin{bmatrix} 1 & 2 & 36 \\ 0 & -1 & -2-3 \\ 3 & 4 & 110 \end{bmatrix}$$

De forma análoga para hacer cero el elemento $A(3,1)$, se sustituye el renglón 3 por la suma de 3 veces el renglón 1 con el renglón 3:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 36 \\ 0 & -1 & -2-3 \\ 3 & 4 & 110 \end{bmatrix} -3A_1 + A_3 \rightarrow A_3 \begin{bmatrix} 1 & 2 & 36 \\ 0 & -1 & -2-3 \\ 0 & -2 & -8-8 \end{bmatrix}$$

Para obtener el pivote en la posición $A(2, 2)$ se multiplica el renglón 2 por -1 (valor en la posición $A(2,2)$)

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 36 \\ 0 & -1 & -2-3 \\ 0 & -2 & -8-8 \end{bmatrix} -1A_2 \rightarrow A_2 \begin{bmatrix} 1 & 2 & 36 \\ 0 & 1 & 23 \\ 0 & -2 & -8-8 \end{bmatrix}$$

Para reducir a cero el elemento $A(1,2)$, se sustituye el renglón 1 por la suma del renglón 2 por -2 con el renglón 1.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -10 \\ 0 & 1 & 23 \\ 0 & -2 & -8-8 \end{bmatrix} 2A_2 + A_3 \rightarrow A_3 \begin{bmatrix} 1 & 0 & -10 \\ 0 & 1 & 23 \\ 0 & 0 & -4-2 \end{bmatrix}$$

Por lo que el sistema de ecuaciones equivalente es:

$$\begin{cases} x - z = 0 \\ y + 2z = 3 \\ -4z = -2 \end{cases}$$

Ahora al desarrollar la sustitución inversa:

$$z = \frac{1}{2}$$

$$y = 2$$

$$x = \frac{1}{2}$$

El método de Gauss-Jordan consiste en seguir aplicando las operaciones elementales entre renglones hasta la forma escalonada reducida, con ceros alrededor de la diagonal principal de unos.

La solución de sistemas de ecuaciones por el método de Gauss-Jordan, consiste en transformar la matriz aumentada, asociada a un sistema de ecuaciones lineales, en su forma escalonada reducida, mediante una sucesión finita de las operaciones elementales por renglones. Primero se escribe la matriz aumentada del sistema de ecuaciones lineales:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{array} \right)$$

Después se aplican las operaciones elementales sobre renglones (i, ii y iii), para llevar a la forma escalonada reducida, dónde los elementos de la diagonal principal son uno, el resto son cero y los valores K_1 , K_2 , y K_3 son los valores de las variables respectivamente.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & K_1 \\ 0 & 1 & 0 & K_2 \\ 0 & 0 & 1 & K_3 \end{array} \right)$$

Para obtener el pivote en la posición A(3, 3) se multiplica el renglón 3 por -4 (valor en la posición A(3,3))

$$\frac{A_3}{-4} \rightarrow A_3 \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Para reducir a cero el elemento A(1,3), se sustituye el renglón 1 por la suma del renglón 3 con el renglón 1.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} A_1 + A_3 \rightarrow A_3 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Para reducir el elemento A(2,3), se sustituye el renglón 2 por la suma del 3 veces el renglón 1 más el renglón 2 :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} - 2A_3 + A_2 \rightarrow A_2 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

Por lo que el sistema de ecuaciones equivalente representa la solución:

$$z = \frac{1}{2}$$

$$y = 2$$

$$x = \frac{1}{2}$$

DESARROLLO

En MATLAB las operaciones elementales de región, para la solución del ejercicio anterior, se realizan con las siguientes instrucciones:

Declarar la matriz A

```
>>A=[3, 4, 1, 10;2, 3, 4, 9;1, 2, 3, 6]
```

A =

```
3    4    1   10
2    3    4    9
1    2    3    6
```

Intercambiar renglón A_i por el renglón A_r , $A_i \leftrightarrow A_r$, en este caso, se intercambia el renglón 1 con el renglón 3

```
>>aux = A(1,:) (Asigna a la variable aux, los elementos de la fila 1)
```

aux =

```
3    4    1   10
```

```
>> A(1,:) = A(3,:) (Asigna los elementos de la fila 2 en la fila 1 de la matriz A)
```

A =

```
1    2    3    6
2    3    4    9
1    2    3    6
```

```
>> A(3,:) = aux (Asigna los elementos guardados en aux, a la fila 2 de la matriz A)
```

A =

```
1    2    3    6
```

2	3	4	9
3	4	1	10

Para el ejemplo, el pivote $a(1,1)$ ya es 1, sin embargo se muestran los comandos de Matlab para obtener el pivote en el renglón 1, columna 1:

```
>> A(1,:) = A(1,+)/A(1,1)

A =
     1     2     3     6
     2     3     4     9
     3     4     1    10
```

Se sustituye el renglón r , con la suma de n veces el renglón A_i con el renglón A_r , $n * A_i + A_r \rightarrow A_r$. Para el ejemplo se deben hacer cero los elementos $A(2,1)$ y $A(3,1)$, para el elemento $A(2,1)$, se sustituye el renglón 2 por la suma de 2 veces el renglón 1 con el renglón 2 y de forma análoga para el elemento $A(3,1)$, se sustituye el renglón 3 por la suma de 3 veces el renglón 1 con el renglón 3:

```
>> A(2,:) = A(2,)-A(1,)*A(2,1)

A =
     1     2     3     6
     0    -1    -2    -3
     3     4     1    10

>> A(3,:) = A(3,)-A(1,)*A(3,1)

A =
     1     2     3     6
     0    -1    -2    -3
     0    -2    -8    -8
```

Para hacer el pivote del elemento $A(2,2)$, se divide el renglón 2 entre el elemento $a(2,2)$:

```
>> A(2,:) = A(2,)/A(2,2)

A =
     1     2     3     6
     0     1     2     3
     0    -2    -8    -8
```

Para eliminar los elementos $A(1,2)$ y $A(3,2)$

```
>> A(1,:) = A(1,:)-A(2,:)*A(1,2)
```

```
A =
```

```
1  0  -1  0
0  1  2  3
0  -2  -8  -8
```

```
>> A(3,:) = A(3,:)-A(2,:)*A(3,2)
```

```
A =
```

```
1  0  -1  0
0  1  2  3
0  0  -4  -2
```

Por lo que el sistema de ecuaciones equivalente es:

$$\begin{cases} x - z = 0 \\ y + 2z = 3 \\ -4z = -2 \end{cases}$$

Para obtener la forma escalonada reducida, se ejecutan los siguientes comandos:

```
>> A(3,:) = A(3,:)/A(3,3)
```

```
A =
```

```
1.0000    0 -1.0000    0
    0  1.0000  2.0000  3.0000
    0    0  1.0000  0.5000
```

```
>> A(1,:) = A(1,:)-A(3,:)*A(1,3)
```

```
A =
```

```
1.0000    0    0  0.5000
    0  1.0000  2.0000  3.0000
    0    0  1.0000  0.5000
```

```
>> A(2,:) = A(2,:)-A(3,:)*A(2,3)
```

```
A =
```

```
1.0000    0    0  0.5000
    0  1.0000    0  2.0000
    0    0  1.0000  0.5000
```

Por lo que el sistema de ecuaciones equivalente representa la solución:

$$z = \frac{1}{2}$$

$$y = 2$$

$$x = \frac{1}{2}$$

Otra forma de resolver el sistema de ecuaciones, es por el método de la matriz inversa, calculando el producto de la inversa de la matriz de coeficientes por el vector solución, teniendo cuidado de la condición necesaria para el producto de matrices, dónde el número de columnas de la primera matriz debe coincidir con el número de filas de la segunda.

Para obtener la matriz inversa de la matriz, se escribe la matriz aumentada pero con la matriz identidad del mismo orden, por ejemplo sean M la matriz de coeficientes, aumentada con la matriz identidad del mismo orden que M y sea b el vector solución.

```
>>M=[3, 4, 1, 1, 0, 0;2, 3, 4, 0, 1, 0;1, 2, 3, 0, 0, 1]
```

M =

3	4	1	1	0	0
2	3	4	0	1	0
1	2	3	0	0	1

```
b=[10; 9; 6]
```

b=

10
9
6

Al aplicar las operaciones elementales la matriz aumentada con la matriz identidad, se obtiene la matriz identidad aumentada con la matriz inversa:

$[M \mid I]$ Operaciones elementales $[I \mid M']$

Para el ejercicio anterior, los comandos ejecutados son los siguientes:

```
>>aux = M(1,:)
>> M(1,:) = M(3,:)
>> M(3,:) = aux
>> M(1,:) = M(1,+)/M(1,1)
>> M(2,:) = M(2,)-M(1,)*M(2,1)
>>M(3,:) = M(3,)-M(1,)*M(3,1)
>> M(2,:) = M(2,)/M(2,2)
```

```
>> M(1,:) = M(1,:)-M(2,:)*M(1,2)
>> M(3,:) = M(3,:)-M(2,:)*M(3,2)
>> M(3,:) = M(3,:)/M(3,3)
>> M(1,:) = M(1,:)-M(3,:)*M(1,3)
>> M(2,:) = M(2,:)-M(3,:)*M(2,3)
```

Cuyo resultado final debe ser

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -2.5 & 2.5 & -3.25 \\ 0 & 1 & 0 & 0.50 & -2.0 & 2.50 \\ 0 & 0 & 0 & -2.5 & 0.5 & -0.25 \end{bmatrix}$$

Dónde la matriz inversa es

$$M' \begin{bmatrix} -2.5 & 2.5 & -3.25 \\ 0.50 & -2.0 & 2.5 \\ -2.5 & 0.50 & -0.25 \end{bmatrix}$$

Para resolver el sistema se hace el producto de la matriz (M') inversa con el vector solución (b), asignando la solución a una variable s, por ejemplo:

```
>> s=inv(M)*B
s =
    0.5000
    2.0000
    0.5000
```

Los resultados corresponden a los valores de las variables, x, y, z.

$$z = \frac{1}{2}$$

$$y = 2$$

$$x = \frac{1}{2}$$

Que es la misma solución que por el método de Gauss y de Gauss Jordan. Con Matlab se puede calcular la matriz inversa con la función *inv*.

```
>> M=[3 4 1; 2 3 4; 1 2 3]
M =
```

```

3  4  1
2  3  4
1  2  3
>>inv(M)
ans =
-0.2500  2.5000 -3.2500
 0.5000 -2.0000  2.5000
-0.2500  0.5000 -0.2500
>> B=[10;9;6];
>> s=inv(M)*B
s =
0.5000
2.0000
0.5000

```

TAREA

1. Aplica el método de Gauss Jordan y el de la matriz inversa para el siguiente sistema de ecuaciones lineales.

$$-x + 2y + 4z + w = 1$$

$$3y - 2x - 4w + z = 2$$

$$2y - x + 2z + w = -2$$

$$8z - 3x + 6w = 0$$

2. Resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales.

$$\begin{cases} 2x - y + 3z = -1 \\ 3x + 2y + z = 2 \\ x + y - 3z = -2 \end{cases}$$

a. Por el método de Gauss, realizando las operaciones con calculadora.

b. Por el método de Gauss, realizando las operaciones con comandos de Matlab.

3. Aplica el método de Gauss Jordan y demuestra que la solución del siguiente sistema de ecuaciones es $x_1 = 1.5$, $x_2 = -1$ y $x_3 = 0.5$

$$x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 2$$

$$2x_1 + x_2 + 4x_3 = 4$$

$$x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 1$$

4. Verifica el resultado del inciso anterior con el método de la matriz inversa.
5. Resuelve por el método de Gauss Jordan y verifica tu solución por el método de la matriz inversa

$$-x_1 + 2x_2 + x_3 + 4x_4 = 2$$

$$x_1 + 3x_2 + 6x_3 - x_4 = 0$$

$$2x_1 + 8x_2 + 2x_3 + 8x_4 = -2$$

$$-2x_1 + x_2 + 5x_3 + 6x_4 = 6$$

6. Escribe en forma matricial el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$2X_2 - 2X_1 + X_4 = 2$$

$$-X_3 + 3X_2 + 2X_4 = -1$$

$$-X_4 + 5X_2 - X_3 = 0$$

$$X_1 - 6X_2 + 2X_3 - X_4 = 4$$

PRACTICA No. 9.

REGRESIÓN POLINOMIAL POR CUADRADOS MÍNIMOS.

OBJETIVO GENERAL

Ajustar una función polinomial a un conjunto de datos experimentales representados por un par de variables, una independiente y otra dependiente (x, y), por el método de cuadrados mínimos

INTRODUCCIÓN.

El procedimiento para ajustar un conjunto de datos experimentales (x_i, y_i) a un polinomio de grado n, se denomina regresión polinomial; se parte de un conjunto de medidas experimentales que corresponden con un conjunto de pares de datos ordenados (x_i, y_i) , y se desea obtener una función polinomial que se ajuste lo mejor posible a los valores experimentales,

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + a_{n-3} x^{n-3} + a_{n-4} x^{n-4} + \dots + a_1 x + a_0$$

Una vez establecido el grado n al que se va a ajustar el polinomio, se determinan los coeficientes numéricos $a_n, a_{n-1}, a_{n-2}, \dots, a_0$, es decir los coeficientes numéricos del polinomio, de modo que los datos experimentales se desvíen lo menos posible del polinomio, lo cual ocurre cuando la suma de cuadrados de las desviaciones entre los valores experimentales y los estimados por el polinomio sean mínimos:

$$\sum_{i=1}^{i=m} d_i^2 = \sum_{i=1}^{i=m} [P(x_i) - y_i]^2$$

$$\min \sum_{i=1}^{i=m} [P(x_i) - y_i]^2$$

$$\min \sum_{i=1}^{i=m} [a_n x_i^n + a_{n-1} x_i^{n-1} + a_{n-2} x_i^{n-2} + a_{n-3} x_i^{n-3} + a_{n-4} x_i^{n-4} + \dots + a_1 x_i + a_0 - y_i]^2$$

Una desviación es la diferencia entre un valor observado (y_i) y un valor ajustado (\hat{y}_i). Por ejemplo para un ajuste lineal, el valor ajustado se calcula por $y_i = a_1 x_i + a_0$ mientras que el valor observado (y_i) puede ser obtenido de un experimento, la discrepancia o desviación se define por: $d_i = \hat{y}_i - y_i$.

La suma de estas discrepancias tiende a cero, dado que la recta de ajuste pasa entre los puntos experimentales y hay discrepancias positivas y negativas cuya suma tiende a ser cero, por lo que es necesario hacer todas las desviaciones positivas; la forma de realizarlo en cuadrados mínimos es elevar al cuadrado las discrepancias. Considere la siguiente gráfica, para un punto (x_i, y_i) .

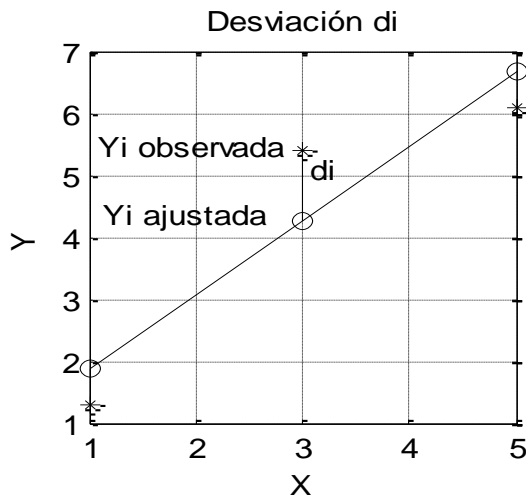


Figura 9.1 Desviaciones entre los datos observados * y los estimados o

Los valores de los coeficientes del polinomio de ajuste, son los valores de $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$, de modo que la suma de cuadrados de las discrepancias tome un valor mínimo. Por lo que se deriva parcialmente respecto a cada coeficiente a_i e iguala a cero, obteniendo un sistema de $n+1$ ecuaciones con $n+1$ incógnitas, a_0, a_1, \dots, a_n

Procedimiento para la regresión lineal por mínimos cuadrados.

Se dispone de una serie de puntos $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, que representados gráficamente deberían caer alrededor de una línea recta, es decir la tendencia o patrón general sigue la forma de una línea recta. Por otra parte el polinomio de ajuste es de la forma $y_i = a_1 x_i + a_0$, de forma que se deben de obtener los valores de a_0 y a_1 para que la ecuación quede definida. Para determinar los valores de los coeficientes a_0, a_1 , de la recta que mejor se ajusta a los datos experimentales, se deriva parcialmente respecto a cada coeficiente a_0, a_1 , y se resuelve el sistema de ecuaciones obtenido:

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_0} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} [a_1 x_i + a_0 - y_i]^2}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^{i=m} 2(a_1 x_i + a_0 - y_i)(1) = 0$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_1} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} [a_1 x_i + a_0 - y_i]^2}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^{i=m} 2(a_1 x_i + a_0 - y_i)(x_i) = 0$$

Haciendo las operaciones y reacomodando los términos, se obtiene el sistema de las ecuaciones normales de ajuste de regresión lineal:

$$ma_0 + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i = \sum_{i=1}^{i=m} y_i$$

$$a_0 \sum_{i=1}^{i=m} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 = \sum_{i=1}^{i=m} x_i y_i$$

Se resuelve el sistema de ecuaciones para a_0 , a_1 , por lo que el sistema en forma matricial es:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^{i=m} x_i \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_i & \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{i=m} y_i \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_i y_i \end{bmatrix}$$

Para resolver el sistema de ecuaciones se puede emplear alguno de los procedimientos como el de Gauss-Jordan o por determinantes, resultando las ecuaciones para la pendiente y la ordenada al origen:

$$a_1 = \frac{m \left(\sum_{i=1}^m x_i y_i \right) - \left(\sum_{i=1}^m x_i \right) \left(\sum_{i=1}^m y_i \right)}{m \left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^m x_i \right)^2}$$

$$a_0 = \frac{\left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^m y_i \right) - \left(\sum_{i=1}^m x_i y_i \right) \left(\sum_{i=1}^m x_i \right)}{m \left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^m x_i \right)^2}$$

El coeficiente de correlación lineal es un parámetro que nos indica el grado de dependencia entre las variables x e y . El coeficiente de correlación r es un número que se obtiene mediante la fórmula:

$$r = \frac{m(\sum x_i y_i) - (\sum x_i)(\sum y_i)}{\sqrt{[m(\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2][m(\sum y_i^2) - (\sum y_i)^2]}}$$

Su valor puede variar entre 1 y -1.

Si $r = -1$ todos los puntos se encuentran sobre la recta la correlación es perfecta e inversa.

Si $r = 0$ no existe ninguna relación entre las variables.

Si $r = 1$ todos los puntos se encuentran sobre la recta con una correlación perfecta y directa.

Estimación del error en el ajuste lineal por mínimos cuadrados.

Las discrepancias se definen como la diferencia entre el valor estimado y el valor experimental o real, en la literatura se conocen estas discrepancias como residuos y son una forma de representar el error para cada una de las estimaciones de los datos experimentales:

$$d_i = e_i = y_i - a_0 - a_1 x_i$$

e_i representa la distancia vertical entre el dato experimental y la línea recta de ajuste. Una forma

de estimar el error es con el error estándar del estimado $S_{y/x}$: $S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_R}{n-2}}$

$S_{y/x}$ es el error predicho de y_i para un valor particular de x_i , y cuantifica la dispersión de los datos alrededor de la línea de regresión, a diferencia de la desviación estándar s , que mide la dispersión alrededor de la media. S_R es la suma de cuadrados de los residuos e_i (o discrepancias d_i)

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

La bondad del ajuste se mide con el coeficiente de regresión r^2 , y el coeficiente de correlación r , para lo cual se calculan la diferencia entre la suma de cuadrados total S_t y la suma de cuadrados de los residuos S_R ; S_t es una medida del error residual, asociado con la variable dependiente antes de la regresión y S_R es asociado con la línea de regresión, es decir después de la regresión. La diferencia entre S_t y S_R caracteriza al error residual que queda después de la regresión y algunas veces se le llama como suma inexplicable de los cuadrados, esta diferencia depende de la escala, por lo que se normaliza, dividiendo la diferencia entre, entre S_t y así obtener r^2 . Suma total de los cuadrados alrededor de la media S_t se calcula por

$$S_t = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \text{ donde } \bar{y} \text{ es la media aritmética.}$$

El coeficiente de determinación se calcula por: $r^2 = \frac{st - sr}{st} = 1 - \frac{sr}{st}$

El coeficiente de correlación se calcula por: $r = \sqrt{1 - \frac{sr}{st}}$

Procedimiento para la regresión cuadrática por mínimos cuadrados.

Se dispone de una serie de puntos $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, que representados gráficamente deberían caer alrededor de una curva cuadrática, es decir la tendencia o patrón general sigue la forma de una parábola. El polinomio de ajuste es de la forma: $y_i = a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0$

De manera que se deben de obtener los valores de a_0 , a_1 y a_2 para que la ecuación quede definida.

Para determinar los valores óptimos (mínimos) de los coeficientes a_0 , a_1 y a_2 de la parábola que mejor se ajusta a los datos experimentales, se deriva parcialmente respecto a cada coeficiente a_0 , a_1 y a_2 y se resuelve el sistema de ecuaciones normales:

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_1} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} [a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i]^2}{\partial a_1}$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_1} = \sum_{i=1}^{i=m} 2(a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i)(x_i) = 0$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_2} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} [a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i]^2}{\partial a_2}$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_2} = \sum_{i=1}^{i=m} 2(a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i)(x_i^2) = 0$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_0} = \frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} [a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i]^2}{\partial a_0}$$

$$\frac{\partial \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2}{\partial a_0} = \sum_{i=1}^{i=m} 2(a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 - y_i)(1) = 0$$

Haciendo las operaciones y acomodando los términos, se obtiene el sistema de las ecuaciones normales del ajuste de regresión lineal:

$$\begin{aligned}
 ma_0 + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 &= \sum_{i=1}^{i=m} y_i \\
 a_0 \sum_{i=1}^{i=m} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^3 &= \sum_{i=1}^{i=m} x_i y_i \\
 a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^4 &= \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 y_i
 \end{aligned}$$

Se resuelve el sistema de ecuaciones para a_0 , a_1 , y a_2 , por lo que el sistema en forma matricial es:

$$\begin{bmatrix}
 m & \sum_{i=1}^{i=m} x_i & \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 \\
 \sum_{i=1}^{i=m} x_i & \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{i=m} x_i^3 \\
 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 & \sum_{i=1}^{i=m} x_i^3 & \sum_{i=1}^{i=m} x_i^4
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 a_0 \\
 a_1 \\
 a_2
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 \sum_{i=1}^{i=m} y_i \\
 \sum_{i=1}^{i=m} x_i y_i \\
 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 y_i
 \end{bmatrix}$$

Para resolver el sistema de ecuaciones se puede emplear alguno de los procedimientos como el de Gauss-Jordan.

Generalización del modelo

El ajuste de datos por mínimos cuadrados, se puede extender para un polinomio de grado n

$$y_i = a_n x_i^n + a_{n-1} x_i^{n-1} + a_{n-2} x_i^{n-2} + \dots + a_2 x_i^2 + a_1 x_i + a_0 + e$$

Para lo cual se requieren al menos $m+1$ datos y resolver el sistema de ecuaciones de orden $n+1$:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \dots & \sum_{i=1}^m x_i^n \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^4 & \dots & \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 & \sum_{i=1}^m x_i^3 & \sum_{i=1}^m x_i^4 & \sum_{i=1}^m x_i^5 & \dots & \sum_{i=1}^m x_i^{n+2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=1}^m x_i^n & \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} & \sum_{i=1}^m x_i^{n+2} & \sum_{i=1}^m x_i^{n+3} & \dots & \sum_{i=1}^m x_i^{n+n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i^2 y_i \\ \dots \\ \sum_{i=1}^m x_i^n y_i \end{bmatrix}$$

Este sistema se puede resolver por cualquiera de los métodos desarrollados para sistemas de ecuaciones lineales, desarrollados en la práctica anterior, para obtener los coeficientes a_0, a_1, \dots, a_n .

Estimación del error en el ajuste polinomial por mínimos cuadrados.

El error estándar se calcula con la fórmula

$$S_{\frac{x}{y}} = \sqrt{\frac{S_R}{m - (n + 1)}}$$

Dónde n es el grado del polinomio de ajuste y m es el número de datos. El coeficiente de determinación se calcula por:

$$r^2 = \frac{st - sr}{st} = 1 - \frac{sr}{st}$$

El coeficiente de correlación se calcula por:

$$r = \sqrt{1 - \frac{sr}{st}}$$

$$S_R = \sum_{i=1}^N e_i^2 = \sum_{i=1}^n \left(y_i - a_n x_i^n - a_{n-1} x_i^{n-1} - a_{n-2} x_i^{n-2} - \dots - a_2 x_i^2 - a_1 x_i - a_0 \right)^2$$

$$S_t = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

DESARROLLO:

Ejercicio 1: Considere los datos de la siguiente tabla de datos experimentales:

x_i	1	2	3	4	5	6	7	8
y_i	1.3	3.5	4.2	5.0	7.0	8.8	10.1	12.5

- Obtener el diagrama de dispersión y por inspección gráfica describir el patrón que siguen los datos.
- Calcule los coeficientes numéricos para el ajuste lineal, calculando las sumatorias en una tabla de la forma tradicional.
- Calcule los coeficientes numéricos para el ajuste lineal, calculando las sumatorias con comandos de matlab.
- Calcule los coeficientes numéricos para el ajuste lineal, con el comando polifyt
- Determine la ecuación de ajuste.
- Grafique la línea de ajuste sobre el diagrama de dispersión.
- Calcule la suma de las discrepancias de los datos originales.
- Calcule el coeficiente de correlación e interprete su valor.
- Calcula el error estándar del estimado.

Solución:

- El diagrama de dispersión se obtiene con los siguientes comandos de Matlab

```
>>xp=1:8;
>>yp=[1.3 3.5 4.2 5 7 8.8 10.1 12.5];
>> plot(xp,yp,'k*');grid
>>title('Diagrama de dispersión')
>>xlabel ('X');ylabel ('Y')
```

En la salida se puede ver que la tendencia de los puntos es

de una línea recta, por lo que se puede realizar un ajuste lineal.

