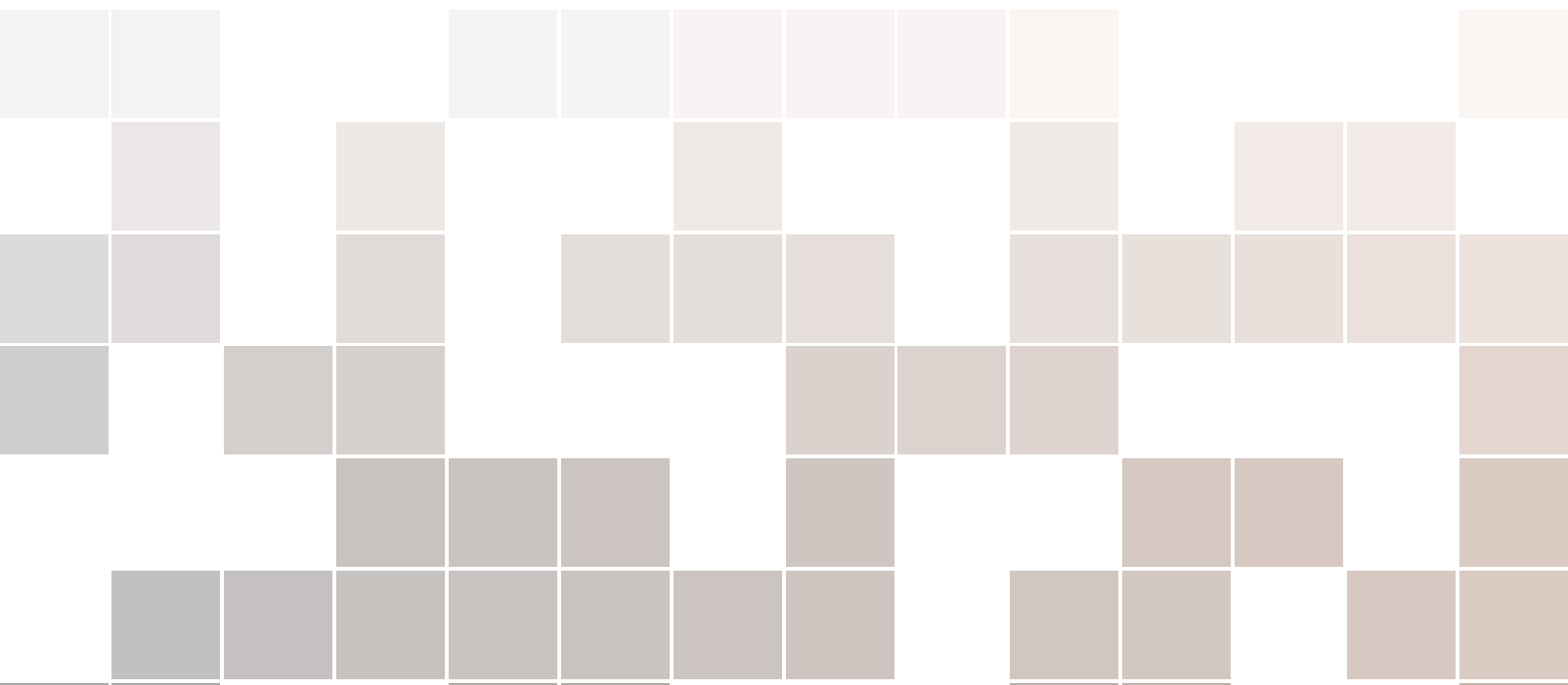


Métodos Numéricos

Facultad de Ingeniería - Universidad Anáhuac

Dr. Héctor Selley



Índice general

Index	7
1 Introducción	7
1.1 Razones de su aplicación en la Ingeniería	7
1.2 Conceptos básicos	8
1.3 Tipos de errores	9
1.3.1 Error absoluto	9
1.3.2 Error de redondeo y truncamiento	9
1.4 Uso de herramientas computacionales	11
2 Métodos de interpolación	13
2.1 Interpolación simple	13
2.2 Interpolación polinomial de Newton	15
2.2.1 Diferencias Divididas	15
2.3 Interpolación de Lagrange	19
2.4 Interpolación de mínimos cuadrados	24
2.4.1 Caso lineal	24
2.4.2 Caso no lineal	27
2.5 Interpolación inversa	29
2.6 Ejercicios	30

3	Solución de ecuaciones	33
3.1	Método de Newton Raphson	33
3.2	Método de la secante	36
3.3	Convergencia acelerada	39
3.3.1	Método de Aitken	39
3.3.2	Método de Steffensen	40
4	Solución de sistemas de ecuaciones lineales	43
4.1	Métodos iterativos	43
4.1.1	Método de Jacobi	43
4.1.2	Método de Gauss-Seidel	46
5	Sistemas de ecuaciones no lineales	49
5.1	Método del Punto Fijo	49
5.1.1	Iteración funcional	49
5.1.2	Iteración funcional acelerada	51
5.2	Solución de sistemas de ecuaciones mediante Newton	52
5.3	Aplicaciones	55
6	Diferenciación e integración numérica	57
6.1	Fórmula de diferencia progresiva y regresiva	57
6.1.1	Diferencia progresiva	57
6.1.2	Diferencia regresiva	58
6.2	Fórmula de tres puntos	61
6.3	Fórmula de cinco puntos	63
6.4	Fórmula de 3 puntos para la segunda derivada	64
6.5	Integración numérica: Método del trapecio	64
6.6	Integración numérica: Métodos de Simpson	64
6.7	Integración numérica: Integración de Romberg	64
6.8	Integración numérica: Método de cuadratura gaussiana	64
6.9	Integración múltiple	64
6.10	Aplicaciones	64
7	Solución de ecuaciones diferenciales	65
7.1	Método de Euler y Euler mejorado	65
7.2	Método de Ruge-Kutta	65
7.3	Método de pasos múltiples	65
7.4	Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias	65
7.5	Aplicaciones	65

Bibliography	67
Articles	67
Books	67

1. Introducción

1.1 Razones de su aplicación en la Ingeniería

La matemática y la física nos permite describir fenómenos de la naturaleza a través de modelos. El planteamiento de dichos modelos generalmente resulta en un problema matemático.

Por ejemplo, imagine que se desea calcular el área debajo de un puente y supongamos que el área formada por el puente no es una figura simple. Este cálculo podría hacerse a través de una integral, para ello es necesario obtener una función que modele la parte inferior del puente y plantear la integral definida. Ahora al resolver la integral se podría obtener dicha área, y la calidad de la aproximación dependerá de lo preciso que sea el modelo generado para el bajo-puente.

Por ello si se desea mejorar el cálculo habría que mejorar el modelo. Ahora si el modelo resulta una función complicada, ¿qué ocurriría si la integral no se puede resolver analíticamente?. Debe ser claro que el área existe a pesar de que la integral pueda o no resolverse analíticamente.

Para fines prácticos, nos interesa el resultado más no si éste se obtuvo de manera analítica o no. Es en este escenario donde los métodos numéricos resultan muy útiles.

Los métodos numéricos nos permiten obtener una aproximación a la solución de un problema matemático, más no resolverlo.

¿Cuál es la diferencia entre resolver y aproximar a la solución de un problema matemático?. Resolver un problema matemático consiste en encontrar una expresión, un teorema, o una regla para ese problema; es una solución que incluye una generalización para una familia de problemas semejantes. Una aproximación a la solución es un valor numérico para un problema específico de esa familia.

El único precio que se paga por utilizar un método numérico es que las aproximaciones incluyen un error por su mera naturaleza.

1.2 Conceptos básicos

Cifra significativa. El concepto de cifras o dígitos significativos se ha desarrollado para designar formalmente la confiabilidad de un valor numérico. Las cifras significativas de un número son aquellas que pueden utilizarse de forma confiable. Se trata del número de dígitos que se ofrecen con certeza, más uno estimado. Por ejemplo, el velocímetro y el odómetro de un automóvil mostrado en la figura 1.1.

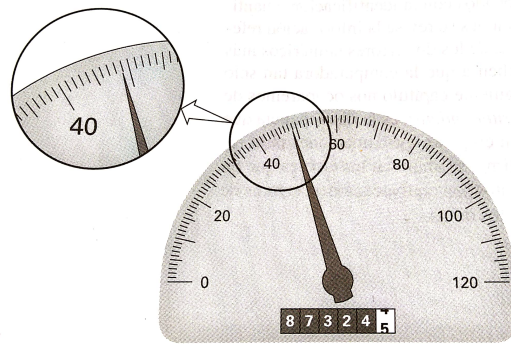


Figura 1.1: El odómetro y velocímetro de un automóvil ejemplifican el concepto de cifras significativas.

Exactitud e incertidumbre. Se refiere a que tan cercano está el valor calculado o medido del valor verdadero.

Precisión y error. Se refiere a que tan cercanos se encuentran, unos de otros, diversos valores calculados o medidos.

Estos conceptos se ilustran gráficamente utilizando la analogía con una diana en la práctica de tiro. Los agujeros en cada blanco de la figura 1.2 se consideran como las predicciones con una técnica numérica; mientras que el centro del blanco representa la verdad.

La *inexactitud* (conocida también como *sesgo*) se define como una desviación sistemática del valor verdadero. Por lo tanto, aunque los disparos en la figura 1.2c están más juntos que los de la figura 1.2a, los dos casos son igualmente inexactos, ya que ambos se centran en la esquina superior izquierda del blanco.

La *imprecisión* (también llamada *incertidumbre*), por otro lado, se refiere a la magnitud en la dispersión de los disparos. Por consiguiente, aunque las figuras 1.2b y 1.2d son igualmente exactas (esto es, igualmente centradas con respecto al blanco), la última es más precisa pues los disparos están agrupados en forma más compacta.

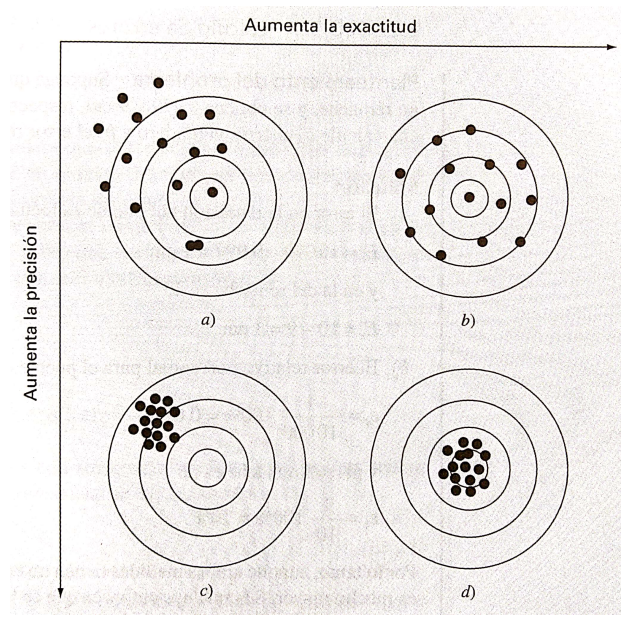


Figura 1.2: Exactitud y precisión

1.3 Tipos de errores

Los métodos numéricos permiten encontrar aproximaciones a la solución de diversos problemas matemáticos. Sin embargo, el hecho de utilizar estos métodos introduce errores en la aproximación. A continuación se describen algunos de los errores que ocurren.

1.3.1 Error absoluto

Una aproximación, por definición, es un valor cercano a la solución del problema, la cuál llamaremos absoluta. De esta forma, la diferencia entre la solución absoluta y la aproximación a ella la llamaremos error absoluto. Es decir, si sumamos la aproximación y el error absoluto se obtiene la solución absoluta.

Este error absoluto es inevitable en los métodos numéricos y su estimación es compleja, incluso más que el método numérico que determina la aproximación. Por esta razón es que el cálculo del error absoluto resulta impráctico y se opta por utilizar estrategias en la obtención de la aproximación para minimizar este error.

1.3.2 Error de redondeo y truncamiento

Utilizar una herramienta digital para el cómputo numérico tiene muchas ventajas pero también desventajas. Entre sus ventajas más relevantes se encuentra el hecho de que los sistemas digitales permiten la realización de cálculos aritméticos rápidamente, lo cual es muy conveniente para los métodos iterativos. Una desventaja relevante de los sistemas digitales es el hecho de que cuentan con una capacidad finita de memoria, aún y cuando esta capacidad de memoria se incrementa día a día, sigue siendo finita.

Tomemos un ejemplo específico, sea el número

$$\frac{1}{3} = 0.33333\dots,$$

este número tiene un número infinito de cifras, un ligero cambio en alguna de esas cifras (por pequeña que sea) implica que el número ya no sea el mismo. Si el número no se escribe en su forma racional, será necesario emplear el número infinito de cifras para realizar un trato *preciso* del número.

Cuando este número se almacena en la memoria de un sistema digital, no podrán almacenarse todas las cifras de este número dado que la memoria es finita. Esto significa que el número será almacenado solamente con una cantidad limitada de cifras significativas, lo que significa que ya no será estrictamente el mismo número. Esto se llama **truncamiento**. Por otro lado, cuando se realizan operaciones con números truncados podrían obtenerse resultados imprecisos, esto llama **error de truncamiento**.

Vayamos a un ejemplo. En este ejemplo utilizaremos nuevamente el número $\frac{1}{3}$ y realizaremos operaciones aritméticas con el para mostrar el error de truncamiento. Supongamos que el sistema digital solo es capaz de almacenar 6 cifras significativas.

Aritmética convencional	Aritmética digital con truncamiento
$\frac{1}{3}$	0.333333
$3 \times \frac{1}{3}$	3×0.333333
1	0.999999

Tabla 1.1: Ejemplo del error de truncamiento

En la tabla 1.3 se muestra la diferencia entre la aritmética convencional y digital, con el número completo y el número truncado. En el resultado es evidente que formalmente $1 \neq 0.999999$, y aunque se tenga un mayor número de cifras en el número digital siempre serán desiguales los resultados. En un caso práctico se dice que $1 \approx 0.999999$, asumiendo que la diferencia es resultado del error de truncamiento.

El redondeo es similar al de truncamiento, solo que este ocurre cuando se ajusta el resultado de la operación a su inmediato superior o inferior, aquel que se encuentre más cerca. El redondeo es una forma en la que los sistemas digitales pueden compensar el error de truncamiento, en el ejemplo mostrado en la tabla 1.3 lo compensaría apropiadamente, pero en otros casos no. Cuando el redondeo no compensa el truncamiento y en su lugar aleja al número de su valor absoluto, se dice que ocurre un **error de redondeo**.

Veamos un ejemplo en el que ocurre el error de redondeo y afecta al resultado obtenido en la operación. Considere los siguientes números y que se hará un redondeo de 6 cifras significativas del número.

Número racional	Valor numérico	Valor numérico redondeado
$\frac{2}{7}$	0.2857142857	0.285710
$\frac{5}{7}$	0.7142857143	0.714285

Tabla 1.2: Valor numérico redondeado

Al realizar la suma de los números se obtiene un resultado inesperado e incorrecto debido al error de redondeo.

Aritmética convencional	Aritmética digital con redondeo
$\frac{2}{7}$	0.285710
+	+
$\frac{5}{7}$	0.714285
=	=
1	0.999995

Tabla 1.3: Ejemplo del error de redondeo

Por último, cabe mencionar que estos errores pueden combinarse en las operaciones aritméticas digitales, la gravedad de sus efectos dependerán completamente de los números y las operaciones que se hagan con ellos.

1.4 Uso de herramientas computacionales

Los métodos numéricos constituyen técnicas mediante las cuales es posible formular problemas matemáticos, de tal forma que puedan resolverse utilizando operaciones aritméticas. Aunque existen muchos tipos de métodos numéricos, éstos comparten una característica común: invariablemente requieren de un buen número de tediosos cálculos aritméticos. No es raro que con el desarrollo de computadoras digitales eficientes y rápidas, el papel de los métodos numéricos en la solución de problemas en ingeniería haya aumentado de forma considerable en los últimos años.

Antes del uso de la computadora se gastaba bastante energía en la técnica misma de solución, en lugar de usarla en la definición del problema y su interpretación. Esta situación desafortunada se debía al tiempo y trabajo monótono que se requería para obtener resultados numéricos con técnicas que no utilizaban la computadora.

En la actualidad, las computadoras y los métodos numéricos ofrecen una alternativa para los cálculos complicados. Al usar el poder del cómputo se obtienen soluciones directamente, de esta manera se pueden aproximar los cálculos sin tener que recurrir a consideraciones de simplificación o a técnicas muy lentas. Aunque las soluciones analíticas aún son muy valiosas, tanto para resolver problemas como para brindar una mayor comprensión, los métodos numéricos representan opciones que aumentan, en forma considerable, la capacidad de enfrentar y resolver los problemas; como resultado, se dispone de más tiempo para aprovechar las habilidades creativas personales. En consecuencia, es posible dar más importancia a la formulación de un problema y a la interpretación de la solución.

Para la gran mayoría de los métodos numéricos, es posible describir su desarrollo y representarlo mediante un algoritmo. En este sentido, resulta en extremo práctico utilizar una computadora para delegarle los cálculos que sean necesarios para encontrar una aproximación. Es muy importante recalcar

que la computadora o bien el software que corre en ella, sólo son herramientas que ayudan al humano a resolver (o aproximar a la solución de) un problema.

2. Métodos de interpolación

Con frecuencia se encontrará con que se tiene que estimar valores intermedios entre puntos asociados con datos. El método más común que se usa para este propósito es la interpolación polinomial. La fórmula general para un polinomio de n -ésimo grado es

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n. \quad (2.1)$$

Dados $n + 1$ puntos asociados con datos, hay uno y sólo un polinomio de grado n que pasa a través de todos los puntos. La *interpolación polinomial* consiste en determinar el polinomio único de n -ésimo grado que se ajuste a $n + 1$ puntos asociados con datos. Este polinomio, entonces, proporciona una fórmula para calcular valores intermedios.

2.1 Interpolación simple

La forma más simple de interpolación es la que se conoce como *interpolación lineal*. Esta técnica consiste en unir dos puntos asociados con datos con una línea recta.

Sean los puntos $(x_0, f(x_0))$ y $(x_1, f(x_1))$, se puede construir un polinomio de primer grado calculando la pendiente entre los puntos:

$$m = \frac{y_2 - y_1}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

Ahora se construye un polinomio de primer grado con la ecuación *punto-pendiente*:

$$\begin{aligned} y - y_0 &= m(x - x_0) \\ y - f(x_0) &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \\ y &= f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \end{aligned}$$

$$f_1(x) = f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \quad (2.2)$$

La expresión 2.2 es una *fórmula de interpolación lineal*, donde la notación $f_1(x)$ indica que se trata de un polinomio de primer grado.

Ejercicio 2.1 Estime el logaritmo natural de 2 mediante interpolación lineal. Utilice $\ln 1 = 0$ y $\ln 6 = 1.791759$. Repita el ejercicio utilizando ahora $\ln 1 = 0$ y $\ln 4 = 1.386294$.

Solución.

a) Sea:

$$\begin{aligned} x_0 &= 1 \\ f(x_0) &= \ln 1 \\ x_1 &= 6 \\ f(x_1) &= \ln 6 \\ f_1(x) &= f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \\ f_1(2) &= \ln 1 + \frac{\ln 6 - \ln 1}{6 - 1} = 0.358351 \\ \ln 2 &\approx 0.358351 \end{aligned}$$

b) Sea:

$$\begin{aligned} x_0 &= 1 \\ f(x_0) &= \ln 1 \\ x_1 &= 4 \\ f(x_1) &= \ln 4 \\ f_1(x) &= f(x_0) + \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0) \\ f_1(2) &= \ln 1 + \frac{\ln 4 - \ln 1}{4 - 1} = \\ \ln 2 &\approx 0.462098 \end{aligned}$$

Ejercicio 2.2 Utilice los datos de la tabla 2.1 para obtener una aproximación al valor de $f(1.5)$. Utilice la interpolación simple.

x	$f(x)$
1.0	0.7651977
1.3	0.6200860
1.6	0.4554022
1.9	0.2818186
2.2	0.1103623

Tabla 2.1: Datos del Ejemplo 2.2

Solución.

Dado que el valor que se encontrará una aproximar se encuentra entre los valores 1.3 y 1.6, se utilizarán estos para realizar la interpolación.

$$\begin{aligned}
 x_0 &= 1.3 \\
 f(x_0) &= 0.6200860 \\
 x_1 &= 1.6 \\
 f(x_1) &= 0.4554022 \\
 f(x) &= 0.6200860 + \frac{0.4554022 - 0.6200860}{1.6 - 1.3} \cdot (1.5 - 1.3) = 0.5102968 \\
 f(1.5) &\approx 0.5102968
 \end{aligned}$$

2.2 Interpolación polinomial de Newton

En la sección anterior utilizamos la interpolación para generar aproximaciones de primer grado. Los métodos de diferencias divididas, que explicaremos en esta sección, se usarán para generar sucesivamente los polinomios de grado n por sí mismos.

2.2.1 Diferencias Divididas

Supongamos que $P_n(x)$ es el n -ésimo polinomio que concuerda con la función f en los números distintos x_0, x_1, \dots, x_n . Dicho polinomio $P_n(x)$ tiene la forma

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0) \dots (x - x_{n-1}), \quad (2.3)$$

para las constantes apropiadas a_0, a_1, \dots, a_n .

Para determinar la primera de las constantes a_0 se evalúa el polinomio P_n de la ecuación 2.3 en x_0 , esto es:

$$P_n(x_0) = a_0 = f(x_0),$$

que a su vez debe ser igual a $f(x_0)$ dado que el polinomio P_n debe coincidir con la función en x_0 .