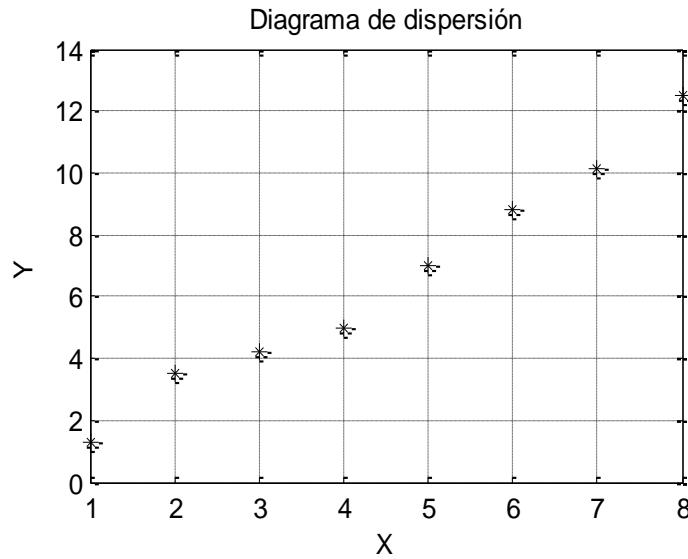


Figura 9.2 Gráfica de dispersión de los pares de puntos (x_i, y_i)

- b) Para hacer el ajuste a una línea recta se calculan las sumatoria de las fórmulas para a_0 y a_1 , como se muestra en la siguiente tabla:

X_i	Y_i	X_i^2	$X_i Y_i$
1	1.3	1	1.3
2	3.5	4	7.0
3	4.2	9	12.6
4	5.0	16	20.0
5	7.0	25	35.0
6	8.8	36	52.8
7	10.1	49	70.7
8	12.5	64	100.0
$\sum x_i = 36$	$\sum y_i = 52.4$	$\sum x_i^2 = 204$	$\sum x_i y_i = 299.4$

Aplicando estos resultados en las fórmulas de a_0 y a_1 , tenemos lo siguiente:

$$a_1 = \frac{8(299.4) - (36)(52.4)}{8(204) - (36)^2}$$

$$a_1 = \frac{2395.2 - 1886.4}{1632 - 1296}$$

$$a_1 = \frac{508.8}{336}$$

$$a_1 = 1.514$$

$$a_0 = \frac{(204)(52.4) - (299.4)(36)}{8(204) - (36)^2}$$

$$a_0 = \frac{10689.6 - 10778.4}{1632 - 1296}$$

$$a_0 = \frac{-88.8}{336}$$

$$a_0 = -0.264$$

La ecuación de la recta que mejor se aproxima al conjunto de datos, tiene los coeficientes $a_0 = -0.264$ y $a_1 = 1.514$ y está dada por:

$$y = a_1x + a_0 \Rightarrow y = 1.514x - 0.264$$

c) Las sumatorias se pueden calcular fácilmente con matlab, al ejecutar los siguientes comandos:

```
>>m=length (xp)
m=
    8
>>sx= sum(xp)
sx =
    36
>>sy= sum(yp)
sy =
   52.4000
>>scx=sum(xp.^2)
scx =
    204
>>scy=sum(yp.^2)
scy =
   441.2800
```

```
>>sxy=sum(yp.*xp)
ans =
299.4000
```

Se pueden calcular los parámetros a_0 y a_1 con las ecuaciones anteriores, con las siguientes instrucciones de matlab.

```
>> a0=(scx*sy-sxy*sx)/(m*scx-sx^2)
a0 =
-0.2643
>> a1=(m*sxy-sx*sy)/(m*scx-sx^2)
a1 =
1.5143
```

- d) Otra forma más directa es usar el comando *polyfit* (x,y,n), que hace el ajuste por mínimos cuadrados, dónde x corresponde a la variable independiente, y a la dependiente y n el grado del polinomio de ajuste, como se muestra a continuación.

```
>>pol=polyfit(xp,yp,1)
pol =
1.5143 -0.2643
```

- e) Por lo que el polinomio de ajuste es $y = 1.5143x - 0.2643$ y este queda representado en la variable *pol*.
- f) Para graficar el polinomio de ajuste en el diagrama de dispersión, se usa el comando *hold on* y se evalúan los valores de la gráfica en datos de mayor resolución.

```
>>hold on
>>xg=1:0.1:8;
>>yg=polyval(pol,xg);
>>plot(xg,yg,'k');
```

La grafica resultante se muestra en la siguiente figura:

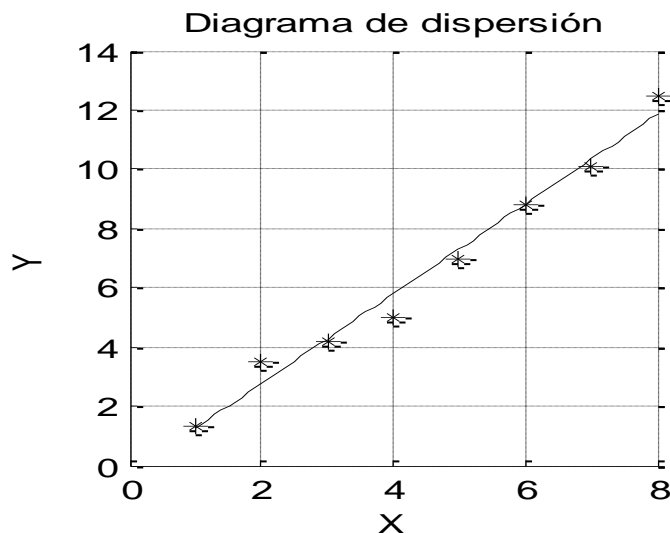


Figura 9.3 Gráfica de la ecuación de ajuste y los datos experimentales

Como se puede observar, la línea debe pasar entre los puntos, de forma que sea mínima la suma de las discrepancias.

- g) Para calcular las discrepancias en cada dato experimental, se estiman los valores de \hat{y}_i para cada x_i , y se hace la diferencia con los datos experimentales.

x_i	y_i	$\hat{y} = 1.514x - 0.264$	d_i
1	1.3	1.25	-0.05
2	3.5	2.76	-0.74
3	4.2	4.27	0.07
4	5.0	5.79	0.79
5	7.0	7.30	0.3
6	8.8	8.82	0.02
7	10.1	10.33	0.23
8	12.5	11.84	-0.66
Σ			-0.04

Para hacerlo en matlab, podemos evaluar el polinomio de ajuste en cada valor de x_i , usando el comando `polyval` y guardando los valores en una variable `yest` (*y estimada*), y hacer las diferencias con cada dato experimental y_i .

```
>>yest= polyval (pol,xp)
yest =
Columns 1 through 8
    1.2500    2.7643    4.2786    5.7929    7.3071    8.8214   10.3357   11.8500
>> disc=yp-yest
disc =
Columns 1 through 8
    0.0500    0.7357   -0.0786   -0.7929   -0.3071   -0.0214   -0.2357    0.6500
>>sdisc=sum(disc)
sdisc =
1.0658e-014
```

Podemos notar nuevamente que la suma de discrepancias (también llamados residuos), es casi cero, dado que la curva de ajuste pasa entre los puntos, minimizando las diferencias del modelo (ecuación de ajuste) con los datos.

h) El coeficiente de correlación se calcula en general con la fórmula

$$i) \quad r = \sqrt{1 - \frac{sr}{st}}$$

$$\text{Con: } S_R = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

$$S_t = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

Que en matlab se pueden calcular con las siguientes instrucciones:

```
>>sR=sum((yp-yest).^2)
sR =
    1.7514
>>st=sum((yp-mean(yp)).^2)
st =
    98.0600
>> r=sqrt(1-sR/st)
r =
    0.9910
```

El coeficiente de correlación es 0.991, lo que indica una buena correlación entre las variables (casi es perfecta $r=1$)

También se puede calcular r con la fórmula particular de la regresión lineal:

$$r = \frac{m(\sum x_i y_i) - (\sum x_i)(\sum y_i)}{\sqrt{[m(\sum x_i^2) - \sum (x_i)^2][m(\sum y_i^2) - (\sum y_i)^2]}}$$

Que en matlab se puede obtener con:

```
>>sy=sum(yp.^2)
sy=
    441.2800
r=(m*sxy-sx*sy)/sqrt((m*scx-sx^2)*(m*scy-sy^2))
r=
    0.9910
```

- j) El error estándar del estimado, se calcula con la fórmula: $S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_R}{n-2}}$, que se puede calcular con los siguientes comandos de matlab

```
>>Sxy=sqrt(sR/(m-2))
Sxy =
    0.5403
```

Ejercicio 2: Se hacen lecturas del crecimiento de la plántula de maíz desde el momento en que la plántula emerge a la superficie de la tierra, con el objeto de determinar la relación de crecimiento del maíz en función del tiempo.

Día	1	3	5	7	9	11	13	15
altura (cm)	0.11	0.21	0.62	1.29	1.94	3.08	4.45	7.29

- Realiza la gráfica de dispersión para el crecimiento de la plántula de maíz.
- Escribe el sistema de ecuaciones normales en notación matricial, para determinar un polinomio de segundo grado para el crecimiento de la plántula de maíz.
- Determina los valores de los coeficientes de la regresión cuadrática por el método de Gauss-Jordan y escribe la ecuación cuadrática de ajuste por mínimos cuadrados.
- Determina los valores de los coeficientes de la regresión cuadrática por el método de la matriz inversa y escribe la ecuación cuadrática de ajuste por mínimos cuadrados.
- Determina los valores de los coeficientes de la regresión cuadrática con el comando polyfit (), y escribe la ecuación cuadrática de ajuste por mínimos cuadrados.
- Grafica la curva de ajuste, sobre el diagrama de dispersión.
- Calcula la suma de discrepancias del modelo de crecimiento de la plántula de maíz.
- Calcule el coeficiente de correlación e interprete su valor.
- Calcula el error estándar del estimado.

Solución:

- Gráfica de dispersión: al ejecutar los comandos, de matlab como en el caso anterior pero ahora con las variables del problema:

```
>>d=[1 3 5 7 9 11 13 15];
>> a=[0.11 0.21 0.62 1.29 1.94 3.08 4.45 7.29];
>>plot(d,a,'o');grid
>>title('Gráfica de dispersión')
>>xlabel ('eje X')
>>ylabel ('eje Y [cm]')
```

La respectiva salida es la gráfica de dispersión siguiente, dónde se observa que el patrón que siguen los datos es de una parábola.

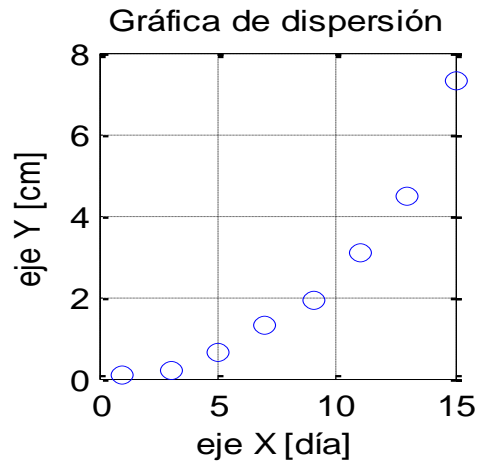


Figura 9.4 Gráfica de dispersión para el crecimiento de la plántula de maíz.

- b) El sistema de ecuaciones normales en notación matricial, para determinar un polinomio de segundo grado es el siguiente:

$$\begin{aligned}
 ma_0 + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i + a_2 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 &= \sum_{i=1}^{i=m} y_i \\
 a_0 \sum_{i=1}^{i=m} x_i + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^3 &= \sum_{i=1}^{i=m} x_i y_i \\
 a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^{i=m} x_i^4 &= \sum_{i=1}^{i=m} x_i^2 y_i
 \end{aligned}$$

Las instrucciones de Matlab para escribirlo en forma matricial, son las siguientes:

```
>> ma=[sum(d.^0) sum(d) sum(d.^2) sum(a);sum(d) sum(d.^2) sum(d.^3)
sum(a.*d);sum(d.^2) sum(d.^3) sum(d.^4) sum(a.*d.^2)]
ma =
1.0e+05 *
0.0001 0.0006 0.0068 0.0002
0.0006 0.0068 0.0813 0.0023
0.0068 0.0813 1.0350 0.0300
```

Cómo vemos la matriz es de 3 filas por 4 columnas, porque se escribió el sistema en su forma aumentada y así, poder aplicar el método de Gauss Jordan. Se debe notar que la matriz esta multiplicada por 10^5 . Al pasar al formato largo podremos comprobar que el elemento (1, 1) es el número de datos, que en este caso es 8.

```
>> format long
>> ma
ma =
  1.0e+05 *
Columns 1 through 4
0.000080000000  0.000640000000  0.006800000000  0.000189900000
0.000640000000  0.006800000000  0.081280000000  0.002314100000
0.006800000000  0.081280000000  1.034960000000  0.030028300000
```

Por lo que el sistema de ecuaciones normales queda expresado como:

$$8a_0 + 64a_1 + 680a_2 = 18.99$$

$$64a_0 + 680a_1 + 8128a_2 = 231.41$$

$$a_1 680 + 8128a_1 + 103496a_2 = 3002.83$$

- c) Ahora se intercambia el renglón 3 con el renglón 1 para obtener el primer pivote sobre el valor más grande de la columna 1.

```
>>aux=ma(1,:);
>>ma(1,:)=ma(3,:);
>>ma(3,:)=aux
ma =
  1.0e+05 *
  0.0068  0.0813  1.0350  0.0300
  0.0006  0.0068  0.0813  0.0023
  0.0001  0.0006  0.0068  0.0002
```

Para obtener el primer pivote y hacer ceros los elementos restantes de la primera columna, ejecutar los siguientes comandos:

```
>>ma(1,:)=ma(1,:)/ma(1,1);
>>ma(2,:)=ma(2,:)-ma(1,:)*ma(2,1);
>>ma(3,:)=ma(3,:)-ma(1,:)*ma(3,1)
ma =
  1.0e+03 *
```

0.0010	0.0120	0.1522	0.0044
0	-0.0850	-1.6128	-0.0512
0	-0.0316	-0.5376	-0.0163

Para obtener el segundo pivote y hacer ceros los elementos restantes de la segunda columna, ejecutar los siguientes comandos:

```
>>ma(2,:)=ma(2,+)/ma(2,2);
>>ma(1,:)=ma(1,)-ma(2,)*ma(1,2);
>>ma(3,:)=ma(3,)-ma(2,)*ma(3,2)
ma =
    1.0000         0 -74.6279 -2.7863
         0    1.0000  18.9767  0.6025
         0         0  62.5116  2.7172
```

Finalmente
para
obtener el
tercer
pivote y
hacer ceros
los
elementos

restantes de la tercera columna, ejecutar los siguientes comandos:

```
>>ma(3,:)=ma(3,)/ma(3,3);
>>ma(1,:)=ma(1,)-ma(3,)*ma(1,3);
>>ma(2,:)=ma(2,)-ma(3,)*ma(2,3)
ma =
    1.0000         0         0  0.4576
         0    1.0000         0 -0.2223
         0         0    1.0000  0.0435
```

Los coeficientes
son $a_0=0.4576$,
 $a_1=-0.2223$ y
 $a_2=0.0453$, y la
ecuación de ajuste
es $a=0.0453d^2-$
 $0.2232d+0.4576$

```
mc=[sum(d.^0) sum(d) sum(d.^2);sum(d) sum(d.^2) sum(d.^3);sum(d.^2) sum(d.^3)
sum(d.^4)]
mc =
     8     64    680
    64    680   8128
   680   8128  103496
>> b=[sum(a);sum(a.*d);sum(a.*d.^2)]
```

```
b =
    1.0e+03 *
    0.0190
    0.2314
    3.0028
>> s=inv(mc)*b
s =
    0.4576
   -0.2223
    0.0435
```

- d) Para aplicar el método de la matriz inversa, se obtiene la matriz de coeficientes de las ecuaciones normales y se calcula su inversa que se multiplica con el vector solución, es decir con los términos independientes del sistema de ecuaciones normales, teniendo cuidado de expresarlo de forma que se cumplan las condiciones para el producto de matrices.

Los coeficientes resultantes son $a_0=0.4576$, $a_1=-0.2223$ y $a_2=0.0453$, y la ecuación de ajuste es $a=0.0453d^2-0.2232d+0.4576$. El resultado es el mismo que por el método de Gauss-Jordan.

- e) Usando el comando `polyfit()`, se ejecutan las siguientes instrucciones:

```
>> pol2=polyfit(d,a,2)
pol2 =
    0.0435   -0.2223    0.4576
```

Los coeficientes resultantes son $a_0=0.4576$, $a_1=-0.2223$ y $a_2=0.0453$, y la ecuación de ajuste es $a=0.0453d^2-0.2232d+0.4576$. El resultado es el mismo que por el método de Gauss-Jordan y el método de la matriz inversa, sin embargo se debe notar que el resultado aparece en un vector fila, en lugar de un vector columna y que el orden es inverso, pues en `pol2` queda asignado como el polinomio de grado dos y el orden en el vector es del coeficiente numérico del término de mayor hasta el de menor grado.

- f) Para agregar la gráfica del polinomio de ajuste al diagrama de dispersión, se mantiene la gráfica con el comando *hold on*, y se evalúan nuevos puntos, con mayor resolución, para la gráfica del ajuste.

```
>> hold on
>> xg=0:0.1:15;
>> yg=polyval(pol2,xg);
>> plot(xg,yg,'r')
```

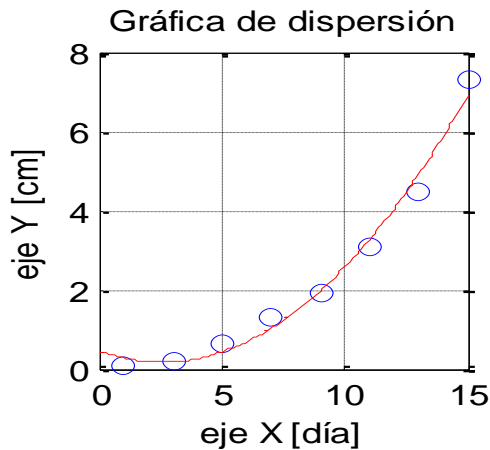


Figura 9.5 Gráfica de ajuste para el crecimiento de la plántula de maíz.

- g) Para calcular la suma de discrepancias del modelo de crecimiento de la plántula de maíz, considera las siguientes instrucciones.

```
>> aest=polyval(pol2,d);
>> disc=a-aest
disc =
Columns 1 through 8
-0.1687  0.0282  0.1873  0.2588 -0.0376 -0.1916 -0.4634  0.3871
>> sdisc=sum(a-aest)
sdisc =
2.0761e-14
```

- h) Para calcular el coeficiente de correlación, primero se calculan S_R y S_t :

```
>> sR=sum((a-aest).^2)
sR =
0.5340
>> st=sum((a-mean(a)).^2)
```


<pre>st = 43.2238 >> r=sqrt(1-sR/st) r = 0.9938</pre>	Se obtiene un valor de r
---	-------------------------------------

aceptable, pues es superior a 0.9, por lo que la dependencia de las variables es buena.

i) Par calcular el error estándar del estimado, aplicar la respectiva fórmula:

<pre>>>Sxy=sqrt(sR/(m-2)) Sxy = 0.2983</pre>
--

Tarea:

1. Obtener el sistema de ecuaciones normales para el ajuste polinomial de tercer grado, por cuadrados mínimos.
2. Al medir la velocidad de un fluido (con un tubo de Pitot) en una tubería circular de diámetro interior de 20 cm, se encontró la siguiente información:

radio (cm)	0	3	5	7	8
velocidad (cm/s)	600	550	450	312	240

Se sabe que el perfil de velocidades en una tubería generalmente es de tipo parabólico.

- a) Obtenga el diagrama de dispersión para la relación $v = f(r)$.
- b) Muestra la matriz aumentada del sistema de ecuaciones normales, para el ajuste por mínimos cuadrados del perfil de velocidades en el tubo de Pitot.
- c) Obtén la ecuación de ajuste por el método de Gauss-Jordan.
- d) Grafica la función de ajuste sobre el diagrama de dispersión.
- e) Estime la velocidad en el punto $r = 4$ cm.
- f) Calcula el coeficiente de correlación r .

r [ohms]	10.21	10.39	11.21	11.94	16.42	22.68
T [°C]	10.55	29.99	44.70	64.01	57.51	91.05

- g) Determina el error estándar del estimado.

3. En la siguiente tabla, r es la resistencia de una bobina en Ohms y T la temperatura de la bobina en $^{\circ}\text{C}$.
 - a. Escribe el sistema de ecuaciones normales para el ajuste polinomial por mínimos cuadrados de grado 3, de los datos $r = f(T)$.
 - b. Escribe los comandos para determina los valores de los coeficientes de la regresión (a_0 , a_1 , a_2 y a_3) por mínimos cuadrados, para un polinomio de grado 3, aplicando el método de Gauss Jordan y comprueba con el resultado al usar el comando `polyfit()`.
 - c. Escribe la ecuación de ajuste, del polinomio de grado 3 obtenido en el inciso anterior y muestra la gráfica del conjunto de puntos (x, y) y la curva de ajuste, en una misma gráfica.
 - d. Determina el valor de r si $T = 15^{\circ}\text{C}$
4. Los siguientes valores experimentales representan el calor específico del agua como una función de la temperatura.

Tabla de calor específico del agua							
$T(^{\circ}\text{K})$	273	283	293	303	313	323	333
$C_p \text{ cal}/(\text{g}^{\circ}\text{K})$	1.0073	1.0013	0.9988	0.9981	0.9980	0.9985	0.9994

- a. Obtén el diagrama de

dispersión y por inspección gráfica justifica el grado de ajuste polinomial recomendado.

- b. Muestra los comandos usados para obtener la ecuación de ajuste al patrón de datos.
- c. Escribe los comando para hacer la gráfica del polinomio de ajuste sobre el diagrama de dispersión.
- d. Calcula e interpreta el coeficiente de correlación del ajuste.
- e. Calcula el error estándar del estimado.
- f. Estima el valor del calor específico a una temperatura de 300°K .

PRACTICA No. 10

REGRESIÓN MULTINOMIAL POR CUADRADOS MÍNIMOS.

OBJETIVO GENERAL

Ajustar una función multinomial a un conjunto de datos experimentales representados por una variable dependiente y dos o más variables independientes, $y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$

INTRODUCCIÓN TEÓRICA

Se aplica una regresión múltiple cuando f es una función lineal de dos o más variables independientes $f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_k)$, por ejemplo para dos variables independientes donde f es una función lineal de x_1 y x_2 es decir $f(x_1, x_2)$, el modelo lineal sería:

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + e$$

Dicha ecuación es útil al ajustar datos experimentales donde la variable sujeta a estudio es a menudo una función de otras dos variables. En este caso la función de regresión representa un plano, en la siguiente figura se muestra de forma general la representación gráfica.

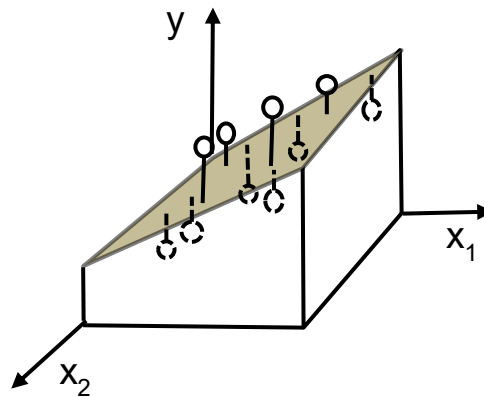


Figura 10.1 Grafica del ajuste binomial

Las variables de diseño de ingeniería son a menudo dependientes de varias variables independientes, es decir que se requiere más de una variable para explicar la variabilidad de un proceso productivo o experimental, en este caso la dependencia funcional es lineal y bivariable.

Sistema de ecuaciones normales para un modelo que depende dos variables

Para un conjunto de datos con una variable dependiente y dos variables independientes, tenemos una tabla de datos como la siguiente:

Y	X ₁	X ₂
y ₁	x ₁₁	x ₂₁
y ₂	x ₁₂	x ₂₂
y ₃	x ₁₃	x ₂₃
y ₄	x ₁₄	x ₂₄
...
y _m	x _{1m}	x _{2m}

Se pretende describir el patrón de los datos con una función lineal de dos variables:
 $\hat{y} = a_2 x_2 + a_1 x_1 + a_0$

El ajuste se debe hacer de forma que se minimice la suma de discrepancias o residuales:

$$\min \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2 = \min \sum_{i=1}^{i=m} [\hat{y}_i - y_i]^2$$

$$\min \sum_{i=1}^{i=m} [a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2$$

Para aplicar el método de mínimos cuadrados y determinar los coeficientes a_2 , a_1 , y a_0 que mejor aproximen a la función de dos variables de la tabla de datos, tenemos que minimizar la función, por lo que se procede a derivar parcialmente, respecto a cada coeficiente a_2 , a_1 , y a_0 , para obtener el sistema de ecuaciones normales:

$$\frac{\partial}{\partial a_0} \sum_{i=1}^{i=m} [a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2 = 2 \sum_{i=1}^{i=m} (a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i)(1) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a_1} \sum_{i=1}^{i=m} [a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2 = 2 \sum_{i=1}^{i=m} (a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i)(x_{1i}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a_2} \sum_{i=1}^{i=m} [a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2 = 2 \sum_{i=1}^{i=m} (a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i)(x_{2i}) = 0$$

Al reacomodar los términos y dejar las sumatorias de x en el primer miembro y las de y en el segundo, se obtiene el sistema de ecuaciones normales:

$$ma_0 + a_1 \sum x_{1i} + a_2 \sum x_{2i} = \sum y_i$$

$$a_0 \sum x_{1i} + a_1 \sum x_{1i}^2 + a_2 \sum x_{1i} x_{2i} = \sum y_i x_{1i}$$

$$a_0 \sum x_{2i} + a_1 \sum x_{1i} x_{2i} + a_2 \sum x_{2i}^2 = \sum y_i x_{2i}$$

Las incógnitas son los valores de los coeficientes $a_0, a_1, y a_2$, y el sistema se puede escribir en forma matricial, de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} m & \sum x_{1i} & \sum x_{2i} \\ \sum x_{1i} & \sum x_{1i}^2 & \sum x_{1i}x_{2i} \\ \sum x_{2i} & \sum x_{1i}x_{2i} & \sum x_{2i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_{1i}y_i \\ \sum x_{2i}y_i \end{bmatrix}$$

Se calculan las sumatorias indicadas y se resuelve el sistema de ecuaciones por alguno de los métodos desarrollados anteriormente, como Gauss Jordan o por la matriz inversa.