De manera similar, cuando se evalúa $P_n(x)$ en x_1 , los únicos términos diferentes de cero en la evaluación de $P_n(x_1)$ son los términos constante y lineal,

$$P_n(x_1) = f(x_0) + a_1(x_1 - x_0) = f(x_1);$$

de manera análoga se iguala con $f(x_1)$ y despejando el término a_1 :

$$a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \quad (2.4)$$

La expresión 2.4 resulta ser la primer diferencia dividida. De esta forma, reescribiendo los términos y generalizando se dice que la diferencia dividida cero de la función f respecto a x_1 se denota como $f[x_i]$, esto es:

$$f[x_i] = f(x_i)$$

El resto de las diferencias divididas se definen en forma recursiva utilizando como base la expresión 2.4. De esta forma la *primera diferencia dividida* de f con respecto a x_i y x_{i+1} se denota: $f[x_i, x_{i+1}]$ y se define así

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}. \quad (2.5)$$

La *segunda diferencia dividida*, $f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}]$, se define como sigue

$$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i}$$

El proceso termina con la n -ésima diferencia dividida,

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, x_2, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0}$$

Por tanto el polinomio de interpolación en la ecuación 2.3 es

$$P_n(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots + a_n(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{n-1}).$$

Podemos reescribir $P_n(x)$ en una forma llamada diferencia dividida de Newton:

$$P_n(x) = f[x_0] + \sum_{k=1}^n f[x_0, x_1, \dots, x_k](x - x_0) \dots (x - x_{k-1}). \quad (2.6)$$

El valor de $f[x_0, x_1, \dots, x_k]$ es independiente del orden de los números x_0, x_1, \dots, x_k .

Teorema 2.2.1 — Diferencias divididas de Newton.

$$P_n(x) = F_{0,0} + \sum_{i=1}^n F_{i,i} \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j).$$

donde $F_{i,i}$ es $f[x_0, x_1, \dots, x_i]$.

Ejercicio 2.3 Con los datos de la tabla 2.3 construya el polinomio de interpolación de mayor grado posible. Utilizando el polinomio resultante, aproxime $P(1.5)$.

x	$f(x)$
1.0	0.7651977
1.3	0.6200860
1.6	0.4554022
1.9	0.2818186
2.2	0.1103623

Tabla 2.2: Datos del Ejemplo 2.3

Algoritmo 1: Diferencias Divididas de Newton**Entrada :** Números x_0, x_1, \dots, x_n ; valores $f(x_0), f(x_1), \dots, f(x_n)$ como $F_{0,0}, F_{1,0}, \dots, F_{n,0}$.**Salida :** Los números $F_{0,0}, F_{1,1}, \dots, F_{n,n}$ donde

$$P_n(x) = F_{0,0} + \sum_{i=1}^n F_{i,i} \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j).$$

$(F_{i,i})$ es $f[x_0, x_1, \dots, x_i]$.

```

1 begin
2   for i = 1 to n do
3     for j = 1 to i do
4        $F_{i,j} = \frac{F_{i,j-1} - F_{i-1,j-1}}{x_i - x_{i-j}}$ 
5   Salida ( $F_{0,0}, F_{1,1}, \dots, F_{n,n}$ ;)

```

Solución.La primera diferencia dividida que involucra a x_0 y x_1 es

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{0.6200860 - 0.7651877}{1.3 - 1.0} = -0.4837057.$$

El resto de las primeras diferencias divididas se calcularon de manera similar y se muestran en la cuarta columna de la tabla 2.3.

i	x_i	$f[x_i]$	$f[x_{i-1}, x_i]$	$f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i]$	$f[x_{i-3}, \dots, x_i]$	$f[x_{i-4}, \dots, x_i]$
0	1.0	0.7651977				
			-0.4837057			
1	1.3	0.6200860		-0.1087339		
			-0.5489460		0.0658784	
2	1.6	0.4554022		-0.0494433		0.0018251
			-0.5786120		0.0680685	
3	1.9	0.2818186		0.0118183		
			-0.5715210			
4	2.2	0.1103623				

Tabla 2.3: Diferencias Divididas del Ejemplo 2.3

La segunda diferencia dividida que implica a x_0, x_1 y x_2 es

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{-0.5489460 - (-0.4837057)}{1.6 - 1.0} = -0.1087339$$

La segunda diferencia dividida restante se muestra en la quinta columna de la tabla 2.3. La tercera diferencia dividida que involucra a x_0, x_1, x_2 y x_3 y la cuarta diferencia dividida que involucra todos los

puntos existentes son, respectivamente,

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0} = \frac{-0.0494433 - (-0.1087339)}{1.9 - 1.0} = 0.0658784,$$

y

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] = \frac{f[x_1, x_2, x_3, x_4] - f[x_0, x_1, x_2, x_3]}{x_4 - x_0} = \frac{0.0680685 - 0.0658784}{2.2 - 1.0} = 0.0018251.$$

Los coeficientes de la fórmula de las diferencias divididas del polinomio de interpolación de Newton se encuentran a lo largo de la diagonal de la tabla 2.3. Por lo tanto, el polinomio es

$$P_4(x) = 0.7651977 - 0.4837057 \cdot (x - 1.0) - 0.1087339 \cdot (x - 1.0)(x - 1.3) + \\ 0.0658784 \cdot (x - 1.0)(x - 1.3)(x - 1.6) + 0.0018251 \cdot (x - 1.0)(x - 1.3)(x - 1.6)(x - 1.9)$$

Finalmente la aproximación es:

$$P_4(1.5) = 0.7651977 - 0.4837057 \cdot (1.5 - 1.0) - 0.1087339 \cdot (1.5 - 1.0)(1.5 - 1.3) + \\ 0.0658784 \cdot (1.5 - 1.0)(1.5 - 1.3)(1.5 - 1.6) + 0.0018251 \cdot (1.5 - 1.0)(1.5 - 1.3)(1.5 - 1.6)(1.5 - 1.9) \\ P_4(1.5) = 0.5118200$$

Ejercicio 2.4 Construya el polinomio de aproximación de mayor grado posible para los siguientes datos: $f(8.1) = 16.94410$, $f(8.3) = 17.56492$, $f(8.6) = 18.50515$ y $f(8.7) = 18.82091$. Use el polinomio para aproximar a $f(8.4)$.

Solución.

Calculamos las primeras diferencias divididas.

$$f[x_0, x_1] = \frac{f[x_1] - f[x_0]}{x_1 - x_0} = \frac{17.56492 - 16.94410}{8.3 - 8.1} = 3.1041.$$

$$f[x_1, x_2] = \frac{f[x_2] - f[x_1]}{x_2 - x_1} = \frac{18.50515 - 17.56492}{8.6 - 8.3} = 3.1341.$$

$$f[x_2, x_3] = \frac{f[x_3] - f[x_2]}{x_3 - x_2} = \frac{18.82091 - 18.50515}{8.7 - 8.6} = 3.1576.$$

Ahora las segundas diferencias divididas.

$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{3.1341 - 3.1041}{8.6 - 8.1} = 0.06.$$

$$f[x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_2, x_3] - f[x_1, x_2]}{x_3 - x_1} = \frac{3.1576 - 3.1341}{8.7 - 8.3} = 0.05875.$$

La tercera y última diferencia dividida.

$$f[x_0, x_1, x_2, x_3] = \frac{f[x_1, x_2, x_3] - f[x_0, x_1, x_2]}{x_3 - x_0} = \frac{0.058750 - 0.06}{8.7 - 8.1} = -0.00208333$$

Todos los resultados anteriores los concentramos en la tabla 2.4.

x_i	$f[x_i]$	$f[x_{i-1}, x_i]$	$f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i]$	$f[x_{i-3}, \dots, x_i]$
0	8.1	16.94410		
1	8.3	17.56492	3.1041	
2	8.6	18.50515	3.1341	0.06
3	8.7	18.82091	3.1576	0.058750
				-0.00208333

Tabla 2.4: Diferencias Divididas del Ejemplo 2.4

Los coeficientes de la fórmula de las diferencias divididas del polinomio de interpolación de Newton se encuentran a lo largo de la diagonal de la tabla 2.4. Por lo tanto, el polinomio es

$$P_3(x) = 16.94410 + 3.1041 \cdot (x - 8.1) + 0.06 \cdot (x - 8.1)(x - 8.3) - 0.00208333 \cdot (x - 8.1)(x - 8.3)(x - 8.6)$$

Finalmente la aproximación es:

$$P_3(8.4) = 16.94410 + 3.1041 \cdot (8.4 - 8.1) + 0.06 \cdot (8.4 - 8.1)(8.4 - 8.3) - 0.00208333 \cdot (8.4 - 8.1)(8.4 - 8.3)(8.4 - 8.6) = 17.8771175$$

2.3 Interpolación de Lagrange

El problema de definir un polinomio de primer grado que pasa por los puntos distintos (x_0, y_0) y (x_1, y_1) es el mismo que el de aproximar una función f , para la cual $f(x_0) = y_0$ y $f(x_1) = y_1$ por medio de un polinomio de primer grado que **interpole** los valores de f en los puntos dados o que coincida con ellos. Este procedimiento utilizado para aproximar dentro del intervalo dado por los extremos es llamado polinomio de **interpolación**.

Definamos las funciones

$$L_0 = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \text{ y } L_1 = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}.$$

El polinomio de interpolación de Lagrange lineal que pasa por (x_0, y_0) y (x_1, y_1) es

$$P(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}f(x_1).$$

Observe que

$$L_0(x_0) = 1, L_0(x_1) = 0, L_1(x_0) = 0 \text{ y } L_1(x_1) = 1$$

lo cual implica que

$$P(x_0) = 1 \cdot f(x_0) + 0 \cdot f(x_1) = f(x_0) = y_0$$

y

$$P(x_1) = 0 \cdot f(x_0) + 1 \cdot f(x_1) = f(x_1) = y_1$$

Así P es el único polinomio de primer grado como máximo que pasa por (x_0, y_0) y (x_1, y_1) .

Ejercicio 2.5 Determine el polinomio de interpolación lineal de Lagrange que pasa por los puntos $(2, 4)$ y $(5, 1)$.

Solución.

En este caso tenemos

$$L_0(x) = \frac{x-5}{2-5} = -\frac{1}{3}(x-5)$$

y

$$L_1(x) = \frac{x-2}{5-2} = \frac{1}{3}(x-2)$$

por lo que

$$P(x) = -\frac{1}{3}(x-5) \cdot 4 + \frac{1}{3}(x-2) \cdot 1 = -\frac{4}{3}x + \frac{20}{3} + \frac{1}{3}x - \frac{2}{3} = -x + 6$$

A fin de generalizar el concepto a partir de la interpolación lineal, consideremos la construcción de un polinomio de grado máximo n que pase por los $n+1$ puntos

$$\{(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))\}.$$

En este caso para cada $k = 0, 1, \dots, n$ construimos una función $L_{n,k}(x)$ con la propiedad de que $L_{n,k}(x_i) = 0$, cuando $i \neq k$ y $L_{n,k}(x_k) = 1$. Para satisfacer $L_{n,k}(x_i) = 0$ para cada $i \neq k$ se requiere que el numerador de $L_{n,k}(x)$ contenga el término

$$(x-x_0)(x-x_1) \cdots (x-x_{k-1})(x-x_{k+1}) \cdots (x-x_n).$$

Para satisfacer $L_{n,k}(x_k) = 1$, el denominador de $L_{n,k}(x)$ debe ser este término pero evaluado en $x = x_k$; es decir,

$$L_{n,k}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1) \cdots (x-x_{k-1})(x-x_{k+1}) \cdots (x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1) \cdots (x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1}) \cdots (x_k-x_n)}.$$

El polinomio de interpolación se describe fácilmente ahora que conocemos la forma de $L_{n,k}$. Este polinomio, denominado **n-ésimo polinomio de interpolación de Lagrange**, se describe en el siguiente teorema.

Teorema 2.3.1 — Teorema de polinomio de Lagrange. Si x_0, x_1, \dots, x_n son $n+1$ números distintos y si f es una función cuyos valores están dados en estos números, entonces existe un único polinomio $P(x)$ de grado máximo n , con la propiedad de que

$$f(x_k) = P(x_k), \forall k = 0, 1, \dots, n.$$

Este polinomio está dado por

$$P(x) = f(x_0)L_{n,0}(x) + \cdots + f(x_n)L_{n,n}(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k)L_{n,k}(x) \quad (2.7)$$

donde, para cada $k = 0, 1, \dots, n$,

$$L_{n,k}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1) \cdots (x-x_{k-1})(x-x_{k+1}) \cdots (x-x_n)}{(x_k-x_0)(x_k-x_1) \cdots (x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1}) \cdots (x_k-x_n)} = \prod_{i=0, i \neq k}^n \frac{(x-x_i)}{(x_k-x_i)}. \quad (2.8)$$

Escribiremos $L_{n,k}(x)$ simplemente como $L_k(x)$ cuando no hay confusión respecto a su grado.

Ejercicio 2.6 a) Utilice los números (o nodos) $x_0 = 2$, $x_1 = 2.75$ y $x_2 = 4$ para obtener el segundo polinomio de interpolación de Lagrange para $f(x) = 1/x$.

b) Use este polinomio para aproximar $f(3) = 1/3$.

Solución.

- a) Primero determinamos los polinomios de coeficientes $L_0(x)$, $L_1(x)$ y $L_2(x)$. Dado que $n = 2$, los coeficientes de Lagrange de la expresión 2.8 se reducen a:

$$L_{2,0}(x) = L_0(x) = \prod_{i=0, i \neq 0}^2 \frac{(x - x_i)}{(x_0 - x_i)} = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$L_{2,1}(x) = L_1(x) = \prod_{i=0, i \neq 1}^2 \frac{(x - x_i)}{(x_1 - x_i)} = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$L_{2,2}(x) = L_2(x) = \prod_{i=0, i \neq 2}^2 \frac{(x - x_i)}{(x_2 - x_i)} = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

En forma anidada son

$$L_0(x) = \frac{(x - 2.75)(x - 4)}{(2 - 2.75)(2 - 4)} = \frac{2}{3}(x - 2.75)(x - 4),$$

$$L_1(x) = \frac{(x - 2)(x - 4)}{(2.75 - 2)(2.75 - 4)} = -\frac{16}{15}(x - 2)(x - 4),$$

y

$$L_2(x) = \frac{(x - 2)(x - 2.75)}{(4 - 2)(4 - 2.75)} = \frac{2}{5}(x - 2)(x - 2.75).$$

Puesto que $f(x_0) = f(2) = 1/2$, $f(x_1) = f(2.75) = 4/11$ y $f(x_2) = f(4) = 1/4$, tenemos

$$\begin{aligned} P(x) &= \sum_{k=0}^2 f(x_k) L_k(x) = \frac{1}{2} \cdot \frac{2}{3}(x - 2.75)(x - 4) + \frac{4}{11} \cdot \left(-\frac{16}{15}\right)(x - 2)(x - 4) + \frac{1}{4} \cdot \frac{2}{5}(x - 2)(x - 2.75) \\ &= \frac{1}{3}(x - 2.75)(x - 4) - \frac{64}{165}(x - 2)(x - 4) + \frac{1}{10}(x - 2)(x - 2.75) \\ &= \frac{1}{22}x^2 - \frac{35}{88}x + \frac{49}{44}. \end{aligned}$$

- b) Una aproximación a $f(3) = 1/3$ es

$$f(3) \approx P(3) = \frac{9}{22} - \frac{105}{88} + \frac{49}{44} = \frac{29}{88} \approx 0.32955.$$

Ejercicio 2.7 Para la función dada $f(x) = \sin(\pi x)$, sean $x_0 = 1$, $x_1 = 1.25$ y $x_2 = 1.6$. Construya el polinomio de interpolación de segundo grado para aproximar $f(1.4)$, y calcule el error máximo.

Solución.

Dado que $n = 2$, los coeficientes de Lagrange $L_0(x)$, $L_1(x)$ y $L_2(x)$ de la expresión 2.8 son:

$$L_0(x) = \prod_{i=0, i \neq 0}^2 \frac{(x - x_i)}{(x_0 - x_i)} = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}$$

$$L_1(x) = \prod_{i=0, i \neq 1}^2 \frac{(x - x_i)}{(x_1 - x_i)} = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}$$

$$L_2(x) = \prod_{i=0, i \neq 2}^2 \frac{(x - x_i)}{(x_2 - x_i)} = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

Sustituyendo los datos del problema:

$$L_0(x) = \frac{(x - 1.25)(x - 1.6)}{(1 - 1.25)(1 - 1.6)} = \frac{20}{3}(x - 1.25)(x - 1.6) = \frac{20}{3}x^2 - 19x + \frac{40}{3}$$

$$L_1(x) = \frac{(x - 1)(x - 1.6)}{(1.25 - 1)(1.25 - 1.6)} = -\frac{80}{7}(x - 1)(x - 1.6) = -\frac{80}{7}x^2 + \frac{208}{7}x - \frac{128}{7}$$

$$L_2(x) = \frac{(x - 1)(x - 1.25)}{(1.6 - 1)(1.6 - 1.25)} = \frac{100}{21}(x - 1)(x - 1.25) = \frac{100}{21}x^2 - \frac{75}{7}x + \frac{125}{21}$$

Sustituyendo los puntos en la función dada:

$$f(x_0) = f(1) = \sin(\pi) = 0$$

$$f(x_1) = f(1.25) = \sin(1.25\pi) = -\frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$f(x_2) = f(1.6) = \sin(1.6\pi) = -0.951057$$

Formando el Polinomio de Lagrange

$$P(x) = \sum_{k=0}^2 f(x_k)L_{2,k}(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x)$$

$$P(x) = 0 \cdot \left[\frac{20}{3}x^2 - 19x + \frac{40}{3} \right] - \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \left[-\frac{80}{7}x^2 + \frac{208}{7}x - \frac{128}{7} \right] - 0.951057 \cdot \left[\frac{100}{21}x^2 - \frac{75}{7}x + \frac{125}{21} \right]$$

$$P(x) = 3.55238x^2 - 10.8213x + 7.2689$$

Calculando la aproximación al punto $x = 1.4$

$$P(1.4) = 3.55238(1.4)^2 - 10.8213(1.4) + 7.2689 \approx -0.91826$$

Ejercicio 2.8 Use el polinomio de interpolación de Lagrange apropiados de grado tres para aproximar lo siguiente: $f(8.4)$ si $f(8.1) = 16.94410$, $f(8.3) = 17.56492$, $f(8.6) = 18.50515$, $f(8.7) = 18.82091$.

Solución.

Dado que $n = 3$, es necesario encontrar los coeficientes $L_0(x)$, $L_1(x)$, $L_2(x)$ y $L_3(x)$. La expresión 2.8 se reduce a:

$$L_0(x) = \prod_{i=0, i \neq 0}^3 \frac{(x - x_i)}{(x_0 - x_i)} = \frac{(x - x_1)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)(x_0 - x_3)}$$

$$L_1(x) = \prod_{i=0, i \neq 1}^3 \frac{(x - x_i)}{(x_1 - x_i)} = \frac{(x - x_0)(x - x_2)(x - x_3)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}$$

$$L_2(x) = \prod_{i=0, i \neq 2}^2 \frac{(x-x_i)}{(x_2-x_i)} = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}$$

$$L_3(x) = \prod_{i=0, i \neq 3}^2 \frac{(x-x_i)}{(x_3-x_i)} = \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}$$

Sustituyendo las coordenadas dadas por el problema:

$$L_0(x) = \frac{(x-8.3)(x-8.6)(x-8.7)}{(8.1-8.3)(8.1-8.6)(8.1-8.7)} = \frac{(x-8.3)(x-8.6)(x-8.7)}{-\left(\frac{1}{5}\right)\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{3}{5}\right)}$$

$$L_0(x) = -\frac{50}{3}(x-8.3)(x-8.6)(x-8.7)$$

$$L_1(x) = \frac{(x-8.1)(x-8.6)(x-8.7)}{(8.3-8.1)(8.3-8.6)(8.3-8.7)} = \frac{(x-8.1)(x-8.6)(x-8.7)}{\left(\frac{1}{5}\right)\left(-\frac{3}{10}\right)\left(-\frac{2}{5}\right)}$$

$$L_1(x) = \frac{250}{6}(x-8.1)(x-8.6)(x-8.7)$$

$$L_2(x) = \frac{(x-8.1)(x-8.3)(x-8.7)}{(8.6-8.1)(8.6-8.3)(8.6-8.7)} = \frac{(x-8.1)(x-8.3)(x-8.7)}{\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{3}{10}\right)\left(-\frac{1}{10}\right)}$$

$$L_2(x) = -\frac{200}{3}(x-8.1)(x-8.3)(x-8.7)$$

$$L_3(x) = \frac{(x-8.1)(x-8.3)(x-8.6)}{(8.7-8.1)(8.7-8.3)(8.7-8.6)} = \frac{(x-8.1)(x-8.3)(x-8.6)}{\left(\frac{3}{5}\right)\left(\frac{2}{5}\right)\left(\frac{1}{10}\right)}$$

$$L_3(x) = \frac{250}{6}(x-8.1)(x-8.3)(x-8.6)$$

Luego, sustituyendo estos coeficientes en el polinomio de Lagrange (ecuación 2.7) cuando $n = 3$:

$$P(x) = \sum_{k=0}^3 f(x_k)L_{3,k}(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x) + f(x_3)L_3(x)$$

$$P(x) = (16.9441) \left[-\frac{50}{3}(x-8.3)(x-8.6)(x-8.7) \right] + (17.56492) \left[\frac{250}{6}(x-8.1)(x-8.6)(x-8.7) \right]$$

$$+ (18.50515) \left[-\frac{200}{3}(x-8.1)(x-8.3)(x-8.7) \right] + (18.82091) \left[\frac{250}{6}(x-8.1)(x-8.3)(x-8.6) \right]$$

$$P(x) = -0.0020833x^3 + 0.112083x^2 + 1.6861x - 2.96077$$

Finalmente sustituyendo $x = 8.4$ para obtener la aproximación

$$P(8.4) = -0.0020833(8.4)^3 + 0.112083(8.4)^2 + 1.6861(8.4) - 2.96077 = 17.8771062368$$

Dado que se cumple que $f(8.3) \leq P(8.4) \leq f(8.6)$, es decir, $17.56492 \leq 17.8771062368 \leq 18.50515$ la aproximación es válida y apropiada.