Sistema de ecuaciones normales para un modelo que depende tres variables

Para un conjunto de datos con una variable dependiente y tres variables independientes, tenemos una tabla de datos como la siguiente:

Y	X ₁	X ₂	X ₃
y ₁	x ₁₁	x ₂₁	x ₃₁
y ₂	x ₁₂	x ₂₂	x ₃₂
y ₃	x ₁₃	x ₂₃	x ₃₃
y ₄	x ₁₄	x ₂₄	x ₃₄
...
y _m	x _{1m}	x _{2m}	x _{3m}

Se pretende describir el patrón de los datos con una función lineal de tres variables:

$$\hat{y} = a_3x_3 + a_2x_2 + a_1x_1 + a_0$$

El ajuste se debe hacer de forma que se minimice la suma de discrepancias o residuales:

$$\min \sum_{i=1}^{i=m} d_i^2 = \min \sum_{i=1}^{i=m} [\hat{y}_i - y_i]^2$$

$$\min \sum_{i=1}^{i=m} [a_3x_{3i} + a_2x_{2i} + a_1x_{1i} + a_0 - y_i]^2$$

Para aplicar el método de mínimos cuadrados y determinar los coeficientes $a_3, a_2, a_1, y a_0$, que mejor aproximen a la función de varias variables de la tabla de datos, tenemos que minimizar la función de la suma de discrepancias, por lo que se procede a derivar parcialmente, respecto a cada coeficiente $a_3, a_2, a_1, y a_0$, para obtener el sistema de ecuaciones normales:

$$\frac{\partial}{\partial a_0} \sum_{i=1}^{i=m} [a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2 = 2 \sum_{i=1}^{i=m} (a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i)(1) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a_1} \sum_{i=1}^{i=m} [a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2 = 2 \sum_{i=1}^{i=m} (a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i)(x_{1i}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a_2} \sum_{i=1}^{i=m} [a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2 = 2 \sum_{i=1}^{i=m} (a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i)(x_{2i}) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial a_3} \sum_{i=1}^{i=m} [a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i]^2 = 2 \sum_{i=1}^{i=m} (a_3 x_{3i} + a_2 x_{2i} + a_1 x_{1i} + a_0 - y_i)(x_{3i}) = 0$$

Al reacomodar los términos y dejar las sumatorias de x en el primer miembro y las de y en el segundo, se obtiene el sistema de ecuaciones normales:

$$ma_0 + a_1 \sum x_{1i} + a_2 \sum x_{2i} + a_3 \sum x_{3i} = \sum y_i$$

$$a_0 \sum x_{1i} + a_1 \sum x_{1i}^2 + a_2 \sum x_{1i} x_{2i} + a_3 \sum x_{1i} x_{3i} = \sum y_i x_{1i}$$

$$a_0 \sum x_{2i} + a_1 \sum x_{1i} x_{2i} + a_2 \sum x_{2i}^2 + a_3 \sum x_{2i} x_{3i} = \sum y_i x_{2i}$$

$$a_0 \sum x_{3i} + a_1 \sum x_{1i} x_{3i} + a_2 \sum x_{2i} x_{3i} + a_3 \sum x_{3i}^2 = \sum y_i x_{3i}$$

Las incógnitas son los valores de los coeficientes a_3 , a_2 , a_1 , y a_0 , y el sistema se puede escribir en forma matricial, de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{2i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{3i} \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i}^2 & \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i} x_{2i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i} x_{3i} \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_{2i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i} x_{2i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{2i}^2 & \sum_{i=1}^{i=m} x_{2i} x_{3i} \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_{3i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i} x_{3i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{2i} x_{3i} & \sum_{i=1}^{i=m} x_{3i}^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{i=m} y_i \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_{1i} y_i \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_{2i} y_i \\ \sum_{i=1}^{i=m} x_{3i} y_i \end{bmatrix}$$

Este sistema de ecuaciones se resuelve por los métodos de Gauss-Jordan o por la matriz inversa. El caso se puede extender para n variables independientes o dimensiones, en el modelo:

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_nx_n + e$$

Estimación del error en el ajuste multinomial por mínimos cuadrados.

El error estándar se calcula con la fórmula :

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

$$\text{Con } S_R = \sum_{i=1}^N e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_1 - a_2x_2 - \dots - a_nx_n)^2$$

El coeficiente de regresión r^2 , y el coeficiente de correlación r , se calculan con la diferencia entre la suma de cuadrados total S_t y la suma de cuadrados de los residuos S_R normalizada por lo que se divide S_t . La suma total de los cuadrados alrededor de la media se calcula por:

$$S_t = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \text{ donde } \bar{y} \text{ es la media aritmética.}$$

$$\text{El coeficiente de determinación se calcula por: } r^2 = \frac{st - sr}{st} = 1 - \frac{sr}{st}$$

$$\text{El coeficiente de correlación se calcula por: } r = \sqrt{1 - \frac{sr}{st}}$$

DESARROLLO:

Para los datos de la siguiente tabla.

y	x	u
27.5	2.0	18.0
28.0	3.5	16.5
28.8	4.5	10.5
29.1	2.5	2.5
30.0	8.5	9.0
31.0	10.5	4.5
32.0	13.5	1.5

- Ajustar una ecuación de la forma $y = a_0 + a_1x + a_2u$
- Calcular en una tabla las sumatorias necesarias para armar el sistema de ecuaciones normales.
- Calcular las sumatorias para armar el sistema de ecuaciones normales con los comandos de matlab.
- Obtener a_0 , a_1 y a_2 por el método de Gauss-Jordan
- Obtener a_0 , a_1 y a_2 por el método de la matriz inversa
- Obtener la gráfica de dispersión de los datos y del plano de ajuste.
- Calcular la suma de las discrepancias.
- Calcular el error estándar del estimado.

Solución:

- Tradicionalmente se construye una tabla como la siguiente, con las potencias y productos de los datos, para facilitar los cálculos y armar el sistema de ecuaciones normales:

El sistema

I	x_i	u_i	y_i	x_i^2	$x_i u_i$	u_i^2	$x_i y_i$	$u_i y_i$
1	2.0	18.0	27.5	4.0	36.00	324.00	55.00	495.00
2	3.5	16.5	28.0	12.25	57.75	272.25	98.00	462.00
3	4.5	10.5	28.8	20.25	47.25	110.25	129.60	302.40
4	2.5	2.5	29.1	6.25	6.25	6.25	72.75	72.75
5	8.5	9.0	30.0	72.75	76.50	81.00	255.00	270.00
6	10.5	4.5	31.0	110.25	47.25	20.25	325.50	139.50
7	13.5	1.5	32.0	182.25	20.25	2.25	432.00	48.00
Σ	45.0	62.5	206.4	407.5	291.25	816.25	1367.85	1789.65

de

ecuaciones normales para las dos variables independientes x y u queda expresado por:

$$\begin{aligned}
 ma_0 + a_1 \sum x_i + a_2 \sum u_i &= \sum y_i \\
 a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum u_i x_i &= \sum x_i y_i \\
 a_0 \sum u_i + a_1 \sum u_i x_i + a_2 \sum u_i^2 &= \sum u_i y_i
 \end{aligned}$$

Sustituyendo los datos de la tabla, en el sistema de ecuaciones normales obtenemos:

$$\begin{cases}
 7a_0 + 45a_1 + 62.5a_2 = 206.4 \\
 45a_0 + 407.5a_1 + 291.25a_2 = 1367.85 \\
 62.5a_0 + 291.25a_1 + 816.25a_2 = 1789.65
 \end{cases}$$

- b) Este sistema se puede armar con mayor facilidad, usando los comandos de Matlab, primero se definen las variables x , u y y , para después definir las sumatorias que corresponden a un sistema de ecuaciones normales con dos variables independientes:

```
>>x=[2 3 4.5 2.5 8.5 10.5 13.5];
>>u=[18 16.5 10.5 2.5 9 4.5 1.5];
>>y=[27.5 28 28.8 29.1 30 31 32 ]
```

Las sumatorias se deben guardar en variables establecidas por el usuario, para facilitar un poco el proceso usaremos las siguientes variables:

m es el número de datos

$$sx = \sum x_i$$

$$su = \sum u_i$$

$$sy = \sum y_i$$

$$scx = \sum x_i^2$$

$$scu = \sum u_i^2$$

$$sux = \sum u_i x_i$$

$$sxy = \sum x_i y_i$$

$$suy = \sum u_i y_i$$

Estas sumatorias se calculan en matlab como sigue:

```
>>sx=sum(x)
sx =
    44.5000
>> su=sum(u)
su =
    62.5000
>>sy=sum(y)
sy =
   206.4000
>>scx=sum(x.^2)
scx =
```

```

404.2500
>>scu=sum(u.^2)
scu =
    816.2500
>>sux=sum(u.*x)
sux =
    283
>>sxy=sum(x.*y);
sxy =
    1.3538e+03
>>suy=sum(u.*y)
suy =
    1.7897e+03

```

Para construir la matriz aumentada se pueden usar los elementos de las sumatorias calculadas, o los comandos de las sumatorias directamente y estos a su vez se puede hacer, introduciendo elemento por elemento de la matriz aumentada o en un solo paso, declarando un arreglo entre corchetes. Si se introduce elemento por elemento, se hace lo siguiente:

```

>> a(1,1)=length(x);
>> a(1,2)=sx;
>> a(1,3)=su;
>> a(1,4)=sy;
>> a(2,1)=sx;
>> a(2,2)= scx;
>> a(2,3)= sux;
>> a(2,4)=sxy;
>> a(3,1)=su;
>> a(3,2)=sux;
>> a(3,3)=scu;
>> a(3,4)=suy;
>> a;
a =
    1.0e+03 *
    0.0070    0.0445    0.0625    0.2064
    0.0445    0.4043    0.2830    1.3539

```

0.0625	0.2830	0.8163	1.7897
--------	--------	--------	--------

Si las sumas se introducen en una sola instrucción, como un arreglo entre corchetes se hace lo siguiente:

```
>> a=[7,sx,su,sy;sx,scx,sux,sxy;su,sux,scu,suy]
a =
1.0e+03 *
0.0070 0.0445 0.0625 0.2064
0.0445 0.4043 0.2830 1.3539
0.0625 0.2830 0.8163 1.7897
```

Se debe notar que el sistema es el mismo, y el arreglo también se pudo declarar directamente con los comandos de las sumatorias, como se muestra a continuación:

```
>>a=[length(x),sum(x),sum(u),sum(y);sum(x),sum(x.^2),sum(u.*x),sum(x.*y);sum(u),
sum(u.*x),sum(u.^2),sum(u.*y)]
a =
1.0e+03 *
0.0070 0.0445 0.0625 0.2064
0.0445 0.4043 0.2830 1.3539
0.0625 0.2830 0.8163 1.7897
```

c) Para resolver el sistema por el método de Gauss-Jordan, se intercambiará la fila 1 con la 3, para tomar como pivote al número más grande de la primer columna:

```
>>aux=a(1,:);
>> a(1,:)=a(3,:);
>> a(3,:)=aux
a =
1.0e+04 *
0.0625 0.2830 0.8163 1.7897
0.0445 0.4043 0.2830 1.3539
0.0070 0.0445 0.0625 0.2064
```

Para obtener el primer pivote y hacer ceros el resto de elementos de la primera columna se ejecutan los siguientes comandos:

```
>> a(1,:)=a(1,+)/a(1,1);
>> a(2,:)=a(2,)-a(1,)*a(2,1);
>> a(3,:)=a(3,)-a(1,)*a(3,1);
>> a
a =
    1.0000    4.5280   13.0600   28.6344
    0 202.7540 -298.1700   79.6192
    0  12.8040 -28.9200    5.9592
```

Para obtener el segundo pivote y hacer ceros el resto de elementos de la segunda columna se ejecutan los siguientes comandos:

```
>> a(2,:)=a(2,)/a(2,2);
>> a(1,:)=a(1,)-a(2,)*a(1,2);
>> a(3,:)=a(3,)-a(2,)*a(3,2)
a =
    1.0000     0 19.7189 26.8563
     0  1.0000 -1.4706  0.3927
     0     0 -10.0904  0.9312
```

Finalmente para la tercera columna se ejecutan los siguientes comandos:

```
>> a(3,:)=a(3,)/a(3,3);
>> a(1,:)=a(1,)-a(3,)*a(1,3);
>> a(2,:)=a(2,)-a(3,)*a(2,3)
a =
    1.0000     0     0 28.6761
     0  1.0000     0  0.2570
     0     0  1.0000 -0.0923
```

De dónde se obtienen los siguientes coeficientes, de la ecuación $\hat{y} = a_1x + a_2u + a_0$, con $a_0=28.6761$, $a_1=0.2570$ y $a_2=-0.0923$ y la ecuación de ajuste es entonces:

$$\hat{y} = 0.2570x - 0.0923u + 28.6761$$

- d) Para resolver el sistema de ecuaciones, por el método de la matriz inversa, se debe escribir primero la matriz de coeficientes del sistema y el vector solución, con los términos independientes del sistema. Usando las variables de las sumatorias calculadas anteriormente:

```
>> a=[7,sx,su;sx,scx,sux;su,sux,scu]
a =
    7.0000    44.5000    62.5000
   44.5000   404.2500   283.0000
   62.5000   283.0000   816.2500
>> b=[sy;sxy;suy]
b =
    1.0e+03 *
    0.2064
    1.3539
    1.7897
>> s=inv(a)*b
s =
    28.6761
     0.2570
    -0.0923
```

Los siguientes coeficientes son: $a_0=28.6761$, $a_1=0.2570$ y $a_2=-0.0923$ y la ecuación de ajuste es entonces: $\hat{y} = 0.2570x - 0.0923u + 28.6761$

- e) Para hacer la gráfica del diagrama de dispersión en tres dimensiones, se usa el comando `plot3()`, con las variables x , u y y , como se muestra a continuación. La gráfica del plano, requiere que se realice primero el cruce de valores propuestos para las variables independientes x y u , con el comando `meshgrid`, evaluar en esos valores de cruce la ecuación de ajuste y graficar con el comando `surf()`.

```
>> plot3(x,u,y,'*k');grid
>> [X,U]=meshgrid([0:16],[0:20]);
>> Y=a(2,4)*X+a(3,4)*U+a(1,4);
>> hold on
>> surf(Y)
>> title('Grafica de dispersión y plano de ajuste')
>> xlabel('X')
>> ylabel('U')
>> zlabel('Y')
```

Grafica de dispersión y plano de ajuste

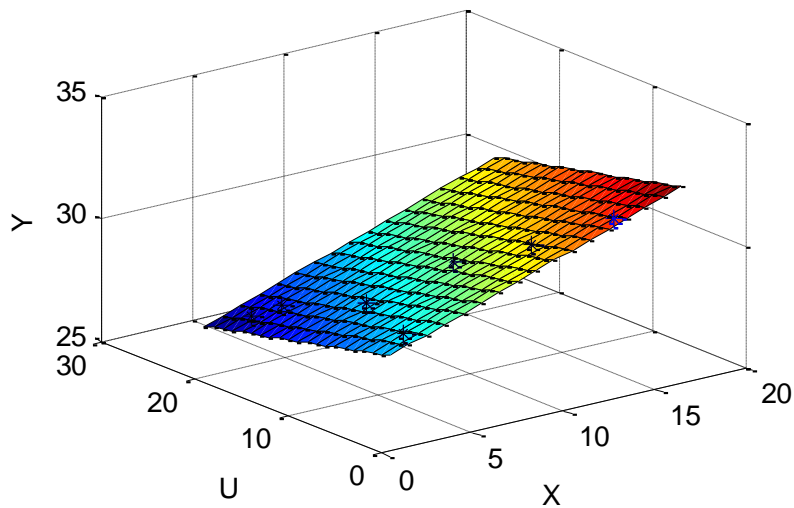


Figura 10.2 Grafica del ajuste binomial

En esta gráfica se muestra el diagrama de puntos y el plano de ajuste, sólo que no se distinguen de forma clara los puntos alrededor del plano, por lo que se gira la figura, hasta visualizar el perfil del plano en una vista lateral que permita una mejor perspectiva visual del ajuste

Grafica de dispersión y plano de ajuste

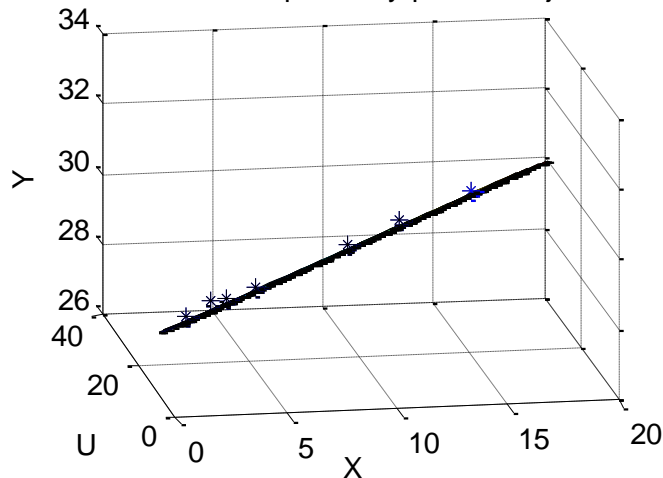


Figura 10.3 Grafica del ajuste binomial en una vista lateral

En ésta última gráfica se puede notar la proximidad del plano a los puntos de dispersión.

- f) La suma de discrepancias, se hace calculando los valores de y para cada par de valores (x_i, u_i) , de los datos experimentales.

```
>>yest=a(2,4)*x+a(3,4)*u+a(1,4)
```

```
yest =
Columns 1 through 8
27.5289 27.9243 28.8635 29.0878 30.0298 30.9590 32.0068
>> y
y =
27.5000 28.0000 28.8000 29.1000 30.0000 31.0000 32.0000
>> sdisc=sum(y-yest)
sdisc =
1.0658e-14
```

Los valores estimados se guardan en una variable yest (y estimada) y se muestran los valores originales de y, para notar las aproximaciones en cada valor, la suma de discrepancias simples, debe ser muy próxima a cero, lo cual se cumple.

g) Para calcular el error estándar del estimado, se usan las siguientes fórmulas:

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

$$\text{con } S_R = \sum_{i=1}^N e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_1 - a_2 x_2 - \dots - a_n x_n)^2$$

Que para el caso de las dos variables independientes del ejercicio, se reducen a:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_R}{7 - 3}}$$

$$\text{con } S_R = \sum_{i=1}^N e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x - a_2 u)^2$$

Recordando que para calcular la suma de cuadrados de los residuos, se calculan las diferencias entre los valores experimentales y los estimados con la ecuación de ajuste.

```
>>Sr=sum((y-vest).^2)
Sr =
    0.0134
>>Sxy=sqrt(Sr/(m-3))
Sxy =
    0.0578
```

TAREA

La siguiente tabla presenta los datos de dos variables independientes u y v que influyen sobre la variable dependiente y.

y	u	v
78.9	0.02	1000
65.1	0.02	1100
55.2	0.02	1200
26.4	0.02	1300
80.9	0.1	1000
69.7	0.1	1100
57.4	0.1	1200
55.4	0.1	1300
85.3	0.18	1000
71.8	0.18	1100
60.7	0.18	1200
58.9	0.18	1300

- Determina los parámetros a_0 , a_1 y a_2 , por el criterio de mínimos cuadrados.
- Escribe la ecuación de lineal resultante.
- Muestra la gráfica de la superficie de respuesta.
- Determina el error de la ecuación multilineal.
- Calcula el valor de r e interpreta el resultado.
- Calcula el valor de y para $u = 0.15$ y $v = 1250$.

PRÁCTICA No. 11

INTERPOLACIÓN DE LAGRANGE

OBJETIVO

Aproximar el valor de una función de forma tabular, en valores de la variable independiente entre un conjunto de datos conocidos, con un polinomio de interpolación de Lagrange de grado a lo más $n-1$

INTRODUCCIÓN:

El método de interpolación polinomial de Lagrange no requiere resolver sistemas de ecuaciones lineales y los cálculos se realizan directamente, partiendo de los valores de una función $f(x)$ expresada en forma tabular.

X	Y
x_0	y_0
x_1	y_1
x	$f(x)$
x_2	y_2
...	...
x_m	y_m

El problema de interpolación consiste en encontrar el valor de la función $y=f(x)$, para un valor de x que se encuentre entre dos o más valores consecutivos conocidos, como se muestra en la tabla anterior.

Teorema del polinomio interpolante de Lagrange

Sí $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, son $n+1$ números diferentes y $f(x)$ es una función cuyos valores están dados en estos puntos, entonces existe un único polinomio $p(x)$ de grado a lo más n con la propiedad de que:

$$p(x_k) \approx f(x_k), \text{ para cada } k= 1, 2, 3, 4, \dots, n$$

Este polinomio está dado por:

$$p(x) = f(x_0) L_0(x) + f(x_1) L_1(x) + \dots + f(x_n) L_n(x),$$

$$p(x) = \sum f(x_k) L_k(x)$$

Donde los polinomios $L_k(x)$ son denominados polinomios de Lagrange y se calculan por:

$$L_k = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^n \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}, \text{ para } k = 0, 1, 2, 3, \dots, n.$$

$$L_k = \frac{(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \dots (x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \dots (x_k - x_n)}$$

Polinomio de Lagrange de primer grado

Para un polinomio de primer grado (ecuación de una línea recta) se deben tener dos puntos conocidos $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, con los cuales se puede obtener un polinomio de primer grado como sigue:

De la fórmula general para un polinomio de Lagrange de orden n

$$p(x) = \sum_{k=0}^{k=1} f(x_k) L_k(x)$$

Para el caso de un polinomio de grado 1 ($n=1$)

$$p(x) = f(x_0) L_0(x) + f(x_1) L_1(x)$$

Se requieren dos puntos $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$ para obtener L_0 y L_1

$$L_0 = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)}; L_1 = \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}$$

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

En esta expresión los x_k , son números (valores conocidos de x_k alrededor de x) y al simplificarla se obtiene el polinomio de primer grado correspondiente.

Es decir se tiene una tabla o parte de una tabla con los valores respectivos:

X	Y
x_0	y_0
x	$f(x)$
x_1	y_1

Gráficamente se deben conocer dos puntos alrededor de x y entre estos puntos conocidos, se obtiene la ecuación de la línea recta que pasa por los dos puntos.

Considere los datos de un caso hipotético en los que hace una interpolación lineal de Lagrange en el valor $x=2.5$:

X	Y
1	0.5
2	0.8
3	1.2
4	1.4
5	2.1

Por tratarse de una interpolación lineal, el valor que se estima debe estar entre dos puntos conocidos, en este caso $x=2.5$ se encuentra entre los puntos (2, 0.8) y (3, 1.2). La ecuación de la línea recta de interpolación al sustituir los puntos conocidos es:

$$p(x) = \frac{(x-3)}{(2-3)}0.8 + \frac{(x-2)}{(3-2)}1.2$$

$$p(x) = \frac{0.8x-2.4}{-1} + \frac{1.2x-2.4}{1}$$

$$p(x) = -0.8x + 2.4 + 1.2x - 2.4$$

$$p(x) = 0.4x$$

El polinomio de Lagrange sólo considera los puntos alrededor del valor de x especificado, no toma en consideración todos los puntos conocidos como se hace en cuadrados mínimos, además de que la curva de ajuste de Lagrange pasa por los puntos conocidos.

Para obtener el polinomio de Lagrange de grado uno en $x=2.5$ con Matlab, ejecutar los comandos de la siguiente tabla, donde (x_i, y_i) son los valores de los puntos conocidos, es decir (2, 0.8) y (3, 1.2); L_i son los polinomios de Lagrange y en la variable px se asigna el polinomio resultante de Lagrange, que es el mismo polinomio que el obtenido algebraicamente $p(x) = 0.4x$, pero expresado en forma de fracción.

Al evaluar el polinomio de Lagrange de grado uno en el valor de $x=2.5$ se obtiene el valor estimado de $f(x)$.

$$p(2.5) = 0.4(2.5)$$

$$p(2.5) = 1$$

Es decir que $f(2.5) \approx 1$

```
>> xi=[2,3];
>> yi=[0.8,1.2];
>> syms x
>> L1=(x-xi(2))/(xi(1)-xi(2))
L1=
    3 - x
>> L2=(x-xi(1))/(xi(2)-xi(1))
L2=
    X - 2
>> px=simplify(L1*yi(1)+L2*yi(2))
px=
    (2*x)/5
>> pretty (px)
    2 x
    ----
    5
```

Para obtener la gráfica se ejecutan los siguientes comandos:

```
>>xi=[1 2 3 4 5];
>>yi=[0.5 0.8 1.2 1.4 2.1];
>>xg=0:0.1:5;
>>yg=subs(px,xg);
>>xint=2.5;
>>yint=subs(px,xint);
>> plot(xi, yi, 'k*',xg, yg, 'b--',xint, yint,'O')
>>hold on
```

La siguiente figura muestra la salida de la gráfica en Matlab, con el valor de interpolación de $f(x)$ y el polinomio de Lagrange de primer grado. En este caso (x_i, y_i) corresponde a todos los datos conocidos y se muestra el diagrama de dispersión con asterisco; Las variables xg y yg corresponden a los valores del ajuste que están graficados con línea punteada; $xint$ es el valor de x a interpolar ($x=2.5$), $yint$ es la estimación de $f(x)$ en $x=2.5$. La grafica de la recta se traza en línea punteada en azul, pero el segmento dónde el polinomio de interpolación es válido, esta graficado con línea sólida de color negro y el punto estimado esta graficado con una "O"

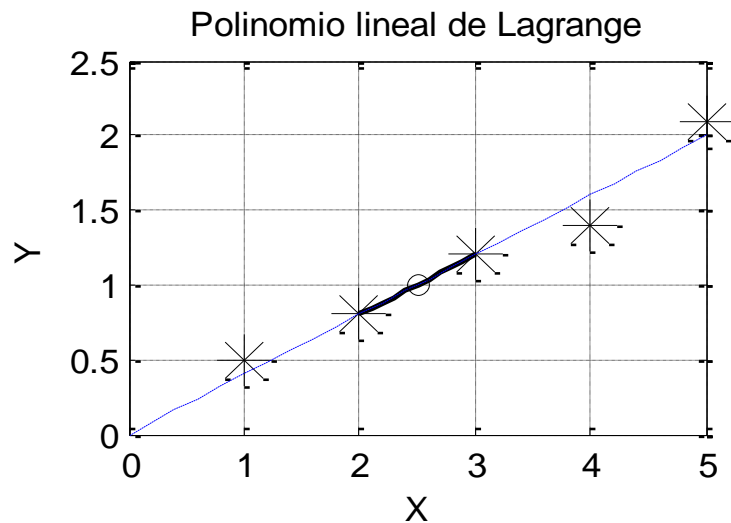


Figura 11.1 Interpolación lineal de Lagrange

Para agregar la recta de ajuste entre los puntos válidos, ejecutar los siguientes comandos:

```
>>xgi=[2,3];
>>ygi=subs(px,xgi);
>> plot(xgi,ygi,'*',xgi,ygi,'k','LineWidth',2)
>> title('Polinomio lineal de Lagrange')
>> xlabel('X')
>> ylabel('Y')
```

Polinomio de Lagrange de segundo grado

Para un polinomio de Lagrange de segundo grado (ecuación de una parábola) se deben conocer tres puntos $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, y $(x_3, f(x_3))$, al desarrollar la multiplicatoria para un polinomio de segundo grado se expresa por:

$$p(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

Para realizar el ajuste se requieren tres puntos, en la fórmula se hace referencia a x_0 , x_1 y x_3 , de forma general, aunque en el ejemplo hipotético se pueden tomar los valores para x_1 , x_2 y x_3 , de acuerdo con la tabla de datos, o también se pueden usar los datos de x_0 , x_1 y x_2 , porque ambos casos contiene el valor $x=2.5$.

	X	Y	
x ₀	1	0.5	f(x ₀)
x ₁	2	0.8	f(x ₁)
x ₂	3	1.2	f(x ₂)
x ₃	4	1.4	f(x ₃)
x ₄	5	2.1	f(x ₄)

El polinomio de Lagrange, en términos de los subíndices mostrados en la tabla, quedaría de la forma siguiente:

$$p(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f(x_1) + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f(x_2) + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f(x_3)$$

Tomando los valores de (x₁, f(x₁)), (x₂, f(x₂)) y (x₃, f(x₃)) en la fórmula del polinomio de Lagrange tenemos que:

$$p(x) = \frac{(x-3)(x-4)}{(2-3)(2-4)} 0.8 + \frac{(x-2)(x-4)}{(3-2)(3-4)} 1.2 + \frac{(x-2)(x-3)}{(4-2)(4-3)} 1.4$$

$$p(x) = \frac{x^2 - 7x + 12}{2} 0.8 + \frac{x^2 - 6x + 8}{-1} 1.2 + \frac{x^2 - 5x + 6}{2} 1.4$$

$$p(x) = 0.4x^2 - 2.8x + 4.8 - 1.2x^2 + 7.2x - 9.6 + 0.7x^2 - 3.5x + 4.2$$

$$p(x) = -0.1x^2 + 0.9x - 0.6$$

Esta es la ecuación del polinomio de interpolación de segundo grado y que pasa por los puntos (2, 0.8), (3, 1.2) y (4, 1.4). El polinomio de ajuste se puede obtener con la ejecución de los siguientes comandos:

```
>> xi=[2,3,4];
>> yi=[0.8,1.2,1.4];
>> syms x
>> L1=expand((x-xi(2))*(x-xi(3))/((xi(1)-xi(2))*(xi(1)-xi(3))))
L1=
    x^2/2 - (7*x)/2 + 6
>> L2=expand((x-xi(1))*(x-xi(3))/((xi(2)-xi(1))*(xi(2)-xi(3))));
L2=
    6*x - x^2 - 8
```

```
>>L3=expand((x-xi(1))*(x-xi(2))/((xi(3)-xi(1))*(xi(3)-xi(2))));
L3=
    x^2/2 - (5*x)/2 + 3
>>px=simplify(L1*yi(1)+L2*yi(2)+L3*yi(3))
px=
    (9*x)/10 - x^2/10 - 3/5
>> pretty (px)
      2
    x   9 x
  - --- + ---- - 3/5
   10   10
```

El polinomio obtenido es el mismo que el obtenido algebraicamente $p(x) = -0.1x^2 + 0.9x - 0.6$

La gráfica del ajuste se obtiene con los siguientes comandos:

```
>>xi=[1 2 3 4 5];
>>yi=[0.5 0.8 1.2 1.4 2.1];
>>xg=0:0.1:5;
>>yg=subs(px,xg);
>>xint=2.5;
>>yint=subs(px,xint)
yint =
    1.0250
>> plot(xi, yi, 'k*',xg, yg, 'b--',xint, yint,'O');grid
>>hold on
>> title('Ajuste de Lagrange de segundo grado')
>> xlabel('X'); ylabel('Y')
```

En este caso (x_i, y_i) corresponde a todos los datos conocidos y se muestra el diagrama de dispersión con asterisco en la gráfica 11.2; Las variables xg y yg corresponden a los valores del ajuste, y están graficados con línea punteada; $xint$ es el valor de x a interpolar ($x=2.5$), $yint$ es la estimación de $f(x)$ en $x=2.5$ que en este caso resulta de 1.025, es decir que $f(2.5) \approx 1.025$.

Para agregar la recta de ajuste entre los puntos válidos, ejecutar los siguientes comandos:

```
>>hold on
>>xpa=2:0.1:4;
```

```
>>ypa=subs(px,xpa);  
>>plot(xgi,ygi,'*',xpa,ypa,'k','LineWidth',2);grid
```

Los valores (xpa, ypa) corresponde a los datos usados para el segmento dónde es válida la interpolación y se muestra en la gráfica con línea sólida.

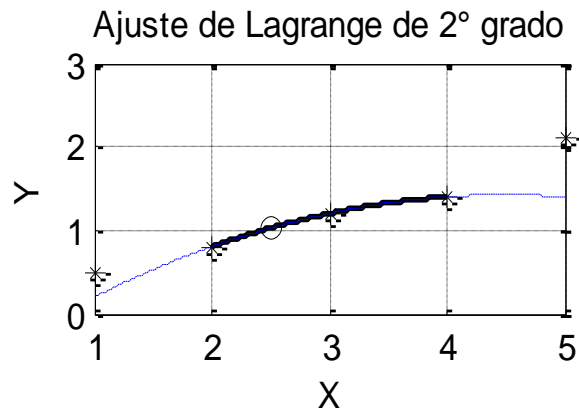


Figura 11.2 Interpolación cuadrática de Lagrange

El valor de interpolación de $f(x)$, con el polinomio de segundo grado es:

$$p(2.5) = -0.1(2.5)^2 + 0.9(2.5) - 0.6$$

$$p(2.5) = 1.025$$

Que en este caso es la aproximación de la función tabular en $x=2.5$ con el polinomio de interpolación de segundo grado $f(2.5) \approx 1.025$

Se debe notar que para realizar el ajuste de un polinomio de Lagrange de grado n , se requieren $n+1$ puntos, así en este caso para realizar el ajuste de un polinomio de segundo grado se hizo con tres puntos conocidos.

Generalización del polinomio de Lagrange de grado n

Para $n+1$ puntos de la forma (x_k, y_k) , la forma general del polinomio de Lagrange de orden n es

$$p(x) = f(x_0) L_0(x) + f(x_1) L_1(x) + \dots + f(x_n) L_n(x),$$

Con n polinomios de Lagrange $L_k(x)$ que se calculan por:

$$L_k = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\dots(x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1)\dots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\dots(x_k-x_n)}$$

Al desarrollar las n multiplicatorias

$$L_0 = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)(x_0-x_4)\dots(x_0-x_n)}$$

$$L_1 = \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)\dots(x_1-x_n)}$$

$$L_2 = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)(x-x_4)\dots(x-x_n)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)\dots(x_2-x_n)}$$

...

$$L_n = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)(x-x_4)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)(x_n-x_3)(x_n-x_4)\dots(x_n-x_{n-1})}$$

Ahora se suma multiplica cada L_i por la respectiva $f(x_i)$ y se suman, de acuerdo con la fórmula del polinomio de interpolación de Lagrange:

$$p(x) = f(x_0) L_0(x) + f(x_1) L_1(x) + \dots + f(x_n) L_n(x)$$

Desarrollo

La siguiente tabla muestra lecturas de Temperatura cada diez segundos del enfriamiento de un objeto:

Tiempo (segundos)	Temperatura (C°)
0	26.4
10	22.3
20	18.2
30	15.7
40	10.6
50	4.9

- Muestra el diagrama de dispersión del conjunto de datos.
- Obtener el polinomio lineal de Lagrange para interpolar la temperatura entre 10 y 20 segundos.

-
- c) Calcular la temperatura del objeto a los 15 segundos con el polinomio lineal de interpolación de Lagrange.
 - d) Obtener el polinomio cuadrático de Lagrange para interpolar la temperatura entre 10 y 20 segundos.
 - e) Calcular la temperatura del objeto a los 15 segundos con el polinomio cuadrático de interpolación de Lagrange.
 - f) Obtener el polinomio cúbico de Lagrange para interpolar la temperatura entre 10 y 20 segundos.
 - g) Calcular la temperatura del objeto a los 15 segundos con el polinomio cúbico de interpolación de Lagrange.
 - h) Mostrar la gráfica de dispersión, con el ajuste de tercer grado y el valor estimado.

Solución:

- a) Para el diagrama de dispersión, definir los vectores con los datos de la tabla y ejecutar los siguientes comandos de Matlab:

```
>>ti=[0:10:50];  
>>te=[26.4, 22.3, 18.2, 15.7, 10.6, 4.9];  
>>plot (ti,te,'*k','LineWidth',2)  
>> grid  
>> title('Grafica de dispersión enfriamiento')  
>> xlabel('Tiempo [seg]')  
>> ylabel('Temperatura °C')
```

Dónde los datos expresados en los vectores ti y te, corresponden a los datos conocidos (ti, te), el diagrama de dispersión es la gráfica de los asteriscos. Se puede observar que los datos siguen un patrón aproximadamente lineal. La salida correspondiente de los comandos para la gráfica de dispersión del enfriamiento, se muestra en la siguiente figura.

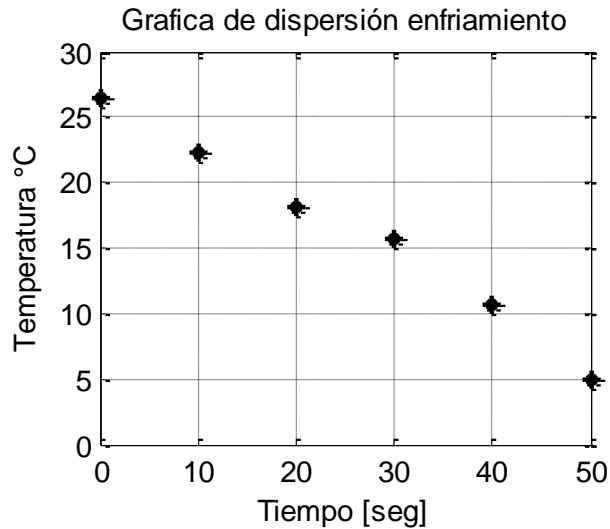


Figura 11.3 Grafica de dispersión del enfriamiento de un objeto

Se pide encontrar el polinomio de interpolación de Lagrange para la temperatura entre 10 y 20 segundos con un polinomio lineal, se puede ver que los puntos para la interpolación lineal son (10, 22.3) y (20, 18.2)

b) La fórmula para el polinomio lineal de Lagrange es el siguiente:

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

En términos de las variables del ejercicio:

$$p(t_i) = \frac{(t_i-t_{i1})}{(t_{i0}-t_{i1})}(te_0) + \frac{(t_i-t_{i0})}{(t_{i1}-t_{i0})}(te_1)$$

Dónde t_i es la variable independiente sobre la que se estima el valor de te ; $t_{i0}=10$ y $te_0=22.3$ son los valores del punto inicial, mientras que $t_{i1}=20$ y $te_1=18.2$ son los valores del punto final y corresponden a los puntos conocidos alrededor de t_i por lo que:

$$p(t_i) = \frac{(t_i-20)}{(10-20)}(22.3) + \frac{(t_i-10)}{(20-10)}(18.2)$$

En Matlab se ejecutan los siguientes comandos:

```
>> syms xti
>> PL=(xti-ti(3))/(ti(2)-ti(3))*te(2)+(xti-ti(2))/(ti(3)-ti(2))*te(3)
PL =
132/5 - (41*xti)/100
```

Por lo que el polinomio de Lagrange de primer grado entre los puntos (10, 22.3) y (20, 18.2) es:

$$P_L(ti) = \frac{132}{5} - \frac{41}{100}ti$$

- c) La temperatura del objeto a los 15 segundos con el polinomio lineal de interpolación de Lagrange se calcula al sustituir $ti=15$, ya sea en el polinomio de ajuste obtenido o en la fórmula para el polinomio de interpolación lineal.

Al sustituir aplicar en la fórmula del polinomio de interpolación lineal de Lagrange en Matlab se obtiene lo siguiente:

```
>> te15=(15-ti(3))/(ti(2)-ti(3))*te(2)+(15-ti(2))/(ti(3)-ti(2))*te(3)
te15 =
20.2500
```

Otra forma de obtener la estimación de la interpolación es sustituir $ti=15$ en el polinomio de Lagrange de primer grado entre los puntos (10, 22.3) y (20, 18.2) en Matlab:

```
>> PL=132/5-(41*xti)/100
PL =
132/5 - (41*xti)/100
>> PL(15)=vpa(subs(PL,15))
PL(15) =
20.2500
```

- d) La fórmula para un polinomio cuadrático de Lagrange es el siguiente:

$$p(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

En términos de

las variables del ejercicio la fórmula queda de la siguiente manera:

$$p(t_i) = \frac{(t_i - t_3)(t_i - t_4)}{(t_2 - t_3)(t_2 - t_4)}(te_2) + \frac{(t_i - t_2)(t_i - t_4)}{(t_3 - t_2)(t_1 - t_4)}(te_3) + \frac{(t_i - t_2)(t_i - t_3)}{(t_4 - t_2)(t_4 - t_3)}(te_4)$$

Al ejecutar los comandos correspondientes en Matlab y tomando los datos de la tabla original, observe que los subíndice en Matlab sobre los vectores $ti=[0 \ 10 \ 20 \ 30 \ 40 \ 50]$ y $te=[26.4, 22.3, 18.2, 15.7, 10.6, 4.9]$ son $ti(1)=0$, $ti(2)=10$ y así sucesivamente, es decir que la definición de vectores de Matlab no existe el elemento $ti(0)$, porque no hay posición cero. Así tenemos que con los valores definidos en los vectores ti y te , los comandos que se ejecutan para obtener el polinomio son:

```
>> L1=((x-ti(3))*(x-ti(4)))/((ti(2)-ti(3))*(ti(2)-ti(4)))
L1 =
((x-20)*(x-30))/200
L2=expand(((x-ti(3))*(x-ti(4)))/((ti(2)-ti(3))*(ti(2)-ti(4))))
L2 =
x^2/200 - x/4 + 3
>> L3=expand(((x-ti(2))*(x-ti(3)))/((ti(3)-ti(2))*(ti(3)-ti(4))))
L3 =
(2*x)/5 - x^2/100 - 3
>> L4=expand(((x-ti(2))*(x-ti(2)))/((ti(4)-ti(3))*(ti(4)-ti(3))))
L4 =
x^2/100 - x/5 + 1
>> PL2=simplify(L2*te(2)+L3*te(3)+L4*te(4))
PL2=
(173*x^2)/2000 - (287*x)/200 + 28
```

Por lo que el polinomio de Lagrange de segundo grado entre los puntos (10, 22.3) y (20, 18.2) y

(30, 15.7) es: $P_L(t_i) = \frac{173}{2000}t_i^2 - \frac{287}{200}t_i + 28$

- e) La temperatura del objeto a los 15 segundos con el polinomio cuadrático de interpolación de Lagrange se calcula al sustituir $ti=15$, ya sea en el polinomio de ajuste obtenido o en la fórmula para el polinomio de interpolación cuadrática.

Al aplicar en la fórmula del polinomio de interpolación de segundo grado de Lagrange en Matlab, se obtiene lo siguiente:

```
>> L1=((15-ti(3))*(15-ti(4)))/((ti(2)-ti(3))*(ti(2)-ti(4)))
L1 =
    0.3750
>> L2=((15-ti(2))*(15-ti(4)))/((ti(3)-ti(2))*(ti(3)-ti(4)))
L2 =
    0.7500
>> L3=((15-ti(2))*(15-ti(2)))/((ti(4)-ti(3))*(ti(4)-ti(3)))
L3 =
    0.2500
>> te15=L1*te(2)+L2*te(3)+L3*te(4)
te15 =
    25.9375
```

Al sustituir $ti=15$ en el polinomio de Lagrange de primer grado entre los puntos (10, 22.3) y (20, 18.2) en Matlab:

```
>> PL15=vpa(subs(PL,15))
PL(15) =
    25.9375
```

- f) Para obtener el polinomio cúbico, primero determinemos que puntos se usaran para realizar la interpolación, como el polinomio de ajuste es de grado tres se requieren cuatro puntos que contengan al valor $X=15$, se tienen dos opciones, con los puntos (0, 26.4), (10, 22.3), (20, 18.2) y (30.157) o también (10, 22.3), (20, 18.2), (30.157) y (40, 10.6), esto se puede ver en forma de tabla, con las siguientes opciones:

Ti [s]	Te [C]
0	26.4
10	22.3
20	18.2
30	15.7

Ti [s]	Te [C]
10	22.3
20	18.2
30	15.7
40	10.6

La fórmula del polinomio de interpolación de Lagrange para un polinomio cúbico es la siguiente:

$$p(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f(x_1) \\ + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f(x_2) + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f(x_3)$$

Usando los valores (10, 22.3), (20, 18.2), (30.157) y (40, 10.6) y considerando los valores en los vectores definidos ti y te, la fórmula queda como

$$p(ti) = \frac{(ti-ti_3)(ti-ti_4)(ti-ti_5)}{(ti_2-ti_3)(ti_2-ti_4)(ti_2-ti_5)}(te_2) + \frac{(ti-ti_2)(ti-ti_4)(ti-ti_5)}{(ti_3-ti_2)(ti_1-ti_4)(ti_1-ti_5)}(te_3) \\ + \frac{(ti-ti_2)(ti-ti_3)(ti-ti_5)}{(ti_4-ti_2)(ti_4-ti_3)(ti_4-ti_5)}(te_4) + \frac{(ti-ti_2)(ti-ti_3)(ti-ti_4)}{(ti_5-ti_2)(ti_5-ti_3)(ti_5-ti_4)}(te_5)$$

Ejecutar los siguientes comandos en Matlab para obtener el polinomio de interpolación de Lagrange de tercer grado:

```
>> L1=expand(((x-ti(3))*(x-ti(4))*(x-ti(5)))/((ti(2)-ti(3))*(ti(2)-ti(4))*(ti(2)-ti(5))))
L1 =
(3*x^2)/200 - x^3/6000 - (13*x)/30 + 4
>> L2=expand(((x-ti(2))*(x-ti(4))*(x-ti(5)))/((ti(3)-ti(2))*(ti(3)-ti(4))*(ti(3)-ti(5))))
L2 =
x^3/2000 - x^2/25 + (19*x)/20 - 6
>> L3=expand(((x-ti(2))*(x-ti(3))*(x-ti(5)))/((ti(4)-ti(2))*(ti(4)-ti(3))*(ti(4)-ti(5))))
L3 =
(7*x^2)/200 - x^3/2000 - (7*x)/10 + 4
>> L4=expand(((x-ti(2))*(x-ti(3))*(x-ti(4)))/((ti(5)-ti(2))*(ti(5)-ti(3))*(ti(5)-ti(4))))
L4 =
x^3/6000 - x^2/100 + (11*x)/60 - 1
>> PL3=simplify(L1*te(2)+L2*te(3)+L3*te(4)+L4*te(5))
PL3=
x^2/20 - (7*x^3)/10000 - (71*x)/50 + 161/5
```

Por lo que el polinomio de tercer grado de Lagrange es $P_L(ti) = \frac{1}{20}ti^3 - \frac{7}{10000}ti^3 + \frac{71}{50}ti + \frac{161}{5}$

- g) Para calcular la temperatura del objeto a los 15 segundos con el polinomio cúbico de interpolación de Lagrange, basta con substituir el valor de $x=15$ en el polinomio de ajuste de interpolación cúbica de Lagrange:

```
>> PL15=vpa(subs(PL3,15))  
PL15 =  
19.7875
```

- h) Para obtener la gráfica de dispersión se ejecutan los siguientes comandos:

```
>>ti=[0:10:50];  
>>te=[26.4, 22.3, 18.2, 15.7, 10.6, 4.9];  
>>plot (ti,te,'*k','LineWidth',2);  
>> grid  
>> title('Grafica de dispersión enfriamiento')  
>> xlabel('Tiempo [seg]')  
>> ylabel('Temperatura °C')
```

En los vectores ti y te , se cargan los datos conocidos de la tabla de enfriamiento, estos valores se grafican como un asterisco. Para graficar el ajuste de tercer grado los siguientes comandos:

```
>>hold on  
>>xg=0:0.2:50;  
>>yg=subs(PL3,xg);  
>>plot(xg,yg,'k','LineWidth',2);
```

En este caso se crean las variables xg y yg , para graficar el ajuste con línea sólida negra, se debe notar que la curva pasará sobre los puntos que se usaron para obtener el polinomio de interpolación, xg esta definida en el rango de los datos, es decir de cero a cincuenta y se dan incrementos pequeños, en este caso de 0.2 por el rango que es amplio, en yg se evalúan esos valores de xg , para graficar por el método tabular. Para agregar en la gráfica el punto de interpolación, ejecutar los siguientes comandos:

```
>>plot(15,PL15,'kO','LineWidth',2.5)
```


En este caso sólo se debe graficar un punto con las coordenadas de la interpolación (15, 19.7875), la aproximación está asignada en la variable PL15. La gráfica completa se muestra en la siguiente figura:

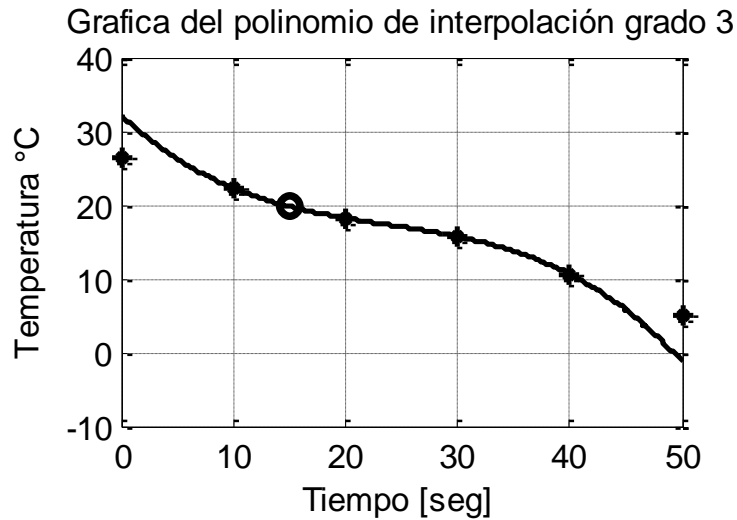
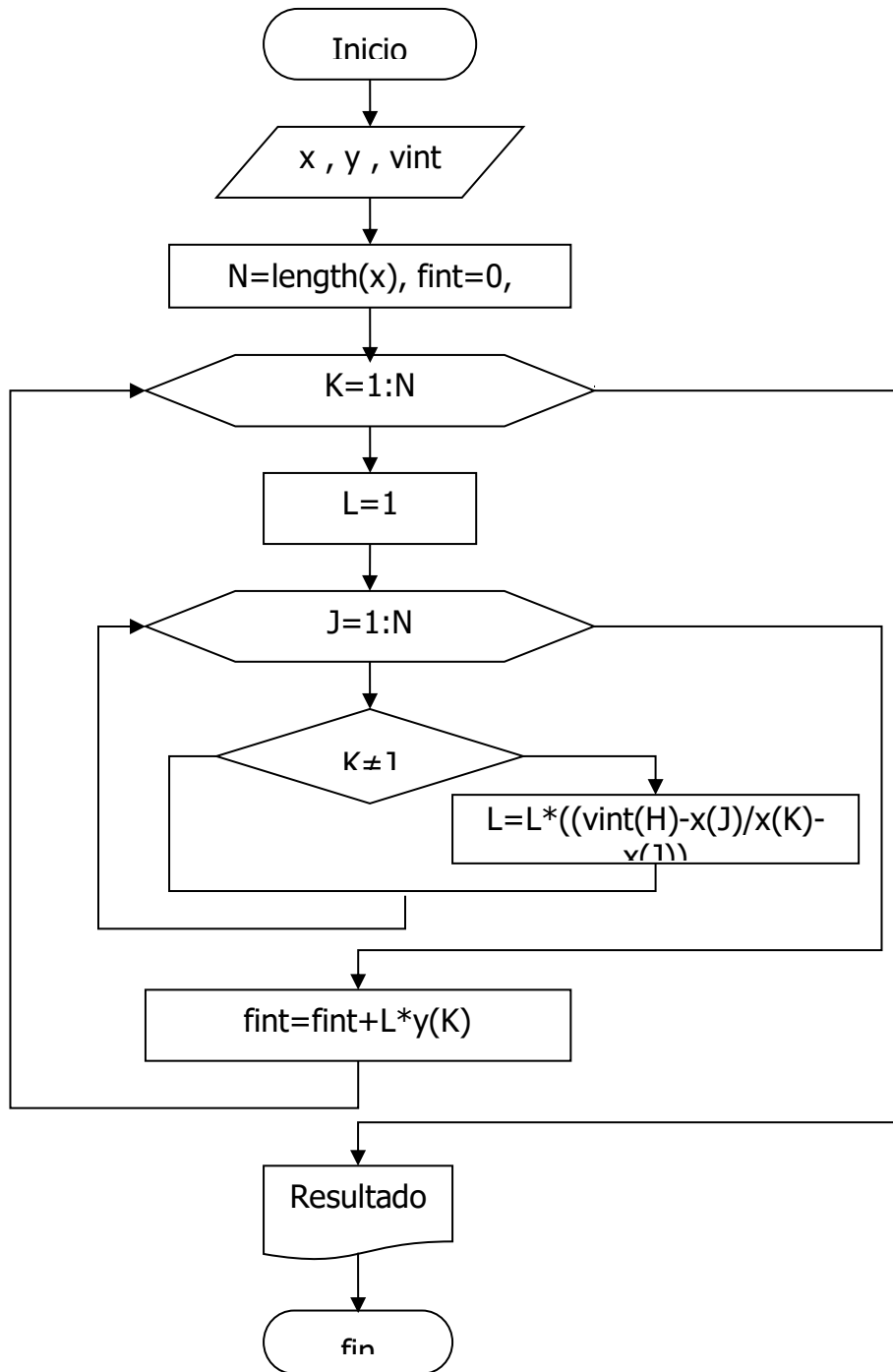


Figura 11.3 Ajuste de interpolación de tercer grado para el enfriamiento de un objeto

En la gráfica se observa que la curva de ajuste pasa por los puntos usados para la interpolación, el punto de interpolación se presenta con un círculo, en caso de haber tomado otros puntos, la gráfica cambiaría.