2.4 Interpolación de mínimos cuadrados

Considere el problema de encontrar un polinomio que se aproxime a un conjunto de datos obtenidos experimentalmente. Se desea que el polinomio sea lo más próximo posible a los datos de manera que el error en la aproximación sea mínimo. Véase la figura 2.1 que muestra una gráfica de valores x y y .

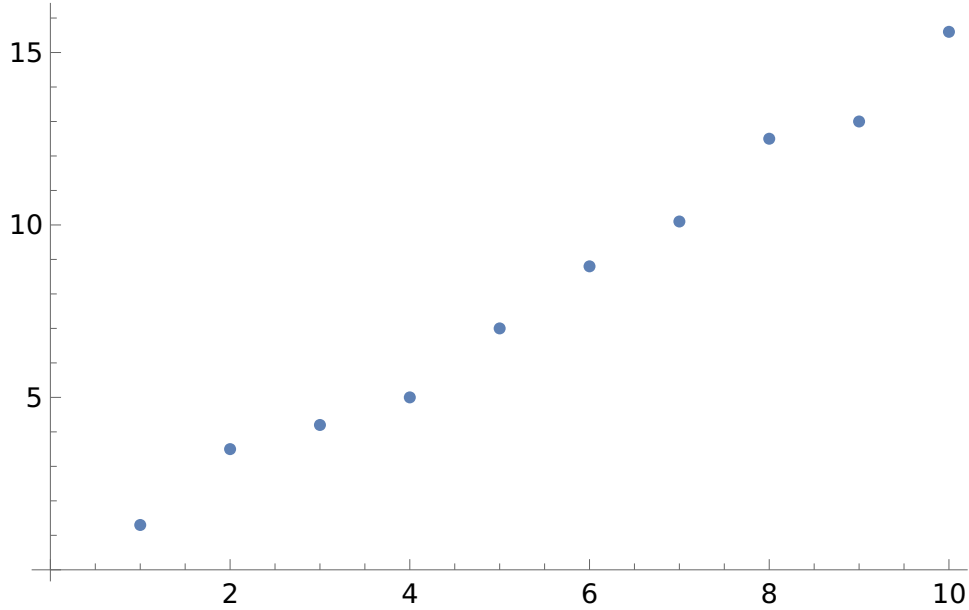


Figura 2.1: Gráfica de puntos Experimentales

De acuerdo a los datos que se encuentran en la figura 2.1, es posible construir un polinomio de grado n , mostrado en la expresión 2.9.

$$P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \cdots + a_nx^n \quad (2.9)$$

Es natural que mientras sea mayor el grado del polinomio, mejor será la aproximación al conjunto de datos. En general, con una cantidad de m datos se puede construir un polinomio de grado máximo $n - 2$. Esto es:

$$n_{max} < m - 1$$

2.4.1 Caso lineal

El problema de determinar la ecuación de la mejor aproximación lineal en el sentido absoluto consiste en hallar los valores de a_0 y a_1 que minimicen

$$E_1(a_0, a_1) = \max_{1 \leq i \leq m} \{|y_i - (a_1x_i + a_0)|\}.$$

A lo anterior comúnmente se le llama problema de **minimax** y no se puede resolver mediante métodos elementales. Otro método para determinar la mejor aproximación lineal implica hallar los valores de a_0 y a_1 que minimicen

$$E_1(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m |y_i - (a_1 x_i + a_0)|$$

Esta cantidad se llama **desviación absoluta**. Para minimizar una función de dos variables, necesitamos igualar a cero sus derivadas parciales y resolver en forma simultánea las ecuaciones resultantes. En el caso de la desviación absoluta, necesitamos hallar a_0 y a_1 tales que

$$0 = \frac{\delta}{\delta a_0} \sum_{i=1}^m |y_i - (a_1 x_i + a_0)|$$

$$0 = \frac{\delta}{\delta a_1} \sum_{i=1}^m |y_i - (a_1 x_i + a_0)|$$

El problema radica en que la función valor absoluto no es derivable en cero y no seríamos capaces de obtener las soluciones de este par de ecuaciones.

El método de mínimos cuadrados para resolver este problema requiere determinar la mejor línea de aproximación cuando el error involucrado es la suma de los cuadrados de las diferencias entre los valores de y en la línea de aproximación y los valores de y dados. Por tanto, hay que encontrar las constantes a_0 y a_1 que reduzcan al mínimo el error de mínimos cuadrados:

$$E_2(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m [y_i - (a_1 x_i + a_0)]^2.$$

Para el cálculo del error se utiliza la diferencia de cada punto con su aproximación. La idea es que cuando se eleva al cuadrado, las diferencias pequeñas se harán más pequeñas y las diferencias grandes se harán más grandes, por lo que el resultado final del error será en su mayoría obtenido por los puntos más lejanos de la aproximación.

El problema general de ajustar la mejor recta con mínimos cuadrados a una colección de datos $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^m$ implica minimizar el error total,

$$E \equiv E_2(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^m [y_i - (a_1 x_i + a_0)]^2,$$

con respecto a los parámetros a_0 y a_1 . Para que haya un mínimo, debemos tener

$$\begin{aligned} \frac{\delta E}{\delta a_0} &= 0 \\ \text{y } \frac{\delta E}{\delta a_1} &= 0, \end{aligned}$$

esto es,

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

y

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

Estas ecuaciones se simplifican en las **ecuaciones normales**:

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

La solución a este sistema de ecuaciones es:

$$a_0 = \frac{\sum_{i=1}^m x_i^2 \sum_{i=1}^m y_i - \sum_{i=1}^m x_i y_i \sum_{i=1}^m x_i}{m \left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^m x_i \right)^2} \quad (2.10)$$

y

$$a_1 = \frac{m \sum_{i=1}^m x_i y_i - \sum_{i=1}^m x_i \sum_{i=1}^m y_i}{m \left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) - \left(\sum_{i=1}^m x_i \right)^2} \quad (2.11)$$

Una vez calculados los valores de a_0 y a_1 , la recta aproximada a los puntos es:

$$P(x) = a_1 x + a_0 \quad (2.12)$$

Ejercicio 2.9 Obtenga la línea de mínimos cuadrados que aproxima a los datos de la tabla 2.9. Utilice el polinomio para encontrar la aproximación $P(6)$.

Solución.

Primero se extiende la tabla con los valores experimentales agregando tres columnas. Dos de ellas tendrán el resultado de las operaciones x_i^2 y $x_i y_i$. La tercera columna se llena al final, después de calcular el valor de a_0 y a_1 . Esta columna contiene el valor de la línea de aproximación para cada punto experimental.

x_i	y_i	x_i^2	$x_i y_i$	$P(x_i) = 1.538x_i - 0.360$
1	1.3	1	1.3	1.18
2	3.5	4	7.0	2.72
3	4.2	9	12.6	4.25
4	5.0	16	20.0	5.79
5	7.0	25	35.0	7.33
6	8.8	36	52.8	8.87
7	10.1	49	70.7	10.41
8	12.5	64	100.0	11.94
9	13.0	81	117.0	13.48
10	15.6	100	156.0	15.02
55	81.0	385	572.4	$E = \sum_{i=1}^{10} (y_i - P(x_i))^2 \approx 2.34$

Tabla 2.5: Valores experimentales

Las ecuaciones normales 2.10 y 2.11 implican que

$$a_0 = \frac{385(81) - 55(572.4)}{10(385) - (55)^2} = -0.360$$

$$a_1 = \frac{10(572.4) - 55(81)}{10(385) - (55)^2} = 1.538$$

por lo que la ecuación de la aproximación lineal por mínimos cuadrados 2.12 queda:

$$P(x) = 1.538x - 0.360$$

Ahora se encuentra la evaluación:

$$P(6) = 1.538(6) - 0.360 = 8.868.$$

Este valor es consistente con los datos contenidos en la tabla 2.9.

2.4.2 Caso no lineal

El problema general de aproximar un conjunto de datos $\{(x_i, y_i) | i = 1, 2, \dots, m\}$, con un polinomio algebraico

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0$$

de grado $n < m - 1$, mediante el procedimiento de mínimos cuadrados se maneja de manera similar. Para disminuir al mínimo el error de mínimos cuadrados, se seleccionan las constantes a_0, a_1, \dots, a_n , para minimizar el error de mínimos cuadrados $E = E_2(a_0, a_1, \dots, a_n)$, donde

$$\begin{aligned} E &= \sum_{i=1}^m (y_i - P_n(x_i))^2 = \sum_{i=1}^m y_i^2 - 2 \sum_{i=1}^m P_n(x_i) y_i + \sum_{i=1}^m (P_n(x_i))^2 \\ &= \sum_{i=1}^m y_i^2 - 2 \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=0}^n a_j x_i^j \right) y_i + \sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=0}^n a_j x_i^j \right)^2 \\ &= \sum_{i=1}^m y_i^2 - 2 \sum_{j=0}^n a_j \left(\sum_{i=1}^m y_i x_i^j \right) + \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^n a_j a_k \left(\sum_{i=1}^m x_i^{j+k} \right). \end{aligned}$$

Igual que en el caso lineal, para reducir al mínimo E es necesario que $\frac{\delta E}{\delta a_j} = 0$ para cada $j = 0, 1, \dots, n$. Así, para cada j , se debe tener

$$0 = \frac{\delta E}{\delta a_j} = -2 \sum_{i=1}^m y_i x_i^j + 2 \sum_{k=0}^n a_k \sum_{i=1}^m x_i^{j+k}.$$

Esto nos da $n + 1$ **ecuaciones normales** con las $n + 1$ incógnitas a_j . Las cuales son

$$\sum_{k=0}^n a_k \sum_{i=1}^m x_i^{j+k} = \sum_{i=1}^m y_i x_i^j, \forall j = 0, 1, \dots, n \quad (2.13)$$

Conviene escribir las ecuaciones de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 a_0 \sum_{i=1}^m x_i^0 + a_1 \sum_{i=1}^m x_i^1 + a_2 \sum_{i=1}^m x_i^2 + \cdots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^n &= \sum_{i=1}^m y_i x_i^0, \\
 a_0 \sum_{i=1}^m x_i^1 + a_1 \sum_{i=1}^m x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^m x_i^3 + \cdots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} &= \sum_{i=1}^m y_i x_i^1, \\
 &\vdots \\
 a_0 \sum_{i=1}^m x_i^n + a_1 \sum_{i=1}^m x_i^{n+1} + a_2 \sum_{i=1}^m x_i^{n+2} + \cdots + a_n \sum_{i=1}^m x_i^{2n} &= \sum_{i=1}^m y_i x_i^n,
 \end{aligned}$$

Puede demostrarse que las ecuaciones normales tienen una solución única, a condición de que las x_i sean distintas.

Ejercicio 2.10 Ajustar los datos de la tabla 2.6 con el polinomio discreto de mínimos cuadrados de segundo grado.

i	x_i	y_i
1	0	1.0000
2	0.25	1.2840
3	0.50	1.6487
4	0.75	2.1170
5	1.00	2.7183

Tabla 2.6: Valores del Ejemplo 2

Solución.