Diagrama de flujo del programa de Lagrange en Matlab es el siguiente.



Codificación:

```
x=input('Escribe los valores de la variable independiente, entre corchetes y  
separados por coma: ');
```

```

y=input(' Escribe los valores de la variable dependiente, entre corchetes y
separados por coma: ');
vint=input ('Dame el valor que quieres interpolar: ');
N=length(x);
fint=0;
for K=1:N;
    L=1;
    for J=1:N;
        if K~=J
            L=L*((vint(H)-x(J))/(x(K)-x(J)));
        end
    end
    fint=fint+L*y(K);
end
fprintf('la interpolacion para %f es %f\n',vint(H),fint);
end

```

Se introduce el programa escrito anteriormente, se proponen los datos deseados, se corre el programa y se obtiene el valor de la interpolación, se debe tener en cuenta que el grado de polinomio de ajuste, corresponde al número de datos introducidos menos uno y que el valor a interpolar debe encontrarse entre los datos conocidos.

TAREA La siguiente tabla muestra los datos de la velocidad de un móvil en diferentes tiempos:

<i>Tiempo (segundos)</i>	<i>Velocidad (m/s)</i>
5	20.3
10	28.9
15	36.4
20	44.3

25	52.8
30	61.6

- a) Obtener el polinomio de interpolación de Lagrange de grado dos para los tres primeros datos
- b) Obtener el polinomio de interpolación de Lagrange de grado cuatro para los cinco primeros datos
- c) Estimar la velocidad en $t=6$ s, con el polinomio de interpolación de Lagrange de grado dos
- d) Estimar la velocidad en $t=13$ s con el polinomio de interpolación de Lagrange de grado 4
- e) Mostrar la gráfica del ajuste de grado cuatro de interpolación de Lagrange, así como el punto de interpolación.

PRÁCTICA No. 12

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

OBJETIVO

El alumno será capaz de aproximar el valor de las derivadas de diferente orden de una función tabular mediante diferencias finitas divididas hacia delante, hacia atrás y central.

INTRODUCCION

En la práctica del análisis numérico, usualmente se requieren una o dos derivadas de bajo orden de una función tabular, Las fórmulas de aproximación a la derivada de una función dada en forma tabular se denominan de diferencia finita y se presenta en tres casos:

- a) Aproximación de diferencia hacia delante.
- b) Aproximación de diferencia hacia atrás.
- c) Aproximación de diferencia central.

El método de Euler divide un segmento de curva en subintervalos, con el fin de obtener una aproximación del valor de la derivada.

PRINCIPIO DEL MÉTODO

La diferenciación numérica es una técnica de análisis numérico para producir una estimación de la derivada de una función matemática que está expresada de forma tabular. Geométricamente la derivada es la pendiente de la recta tangente a una curva de función $f(x)$ en un punto $(x, f(x))$, sin embargo en una función expresada de forma tabular no se conoce la expresión de $f(x)$ y lo que se tiene es una serie de puntos conocidos de la función. Por lo que se aproxima la línea tangente con múltiples líneas secantes con distancias de corte entre dos puntos que cruzan a la función de progresiva con distancias cada vez más pequeñas. Con el límite de las pendientes de las líneas secantes de esta progresión se consigue la pendiente de la línea tangente. En la siguiente lustración h será el incremento en la variable x y corresponde a los valores de x que forman la recta secante, mientras más pequeña sea h , la aproximación a la derivada será más próxima.

La derivada de $f(x)$ en x es entonces el límite del valor del cociente diferencial, conforme las líneas secantes se aproximan a la línea tangente:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x) - f(x + \Delta x)}{\Delta x} = \frac{dy}{dx}$$

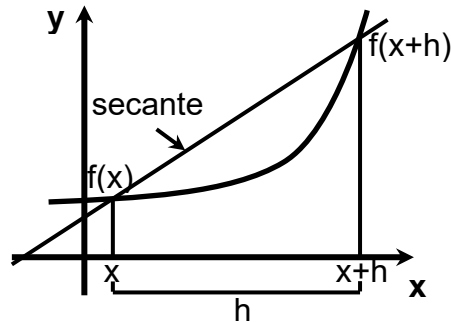


Figura 12.1 Gráfica de la recta tangente entre x y $x+h$

En este caso $\Delta x = h$, y es llamado el tamaño del paso, por lo que:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_i + h)}{h}$$

Es deseable que h sea lo más pequeña posible, si se renombran los dos puntos $(x_i, f(x_i))$ y $(x_i + h, f(x_i + h))$, como dos puntos consecutivos de la función tabular (x_0, y_0) y (x_1, y_1) respectivamente, la fórmula se expresa por:

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

Conociendo lo anterior, se puede estimar la derivada de una función.

Derivada de la función tabular por la expansión de Taylor.

El método de expansión de Taylor también proporciona una fórmula para obtener derivadas a partir de un conjunto de pares ordenados de datos (x, y) , siempre y cuando el grado de la derivada sea menor que el número de puntos dados. El método calcula aproximaciones de diferencia, basado en el teorema de Taylor, el cual dice lo siguiente: *“Si una función $f(x)$ posee derivadas continuas hasta de orden n en el punto $x=a$ con $n \geq 1$ se tratara de encontrar un polinomio $P(x)$ que coincida con $f(x)$ con sus primera derivadas en $x = a$.”*

Al truncar la serie de Taylor hasta el segundo término alrededor de x_0 :

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

Estimando el polinomio de Taylor en x_1 : $f(x_1) = f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0)$

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

Multiplicando el numerador y el denominador por menos uno, se obtiene la misma fórmula del análisis geométrico

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

De forma general para dos datos consecutivos x_i y x_{i+1} :

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

Dónde: $h = x_{i+1} - x_i$

$O(h)$ es el error de truncamiento de la serie de Taylor, por lo que:

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

Esta ecuación es conocida como la fórmula de la primera diferencia dividida finita hacia adelante y $O(h)$ es la estimación del error por trunca la serie de Taylor hasta un grado determinado, en este caso hasta el segundo término o de la primera derivada.

Primera derivada hacia adelante (primera diferencia finita dividida hacia adelante)

Las diferencias finitas son hacia adelante cuando $x_i + h > x_i$, entonces $x_{i+1} = x_i + h$, es decir que se define un punto x_i y otro punto sucesivo x_{i+1} a la derecha de x_i , que está delante de x_i .

De la expansión de la serie de Taylor alrededor de x_i y truncando hasta el segundo término, con la primera derivada, tenemos la siguiente expresión:

$$f(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i)$$

Al evaluar en un valor consecutivo de x_i , es decir en x_{i+1} , se tiene:

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

Despejando $f'(x_i)$

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

Pero $x_{i+1} - x_i = h$, y tomando en cuenta el error por truncamiento $O(h)$ en la serie de Taylor

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

Dónde $O(h)$ es la estimación del error que se calcula por:

$$R(x) = O(h) = \frac{f^{(n+1)}(E)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1}$$

Gráficamente, corresponde a la siguiente figura

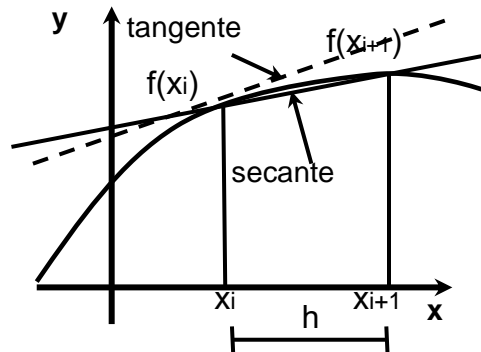


Figura 12.2 Gráfica de la recta tangente hacia adelante

Primera derivada hacia atrás (primera diferencia finita dividida hacia atrás)

Si la x_i corresponde a una diferencia hacia atrás, entonces $h = x_i - x_{i-1}$, por lo que x_{i-1} es un valor a la izquierda de x_i , es decir atrás de x_i . Al aproximar $f'(x)$ con el polinomio de Taylor en x_{i-1} , con un polinomio de Taylor construido alrededor de x_i y truncado en la primera derivada:

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

Pero $h = x_i - x_{i-1} > 0$, porque $x_{i-1} < x_i$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i)$$

Despejando la primera derivada:

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

Que también se puede expresar por

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

Considerando el error por el truncamiento de la serie de Taylor:

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

Que corresponde con la siguiente gráfica:

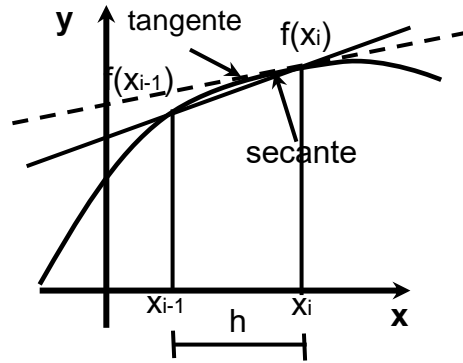


Figura 12.3 Gráfica de la recta tangente hacia atrás

Además el error estimado para la primera derivada en x_i es también:

$$O(h) = \frac{f''(E)}{2}(h)$$

Primera derivada centrada (primera diferencia finita dividida centrada)

Al restar la expansión de la serie de Taylor hacia atrás de la expansión hacia adelante y despejar $f'(x)$, se obtiene la fórmula para la diferencia dividida centrada:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i)$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i)$$

Al restarlas se obtiene lo siguiente:

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

$$f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}) = 2hf'(x_i)$$

Despejando $f'(x_i)$:

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

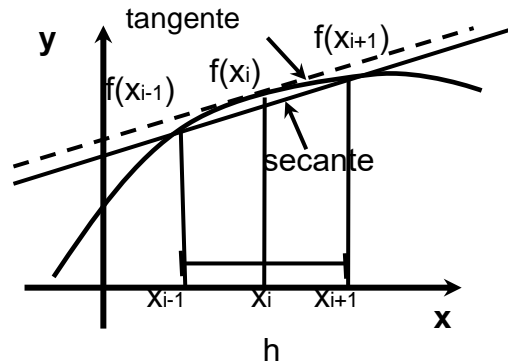


Figura 12.4 Gráfica de la recta tangente centrada

Que corresponde a la fórmula de la primera derivada con diferencias finitas divididas centradas y con un error de

$$O(h^2) = \frac{f''(E)}{2} (h^2)$$

Debe observarse que el error es del orden de h^2 , por lo que la serie de Taylor para la diferencia centrada es una representación más exacta de la derivada.

Segunda derivada hacia adelante (segunda diferencia finita dividida hacia adelante)

Para obtener la segunda derivada se retiene un término más de la expansión de serie de Taylor, en este caso hasta la segunda derivada, y al evaluar en los puntos sucesivos x_{i+1} y x_{i+2} :

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

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

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + 2hf'(x_i) + 2h^2 f''(x_i)$$

Para obtener la segunda derivada, multiplicar por dos la expansión para $f(x_{i+1})$, restarla de $f(x_{i+2})$ y despejar $f''(x_i)$.

Al multiplicar por dos la expansión para $f(x_{i+1})$

$$\left[f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) \right] 2$$

$$2f(x_{i+1}) = 2f(x_i) + 2hf'(x_i) + h^2 f''(x_i)$$

Al restarla de $f(x_{i+2})$:

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + 2hf'(x_i) + 2h^2 f''(x_i)$$

–

$$2f(x_{i+1}) = 2f(x_i) + 2hf'(x_i) + h^2 f''(x_i)$$

Que resulta en

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

Despejando $f''(x_i)$:

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

Con un error de $O(h)$

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

Dónde $O(h)$ se calcula por

$$O(h) = \frac{f'''(E)}{2}(h)$$

Segunda derivada hacia atrás (segunda diferencia finita dividida hacia atrás)

De forma análoga al caso de la derivada hacia adelante, se retienen más términos de la expansión de serie de Taylor, hasta la derivada de interés, desarrollando la serie de Taylor hasta la segunda derivada, para los puntos sucesivos x_{i-1} y x_{i-2} :

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

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

$$f(x_{i-2}) = f(x_i) - 2hf'(x_i) + 2h^2 f''(x_i)$$

Para obtener la segunda derivada, multiplicar por dos la expansión para $f(x_{i-1})$, restarla de $f(x_{i-2})$ y despejar $f''(x_i)$.

Al multiplicar por dos la expansión para $f(x_{i-1})$

$$\left[f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{h^2}{2} f''(x_i) \right] 2$$

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

Al restarla de $f(x_{i-2})$:

$$f(x_{i-2}) = f(x_i) - 2hf'(x_i) + 2h^2 f''(x_i)$$

—

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

Que resulta en

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

Despejando $f''(x_i)$:

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

Con un error $O(h) = \frac{f'''(E)}{2}(h)$

Segunda derivada centrada (segunda diferencia finita dividida centrada)

En este caso se retienen hasta la segunda derivada en la expansión de la serie de Taylor, y se evalúa en los puntos sucesivos x_{i-1} y x_{i+1} :

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

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

Para obtener la segunda derivada se suman las dos expansiones y se despeja $f''(x_i)$.

Al sumar las dos expansiones:

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

+

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

Que resulta en

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

Despejando $f''(x_i)$:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1}))}{h^2} \quad \text{Con un error} \quad O(h^2) = \frac{f''(E)}{2}(h^2)$$

Por otra parte se debe notar que la segunda diferencia finita centrada:

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

Se puede escribir como

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

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

Pero $f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$ es la primera diferencia finita hacia adelante y

$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{h}$ es la primera diferencia finita hacia atrás.

Entonces así como la segunda derivada es la derivada de la primera derivada, la segunda diferencia finita dividida se obtiene con las dos primeras diferencias divididas.

Fórmulas de diferenciación con alta exactitud

Hasta ahora las aproximaciones de diferencias finitas se han realizado con dos puntos, pero se puede obtener una mejor aproximación cuanto más puntos se consideren en la fórmula y se retengan más términos de la serie de Taylor, de modo que la aproximación sea más exacta.

Primera derivada hacia adelante con alta precisión

Al desarrollar la serie de Taylor hasta el término con la segunda derivada, alrededor de x_i , y evaluarla en x_{i+1} :

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

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

Pero sabemos que la segunda derivada hacia adelante esta expresada por:

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

Por lo que al sustituirla en $f'(x_i)$

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

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

En este caso el error corresponde a $O(h^2)$, que corresponde a una mayor exactitud, en cuanto que h es un valor pequeño. A continuación se presentan las fórmulas de diferencias divididas finitas para derivadas hasta cuarto orden hacia adelante, hacia atrás y centradas, se presentan dos versiones para cada derivada, la primera es simple y la segunda es de alta precisión ya que emplea más términos de la expansión de la serie de Taylor y, en consecuencia, es más exacta.

Fórmulas de diferencias divididas finitas hacia adelante:

Primera derivada

Error

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

$O(h)$

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

$O(h^2)$

Segunda derivada

Error

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

$O(h)$

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

$O(h^2)$

Tercera derivada

Error

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

$O(h)$

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3}$$

$O(h^2)$

Cuarta derivada

Error

$$f^{iv}(x_i) = \frac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4}$$

$O(h)$

$$f^{iv}(x_i) = \frac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4} \quad O(h^2)$$

Fórmulas de diferencias divididas finitas hacia atrás:

Primera derivada Error

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

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

Segunda derivada Error

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

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

Tercera derivada Error

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

$$f'''(x_i) = \frac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4})}{2h^3} \quad O(h^2)$$

Cuarta derivada Error

$$f^{iv}(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4})}{h^4} \quad O(h)$$

$$f^{iv}(x_i) = \frac{3f(x_i) - 14f(x_{i-1}) + 26f(x_{i-2}) - 24f(x_{i-3}) + 11f(x_{i-4}) - 2f(x_{i-5})}{h^4} \quad O(h^2)$$

Fórmulas de diferencias divididas finitas centradas:

Primera derivada Error

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

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h} \quad O(h^4)$$

Segunda derivada Error

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

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{12h^2} \quad O(h^4)$$

Tercera derivada Error

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

$$f''''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3}))}{2h^3} \quad O(h^4)$$

Cuarta derivada Error

$$f^{iv}(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^4} \quad O(h^2)$$

$$f^{iv}(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) + 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) + f(x_{i-3}))}{6h^4} \quad O(h^4)$$

Desarrollo:

Ejercicio 1: Usar las diferencias hacia delante, hacia atrás y central para estimar la primera derivada de $f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$ en $x=0.5$ empleando un tamaño de paso $h=0.25$. Comparar con el valor verdadero $f'(0.5) = -0.8125$, mediante el error relativo porcentual.

Solución

$$h=0.25$$

$$X_i=0.5$$

$$X_{i+1}=h+X_i=0.5+0.25=0.75$$

$$X_{i-1}=X_i-h=0.5-0.25=0.25$$

$$f(X_i) = f(0.5) = -0.1(0.5)^4 - 0.15(0.5)^3 - 0.5(0.5)^2 - 0.25(0.5) + 1.2 = 0.925$$

$$f(X_{i+1})=f(0.75)=-0.1(0.75)^4 -0.15(0.75)^3 -0.5(0.75)^2-0.25(0.75)+1.2=0.6363$$

$$f(X_{i-1})=f(0.25)=-0.1(0.25)^4 -0.15(0.25)^3 -0.5(0.25)^2 -0.25(0.25)+1.2=1.1035$$

a) Diferencias hacia adelante

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

$$f'(x_i) = \frac{0.6363 - 0.925}{0.25}$$

$$f'(x_i) = -1.1548$$

El valor verdadero de la primera derivada, evaluada en 0.5 es $f'(0.5)=0.9125$, por lo que el error relativo porcentual es:

$$E_{r\%} = \left| \frac{V_{real} - V_{estimado}}{V_{real}} \right| * 100$$

$$E_{r\%} = \left| \frac{-0.9125 + 1.1548}{-0.9125} \right| * 100$$

$$E_{r\%} = 26.55$$

b) Diferencias hacia atrás

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

$$f'(x_i) = \frac{0.925 - 1.1035}{0.25}$$

$$f'(x_i) = -0.714$$

El valor verdadero de la primera derivada, evaluada en 0.5 es $f'(0.5)=0.9125$, por lo que el error relativo porcentual es:

$$E_{r\%} = \left| \frac{V_{real} - V_{estimado}}{V_{real}} \right| * 100$$

$$E_{r\%} = \left| \frac{-0.9125 + 0.714}{-0.9125} \right| * 100$$

$$E_{r\%} = 21.75\%$$

c) Diferencia centrada

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

$$f'(x_i) = \frac{0.6363 - 1.1035}{2(0.25)}$$

$$f'(x_i) = -0.9344$$

El valor verdadero de la primera derivada, evaluada en 0.5 es $f'(0.5)=0.9125$, por lo que el error relativo porcentual es:

$$E_{r\%} = \left| \frac{V_{real} - V_{estimado}}{V_{real}} \right| * 100$$

$$E_{r\%} = \left| \frac{-0.9125 + 0.9344}{-0.9125} \right| * 100$$

$$E_{r\%} = 2.4\%$$

Para resolver el ejercicio con Matlab, ejecutar lo siguientes comandos:

```
>> xi=0.5;
>> h=0.25;
>> p=[-0.1, -0.15, -0.5, -0.25, 1.2];
>> xad=xi+h;
>> xat=xi-h;
>> fxi=polyval(p,xi)
fxi =
    0.9250
>> fxad=polyval(p,xad)
fxad =
    0.6363
>> fxat=polyval(p,xat)
```

```
fxat =  
1.1035
```

En los cálculos anteriores x_{i+1} es xad (x adelante), x_{i-1} es xat (x atrás) y de forma análoga $f(x_{i+1})$ es fxad y $f(x_{i-1})$ es fxat. Con estos valores podemos realizar las aproximaciones de la primera derivada.

Para obtener el valor verdadero de $f'(0.5)$, ejecutar los siguientes comandos

```
>> dfx=polyder(p)  
dfx =  
-0.4000 -0.4500 -1.0000 -0.2500  
>> dv=polyval(dfx,xi)  
dv =  
-0.9125
```

De aquí podemos ver que el valor verdadero de la derivada del polinomio en $x=0.5$ es -0.9125. Ahora para calcular la aproximación por la primera diferencia dividida hacia adelante, ejecutar los siguientes comandos:

```
>> pdad=(fxad-fxi)/h  
pdad =  
-1.1547
```

La aproximación a la primera derivada del polinomio es -1.1547, donde la variable pdad, es la primera derivada adelante. El porcentaje del error se calcula como:

$$\% E = \left| \frac{X_{verdadero} - X_{Estimado}}{X_{verdadero}} \right|$$

En este caso el porcentaje de error se puede calcular con los siguientes comandos:

```
>> per=abs((dv-pdad)/dv)*100  
per =  
26.5411
```

Como se puede ver el porcentaje del error verdadero es del 26.5 %. Para calcular la primera derivada atrás, ejecutar los siguientes comandos:

```
>> pdat=(fxi- fxat)/h  
pdat =
```

```
-0.7141
```

El valor de la aproximación a la primera derivada con la primera diferencia dividida hacia atrás es de -0.7141. Ahora calculando el porcentaje del error verdadero, ejecutar los siguientes comandos:

```
>> per=abs((dv-pdat)/dv)*100
per =
    21.7466
```

De forma que el porcentaje de error, resulta en este caso del 21.7 %. Para aproximar la primera por la primera diferencia dividida centrada ejecutar los siguientes comandos:

```
>> pdc=(fxad-fxat)/(2*h)
pdc =
   -0.9344
```

La aproximación a la primera derivada por la primera diferencia finita dividida es de -0.9344, y para calcular el porcentaje de error, ejecutar los siguientes comandos:

```
>> per=abs((dv-pdc)/dv)*100
per =
    2.3973
```

Como se puede notar el porcentaje del error verdadero es menor en el caso de la aproximación centrada, y podemos concluir la diferencia central es donde se obtiene una mejor aproximación.

Que también se pudo haber desarrollado de forma simbólica, con los siguientes comandos:

```
>> syms x
>> xi=0.5;
>> h=0.25;
>> p=-0.1*x^4-0.15*x^3-0.5*x^2-0.25*x+1.2;
>> xad=xi+h;
>> xat=xi-h;
>> fxi=vpa(subs(p,xi))
fxi =
    0.9250
>> fxad=vpa(subs(p,xad))
```

```

fxad =
    0.636328125
>> fxat=vpa(subs(p,xat))
fxat =
    1.103515625
>> dfx=diff(pt,1)
dfx =
    - x - (9*x^2)/20 - (2*x^3)/5 - 1/4
>> dv=vpa(subs(dfx,xi))
dv =
    -0.9125
>> pdad=(fxad-fxi)/h
pdad =
    -1.1546875
>> per=abs((dv-pdad)/dv)*100
per =
    26.541095890410958904109589041096
>> pdat=(fxi- fxat)/h
pdat =
    -0.7140625
>> per=abs((dv-pdat)/dv)*100
per =
    21.746575342465753424657534246575
>> pdc=(fxad-fxat)/(2*h)
pdc =
    -0.934375
>> per=abs((dv-pdc)/dv)*100
per =
    2.3972602739726027397260273972603

```

Con los comandos anteriores se pueden reproducir los mismos resultados que usando comandos para polinomios, pero ahora usando comandos de matemática simbólica.

Ejercicio 2: Dada la siguiente tabla de datos, obtener el diagrama de dispersión, estimar $f'(x)$ para cada valor de x , y estimar el error en cada estimación de la derivada.

Puntos	1	2	3	4	5
X	2	4	6	8	10
f(x)	8	42	50	37	12

Solución:

Para obtener el diagrama de dispersión, se cargan los datos: x y fx para de la tabla, y se ejecuta el comando plot(x, y), como se muestra a continuación:

```
>> x=2:2:10;
>> fx=[8 42 50 37 12];
>> plot(x,fx,'*');grid
>> title('grafica de dispersión')
>> xlabel('X'); ylabel('f(x)')
```

Como se puede notar en la siguiente figura el patrón de los datos corresponde a una parábola, la pendiente en los primeros dos puntos es positiva, y en el tercer punto es cercana a cero, mientras que en los dos últimos la pendiente es negativa.

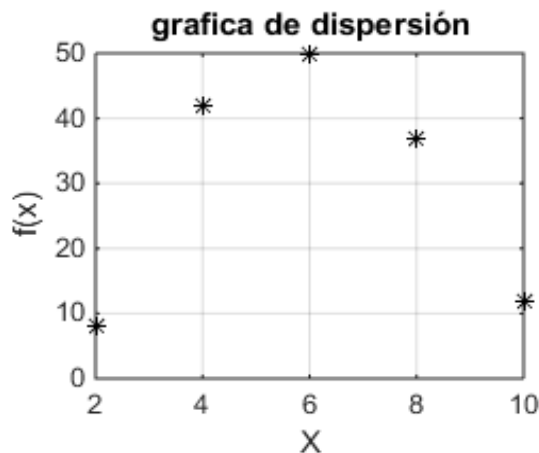


Figura 12.5 Gráfica de dispersión de la tabla de datos x, f(x)

La primera derivada en el primer punto es positiva y se puede estimar con una fórmula de alta precisión hacia adelante, porque se tienen suficientes puntos:

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

Si se guardan los valores de las derivadas en un vector de derivadas nombrado como dfxi, se ejecutan los siguientes comandos:

```
>>h=2;
>> dfxi(1)=(-fx(3)+4*fx(2)-3*fx(1))/(2*h)
dfxi =
    23.5000
```

Para calcular el error aproximado en cada caso se debe usar la fórmula asociada a cada fórmula de la derivada. Así para el primer punto el error se estima con $O(h^2) = \frac{f''(E)}{2}(h^2)$

En este caso $h=2$ y E es un valor de x que pertenece al intervalo de los puntos usados para aproximar la derivada en este caso (2, 6), pues se usan los puntos (2, 8), (4, 42) y (6, 50), el valor seleccionado es arbitrario. Seleccionando el valor de $E=4$, se debe estimar la segunda derivada en $x=4$, la cual se puede estimar por una derivada centrada y con la siguiente fórmula:

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

Si el valor de la segunda derivada $f''(E)$ se guarda en una variable llamada $sdfE$ y se estima el valor del error $O(h^2)$, y se ejecutan los siguientes comandos:

```
>> sdfE=(fx(1)-2*fx(2)+fx(3))/h^2
sdfE =
    -6.5000
>> Ea(1)=sdfE/2*h^2
Ea =
    -13
```

La primera derivada es positiva con un valor de 23.5 en el punto (2, 8) y un error de estimación igual a $Ea=-13$. Para estimar la derivada del segundo punto se puede calcular con la fórmula

centrada $f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}$, y ejecutando los comandos siguientes:

```
>>dfxi(2)=(fx(3) -fx(1))/(2*h)
dfxi =
    23.5000    10.5000
```

Para estimar el error también se calcula con la fórmula de $O(h^2)$, con E que pertenece al intervalo (2, 6), por lo que se puede usar la misma estimación anterior de la segunda derivada en $E=4$, es

decir que $f''(E)=-6.5$, y como h es la misma, la estimación del error es la misma, con la fórmula

$$O(h^2) = \frac{f''(E)}{2}(h^2)$$

```
>> Ea(2)=sdfE/2*h^2
Ea =
-13 -13
```

La estimación de la primera derivada en el segundo punto es 10:5, con un error aproximado de -13. La derivada del tercer punto se puede estimar con una fórmula centrada de alta precisión

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

```
>> dfxi(3)=(-fx(5)+8*fx(4)-8*fx(2)+fx(1))/(12*h)
dfxi =
23.5000 10.5000 -1.8333
```

Al usar la fórmula centrada de alta precisión, el error se estima con la fórmula $O(h^4) = \frac{f''(E)}{2}(h^4)$, con E que pertenece al intervalo (2, 10), por lo que podemos tomar $E=4$ y usar $f''(E)=-6.5$, y ejecutar los siguientes comandos en Matlab:

```
>> Ea(3)=sdfE/2*h^4
Ea =
-13 -13 -52
```

La estimación de la derivada en el tercer punto (6, 50) es de -1.8333, con un error aproximado de -52. La estimación de la derivada en el cuarto punto se podría calcular con la formula centrada, para la cual se tienen suficientes puntos, por lo que se ejecutan los siguientes comandos:

```
>> dfxi(4)=(fx(5)-fx(3))/(2*h)
dfxi =
23.5000 10.5000 -1.8333 -9.5000
```

El error se estima con la fórmula de $O(h^2)$, con un E que pertenece al intervalo (6, 10), se usará $E=8$, para estimar $f''(E)$ con la fórmula de la segunda derivada centrada, ejecutar los siguientes comandos:

```
>> sdfE=(fx(3)-2*fx(4)+fx(5))/h^2
sdfE =
-3
```



```
>> Ea(4)=sdfE/2*h^2
Ea =
-13 -13 -52 -6
```

La estimación de la primera derivada en el cuarto punto (8, 37) resulta de -9.5 y con un error aproximado de -6

Para estimar la derivada en el último punto se tendrá que usar una fórmula hacia atrás, y hay suficientes puntos para hacerlo con una fórmula de alta precisión:

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

Ejecutar los siguientes comandos:

```
>> dfxi(5)=(3*fx(5)-4*fx(4)+fx(3))/(2*h)
dfxi =
23.5000 10.5000 -0.8333 -9.5000 -15.5000
```

El error se estima con la fórmula de $O(h^2)$, con un E que pertenece al intervalo (6, 10), se usará E=8, para estimar $f''(E)$ con la fórmula de la segunda derivada centrada, ejecutar los siguientes comandos:

```
>> Ea(5)=sdfE/2*h^2
Ea =
-13 -13 -52 -6 -6
```

Los resultados se podrían agrupar en una tabla, de la siguiente forma:

Puntos	1	2	3	4	5
X	2	4	6	8	10
f(x)	8	42	50	37	12
f'(x)	23.5	10.5	-0.8333	-9.5	-3.5
Error estimado	-13	-13	-52	-6	-6

Tarea

1. La reacción en fase líquida entre trimetilamina y bromuro de propileno en benceno, se llevó a cabo introduciendo cinco ampollitas con una mezcla de reactantes en un baño a temperatura constante. Las ampollitas se sacan a varios tiempos, se enfrían para detener la reacción y se analiza su contenido. El análisis se basa en que la sal cuaternaria de amoniaco está ionizada, de aquí que la concentración de los iones bromuro se pueda obtener por titulación. Los resultados obtenidos son:

Tiempo (min)	10	35	60	85	110
Conversión (%)	12	28	40	46	52

Calcule la variación de la conversión con respecto al tiempo de los distintos puntos de la tabla.

2. Considere una varilla uniforme de 1 metro de longitud apoyada en dos extremos; el momento

del doblamiento está dado por: $y'' = \frac{M(x)}{EI}$

Donde $y(x)$ es la deflexión, $M(x)$ es el momento del doblamiento y EI es la rigidez de la unión. Calcule el momento de doblamiento en cada punto de la retícula, incluyendo los extremos, suponiendo que la distribución de la deflexión tiene los valores mostrados en la tabla.

i	x_i (m)	y_i (cm)
0	0.0	0.0
1	0.2	7.78
2	0.4	10.68
3	0.6	8.37
4	0.8	3.97
5	1	0.0

Suponga que $EI=1.2 \times 10^5 \text{ Nm}^2$. Utilice la aproximación por diferencias simples que mejor convengan en cada caso.

3. La distribución de la velocidad de un fluido cerca de una superficie plana está dada por la siguiente tabla:

i	y_i (m)	u_i (m/s)
0	0.0	0.0
1	0.002	0.006180
2	0.004	0.011756
3	0.006	0.016180
4	0.008	0.019021

La Ley de Newton para la tensión superficial está dada por $\tau = \mu \frac{du}{dy}$ donde μ es la viscosidad que suponemos vale 0.001 Ns/m^2 . Calcule la tensión superficial en cada punto mediante aproximación por diferencias finitas divididas simples.

4. Dada la función $f(x)=xe^x+e^x$ aproxime $f'(x)$ y $f''(x)$ en $x=0.6$, empleando los valores de $h=0.4$, 0.1 y 0.0002 . Compare con los valores analíticos por medio del porcentaje de error verdadero.
5. Calcule $f'(x)$, $f''(x)$, donde $f(x) = \sqrt{x}$ en $x=1$, utilizando las aproximaciones por diferencias hacia atrás, hacia adelante y centrales con $h=0.1$ y 0.025 . Evalúe el error absoluto verdadero de cada resultado.

PRÁCTICA No. 13

INTEGRACIÓN NUMÉRICA

OBJETIVO

El alumno será capaz de aproximar el valor de las integrales definidas, mediante las fórmulas de Newton-Cotes.

En los cursos de Cálculo Integral, se enseña como calcular una integral definida de una función continua mediante una aplicación del Teorema Fundamental del Cálculo:

Teorema Fundamental del Cálculo

Sea $f(x)$ una función continua en el intervalo $[a, b]$ y sea $F(x)$ una antiderivada de $f(x)$. Entonces:

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$$

El problema en la práctica, se presenta cuando no es posible encontrar la antiderivada requerida, aún para integrales aparentemente sencillas como:

$$\int_0^1 e^{x^2} dx$$

la cual simplemente es imposible de resolver utilizando el Teorema Fundamental del Cálculo.

Existen diversos métodos numéricos que permiten obtener aproximaciones bastante exactas a integrales como la mencionada anteriormente. Específicamente, se verán las técnicas de integración numérica: las fórmulas de Newton-Cotes.

Las fórmulas de Newton-Cotes están conformadas por las bien conocidas reglas del trapecio y de Simpson (regla de un tercio y de tres octavos).

Haciendo uso de algunos programas computacionales (por ejemplo, en *Mathematica*) es posible discernir sobre las cualidades y defectos de cada uno de los métodos mencionados arriba.

FÓRMULAS DE INTEGRACIÓN DE NEWTON-COTES

Estas fórmulas se basan en la idea de integrar una función polinomial en vez de $f(x)$:

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

donde $f_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ es un polinomio de interpolación de grado n para ciertos datos de $f(x)$ que se escogen apropiadamente.

Es importante observar que estas fórmulas se pueden aplicar inclusive a una tabla de datos, ya que lo que se usa es un polinomio de interpolación, el cual puede ser calculado con la tabla.

Dentro de las fórmulas de Newton-Cotes, existen las formas *cerradas* y *abiertas*. En las formas cerradas se conocen los valores de $f(a)$ y $f(b)$; en caso contrario, se llaman formas abiertas.

En el curso se remitirá a estudiar únicamente las formas cerradas, y por lo tanto, siempre se supondrá que conocemos los valores de $f(a)$ y $f(b)$.

REGLA DEL TRAPECIO

Corresponde al caso donde $n = 1$, es decir:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b f_1(x)dx$$

donde $f_1(x)$ es un polinomio de interpolación (obviamente de grado 1) para los datos:

$$\begin{array}{c|c|c} x & a & b \\ \hline y & f(a) & f(b) \end{array}$$

Se sabe que este polinomio de interpolación es:

$$f_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

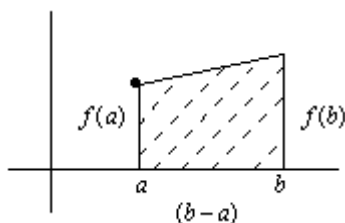
integrando este polinomio, se tiene que:

$$\begin{aligned} \int_a^b f_1(x)dx &= f(a)x + \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \left[\frac{(x - a)^2}{2} \right]_a^b \\ &= f(a)(b - a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \left[\frac{(b - a)^2}{2} \right] \\ &= f(a)(b - a) + (f(b) - f(a)) \left(\frac{b - a}{2} \right) \\ &= (b - a) \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{2} \right] \\ &= (b - a) \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} \right] \end{aligned}$$

Por lo tanto, se tiene que:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b - a) \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} \right]$$

Que es la conocida *Regla del Trapecio*. Este nombre se debe a la interpretación geométrica que se le da a la fórmula. El polinomio de interpolación para una tabla que contiene dos datos, es una línea recta. La integral, corresponde al área bajo la línea recta en el intervalo $[a, b]$, que es precisamente el área del trapecio que se forma.



Ejemplo 1:

Utilizar la regla del trapecio para aproximar la integral:

$$\int_0^1 e^{x^2} dx$$

Solución.

Usamos la fórmula directamente con los siguientes datos:

$$\begin{aligned} a &= 0 \\ b &= 1 \\ f(x) &= e^{x^2} \end{aligned}$$

por lo tanto se tiene que:

$$\int_0^1 e^{x^2} dx \approx (1-0) \left[\frac{f(0) + f(1)}{2} \right] = \frac{1+e}{2} = 1.85914$$

Ejemplo 2.

Usar la regla del trapecio para aproximar la integral:

$$\int_2^4 \frac{e^x}{x} dx$$

Solución.

Igual que en el ejemplo anterior, sustituimos los datos de manera directa en la fórmula del trapecio. En este caso, tenemos los datos:

$$\begin{aligned} a &= 2 \\ b &= 4 \\ f(x) &= \frac{e^x}{x} \end{aligned}$$

Por lo tanto, se tiene que:

$$\int_2^4 \frac{e^x}{x} dx \approx (4-2) \left[\frac{f(2)+f(4)}{2} \right] = \frac{e^2}{2} + \frac{e^4}{4} = 17.3441$$

La regla del trapecio se puede ampliar si subdivide el intervalo $[a, b]$ en n subintervalos, todos de la misma longitud $h = \frac{b-a}{n}$.

Sea $P = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ la partición que se forma al hacer dicha subdivisión. Usando propiedades de la integral, se tiene que:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx$$

Aplicando la regla del trapecio en cada una de las integrales, se obtiene:

$$\int_a^b f(x) dx \approx (x_1 - x_0) \left[\frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} \right] + \dots + (x_n - x_{n-1}) \left[\frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2} \right]$$

Ahora bien, ya que todos los subintervalos tienen la misma longitud h , se tiene que:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

Sustituyendo el valor de h y usando la notación sigma, se tiene finalmente:

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \left[\frac{f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n} \right]$$

Esta es la regla del trapecio para n subintervalos. Obviamente, se espera que entre más subintervalos se utilicen, mejor sea la aproximación a la integral.

Ejemplo 1:

Aplicar la regla del trapecio para aproximar la integral

$$\int_0^1 e^{x^2} dx$$

si se subdivide en 5 intervalos.

Solución.

En este caso, se identifica $n = 5$, y la partición generada es:

$$P = \{0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1\}$$

Así, aplicando la fórmula se tiene que:

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^{x^2} dx &\approx (1-0) \left[\frac{f(0) + 2(f(0.2) + f(0.4) + f(0.6) + f(0.8)) + f(1)}{2(5)} \right] \\ &= 1 \left[\frac{1 + 2(e^{(0.2)^2} + e^{(0.4)^2} + e^{(0.6)^2} + e^{(0.8)^2}) + e}{10} \right] \\ &= 1.48065 \end{aligned}$$

Cabe mencionar que el valor verdadero de esta integral es de 1.4626...

Así, se observa que con 5 intervalos, la aproximación no es tan mala. Para hacer cálculos con más subintervalos, es conveniente elaborar un programa que aplique la fórmula con el número de subintervalos que uno desee. El lector debería hacer su propio programa y checar con 50, 500, 1000, 10000 y 20000 subintervalos, para observar el comportamiento de la aproximación.

REGLA DE SIMPSON DE UN TERCIO

Suponemos que tenemos los datos:

a	x_m	b
$f(a)$	$f(x_m)$	$f(b)$

donde x_m es el punto medio entre a y b .

En este caso se tiene que:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b f_2(x) dx$$

donde $f_2(x)$ es el polinomio de interpolación para los datos en la tabla anterior. Usaremos el polinomio de Lagrange.

Así, se tiene que:

$$f_2(x) = f(a) \frac{(x-x_m)(x-b)}{(a-x_m)(a-b)} + f(x_m) \frac{(x-a)(x-b)}{(x_m-a)(x_m-b)} + f(b) \frac{(x-a)(x-x_m)}{(b-a)(b-x_m)}$$

Si se denota $h = \frac{b-a}{2} = x_m - a = b - x_m$, entonces:

$$f_2(x) = f(a) \frac{(x-x_m)(x-b)}{(-h)(-2h)} + f(x_m) \frac{(x-a)(x-b)}{(h)(-h)} + f(b) \frac{(x-a)(x-x_m)}{(2h)(h)}$$

Simplificando términos:

$$f_2(x) = \frac{f(a)}{2h^2}(x-x_m)(x-b) - \frac{f(x_m)}{h^2}(x-a)(x-b) + \frac{f(b)}{2h^2}(x-a)(x-x_m)$$

Se observa que cada uno de los términos anteriores, es esencialmente de la misma forma, es decir, una constante por $(x-\alpha)(x-\beta)$

Así, calculando la siguiente integral por partes:

$$\int (x-\alpha)(x-\beta) dx$$

Sea:

$$\begin{aligned} u &= x-\alpha & du &= dx \\ dv &= (x-\beta)dx & v &= \int (x-\beta)dx = \frac{(x-\beta)^2}{2} \end{aligned}$$

por lo tanto,

$$\begin{aligned} \int (x-\alpha)(x-\beta) dx &= (x-\alpha) \frac{(x-\beta)^2}{2} - \int \frac{(x-\beta)^2}{2} dx \\ &= (x-\alpha) \frac{(x-\beta)^2}{2} - \frac{(x-\beta)^3}{6} \end{aligned}$$

Usando esta fórmula para calcular la integral de cada uno de los tres términos de $f_2(x)$.

$$\begin{aligned} \int_a^b f_2(x) dx &= \frac{f(a)}{2h^2} \int_a^b (x-x_m)(x-b) dx - \frac{f(x_m)}{h^2} \int_a^b (x-a)(x-b) dx + \frac{f(b)}{2h^2} \int_a^b (x-a)(x-x_m) dx \\ I_1 &= \int_a^b (x-x_m)(x-b) dx = (x-x_m) \frac{(x-b)^2}{2} - \frac{(x-b)^3}{6} \Big|_a^b \\ &= -(a-x_m) \frac{(a-b)^2}{2} + \frac{(a-b)^3}{6} = -(-h) \frac{(-2h)^2}{2} + \frac{(-2h)^3}{6} = 2h^3 - \frac{4}{3}h^3 = \frac{2}{3}h^3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_2 &= \int_a^b (x-a)(x-b)dx = (x-a) \left[\frac{(x-b)^2}{2} - \frac{(x-b)^3}{6} \right]_a^b = \frac{(a-b)^3}{6} = \frac{(-2h)^3}{6} = -\frac{4}{3}h^3 \\
 I_3 &= \int_a^b (x-a)(x-x_m)dx = (x-a) \left[\frac{(x-x_m)^2}{2} - \frac{(x-x_m)^3}{6} \right]_a^b \\
 &= (b-a) \frac{(b-x_m)^2}{2} - \frac{(b-x_m)^3}{6} + \frac{(a-x_m)^3}{6} = (2h) \frac{h^2}{2} - \frac{h^3}{6} + \frac{(-h)^3}{6} = h^3 - \frac{h^3}{3} = \frac{2h^3}{3} \\
 \therefore \int_a^b f_2(x)dx &= \frac{f(a)}{2h^2} \left(\frac{2}{3}h^3 \right) - \frac{f(x_m)}{h^2} \left(-\frac{4}{3}h^3 \right) + \frac{f(b)}{2h^2} \left(\frac{2}{3}h^3 \right) \\
 &= f(a) \frac{h}{3} + f(x_m) \frac{4}{3}h + f(b) \frac{h}{3} = \frac{h}{3} [f(a) + 4f(x_m) + f(b)]
 \end{aligned}$$

Debido al factor $\frac{1}{3}h$ se le conoce como la *regla de Simpson de un tercio*.

En la práctica, sustituimos el valor de $h = \frac{b-a}{2}$ para obtener la fórmula final:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a) \left[\frac{f(a) + 4f(x_m) + f(b)}{6} \right]$$

Ejemplo 1.

Usar la regla de Simpson de 1/3 para aproximar la siguiente integral:

$$\int_0^1 e^{x^2} dx$$

Solución.

Aplicando la fórmula directamente, con los siguientes datos:

$$\begin{aligned}
 a &= 0 \\
 b &= 1 \\
 x_m &= 0.5 \\
 f(x) &= e^{x^2}
 \end{aligned}$$

Por lo tanto, se tiene que:

$$\int_0^1 e^{x^2} dx \approx (1-0) \left[\frac{f(0) + 4f(0.5) + f(1)}{6} \right] = \frac{1 + 4e^{(0.5)^2} + e}{6} = 1.4757$$

Ejemplo 2.

Usar la regla de Simpson de 1/3, para aproximar la siguiente integral:

$$\int_2^4 \frac{e^x}{x} dx$$

Solución.

Igual que en el ejercicio anterior, se sustituyen los datos adecuadamente:

$$\int_2^4 \frac{e^x}{x} dx \approx (4-2) \left[\frac{f(2)+4f(3)+f(4)}{6} \right] = \frac{1}{3} \left[\frac{e^2}{2} + 4\frac{e^3}{3} + \frac{e^4}{4} \right] = 14.7082$$

Al igual que con la regla del trapecio, se puede extender la regla de Simpson de 1/3, si se subdivide el intervalo $[a, b]$ en n subintervalos de la misma longitud $h = \frac{b-a}{n}$

Sea $P = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ la partición que se forma al hacer la subdivisión, y se denota por $x_{M_i} \in [x_{i-1}, x_i]$ el punto medio en cada subintervalo.

Aplicando primero propiedades básicas de la integral definida:

$$\therefore \int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx$$

Ahora, aplicando la regla de Simpson de 1/3, en cada una de las integrales de arriba:

$$\int_a^b f(x) dx \approx (x_1 - x_0) \left[\frac{f(x_0) + 4f(x_{M_1}) + f(x_1)}{6} \right] + \dots + (x_n - x_{n-1}) \left[\frac{f(x_{n-1}) + 4f(x_{M_n}) + f(x_n)}{6} \right]$$

Sustituyendo $h = \frac{b-a}{n}$ y usando la notación sigma:

$$\therefore \int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \left[\frac{f(x_0) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{mi}) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{6n} \right]$$

Ejemplo 1.

Aproximar la siguiente integral, aplicando la regla de Simpson de $\frac{1}{3}$ y subdividiendo en 5 intervalos.

$$\int_0^1 e^{x^2} dx$$

Solución.

En este caso, se tiene que $n = 5$, y la partición que se genera es:

$$P = \{0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1\}$$

Además, los puntos medios de cada subintervalo son:

$$P_M = \{0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9\}$$

Por lo tanto, sustituyendo los datos en la fórmula para obtener:

$$\begin{aligned} \int_0^1 e^{x^2} dx &\approx (1-0) \left[\frac{f(0) + 4[f(0.1) + f(0.3) + \dots + f(0.9)] + 2[f(0.2) + f(0.4) + \dots + f(0.8)] + f(1)}{6(5)} \right] \\ &= \frac{1}{30} \left[1 + 4[e^{(0.1)^2} + e^{(0.3)^2} + \dots + e^{(0.9)^2}] + 2[e^{(0.2)^2} + e^{(0.4)^2} + e^{(0.6)^2} + e^{(0.8)^2}] + e \right] = 1.4626 \end{aligned}$$

Nótese que esta aproximación ya es exacta hasta el cuarto decimal

Ejemplo 2.

Aproximar la siguiente integral, utilizando la regla de Simpson de $\frac{1}{3}$ y subdividiendo en 4 intervalos.

$$\int_2^4 \frac{e^x}{x} dx$$

Solución.

En este caso, se tiene que $n = 4$, y la partición que se genera es:

$$P = \{2, 2.5, 3, 3.5, 4\}$$

Además, los puntos medios de cada subintervalo son:

$$P_M = \{2.25, 2.75, 3.25, 3.75\}$$

Sustituyendo todos estos datos en la fórmula se obtiene la siguiente aproximación:

$$\begin{aligned} \int_2^4 \frac{e^x}{x} dx &\approx (4-2) \left[\frac{f(2) + 4[f(2.25) + f(2.75) + f(3.25) + f(3.75)] + 2[f(2.5) + f(3) + f(3.5)] + f(4)}{6(4)} \right] \\ &= \frac{1}{12} \left[\frac{e^2}{2} + 4 \left[\frac{e^{2.25}}{2.25} + \frac{e^{2.75}}{2.75} + \frac{e^{3.25}}{3.25} + \frac{e^{3.75}}{3.75} \right] + 2 \left[\frac{e^{2.5}}{2.5} + \frac{e^3}{3} + \frac{e^{3.5}}{3.5} \right] + \frac{e^4}{4} \right] = 14.6767 \end{aligned}$$

REGLA DE SIMPSON DE TRES OCTAVOS

Este caso corresponde a $n = 3$, es decir,

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b f_3(x) dx$$

donde $f_3(x)$ es un polinomio de interpolación para los siguientes datos:

x_0	x_1	x_2	x_3
$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$

y donde $a = x_0$, $b = x_3$ y x_1, x_2 son los puntos que dividen en tres partes iguales al intervalo $[a, b]$.

Igual que en el caso anterior, se usa el polinomio de interpolación de Lagrange, y usando el método de integración por partes se llega a la siguiente fórmula:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{3}{8} h [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

donde $h = \frac{(b-a)}{3}$. Debido al factor $\frac{3}{8}h$ es que se le dio el nombre de *Regla de Simpson de 3/8*. En la práctica, se sustituye el valor de h para obtener:

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b-a) \left[\frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8} \right]$$

Ejemplo 1.

Aproximar la siguiente integral, usando la regla de Simpson de $\frac{3}{8}$:

$$\int_1^4 e^x \ln x dx$$

Solución.

En este caso, tenemos los siguientes datos:

$$\begin{aligned} x_0 &= 1 \\ x_1 &= 2 \\ x_2 &= 3 \\ x_3 &= 4 \\ f(x) &= e^x \ln x \end{aligned}$$

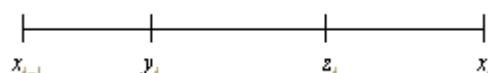
Los cuales se sustituyen en la fórmula, para obtener:

$$\int_1^4 e^x \ln x dx \approx (4-1) \left[\frac{f(1) + 3f(2) + 3f(3) + f(4)}{8} \right]$$

$$= \frac{3}{8} [e \ln 1 + 3e^2 \ln 2 + 3e^3 \ln 3 + e^4 \ln 4] = 58.9698$$

Al igual que en los dos casos anteriores, la regla de Simpson de 3/8, se puede extender si subdividimos el intervalo $[a, b]$ en n intervalos de la misma longitud $h = \frac{b-a}{n}$.