En este problema, $n = 2$, $m = 5$ y las tres ecuaciones normales son:

$$\begin{aligned}
 a_0 \sum_{i=1}^5 x_i^0 + a_1 \sum_{i=1}^5 x_i^1 + a_2 \sum_{i=1}^5 x_i^2 &= \sum_{i=1}^5 y_i x_i^0, \\
 a_0 \sum_{i=1}^5 x_i^1 + a_1 \sum_{i=1}^5 x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^5 x_i^3 &= \sum_{i=1}^5 y_i x_i^1, \\
 a_0 \sum_{i=1}^5 x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^5 x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^5 x_i^4 &= \sum_{i=1}^5 y_i x_i^2,
 \end{aligned}$$

Al realizar las operaciones de las sumatorias quedan los resultados de la tabla 2.7

i	x_i	y_i	x_i^0	x_i^1	x_i^2	x_i^3	x_i^4	$y_i x_i^0$	$y_i x_i^1$	$y_i x_i^2$
1	0	1.0000	1	0	0	0	0	1	0	0
2	0.25	1.2840	1	0.25	0.0625	0.015625	0.00390625	1.284	0.321	0.08025
3	0.50	1.6487	1	0.5	0.25	0.125	0.0625	1.6487	0.82435	0.412175
4	0.75	2.1170	1	0.75	0.5625	0.421875	0.31640625	2.117	1.58775	1.1908125
5	1.00	2.7183	1	1	1	1	1	2.7183	2.7183	2.7183
	2.5	8.768	5	2.5	1.875	1.5625	1.3828125	8.768	5.4514	4.4015375

Tabla 2.7: Resultados del Ejemplo 2

Con estos resultados se puede formar el sistema de ecuaciones, dado que $n = 2$ se debe encontrar el valor de los coeficientes a_0 , a_1 y a_2 resolviendo el sistema de ecuaciones 3×3 .

$$5a_0 + 2.5a_1 + 1.875a_2 = 8.7680,$$

$$2.5a_0 + 1.875a_1 + 1.5625a_2 = 5.4514,$$

$$1.875a_0 + 1.5625a_1 + 1.3828a_2 = 4.4015$$

Después de resolver el sistema de ecuaciones, los valores de las constantes son:

$$a_0 = 1.005075519, a_1 = 0.8646758482, a_2 = 0.8431641518$$

Por lo que el polinomio de mínimos cuadrados de segundo grado queda:

$$P(x) = 1.0051 + 0.86468x + 0.84316x^2$$

El error total se obtiene de la siguiente forma

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

Para facilitar los cálculos se hace la tabla 2.8.

i	x_i	y_i	$P(x_i)$	$(y - P(x_i))^2$
1	0	1.0000	1.0051	2.601×10^{-5}
2	0.25	1.2840	1.2740	1×10^{-4}
3	0.50	1.6487	1.6482	2.5×10^{-7}
4	0.75	2.1170	2.1279	1.1881×10^{-4}
5	1.00	2.7183	2.7129	2.916×10^{-5}

Tabla 2.8: Calculo del error de la aproximación del Ejemplo 2

Por lo tanto, el error vale

$$E = 2.74 \times 10^{-4}$$

el cual es el menor error que se puede obtener utilizando un polinomio de segundo grado.

2.5 Interpolación inversa

La interpolación inversa se utiliza en los casos en los que se tiene un conjunto de datos $(x, f(x))$ y se desea obtener un polinomios de interpolación. A diferencia de los métodos anteriores en los que se requería el valor del polinomio de aproximación para cierto valor de x , considere que se requiere aproximar el valor de x para cierto valor de $P(x)$. Esto es lo que se denomina como interpolación inversa.

La idea consiste en encontrar un polinomio de aproximación mediante algún método numérico y luego encontrar el valor de x para cierto valor de $P(x)$. Este problema se transforma en la búsqueda de raíces de un polinomio de grado n .

Ejercicio 2.11 Retomemos el ejemplo 2.3. Se utilizan entonces los mismos datos que se muestran en la tabla 2.3. En esta ocasión, se encontrará una aproximación al valor x con el que $P(x) = 0.5$.

x	$f(x)$
1.0	0.7651977
1.3	0.6200860
1.6	0.4554022
1.9	0.2818186
2.2	0.1103623

Tabla 2.9: Datos del Ejemplo 2.3

Utilizando el polinomio obtenido en el ejemplo 2.3 se tiene:

$$P_4(x) = 0.7651977 - 0.4837057 \cdot (x - 1.0) - 0.1087339 \cdot (x - 1.0)(x - 1.3) \\ + 0.0658784 \cdot (x - 1.0)(x - 1.3)(x - 1.6) + 0.0018251 \cdot (x - 1.0)(x - 1.3)(x - 1.6)(x - 1.9)$$

Por simplicidad, se reduce la expresión polinomial:

$$P_4(x) = 0.977735 + 0.0733914x - 0.343047x^2 + 0.0552928x^3 + 0.0018251x^4$$

Ahora lo que se debe hacer es sustituir el valor de x_p e igualar el polinomio con $P(x_p)$, esto es:

$$0.977735 + 0.0733914x_p - 0.343047x_p^2 + 0.0552928x_p^3 + 0.0018251x_p^4 = 0.5$$

Dada esta expresión, lo que se debe hacer es encontrar las raíces del polinomio (en este caso son 4 dado que el polinomio es de cuarto grado), dichas raíces son las siguientes:

$$x_1 = -35.6013$$

$$x_2 = -1.00849$$

$$x_3 = 1.52113$$

$$x_4 = 4.79289$$

Dados estos resultados, el que resulta consistente con los valores originales de la tabla 2.3, se puede saber que el valor adecuado resulta ser $x_3 = 1.52113$.

2.6 Ejercicios

Utilice los métodos vistos en este capítulo para construir un polinomio de interpolación del mayor grado posible. Use el polinomio para aproximar el valor especificado.

1. Aproximar a $f(8.4)$ si $f(8.1) = 16.94410$, $f(8.3) = 17.56492$, $f(8.6) = 18.50515$ y $f(8.7) = 18.82091$.
2. Aproximar a $f(0.9)$ si $f(0.6) = -0.17694460$, $f(0.7) = 0.01375227$, $f(0.8) = 0.22363362$ y $f(1.0) = 0.65809197$.
3. Aproximar a $f(0.43)$ si $f(0) = 1$, $f(0.25) = 1.64872$, $f(0.5) = 2.71828$ y $f(0.75) = 4.48169$.

4. Aproximar a $f(0)$ si $f(-0.5) = 1.93750$, $f(-0.25) = 1.33203$, $f(0.25) = 0.800781$ y $f(0.5) = 0.687500$.
5. Aproximar a $f(-\frac{1}{3})$ si $f(-0.75) = -0.07181250$, $f(-0.5) = -0.02475000$, $f(-0.25) = 0.33493750$ y $f(0) = 1.10100000$.
6. Aproximar a $f(0.25)$ si $f(0.1) = -0.62049958$, $f(0.2) = -0.28398668$, $f(0.3) = 0.00660095$ y $f(0.4) = 0.24842440$.
7. Aproximar a $f(-\frac{1}{3})$ si $f(-0.75) = -0.07181250$, $f(-0.5) = -0.02475000$, $f(-0.25) = 0.33493750$ y $f(0) = 1.10100000$.
8. Aproximar a $f(0.25)$ si $f(0.1) = -0.62049958$, $f(0.2) = -0.28398668$, $f(0.3) = 0.00660095$ y $f(0.4) = 0.24842440$.
9. Aproximar a $P(0)$.

x	$f[x]$
-0.1	5.30
0.1	2.00
0.2	3.19
0.3	1.00

10. Aproximar a $P(0.5)$.

x	$f[x]$
0.0	-6.00000
0.1	-5.89483
0.3	-5.65014
0.6	-5.17788
1.0	-4.28172

3. Solución de ecuaciones

Uno de los problemas básicos de la aproximación numérica es la búsqueda de raíces. Consiste en obtener una raíz, o una solución, de una ecuación de la forma $f(x) = 0$ para una función dada f . Una raíz de esta ecuación es llamada también un cero de la función f .

3.1 Método de Newton Raphson

El método de Newton se basa en los polinomios de Taylor, este tipo particular de deducción produce no sólo el método, sino también una cota para el error de aproximación.

Supongamos que $f \in C^2[a, b]$. Sea $p_0 \in [a, b]$ una aproximación de p tal que $f'(p_0) \neq 0$ y $|p - p_0|$ es "pequeño". Considere el primer polinomio de Taylor para $f(x)$ expandido alrededor de p_0 y evaluado en $x = p$.

$$f(p) = f(p_0) + (p - p_0)f'(p_0) + \frac{(p - p_0)^2}{2}f''(\xi(p))$$

donde $\xi(p)$ está entre p y p_0 . Dado que $f(p) = 0$ esta ecuación da como resultado

$$0 = f(p_0) + (p - p_0)f'(p_0) + \frac{(p - p_0)^2}{2}f''(\xi(p))$$

El método de Newton se obtiene suponiendo que, como $|p - p_0|$ es tan pequeño, el término que contiene $(p - p_0)^2$ es mucho menor y que

$$0 \approx f(p_0) + (p - p_0)f'(p_0)$$

Despejando p de esta ecuación obtenemos

$$p \approx p_0 - \frac{f(p_0)}{f'(p_0)} \equiv p_1$$

Esto nos prepara para introducir el método de Newton, el cual comienza con una aproximación inicial p_0 y genera la sucesión $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$ definida por

Teorema 3.1.1 Dada una función $f(x)$ definida $\forall x \in C$ donde $C \subseteq D(f)$. Además $f(x)$ es derivable y $f'(x) \neq 0 \forall x \in C$. Sea $p_0 \in \mathbb{R}$ y $p_0 \in C$ entonces:

$$p_n = p_{n-1} - \frac{f(p_{n-1})}{f'(p_{n-1})}, n \geq 1$$

La figura 3.1 muestra gráficamente como se obtienen las aproximaciones usando tangentes sucesivas. Comenzando con la aproximación inicial p_0 , la aproximación p_1 es la intersección con el eje x de la recta tangente a la gráfica de f en $(p_0, f(p_0))$. La aproximación p_2 es la intersección con el eje x de la recta tangente a la gráfica de f en $(p_1, f(p_1))$ y así sucesivamente. El algoritmo 2 sigue ese procedimiento.