Sea x_0, x_1, \dots, x_n la partición determinada de esta forma. Cada subintervalo $[x_{i-1}, x_i]$ lo dividimos en tres partes iguales, y sean y_i y z_i los puntos determinados así:



Aplicando la regla de $\frac{3}{8}$ en cada uno de los intervalos tenemos:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x) dx + \dots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx$$

$$\approx h \left[\frac{f(x_0) + 3f(y_1) + 3f(z_1) + f(x_1)}{8} \right] + h \left[\frac{f(x_1) + 3f(y_2) + 3f(z_2) + f(x_2)}{8} \right] + \dots$$

$$\dots + h \left[\frac{f(x_{n-1}) + 3f(y_n) + 3f(z_n) + f(x_n)}{8} \right]$$

$$= \frac{h}{8} \left[f(x_0) + 3 \left(\sum_{i=1}^n [f(y_i) + f(z_i)] \right) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right]$$

$$= \frac{b-a}{8n} \left[f(x_0) + 3 \left(\sum_{i=1}^n [f(y_i) + f(z_i)] \right) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right]$$

Esta última, es la regla de Simpson de 3/8 para n subintervalos todos de la misma longitud.

Ejemplo 2.

Aproximar la siguiente integral:

$$\int_1^4 e^x \ln x dx$$

aplicando la regla de Simpson de 3/8, y subdividiendo en 3 intervalos.

Solución.

Identificando $n = 3$ y la partición correspondiente:

$$P = \{1, 2, 3, 4\}$$

Al considerar los puntos que dividen en tres partes iguales a cada subintervalo, se tienen los siguientes datos:

$$1 < \frac{4}{3} < \frac{5}{3} < 2 < \frac{7}{3} < \frac{8}{3} < 3 < \frac{10}{3} < \frac{11}{3} < 4$$

Sustituyendo todos los datos en la fórmula, se obtiene:

$$\int_1^4 e^x \ln x dx \approx \frac{4-1}{8(3)} \left[f(1) + 3 \left[f\left(\frac{4}{3}\right) + f\left(\frac{5}{3}\right) + f\left(\frac{7}{3}\right) + f\left(\frac{8}{3}\right) + f\left(\frac{10}{3}\right) + f\left(\frac{11}{3}\right) \right] + 2 \left[f(2) + f(3) \right] + f(4) \right] = 57.96878$$

De acuerdo a los ejemplos vistos, resulta evidente que la regla de Simpson de 3/8, es más exacta que la de 1/3 y a su vez, ésta es más exacta que la regla del trapecio. En realidad, pueden establecerse cotas para los errores que se cometen en cada uno de estos métodos.

Puesto que no es la intención justificar formalmente cada uno de los teoremas, los siguientes resultados se mencionan para completar la información, pero se omiten las demostraciones correspondientes.

REGLA	FÓRMULA	ERROR	DONDE
Trapecio	$(b-a) \left[\frac{f(a)+f(b)}{2} \right]$	$-\frac{1}{12} h^3 f''(\xi)$	$h = b-a$ $\xi \in [a, b]$
Simpson $\frac{1}{3}$	$(b-a) \left[\frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6} \right]$	$-\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi)$	$h = \frac{b-a}{2}$ $\xi \in [x_0, x_2]$
Simpson $\frac{3}{8}$	$(b-a) \left[\frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8} \right]$	$-\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$	$h = \frac{b-a}{3}$ $\xi \in [x_0, x_3]$

INTEGRACIÓN EN INTERVALOS DESIGUALES

Cuando la longitud de los subintervalos no es igual, se utiliza una combinación de la regla Trapezoidal y las reglas de Simpson, procurando seguir el siguiente orden jerárquico:

1.- Simpson $\frac{3}{8}$

Esta se aplica, si contamos con 4 puntos igualmente espaciados.

2.- Simpson $\frac{1}{3}$

Esta se aplica si falla (1) y contamos con 3 puntos igualmente espaciados.

3.- Regla Trapezoidal

Solo se aplica si no se cumple (1) y (2)

Ejemplo

1.

Evaluar $\int_0^{1.2} f(x)dx$, usando la siguiente tabla:

x	0	0.1	0.3	0.5	0.7	0.95	1.2
$f(x)$	0	6.84	4	4.2	5.51	5.77	1

Solución.

Vemos que en el intervalo $[0,0.1]$ se puede aplicar la regla del trapecio, en el intervalo $[0.1,0.7]$ la regla de Simpson de $3/8$ y en el intervalo $[0.7,1.2]$ la regla de Simpson de $1/3$. Así, se tienen las siguientes integrales:

$$I_1 = \int_0^{0.1} f(x)dx = \frac{0.1-0}{2} [f(0) + f(0.1)] = 0.842$$

$$I_2 = \int_{0.1}^{0.7} f(x)dx = \frac{0.7-0.1}{8} [f(0.1) + 3f(0.3) + 3f(0.5) + f(0.7)] = 2.7712$$

$$I_3 = \int_{0.7}^{1.2} f(x)dx = \frac{1.2-0.7}{6} [f(0.7) + 4f(0.95) + f(1.2)] = 2.4658$$

Finalmente, la integral buscada es la suma de las tres integrales anteriores:

$$\int_0^{1.2} f(x)dx = 0.842 + 2.7712 + 2.4658 = 6.079$$

Ejemplo 2.

Calcula la integral $\int_{-1}^{3.25} f(x)dx$, usando la siguiente tabla de datos:

x	-1	-0.5	0	1	1.75	2.5	3.25
$f(x)$	2	-3	1.5	-1	0.5	0.75	-2

Solución.

En este caso, se observa que podemos aplicar la regla de Simpson de 1/3 en el intervalo $[-1,0]$, la regla del trapecio en el intervalo $[0,1]$ y la regla de Simpson de 3/8 en el intervalo $[1,3.25]$. Así, se tienen las siguientes integrales:

$$I_1 = \int_{-1}^0 f(x)dx = \frac{0 - (-1)}{6} [f(-1) + 4f(-0.5) + f(0)] = -1.41667$$

$$I_2 = \int_0^1 f(x)dx = \frac{1-0}{2} [f(0) + f(1)] = 0.25$$

$$I_3 = \int_1^{3.25} f(x)dx = \frac{3.25-1}{8} [f(1) + 3f(1.75) + 3f(2.5) + f(3.25)] = 0.210938$$

Por lo tanto, la integral buscada es la suma de las tres integrales anteriores:

$$\int_{-1}^{3.25} f(x)dx = -1.41667 + 0.25 + 0.210938 = -0.955729$$

Vale la pena comentar que no siempre tiene que suceder que se apliquen exactamente las tres reglas. En realidad, esto depende de cómo se encuentran espaciados los intervalos de la tabla de datos.

EJERCICIOS

1. Utilice la regla del trapecio para aproximar,

$$\int_0^6 \frac{\cos x}{x+1} dx$$

i) Dividiendo en un solo intervalo.

ii) Dividiendo en 6 intervalos.

2. Utilice la regla de Simpson 1/3 para aproximar,

$$\int_0^4 \sqrt[3]{x} e^x dx$$

i) Dividiendo en dos intervalos.

ii) Dividiendo en 4 intervalos.

3. Utilice la regla de Simpson 3/8 para aproximar,

$$\int_2^4 (\ln x)^3 dx$$

i) Dividiendo en tres intervalos.

ii) Dividiendo en 6 intervalos.

4. Integrar las siguientes tablas de datos:

i)

x	-4	-1	0	1	1.5	2	2.5
$f(x)$	-8	-3	1	2.5	-5	-1	6

ii)

x	-3	-2	-1	0	0.5	1	1.5	3	4.5
$f(x)$	4.1	2.5	0.3	-0.4	-1	-3.6	0	2.3	5.9

5. Utilice la regla del trapecio para aproximar,

$$\int_1^6 \ln x \ln(x+1) dx$$

i) Usando 1, 2 y 4 intervalos.

ii) Usando 8 intervalos.

6. Aproxime la integral del ejercicio anterior, tomando $\epsilon_j = 0.001\%$ como cota suficiente.

PRÁCTICA No. 14

ECUACIONES DIFERENCIALES

OBJETIVO

El alumno será capaz de aproximar numéricamente un valor dado de una ecuación diferencial de primer orden con condiciones iniciales, utilizando un tamaño de paso adecuado.

En esta práctica, se realizará un breve estudio de los métodos numéricos básicos que se utilizan para aproximar soluciones de algunas ecuaciones diferenciales.

Recordando que una ecuación diferencial (ordinaria) es aquella que involucra una variable independiente, una variable dependiente y la derivada (o derivadas) de esta última. En una ecuación diferencial, la incógnita es la variable dependiente y se espera encontrarla como función de la variable independiente, de tal forma que si se sustituye dicha variable dependiente, así como las derivadas que aparecen en la ecuación diferencial, la igualdad que resulta es verdadera.

De cursos anteriores de ecuaciones diferenciales, se sabe que en general, existen una infinidad de funciones (curvas) que resuelven una misma ecuación diferencial. Por ejemplo, la ecuación:

$$y' = y$$

tiene como solución general:

$$y = c \cdot e^x$$

donde c es una constante arbitraria que puede ser cualquier número real (y de aquí la infinidad de curvas solución que se mencionan arriba).

En este curso, se estudiará solamente ecuaciones diferenciales de primer orden del tipo:

$$y' = f(x, y)$$

donde $f(x, y)$ es una función de dos variables.

Cuando se desea que la curva solución pase por algún punto específico, digamos $y(x_0) = y_0$, entonces se dice que se trata de una ecuación diferencial con una condición inicial dada.

Así, se estudiará ecuaciones diferenciales de la forma $y' = f(x, y)$ con la condición inicial $y(x_0) = y_0$.

Obviamente, la importancia de los métodos numéricos radica en la aparición de ecuaciones diferenciales que no pueden resolverse por métodos tradicionales, y de ahí la necesidad de implementar algún método de aproximación.

Se verán tres métodos numéricos:

- El método de Euler.
- El método de Euler mejorado.
- El método de Runge-Kutta de orden 4.

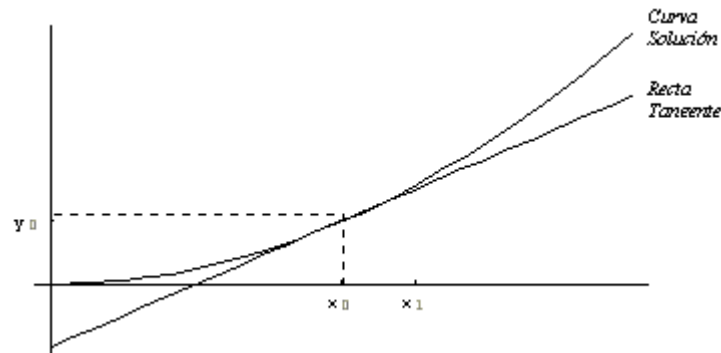
En todos estos métodos se busca aproximar el valor $y(x_1)$ donde x_1 es un valor cercano a x_0 (el de la condición inicial dada).

Al comenzar con el primer método que como siempre, no es el más exacto, pero si el más sencillo y simple de explicar, así como el que marca la pauta para desarrollar los otros métodos.

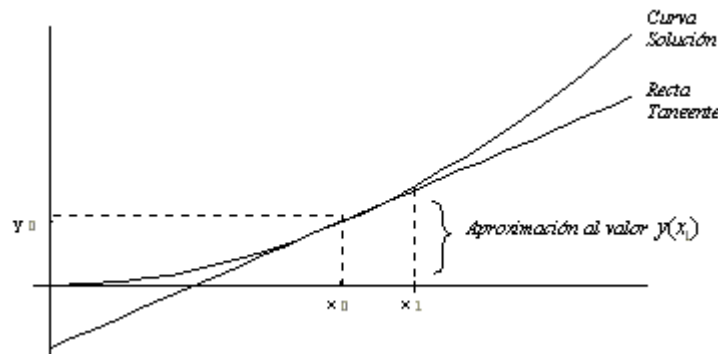
MÉTODO DE EULER

La idea del método de Euler es muy sencilla y está basada en el significado geométrico de la derivada de una función en un punto dado.

Suponiendo que se tiene la curva solución de la ecuación diferencial y trazamos la recta tangente a la curva en el punto dado por la condición inicial.



Debido a que la recta tangente aproxima a la curva en valores cercanos al punto de tangencia, se puede tomar el valor de la recta tangente en el punto x_1 como una aproximación al valor deseado $y(x_1)$.



Así, calculando la ecuación de la recta tangente a la curva solución de la ecuación diferencial dada en el punto (x_0, y_0) . De los cursos de geometría analítica, se sabe que la ecuación de la recta es:

$$y = m(x - x_0) + y_0$$

donde m es la pendiente. En este caso, se sabe que la pendiente de la recta tangente se calcula con la derivada:

$$m = y' \big|_{(x_0, y_0)} = f(x_0, y_0)$$

Por lo tanto, la ecuación de la recta tangente es:

$$y = f(x_0, y_0)(x - x_0) + y_0$$

Ahora bien, suponiendo que x_1 es un punto cercano a x_0 , y por lo tanto estará dado como $x_1 = x_0 + h$. De esta forma, se tiene la siguiente aproximación:

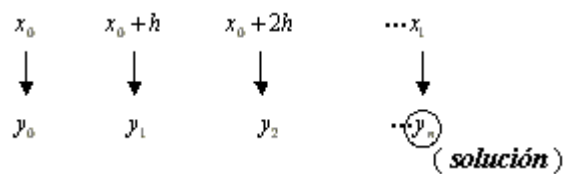
$$y(x_1) = y(x_0 + h) \approx f(x_0, y_0)(\cancel{x_0} + h - \cancel{x_0}) + y_0$$

De aquí, tenemos nuestra fórmula de aproximación:

$$y(x_0 + h) \approx y_0 + h \cdot f(x_0, y_0)$$

Esta aproximación puede ser suficientemente buena, si el valor de h es realmente pequeño, digamos de una décima o menos. Pero si el valor de h es más grande, entonces podemos cometer mucho error al aplicar dicha fórmula. Una forma de reducir el error y obtener de hecho un método iterativo, es dividir la distancia $h = |x_1 - x_0|$ en n partes iguales (procurando que estas partes sean de longitud suficientemente pequeña) y obtener entonces la aproximación en n pasos, aplicando la fórmula anterior n veces de un paso a otro, con la nueva h igual a $\frac{|x_1 - x_0|}{n}$.

En una gráfica, se tiene lo siguiente:



Ahora bien, se sabe que:

$$y_1 = y_0 + hf(x_0, y_0)$$

Para obtener y_2 únicamente hay que pensar que ahora el papel de (x_0, y_0) lo toma el punto (x_1, y_1) , y por lo tanto, si se sustituyen los datos adecuadamente, se obtiene que:

$$y_2 = y_1 + hf(x_1, y_1)$$

De aquí se ve claramente que la fórmula recursiva general, está dada por:

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$$

Esta es la conocida fórmula de Euler que se usa para aproximar el valor de $y(x_1)$ aplicándola sucesivamente desde x_0 hasta x_1 en pasos de longitud h .

Ejemplo 1

Dada la siguiente ecuación diferencial con la condición inicial:

$$y' = 2xy$$
$$y(0) = 1$$

Aproximar $y(0.5)$.

NOTA

Primero se observa que esta ecuación se puede resolver por métodos tradicionales de ecuaciones diferenciales. Por ejemplo, se puede aplicar el método de separación de variables. Veamos las dos soluciones.

Solución Analítica.

$$\frac{dy}{dx} = 2xy$$

$$\frac{dy}{y} = 2x dx$$

$$\int \frac{dy}{y} = \int 2x dx$$

$$\ln |y| = x^2 + c$$

Sustituyendo la condición inicial:

$$x = 0 \rightarrow y = 1$$

$$\ln 1 = 0^2 + c$$

$$0 = c$$

Por lo tanto, se tiene que la curva solución real está dada:

$$\ln y = x^2$$

$$e^{\ln y} = e^{x^2}$$

$$y = e^{x^2}$$

Y por lo tanto, el valor real que se pide es:

$$y(0.5) = e^{(0.5)^2} = 1.28403$$

Solución Numérica

Aplicando el método de Euler y para ello, observamos que la distancia entre $x_0 = 0$ y $x_1 = 0.5$ no es lo suficientemente pequeña. Si dividimos esta distancia entre cinco obtenemos un valor de $h = 0.1$ y por lo tanto, obtendremos la aproximación deseada en cinco pasos.

De esta forma, se tienen los siguientes datos:

$$\begin{cases} x_0 &= 0 \\ y_0 &= 1 \\ h &= 0.1 \\ f(x,y) &= 2xy \end{cases}$$

Sustituyendo estos datos en la fórmula de Euler, se tiene, en un primer paso:

$$\begin{cases} x_1 &= x_0 + h &= 0.1 \\ y_1 &= y_0 + hf(x_0, y_0) &= 1 + 0.1[2(0)(1)] = 1 \end{cases}$$

Aplicando nuevamente la fórmula de Euler, se tiene, en un segundo paso:

$$\begin{cases} x_2 &= x_1 + h &= 0.2 \\ y_2 &= y_1 + hf(x_1, y_1) &= 1 + 0.1[2(0.1)(1)] = 1.02 \end{cases}$$

Y así sucesivamente hasta obtener y_5 . Resumiendo los resultados en la siguiente tabla:

n	x_n	y_n
0	0	1
1	0.1	1
2	0.2	1.02
3	0.3	1.0608
4	0.4	1.12445
5	0.5	1.2144

Se concluye que el valor aproximado, usando el método de Euler es:

$$y(0.5) \approx 1.2144$$

Puesto que en este caso, se conoce el valor verdadero, podemos usarlo para calcular el error relativo porcentual que se cometió al aplicar la fórmula de Euler. Se tiene que:

$$|\epsilon_v| = \left| \frac{1.28402 - 1.2144}{1.28402} \times 100\% \right| = 5.42\%$$

Ejemplo 2

Aplicar el método de Euler para aproximar $y(1.3)$, dada la ecuación diferencial.

$$y' = x^2 + 0.5y^2$$

$$y(1) = 2$$

Solución

Nuevamente se observa que nos conviene dividir en pasos la aproximación. Así, se elige nuevamente $h = 0.1$ para obtener el resultado final en tres pasos. Por lo tanto, aplicando el método de Euler con los siguientes datos:

$$\begin{cases} x_0 &= & 1 \\ y_0 &= & 2 \\ h &= & 0.1 \\ f(x, y) &= & x^2 + 0.5y^2 \end{cases}$$

En un primer paso, se tiene que:

$$\begin{cases} x_1 &= & x_0 + h &= & 1.1 \\ y_1 &= & y_0 + hf(x_0, y_0) &= & 2 + 0.1[1^2 + 0.5(2)^2] &= & 2.3 \end{cases}$$

Resumiendo los resultados en la siguiente tabla:

n	x_n	y_n
0	1	2
1	1.1	2.3
2	1.2	2.6855
3	1.3	3.1901

De lo cual, se concluye que la aproximación buscada es:

$$y(1.3) \approx 3.1901$$

MÉTODO DE EULER MEJORADO

Este método se basa en la misma idea del método anterior, pero hace un refinamiento en la aproximación, tomando un promedio entre ciertas pendientes.

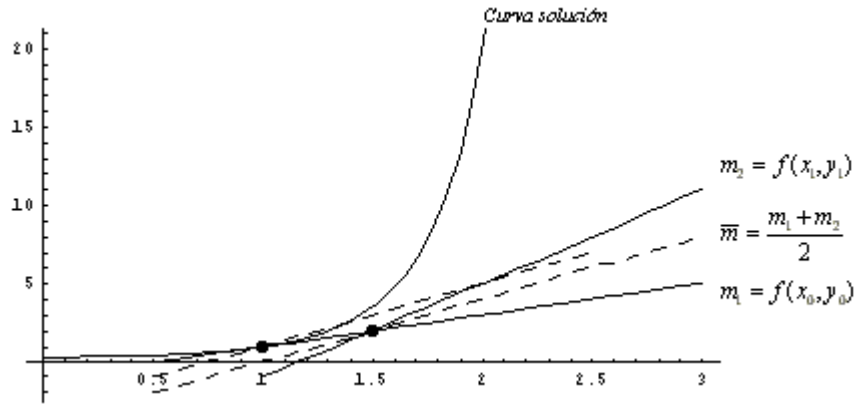
La fórmula es la siguiente:

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot \left[\frac{f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^*)}{2} \right]$$

donde

$$y_{n+1}^* = y_n + h \cdot f(x_n, y_n)$$

Para entender esta fórmula, se analiza el primer paso de la aproximación, con base en la siguiente gráfica:



En la gráfica, se observa que la pendiente promedio \bar{m} corresponde a la pendiente de la recta bisectriz de la recta tangente a la curva en el punto de la condición inicial y la “recta tangente” a la curva en el punto (x_1, y_1) , donde y_1 es la aproximación obtenida con la primera fórmula de Euler. Finalmente, esta recta bisectriz se traslada paralelamente hasta el punto de la condición inicial, y se considera el valor de esta recta en el punto $x = x_1$ como la aproximación de Euler mejorada.

Ejemplo 1

Aplicar el método de Euler mejorado, para aproximar $y(0.5)$ si:

$$\begin{aligned} y' &= 2xy \\ y(0) &= 1 \end{aligned}$$

Solución

Se observa que este es el mismo ejemplo 1 del método anterior. Así que tomando $h = 0.1$ y se encontrará la aproximación después de cinco iteraciones. A diferencia del método de Euler 1, en cada iteración requerimos de dos cálculos en vez de uno solo: el de y_n^* primero y posteriormente el de y_n .

Para aclarar el método se verán con detalle las primeras dos iteraciones. Primero que nada, se aclara que se tienen los siguientes datos iniciales:

$$\begin{cases} x_0 &= 0 \\ y_0 &= 1 \\ h &= 0.1 \\ f(x, y) &= 2xy \end{cases}$$

En la primera iteración se tiene:

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + h = 0 + 0.1 = 0.1 \\ y_1^* = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) = 1 + 0.1[2(0)(1)] = 1 \\ \therefore y_1 = y_0 + h \left(\frac{f(x_0, y_0) + f(x_1, y_1^*)}{2} \right) = 1.01 \end{cases}$$

Nótese que el valor de y_1^* coincide con el y_1 (Euler 1), y es el único valor que va a coincidir, pues para calcular y_2^* se utilizará y_1 y no y_1^* .

Esto se verá claramente en la siguiente iteración:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_2 = x_1 + h = 0.1 + 0.1 = 0.2 \\ y_2^* = y_1 + h \cdot f(x_0, y_0) = 1.0302 \quad y_2 = y_1 + h \left(\frac{f(x_1, y_1) + f(x_2, y_2^*)}{2} \right) = 1.040704 \end{array} \right.$$

Nótese que ya no coinciden los valores de y_2 (Euler 1) y el de y_2^* . El proceso debe seguirse hasta la quinta iteración. Se resumen los resultados en la siguiente tabla:

n	x_n	y_n
0	0	1
1	0.1	1.01
2	0.2	1.040704
3	0.3	1.093988
4	0.4	1.173192
5	0.5	1.28336

Se concluye entonces que la aproximación obtenida con el método de Euler mejorado es:

$$y(0.5) \approx 1.28336$$

Con fines de comparación, se calcula el error relativo verdadero:

$$|\epsilon_v| = \left| \frac{1.28402 - 1.28336}{1.28402} \times 100\% \right| = 0.05\%$$

Se observa que efectivamente se ha obtenido una mejor aproximación con este método, reduciendo el error relativo verdadero de un 5.4% hasta un 0.05%. En nuestro tercer método veremos cómo se reduce aún más este error prácticamente a un 0%!

Efectuando un segundo ejemplo.

Ejemplo 2

Aplicar el método de Euler mejorado para aproximar $y(1.3)$, si:

$$y' = x - y + 5$$

$$y(1) = 2$$

Solución

Se tienen los siguientes datos:

$$h = 0.1$$

$$f(x, y) = x - y + 5$$

$$x_0 = 1 \quad y_0 = 2$$

En una primera iteración, se tiene lo siguiente:

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + h = 1.1 \\ y_1^* = y_0 + h \cdot f(x_0, y_0) = 2.4 \\ y_1 = 2 + 0.1 \left(\frac{4 + (1.1 - 2.4 + 5)}{2} \right) = 2.385 \end{cases}$$

Resumiendo los resultados en la siguiente tabla:

n	x_n	y_n
0	1	2
1	1.1	2.385
2	1.2	2.742925
3	1.3	3.07635

Se concluye entonces que la aproximación buscada es:

$$y(1.3) \approx 3.07635$$

Finalmente, viendo el tercero y último método que se estudia en este curso. Por simplicidad del curso, no se verá la justificación formal de estas últimas fórmulas.

MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

Sin entrar en mucho detalle, se menciona solamente que el método de Runge-Kutta cambia la dirección en el sentido de que no sigue la misma línea de los métodos de Euler. De hecho está basado en una aplicación de los polinomios de Taylor.

Se comenta sin embargo, que el método de Runge-Kutta si contiene como casos especiales los de Euler.

Las fórmulas

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$$

donde

$$k_1 = h \cdot f(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h \cdot f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = h \cdot f\left(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = h \cdot f(x_n + h, y_n + k_3)$$

Se conocen como las reglas o *fórmulas de Runge-Kutta de orden cuatro* para la ecuación diferencial:

$$y' = f(x, y)$$

$$y(x_0) = y_0$$

Ejemplo 1

Usar el método de Runge-Kutta para aproximar $y(0.5)$ dada la siguiente ecuación diferencial:

$$y' = 2xy$$

$$y(0) = 1$$

Solución

Primero, Se identifica el mismo ejemplo 1 de los dos métodos anteriores. Segundo, se procede con los mismos datos:

$$\begin{cases} x_0 &= 0 \\ y_0 &= 1 \\ h &= 0.1 \\ f(x, y) &= 2xy \end{cases}$$

Para poder calcular el valor de y_1 , se debe calcular primeros los valores de k_1 , k_2 , k_3 y k_4 . Se tiene entonces que:

$$k_1 = h \cdot f(x_0, y_0) = 0$$

$$k_2 = h \cdot f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_1\right) = 0.1[2(0.05)(1)] = 0.01$$

$$k_3 = h \cdot f\left(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_2\right) = 0.1[2(0.05)(1.005)] = 0.01005$$

$$k_4 = h \cdot f(x_0 + h, y_0 + k_3) = 0.1[2(0.1)(1.01005)] = 0.020201$$

$$\therefore y_1 = y_0 + \frac{1}{6}[0 + 2(0.01) + 2(0.01005) + 0.020201] = 1.01005$$

Con el fin de un mayor entendimiento de las fórmulas, se efectúa la siguiente iteración:

$$x_2 = x_1 + h = 0.2$$

$$k_1 = h \cdot f(x_1, y_1) = 0.1[2(0.1)(1.01005)] = 0.020201$$

$$k_2 = h \cdot f(x_1 + \frac{1}{2}h, y_1 + \frac{1}{2}k_1) = 0.1[2(0.15)(1.02010)] = 0.03060$$

$$k_3 = h \cdot f(x_1 + \frac{1}{2}h, y_1 + \frac{1}{2}k_2) = 0.1[2(0.15)(1.02535)] = 0.03076$$

$$k_4 = h \cdot f(x_1 + h, y_1 + k_3) = 0.1[2(0.2)(1.04081)] = 0.04163$$

$$\therefore y_2 = y_1 + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] = 1.04081$$

El proceso debe repetirse hasta obtener y_5 . Resumiendo los resultados en la siguiente tabla:

n	x_n	y_n
0	0	1
1	0.1	1.01005
2	0.2	1.04081
3	0.3	1.09417
4	0.4	1.17351
5	0.5	1.28403

Se concluye que el valor obtenido con el método de Runge-Kutta es:

$$y(0.5) \approx 1.28403$$

Finalmente, calculamos el error relativo verdadero:

$$|\epsilon_v| = \left| \frac{1.28402 - 1.28403}{1.28402} \times 100\% \right| = 0.0007\%$$

Con lo cual se ve que efectivamente se ha reducido muchísimo el error relativo. De hecho se observa que se tienen 6 cifras significativas en la aproximación.

Ejemplo 2

Usar el método de Runge-Kutta para aproximar $y(2.2)$ dada la ecuación diferencial:

$$y' = x + y$$

$$y(2) = 4$$

Solución

Igual que siempre, tomamos $h = 0.1$ y se llegará a la aproximación en dos pasos. Con esta aclaración, se tienen los siguientes datos:

$$\begin{cases} x_0 &= 2 \\ y_0 &= 4 \\ h &= 0.1 \\ f(x,y) &= x+y \end{cases}$$

Primera Iteración:

$$x_1 = x_0 + h = 2.1$$

$$k_1 = h \cdot f(x_0, y_0) = 0.1[2+4] = 0.6$$

$$k_2 = h \cdot f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_1) = 0.1[2.05+4.3] = 0.635$$

$$k_3 = h \cdot f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_2) = 0.1[2.05+4.3175] = 0.63675$$

$$k_4 = h \cdot f(x_0 + h, y_0 + k_3) = 0.1[2.1+4.63675] = 0.673675$$

$$\therefore y_1 = y_0 + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] = 4.6362$$

Segunda Iteración:

$$x_2 = x_1 + h = 2.2$$

$$k_1 = h \cdot f(x_1, y_1) = 0.1[2.1+4.6362] = 0.67362$$

$$k_2 = h \cdot f(x_1 + \frac{1}{2}h, y_1 + \frac{1}{2}k_1) = 0.1[2.15+4.97301] = 0.7123$$

$$k_3 = h \cdot f(x_1 + \frac{1}{2}h, y_1 + \frac{1}{2}k_2) = 0.1[2.15+4.99235] = 0.71424$$

$$k_4 = h \cdot f(x_1 + h, y_1 + k_3) = 0.1[2.2+5.35044] = 0.75504$$

$$\therefore y_2 = y_1 + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] = 5.34982$$

Se concluye entonces que el valor buscado es:

$$y(2.2) \approx 5.34982$$

EJERCICIOS

1. Dada la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} y' &= \sqrt{x^2 + y^2} \\ y(2) &= 0.5 \end{aligned}$$

Utilice el método de Euler para aproximar $y(2.3)$ tomando $h = 0.1$ en cada paso del proceso iterativo.

2. Dada la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} y' &= \ln(x+y) \\ y(1) &= 1.5 \end{aligned}$$

Utilice el método de Euler para aproximar $y(1.3)$ tomando $h = 0.1$ en cada paso del proceso iterativo.

3. Dada la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} y' &= 2x + y - 3 \\ y(2) &= 1 \end{aligned}$$

Utilice el método de Euler mejorado para aproximar $y(2.3)$ tomando $h = 0.1$ en cada paso del proceso iterativo.

4. Dada la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} y' &= \frac{1}{x^2 + y} \\ y(3) &= 2.5 \end{aligned}$$

Utilice el método de Euler mejorado para aproximar $y(3.3)$ tomando $h = 0.1$ en cada paso del proceso iterativo.

5. Dada la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} y' &= \ln x + \frac{1}{y} \\ y(4) &= 5 \end{aligned}$$

Utilice el método de Runge-Kutta para aproximar $y(4.3)$ tomando $h = 0.1$ en cada paso del proceso iterativo.

6. Dada la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} y' &= \sqrt{x} + \sqrt{y} \\ y(3) &= 10 \end{aligned}$$

Utilice el método de Runge-Kutta para aproximar $y(3.3)$ tomando $h = 0.1$ en cada paso del proceso iterativo.

Problemario Tipo para el primer examen parcial

- 1.
- Determine la serie infinita para $\ln(3x+59)$ con cinco términos para $x_0 = 0$, y utilícelo para obtener el valor de $\ln(62)$.
 - Calcule el error relativo porcentual usando el valor del logaritmo natural obtenido por la computadora.
 - Use números con cinco decimales en su tabla para los valores de los logaritmos, dos decimales para el error.
- 2.
- Determine la serie infinita para $\cos(2x+1)$ con seis términos para $x_0 = 0$, y utilícelo para obtener el valor de $\cos(\pi/3)$.
 - Calcule el error relativo porcentual usando el valor obtenido por la computadora.
 - Use números con cinco decimales en su tabla para los valores del coseno, dos decimales para el error.
3. Emplee el método del punto fijo para encontrar una raíz de la ecuación:
 $y = 3x^5 + 5x - 4$
con un error relativo porcentual menor a 0.001
4. Emplee el método del punto fijo para encontrar una raíz de la ecuación:
 $y = 4x^{15} + 8x - 2$
con un error relativo porcentual menor a 0.002
5. Si se lanza un proyectil con una velocidad inicial v_0 y un ángulo de inclinación θ con respecto a la horizontal, entonces su trayectoria parabólica está dada por la siguiente ecuación, donde la resistencia del aire se ha considerado despreciable.

$$s = x \tan \theta - \frac{gx^2}{2v_0^2 \cos^2 \theta} \quad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$$

Emplee el método de la bisección para determinar θ , con un error relativo porcentual menor a 0.001 si se sabe que $s = 10$ m, $x = 1.87$ m y $v_0 = 10$ m/s.

6. Fernanda recibió un préstamo en enero de 1992 por \$127,200.00, el cual pagó año con año con abonos de \$24,714.96, empezando a pagar en enero de 1993 y liquidando el préstamo en enero del 2000. Todos los pagos fueron por la misma cantidad y los intereses se cobraron sobre saldos insolutos. Emplee el método de la bisección para calcular la tasa % de interés a la cual le fue otorgado el préstamo a Fernanda, con un error relativo porcentual menor a 0.002, partiendo de la fórmula:

$$A = P \left[\frac{i(1+i)^n}{(1+i)^n - 1} \right]$$

Donde:

A = anualidad

P = presente

I = tasa de interés

n = número de períodos

7. Un circuito eléctrico con resistencia R, capacitancia C e inductancia L, tiene una carga inicial q_0 que fluye a través del capacitor. Cuando se cierra el circuito la carga se disipa en un tiempo t para un valor de q dado por:

$$q/q_o = e^{-Rt/2L} \cos \left[t \sqrt{\frac{1}{LC} - \left(\frac{R}{2L} \right)^2} \right]$$

Emplee el método de la bisección para determinar el valor de L que se requiere para que q/q_o alcance un valor de 0.1 en 0.2 segundos, cuando R sea de 180Ω y C sea de 10^{-4} F. Con un error relativo porcentual menor a 0.004

8. La siguiente ecuación se utiliza para determinar el valor anual de una computadora personal:

$$A = \frac{-1800(1.18)^n}{1.18^n - 1} + \frac{45n}{1.18^n - 1} + 3000$$

Emplee el método Newton-Raphson para determinar el número de años para que su valor sea cero, con un error relativo porcentual menor a 0.002.

9. El factor de fricción para el flujo turbulento en un tubo circular está dado por:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 4 \log(\text{Re} \sqrt{f}) - 0.4 \quad \text{Para } \text{Re} > 3000$$

Donde $\text{Re} = \frac{Dv\rho}{\mu}$

v = velocidad

D = Diámetro del tubo

ρ = densidad del fluido

μ = viscosidad del fluido

Emplee el método Newton-Raphson para calcular el factor de fricción para el agua que fluye a través de un tubo de 2.5 cm de diámetro a una velocidad de 25 m/s, con un error relativo porcentual menor a 0.002. La densidad del agua es 1000 kg/m^3 y la viscosidad es $0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$.

10. Emplee el método Newton-Raphson para calcular el volumen molar del gas nitrógeno a 500 K y 100 atm, con un error relativo porcentual menor a 0.002, utilizando la ecuación de Van der Waals:

$$\left(P + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - b) = RT$$

Para este gas, los valores de las constantes son $a = 1.390 \text{ dm}^6 \text{ atm/mol}^2$, $b = 0.03913 \text{ dm}^3/\text{mol}$, $R = 0.08205 \text{ dm}^3 \text{ atm}/(\text{mol K})$.

Problemario Tipo para el segundo examen parcial

Resuelva los sistemas de ecuaciones 1, 2, 3 respectivamente por el método de Gauss, Gauss-Jordan, Matriz inversa. Para cada uno de ellos haga la comprobación en matlab.

$$\begin{array}{lcl}
 1. & \begin{array}{rcl} 0 & -4x_2 & +5x_3 = 9 \\ -8x_1 & +7x_2 & -4x_3 = -2 \\ 2x_1 & +0 & +2x_3 = 6 \end{array} \\
 2. & \begin{array}{rcl} -6x_1 & -4x_2 & -6x_3 = 4 \\ 7x_1 & +x_2 & -x_3 = -2 \\ -2x_1 & +2x_2 & +4x_3 = 6 \end{array} \\
 3. & \begin{array}{rcl} -2x_1 & -5x_2 & -7x_3 = 8 \\ 0 & +4x_2 & -2x_3 = -5 \\ 5x_1 & +0 & +6x_3 = 3 \end{array}
 \end{array}$$

4. Obtenga el polinomio de interpolación que se ajusta al siguiente conjunto de datos. Grafique el polinomio obtenido y los puntos que se proporcionan.

x	0	1	2	3	4	5	6	7
F(x)	5	6	9	12	18	36	48	58

5. Utilice el siguiente grupo de datos para obtener el valor de $f(x)$ para $x = 3.24$.

x	0	1	2	3	4	5	6	7
F(x)	3	0	-1	0	3	8	15	24

- a) Resuelva con un polinomio de interpolación de Lagrange de segundo orden.
b) Resuelva con un polinomio de interpolación de Lagrange de tercer orden

6. En la siguiente tabla, R es la resistencia de una bobina en ohms y T la temperatura de la bobina en °C. Encuentre el mejor polinomio que represente los datos.

R (ohms)	T (°C)
10.421	10.5
10.939	29.49
11.321	42.7
11.794	60.01
12.242	75.51
12.668	91.05

7. En una empresa donde se fabrican aleaciones de cobre, es necesario verificar la concentración de níquel como impureza en algunas aleaciones. El control se realiza por absorción atómica y se calibra el equipo por medio de los siguientes datos.

Ppm Ni	2	4	6	8	10
% Transmitancia	62.4	39.7	26	17.5	12

- a) Proponga varios modelos que sirvan para calcular el contenido de níquel en ppm de acuerdo al porcentaje de transmitancia que permita la muestra.
b) Utilice los modelos propuestos para predecir cuál es el contenido de níquel para una muestra con un 20% de transmitancia.

8. La aparición de una corriente inducida en un circuito que tiene la constante de tiempo τ está dada por:
 $i = 1 - e^{-t/\tau}$

Donde t es el tiempo medio desde el instante en que el interruptor se cierra e i la razón de la corriente en tiempo t al valor de la corriente dado por la ley de Ohm. Con las mediciones siguientes, estime la constante de tiempo τ de este circuito.

i	0.073	0.220	0.301	0.370	0.418	0.467	0.517
t (seg)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7

9. Para la tabla de datos que se da abajo, encuentre los parámetros a y b de la ecuación

$$y = a + (0.49 - a)e^{-b(x-8)}$$

x	10	20	30	40
y	0.48	0.42	0.40	0.39

10. Veinte tipos de hojas de acero procesadas en frío tienen diferentes composiciones de cobre y temperaturas de templado. Al medir su dureza resultante se obtuvieron los siguientes valores:

Dureza Rockell 30-T	U Contenido de cobre %	v Temp. de Templado ° F
78.9	0.02	1000
65.1	0.02	1100
55.2	0.02	1200
56.4	0.02	1300
80.9	0.10	1000
69.7	0.10	1100
57.4	0.10	1200
55.4	0.10	1300
85.3	0.18	1000
71.8	0.18	1100
60.7	0.18	1200
58.9	0.18	1300

Se sabe que la dureza depende en forma lineal del contenido u de cobre en % y de la temperatura de templado v

$$y = a_0 + a_1u + a_2v$$

Determine a_0 , a_1 y a_2 , siguiendo el criterio de los mínimos cuadrados.

Problemario Tipo para el tercer examen parcial.

1. Para la función $f(x) = 3xe^x - \cos(x)$, encuentre $f'(x)$, $f''(x)$, $f'''(x)$, utilice primeras diferencias centrales, con $x_0 = \pi$, $\Delta x = 0.01$, obtenga el porcentaje de error comparando con la derivada exacta.

2. Derive numéricamente $f(x) = 0.8x^3 + 1.2x^2 - 4.5x - 5.1$, en $x = 0.8$, con $h = 0.1$, utilice primeras diferencias hacia atrás.

3. Dado un circuito con un voltaje $E(t)$ y una inductancia L , la primera ley de Kirchhoff que la modela es

$$E = L \frac{di}{dt} + Ri$$

Donde i es la corriente en amperes y R la resistencia en ohms. La tabla de abajo da los valores experimentales de i correspondientes a varios tiempos t dados en segundos. Si la inductancia L es constante e igual 0.97 H y la resistencia es de 0.14 ohms, aproxime el voltaje E en los valores de t dados en la tabla

t	0.95	0.96	0.97	0.98	0.99	1.0
i	0.90	1.92	2.54	2.88	3.04	3.10

Utilice segundas diferencias centrales.

4. La integral $\int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin x}{x} dx$ puede presentar serias dificultades. Aproxime dicha integral empleando la regla del trapecio con un número de intervalos de $n = 8$.

5. Emplee integración numérica (Simpson 1/3) con un número de intervalos de $n = 10$, para aproximar la integral

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

6. En el estudio de integrales dobles, un problema típico es demostrar que

$$\int_0^R e^{-x^2} dx = \int_0^R \int_0^R e^{-x^2-y^2} dy dx$$

Demuéstrelo numéricamente con $R = 1$. Utilice el método de Simpson 3/8 y número de intervalos $n = 12$.

7. Utilice el método de Euler para integrar la siguiente ecuación diferencial :

$$\frac{dy}{dx} = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8.5$$

Con condición inicial $y(0) = 1$, desde $x = 0$ hasta $x = 4$. Utilice incrementos de 0.5 y 0.01. Grafique los resultados y compárelos contra la solución analítica.

8. Aplique la fórmula de Euler para hallar una aproximación al valor indicado con cuatro decimales de precisión. Primero use $h = 0.1$ y después $h = 0.05$.

$$y' = xy^2 - y/x, \quad y(1) = 1; \quad y(1.5)$$

9. Resuelva la siguiente ecuación diferencial de primer orden para $x = 2$, empleando el método de Euler modificado, utilice $h = 0.1$.

$$\frac{dy}{dx} = -2x^3 + 12x^2 - 20x + 8.5; \quad y(0) = 3$$

10. Resuelva la siguiente ecuación diferencial de primer orden para $x = 3$, empleando el método de Runge-Kutta de cuarto orden, utilice $h = 0.2$.

$$\frac{dy}{dx} = -4x^3 y; \quad y(0) = 5$$

Primer examen parcial de métodos numéricos

INSTRUCCIONES: Lea detenidamente cada pregunta y conteste lo que se pide, debe incluir el desarrollo para llegar al resultado. Resuelva únicamente cuatro problemas, valor 2.5 puntos cada uno.

1. a) Determine la serie infinita para $\ln(3x+59)$ con cinco términos para $x_0 = 0$, y utilícelo para obtener el valor de $\ln(62)$.
b) Calcule el error relativo porcentual usando el valor del logaritmo natural obtenido por la computadora.
c) Use números con cinco decimales en su tabla para los valores de los logaritmos, dos decimales para el error.

2. Emplee el método de la bisección para encontrar una raíz de la ecuación:

$$y = 3x^5 + 5x - 4$$

con un error relativo porcentual menor a 0.001

3. Emplee el método de Newton-Raphson para encontrar una raíz de la ecuación:

$$y = 4x^{15} + 8x - 2$$

con un error relativo porcentual menor a 0.002

4. Emplee el método de la secante para calcular el volumen molar del gas nitrógeno a 500 K y 100 atm, con un error relativo porcentual menor a 0.002, utilizando la ecuación de Van der Waals:

$$\left(P + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT$$

Para este gas, los valores de las constantes son $a = 1.390 \text{ dm}^6 \text{ atm/mol}^2$, $b = 0.03913 \text{ dm}^3/\text{mol}$, $R = 0.08205 \text{ dm}^3 \text{ atm}/(\text{mol K})$.

5. Un circuito eléctrico con resistencia R , capacitancia C e inductancia L , tiene una carga inicial q_0 que fluye a través del capacitor. Cuando se cierra el circuito la carga se disipa en un tiempo t para un valor de q dado por:

$$q/q_0 = e^{-Rt/2L} \cos \left[t \sqrt{\frac{1}{LC} - \left(\frac{R}{2L}\right)^2} \right]$$

Determine el valor de L que se requiere para que q/q_0 alcance un valor de 0.1 en 0.2 segundos, cuando R sea de 180Ω y C sea de 10^{-4} F .

Segundo examen parcial de métodos numéricos

INSTRUCCIONES: Lea detenidamente cada pregunta y conteste lo que se pide, debe incluir el desarrollo para llegar al resultado. Resuelva únicamente cuatro problemas, valor 2.5 puntos cada uno.

1. Para el crecimiento bacteriano de “Yanoikuyae DOS01” que degrada ácidos orgánicos, se obtuvieron los siguientes datos de tiempo y cantidad de bacterias en gramos/ml. Ajuste los datos siguientes con el modelo de potencia $y(t) = at^b$. Use el resultado del ajuste y prediga la cantidad de bacterias por unidad de volumen a los 9 minutos.

Tabla 1

T (minutos)	2.5	3.5	5	6	7.5	10	12.5	15	17.5	20
y (grs/ml)	4.3	4.6	4.8	5.2	6.2	7	8.2	8.5	11	13

2. Con los datos del problema anterior ajuste la curva de crecimiento de bacterias como función del tiempo a una función exponencial $y(t) = Ae^{Bt}$ y compare los datos reales de la tabla 1 con los predichos por el ajuste.

3. La temperatura de una placa de hierro para los puntos (x,y) esta dada por la siguiente tabla.

Tabla 2

X	0	0	1	2	0	1	2	2	1
Y	0	2	2	4	4	6	6	2	1
T (°C)	14	21	11	12	23	23	14	6	11

Obtenga un ajuste tipo $T(x,y) = a_1 + a_2x + a_3y$ y calcule la temperatura en el punto (1,4)

4. Se observó la concentración de bacterias E. Coli en un área de natación, y es la siguiente:

Tabla 3

t (hrs)	4	8	12	16	20	24
y (grs/ml)	1590	1320	1000	900	650	560

a) use los datos para estimar la concentración inicial ($t = 0$), y b) el tiempo en el que la concentración alcanzará 200 grs/ml.

5. Obtenga un polinomio de segundo grado para obtener el valor de $f(4)$ con los siguientes datos.

Tabla 4

X	1	2	3
f(x)	385	355	275

Tercer examen parcial de métodos numéricos

INSTRUCCIONES: Lea detenidamente cada pregunta y conteste lo que se pide, debe incluir el desarrollo para llegar al resultado. Resuelva todos los problemas, valor 2.0 puntos cada uno.

1. Para la función $f(x) = 3xe^x - \cos(x)$, encuentre $f'(x)$, $f''(x)$, $f'''(x)$, utilice primeras diferencias centrales, con $x_0 = \pi$, $\Delta x = 0.01$, obtenga el porcentaje de error comparando con la derivada exacta.

2. Aplique la regla del trapecio con los valores indicados de n para aproximar el valor de la siguiente integral:

$$\int_0^1 \log(6x)e^{-4x^2} dx \quad n = 9$$

3. Aplique la regla de Simpson 1/3 con los valores indicados de n para aproximar el valor de la siguiente integral:

$$\int_0^3 \sqrt{x} \sin x \, dx \quad n = 8$$

4. Aplique la fórmula de Euler para hallar una aproximación al valor indicado con cuatro decimales de precisión. Primero use $h = 0.1$ y después $h = 0.05$.
 $y' = xy^2 - y/x, \quad y(1) = 1; \quad y(1.5)$

5. Use el método de Runge-Kutta con $h = 0.1$ para obtener una aproximación, con cuatro decimales, al valor indicado en el problema de valor inicial.
 $y' = e^{-y}, \quad y(0) = 0; \quad y(0.5)$

Examen extraordinario de métodos numéricos

INSTRUCCIONES: Lea detenidamente cada pregunta y conteste lo que se pide, debe incluir el desarrollo para llegar al resultado. Resuelva todos los problemas, valor 2.0 puntos cada uno.

- 1.a) Determine la serie infinita para $\ln(3x + 59)$ con cinco términos para $x_0 = 0$, y utilícelo para obtener el valor de $\ln(62)$.
- b) Calcule el error relativo porcentual usando el valor del logaritmo natural obtenido por la computadora.
- c) Use números con cinco decimales en su tabla para los valores de los logaritmos, dos decimales para el error.

2. Emplee el método de Newton-Raphson para calcular el volumen molar del gas nitrógeno a 500 K y 100 atm, con un error relativo porcentual menor a 0.002, utilizando la ecuación de Van der Waals:

$$\left(P + \frac{a}{V_m^2}\right)(V_m - b) = RT$$

Para este gas, los valores de las constantes son $a = 1.390 \text{ dm}^6 \text{ atm/mol}^2$, $b = 0.03913 \text{ dm}^3/\text{mol}$, $R = 0.08205 \text{ dm}^3 \text{ atm}/(\text{mol K})$.

3. Obtenga un polinomio de segundo grado para obtener el valor de $f(4)$ con los siguientes datos.

Tabla 1

x	1	2	3
f(x)	385	355	275

4. Aplique la regla de Simpson 1/3 con los valores indicados de n para aproximar el valor de la siguiente integral:

$$\int_0^3 \sqrt{x} \sin x \, dx \quad n = 8$$

5. Use el método de Runge-Kutta con $h = 0.1$ para obtener una aproximación, con cuatro decimales, al valor indicado en el problema de valor inicial.

$$y' = e^{-y}, \quad y(0) = 0; \quad y(0.5)$$

Examen ETS de métodos numéricos

INSTRUCCIONES: Lea detenidamente cada pregunta y conteste lo que se pide, debe incluir el desarrollo para llegar al resultado. Utilice la computadora únicamente para verificar sus resultados. Resuelva únicamente cinco problemas, valor 2.0 puntos cada uno.

1. Un circuito eléctrico con resistencia R , capacitancia C e inductancia L , tiene una carga inicial q_0 que fluye a través del capacitor. Cuando se cierra el circuito la carga se disipa en un tiempo t para un valor de q dado por:

$$q / q_0 = e^{-Rt / 2L} \cos \left[t \sqrt{\frac{1}{LC} - \left(\frac{R}{2L} \right)^2} \right]$$

Utilice el método de la bisección para determinar el valor de L que se requiere para q/q_0 alcance un valor de 0.1 en 0.2 segundos, cuando R sea de $180 \, \Omega$ y C sea de $10^{-4} \, F$.

2. Emplee el método Newton-Raphson para encontrar una raíz de la ecuación:

$$y = 8x^{15} + 5x - 5$$

con un error relativo porcentual menor a 0.002

3. Resuelva el sistema dado de ecuaciones, utilizando el método de la matriz inversa

$$4.2x_1 + 5.8x_2 + 1.7x_3 = 7.9$$

$$8.7x_1 + 1.7x_2 + 10.3x_3 = 5.6$$

$$6.7x_1 + 7.6x_2 + 4.5x_3 = 3.7$$

4. En un estudio para ver la durabilidad de cierta marca de focos, se observaron los siguientes datos:

Horas de uso	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Núm. focos	500	444	404	361	320	288	270	248	226	201	188

a) Haga una gráfica de los datos y encuentre la mejor recta de ajuste.

b) Encuentre la mejor parábola de ajuste.

c) Diga cuál de las dos curvas ajusta mejor para los datos de la tabla (justifique su respuesta).

5. Aplique la regla de Simpson 3/8 con los valores indicados de n para aproximar el valor de la siguiente integral:

$$\int_0^3 \sqrt{x} \sin x \, dx \quad n = 9$$

6. Use el método de Runge-Kutta para obtener una aproximación de $y(1.5)$ para la solución de $y' = 5xy$, $y(0) = 4$, use $h = 0.1$

Bibliografía

1. Chapra, S., Canale, R., Brito, J. & Roa. (2007). *Métodos numéricos para ingenieros*. México: McGraw-Hill Interamericana
2. Burden, R. & Faires, J. (2002). *Análisis numérico*. México: International Thomson Editores.
3. Mathews, J. & Fink, K. (2000). *Métodos numéricos con MATLAB*. Madrid: Prentice Hall.
4. Nakamura, S. & García, R. (1997). *Análisis numérico y visualización gráfica con MATLAB*. México: Prentice-Hall Hispanoamericana.
5. Nieves, A. & Dominguez, F. (2002). *Metodos numéricos aplicados a la ingeniería*. México: Continental CECSA