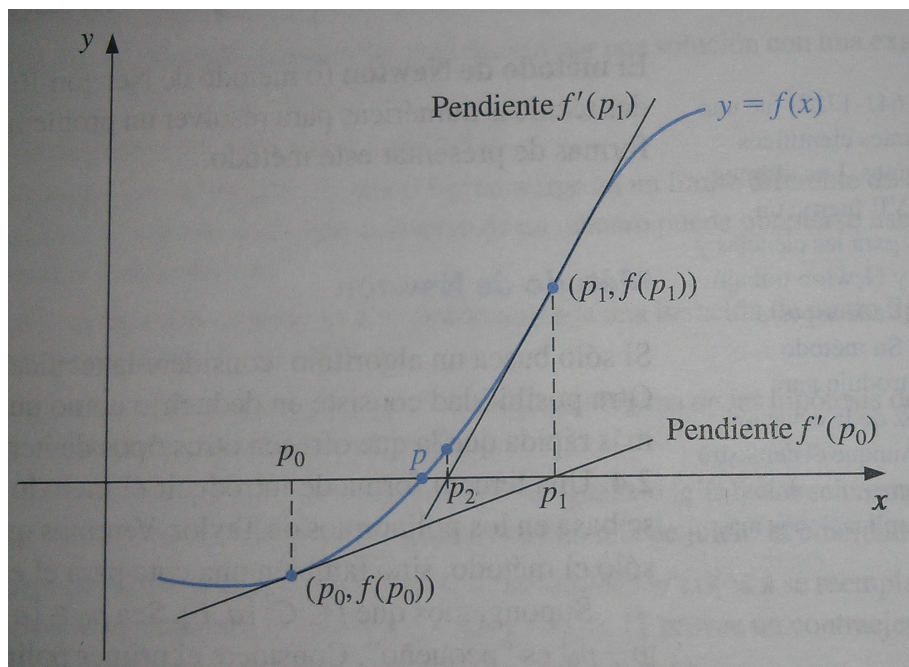


Figura 3.1: Método de Newton-Raphson

Algoritmo 2: Método de Newton-Raphson

```

1 Newton ( $p_0, TOL, N_0$ ) begin
2    $i \leftarrow 1$ 
3   while  $i \leq (N_0)$  do
4      $p \leftarrow p_0 - f(p_0)/f'(p_0)$ 
5     if  $|p - p_0| < TOL$  then
6       Salida ( $p$ )
7      $i \leftarrow i + 1$ 
8      $p_0 \leftarrow p$ 
9   Salida ("El método fracasó después de  $N_0$  iteraciones")

```

Ejercicio 3.1 Considere la función $f(x) = \cos(x) - x$. Aproxime una raíz de f utilizando el método de Newton.

Solución.

Para resolver el problema es necesario encontrar la derivada de $f(x)$, plantear la expresión del teorema 3.1.1 específica de este problema, elegir un valor inicial p_0 y realizar las aproximaciones hasta cumplir con la tolerancia 10^{-2} .

Planteamiento

Condiciones:

- $f'(x) = -\sin p_{n-1} - 1$
- f tiene la menos una raíz
- $p_n = p_{n-1} - \frac{f(p_{n-1})}{f'(p_{n-1})} = p_{n-1} - \frac{\cos p_{n-1} - p_{n-1}}{-\sin p_{n-1} - 1} \forall n \geq 1$
- Se define $p_0 = \pi/4$

Desarrollo

Evaluando p_0 en la expresión para p_n se obtienen progresivamente las aproximaciones posteriores mostradas en la tabla 3.1.

i	Newton
1	0.7395361335
2	0.7390851781
3	0.7390851332

Tabla 3.1: Iteraciones para Ejemplo 3.1.

Se obtiene una excelente aproximación con $n = 3$. Sería razonable esperar que este resultado tenga una precisión hasta el número de cifras enumeradas debido a la coincidencia de p_2 y p_3 .

Resultado

Se estima el error de la aproximación mediante la ecuación:

$$ER = \frac{|p_n - p_{n-1}|}{|p_n|} \times 100\%$$

Por lo tanto, el error de la aproximación obtenida por el método de Newton es:

$$ER = \frac{|p_N - p_{N-1}|}{|p_N|} = \frac{|0.7390851332 - 0.7390851781|}{|0.7390851332|} \times 100\% = 6.0751 \times 10^{-8}$$

El resultado completo del ejercicio es:

$$p_3 = 0.7390851332$$

$$ER = 6.075 \times 10^{-8} \%$$

Ejercicios

1. Aplique el método de Newton para obtener soluciones con una exactitud de 10^{-4} para los siguientes problemas.
 - a) $x^3 - 2x^2 - 5 = 0$, $x \in [1, 4]$
 - b) $x - \cos x = 0$, $x \in [0, \pi/2]$
 - c) $x^3 + 3x^2 - 1 = 0$, $x \in [-3, -2]$
 - d) $x - 0.8 - 0.2 \sin x = 0$, $x \in [0, \pi/2]$
2. Aplique el método de Newton para obtener soluciones con una exactitud de 10^{-5} para los siguientes problemas.
 - a) $e^x + 2^{-x} + 2 \cos x - 6 = 0$, para $1 \leq x \leq 2$
 - b) $\ln(x-1) + \cos(x-1) = 0$, para $1.3 \leq x \leq 2$
 - c) $2x \cos(2x) - (x-2)^2 = 0$ para $2 \leq x \leq 3$ y $3 \leq x \leq 4$
 - d) $(x-2)^2 - \ln x = 0$ para $1 \leq x \leq 2$ y $e \leq x \leq 4$
 - e) $e^x - 3x^2 = 0$ para $0 \leq x \leq 1$, $3 \leq x \leq 5$
 - f) $\sin x - e^{-x} = 0$ para $0 \leq x \leq 1$, $3 \leq x \leq 4$ y $6 \leq x \leq 7$
3. Con el método de Newton resuelva la ecuación, con $p_0 = \pi/2$

$$0 = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}x^2 - x \sin x - \frac{1}{2} \cos 2x$$

Itere el método de Newton hasta llegara una exactitud de 10^{-5} . Explique porque el resultado parece inusual para el método de Newton. También resuelva la ecuación con $p_0 = 5\pi$ y $p_0 = 10\pi$.

3.2 Método de la secante

El método de Newton es una técnica muy poderosa, pero presenta un grave problema: la necesidad de conocer el valor de la derivada de f en cada aproximación. Con frecuencia es más difícil determinar $f'(x)$ y se requieren más operaciones aritméticas para calcularla que para obtener $f(x)$.

Si queremos evitar el problema de evaluar la derivada en el método de Newton, introducimos una pequeña variación. Por definición:

$$f'(p_{n-1}) = \lim_{x \rightarrow p_{n-1}} \frac{f(x) - f(p_{n-1})}{x - p_{n-1}}$$

Si p_{n-2} está cerca de p_{n-1} , entonces:

$$f'(p_{n-1}) \approx \frac{f(p_{n-2}) - f(p_{n-1})}{p_{n-2} - p_{n-1}} = \frac{f(p_{n-1}) - f(p_{n-2})}{p_{n-1} - p_{n-2}}$$

Al aplicar esta aproximación para $f'(p_{n-1})$ en la fórmula de Newton, se obtiene el teorema 3.2.1.

Teorema 3.2.1 — Método de la secante. Dada una función $f(x)$ definida $\forall x \in C$ donde $C \subseteq D(f)$. Si $p_0 \approx p_1 \wedge f(p_n) - f(p_{n-1}) \neq 0$ entonces:

$$p_n = p_{n-1} - \frac{f(p_{n-1})(p_{n-1} - p_{n-2})}{f(p_{n-1}) - f(p_{n-2})}, \forall n \geq 2$$

La técnica que utiliza el teorema recibe el nombre de método de la secante y se representa mediante el algoritmo 3 (Vea la figura 3.2). Comenzando con las dos aproximaciones iniciales p_0 y p_1 , la aproximación p_2 es la intersección con el eje x de la recta que une $(p_0, f(p_0))$ y $(p_1, f(p_1))$. La aproximación de p_3 es la intersección con el eje x de la recta que une $(p_1, f(p_1))$ y $(p_2, f(p_2))$, y así sucesivamente. Observe que solo es necesaria la evaluación de la función en cada paso del método de la secante después de que se ha determinado p_2 . En contraste, cada paso del método de Newton requiere una evaluación de la función y su derivada.

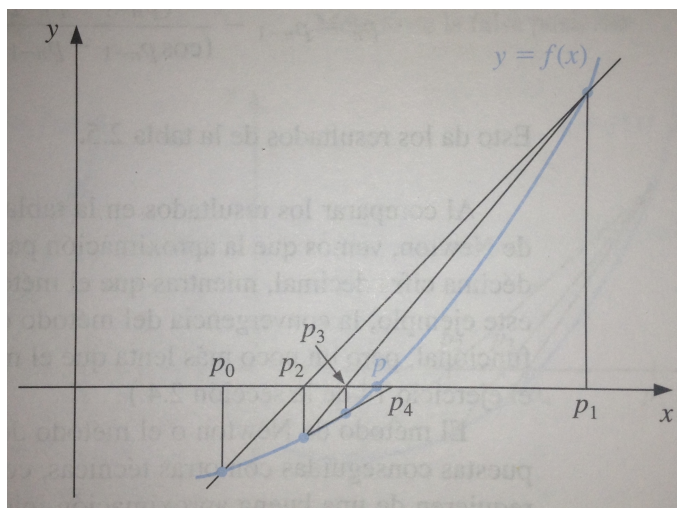


Figura 3.2: Método de la Secante

Algoritmo 3: Método de la Secante

```

1 Secante ( $p_0, p_1, TOL, N_0$ ) begin
2    $i \leftarrow 2$ 
3    $q_0 \leftarrow f(p_0)$ 
4    $q_1 \leftarrow f(p_1)$ 
5   while  $i \leq N_0$  do
6      $p \leftarrow p_1 - q_1(p_1 - p_0)/(q_1 - q_0)$ 
7     if  $|p - p_1| < TOL$  then
8        $\quad$  Salida ( $p$ )
9      $i \leftarrow i + 1$ 
10     $p_0 \leftarrow p_1$ 
11     $q_0 \leftarrow q_1$ 
12     $p_1 \leftarrow p$ 
13     $q_1 \leftarrow f(p)$ 
14  Salida ("El método fracasó después de  $N_0$  iteraciones")

```

Ejercicio 3.2 Utilice el método de la secante para encontrar una aproximación a una raíz de la expresión $x = \cos x$. Considere que se sabe que la raíz está cercana a $p_0 = \pi/4$. Considere una tolerancia 10^{-2} .

Planteamiento

- $f(x) = x - \cos x$ es continua en $\forall x \in \mathbb{R}$
- f tiene la menos una raíz
- $p_n = p_{n-1} - \frac{(p_{n-1} - \cos p_{n-1})(p_{n-1} - p_{n-2})}{(p_{n-1} - \cos p_{n-1}) - (p_{n-2} - \cos p_{n-2})}, \forall n \geq 2$

Desarrollo

Sea $p_0 = \pi/4$ y se elige $p_1 = \pi/2$. Con esto se puede desarrollar la sucesión numérica del método y presentar los valores la siguiente tabla.

i	p_i	$f(p_i)$
0	$\frac{\pi}{4}$	0.0782914
1	$\frac{\pi}{2}$	1.5708
2	0.744199	0.00856833
3	0.739665	0.000971273
4	0.739086	1.09333×10^{-6}

Dado que se cumple:

$$|p_4 - p_3| = 0.000579618 < 10^{-2}$$

entonces la aproximación p_4 cumple la tolerancia y se acepta como aproximación a la raíz de $f(x)$.

Resultado

$$p_4 = 0.739086$$

$$ER = \frac{|p_4 - p_3|}{|p_4|} \times 100\% = \frac{|0.739086 - 0.739665|}{|0.739086|} \times 100\% = 0.691834\%$$

Ejercicios

1. Aplique el método de la secante para obtener soluciones con una exactitud de 10^{-4} para los siguientes problemas.
 - a) $x^3 - 2x^2 - 5 = 0, x \in [1, 4]$
 - b) $x - \cos x = 0, x \in [0, \pi/2]$
 - c) $x^3 + 3x^2 - 1 = 0, x \in [-3, -2]$
 - d) $x - 0.8 - 0.2 \sin x = 0, x \in [0, \pi/2]$
2. Aplique el método de la secante para obtener soluciones con una exactitud de 10^{-5} para los siguientes problemas.
 - a) $e^x + 2^{-x} + 2 \cos x - 6 = 0$, para $1 \leq x \leq 2$
 - b) $\ln(x-1) + \cos(x-1) = 0$, para $1.3 \leq x \leq 2$
 - c) $2x \cos(2x) - (x-2)^2 = 0$ para $2 \leq x \leq 3$ y $3 \leq x \leq 4$
 - d) $(x-2)^2 - \ln x = 0$ para $1 \leq x \leq 2$ y $e \leq x \leq 4$
 - e) $e^x - 3x^2 = 0$ para $0 \leq x \leq 1, 3 \leq x \leq 5$
 - f) $\sin x - e^{-x} = 0$ para $0 \leq x \leq 1, 3 \leq x \leq 4$ y $6 \leq x \leq 7$

3.3 Convergencia acelerada**3.3.1 Método de Aitken**

El método Δ^2 de Aitken sirve para acelerar la convergencia de una sucesión que sea linealmente convergente, prescindiendo de su origen o aplicación. Suponga que $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$ es una sucesión linealmente convergente con un límite p . Para motivar la construcción de una sucesión $\{\hat{p}_n\}_{n=0}^{\infty}$ que converja más rápidamente a p que $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$.

Teorema 3.3.1 — método de Aitken. El método de Aitken se basa en la suposición de que la sucesión $\{\hat{p}_n\}_{n=0}^{\infty}$ definida por:

$$\hat{p}_n = p_n - \frac{(p_{n+1} - p_n)^2}{p_{n+2} - 2p_{n+1} + p_n} \quad (3.1)$$

converge más rápidamente a p que la sucesión original $\{p_n\}_{n=0}^{\infty}$.

Al aplicar una modificación del método Δ^2 de Aitken a una sucesión linealmente convergente obtenida mediante la iteración de punto fijo, podemos acelerar la convergencia a cuadrática. Este procedimiento es el método de Steffensen y difiere un poco de la aplicación directa del método Δ^2 de Aitken (Teorema 3.1) a la sucesión de iteraciones de punto fijo que convergen linealmente. El método de Aitken construye los términos en el orden:

$$\begin{aligned}
 p_0, & & p_1 = g(p_0), & & p_2 = g(p_1), & & \hat{p} = \{\Delta^2\}(p_0), \\
 p_3 = g(p_2), & & \hat{p}_1 = \{\Delta^2\}(p_1), \dots
 \end{aligned}$$

3.3.2 Método de Steffensen

El método de Steffensen construye los mismos primeros cuatro términos p_0, p_1, p_2 y \hat{p}_0 . No obstante, en este paso se supone que \hat{p}_0 es una mejor aproximación a p que p_2 y aplica la iteración de punto fijo a \hat{p}_0 en lugar de a p_2 . Al usar esta notación, la sucesión generada es:

$$\begin{aligned}
 p_0^{(0)}, & & p_1^{(0)} = g(p_0^{(0)}), & & p_2^{(0)} = g(p_1^{(0)}), & & p_0^{(1)} = \{\Delta^2\}(p_0^{(0)}), \\
 & & p_1^{(1)} = g(p_0^{(1)}), & & p_2^{(1)} = g(p_1^{(1)}), & & p_0^{(2)} = \{\Delta^2\}(p_0^{(1)}), \\
 & & \vdots & & & &
 \end{aligned}$$

Cada tercer término de la sucesión de Steffensen es generada por la ecuación (3.1); los demás usan la iteración de punto fijo en el término anterior. El procedimiento se describe en el algoritmo 4.

Algoritmo 4: Método de Steffensen

```

1 Steffensen ( $p_0, TOL, N_0$ ) begin
2    $i \leftarrow 1$ 
3   while  $i \leq N_0$  do
4      $p_1 = g(p_0)$ 
5      $p_2 = g(p_1)$ 
6      $p = p_0 - \frac{(p_1 - p_0)^2}{p_2 - 2p_1 + p_0}$ 
7     if  $|p - p_0| < TOL$  then
8        $\text{Salida}(p)$ 
9      $i \leftarrow i + 1$ 
10   $\text{Salida}$  ("El método fracasó después de  $N_0$  iteraciones")

```

Ejercicio 3.3 Utilice el método de Steffensen y la convergencia acelerada de Aikten para encontrar una aproximación a una raíz de la función $f(x) = x - \cos x$. Considere que se sabe que la raíz está cercana a $p_0 = \pi/4$. Considere una tolerancia 10^{-2} .

Planteamiento

- $f(x) = x - \cos x$ es continua en $\forall x \in \mathbb{R}$
- f tiene la menos una raíz

- Se deben obtener todas las funciones g a partir de $x - \cos x = 0$

$g_1 :$

$$x = \cos x$$

$$g_1(x) = \cos x$$

$g_2 :$

$$x = \arccos x$$

$$g_2(x) = \arccos x$$

Desarrollo

Se define $p_0^{(0)} = \pi/4$.

$$p_0^{(0)} = \pi/4, \quad p_1^{(0)} = g(p_0^{(0)}) =, \quad p_2^{(0)} = g(p_1^{(0)}), \quad p_0^{(1)} = \{\Delta^2\}(p_0^{(0)}),$$

Para desarrollar la sucesión numérica del método, se debe elegir una función g para realizar las evaluaciones correspondientes en la expresión acelerada de Aitken (3.1). Si la sucesión converge con la función g evaluada se habrá encontrado la aproximación a la raíz de f . Por otro lado, si g no converge entonces se debe elegir otra función g y repetir el procedimiento. En este caso se comienza el desarrollo con la función g_1 y los resultados se muestran en la tabla:

i	$p_0^{(i)}$	$p_1^{(i)}$	$p_2^{(i)}$	$\hat{p}_0^{(i+1)}$
0	$\frac{\pi}{4}$	0.707107	0.760245	0.738761
1	0.738761	0.739304	0.738938	0.739085
2	0.739085			

Dado que se cumple:

$$\left| p_0^{(2)} - p_0^{(1)} \right| = 0.000323 < 10^{-2}$$

entonces la aproximación p_4 cumple la tolerancia y se acepta como aproximación a la raíz de $f(x)$.

Resultado

$$p_2 = 0.739085$$

$$ER = 0.04391 \%$$

Ejercicios

1. Utilice el método de Steffensen para encontrar una aproximación a la raíz de las función indicada en cada inciso. Considere una exactitud de 10^{-5} para la realización de los cálculos.
 - a) $2 + \sin x - x = 0$ y utilizar $[2, 3]$
 - b) $x^3 - 2x - 5$ y utilizar $[2, 3]$
 - c) $3x^2 - e^x = 0$
 - d) $x - \cos x = 0$

2. Encuentre todos los ceros (raíces) de $f(x) = x^2 + 10\cos x$ aplicando el método de Steffensen. Considere una exactitud de 10^{-4} .
3. Un objeto que cae verticalmente en el aire está sujeto a una resistencia viscosa y también a la fuerza de gravedad. Suponga que dejamos caer el objeto de masa m desde una altura s_0 y que la altura del objeto después de t segundos es:

$$s(t) = s_0 - \frac{mg}{k}t + \frac{m^2g}{k^2}(1 - e^{-kt/m})$$

donde $g = 32.17$ pies/ s^2 y k representa el coeficiente de resistencia del aire. Suponga que $s_0 = 300$ pies, $m = 0.25$ lb y que $k = 0.1$ lb-s/pies. Calcule, con una exactitud de 0.001 s, el tiempo que tarda la masa en caer al suelo.

4. Solución de sistemas de ecuaciones lineales

4.1 Métodos iterativos

4.1.1 Método de Jacobi

En esta sección describiremos los métodos iterativos de Jacobi y Gauss-Seidel, métodos clásicos que datan de fines del siglo XVIII. Los métodos iterativos rara vez se usan para resolver sistemas lineales de pequeña dimensión, ya que el tiempo necesario para conseguir una exactitud satisfactoria rebasa el que requieren los métodos directos, como el de eliminación gaussiana. Sin embargo, en el caso de sistemas grandes con un alto porcentaje de elementos cero, son eficientes tanto en almacenamiento de computadora como en el tiempo de cálculo. Este tipo de sistemas representan constantemente en los análisis de circuitos y en la solución numérica de problemas con valores en la frontera y ecuaciones diferenciales parciales.

Un método iterativo con el cual se resuelve el sistema lineal $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ de dimensiones $n \times n$ comienza con una aproximación inicial $\mathbf{x}^{(0)}$ a la solución \mathbf{x} y genera una sucesión de vectores $\{\mathbf{x}^{(k)}\}_{k=0}^{\infty}$ que convergen en \mathbf{x} .

El método iterativo de Jacobi se obtiene resolviendo la i -ésima ecuación en $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ para x_i , lo que resulta en (siempre que $a_{ii} \neq 0$)

$$x_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left(-\frac{a_{ij}x_j}{a_{ii}} \right) + \frac{b_i}{a_{ii}}, \text{ para } i = 1, 2, \dots, n.$$

Para cada $k \geq 1$, se generan las componentes $x_i^{(k)}$ de $\mathbf{x}^{(k)}$ a partir de las componentes de $\mathbf{x}^{(k-1)}$ con

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \left(-a_{ij}x_j^{(k-1)} \right) + b_i \right], \text{ para } i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.1)$$

Ejercicio 4.1 El sistema lineal $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ dado por

$$\begin{aligned} E_1: & 10x_1 - x_2 + 2x_3 = 6, \\ E_2: & -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 = 25, \\ E_3: & 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 = -11, \\ E_4: & 3x_2 - x_3 + 8x_4 = 15 \end{aligned}$$

tiene la solución única $\mathbf{x} = (1, 2, -1, 1)^t$. Utilice el método iterativo de Jacobi para encontrar aproximaciones $\mathbf{x}^{(k)}$ a \mathbf{x} comenzando con $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0, 0, 0)^t$ hasta

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|_\infty < 10^{-2}.$$

Primero debemos despejar x_i de la ecuación E_i para cada $i = 1, 2, 3, 4$ para obtener

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{10}x_2 - \frac{1}{5}x_3 + \frac{3}{5}, \\ x_2 &= -\frac{1}{11}x_1 + \frac{1}{11}x_3 - \frac{3}{11}x_4 + \frac{25}{11}, \\ x_3 &= -\frac{1}{5}x_1 + \frac{1}{10}x_2 + \frac{1}{10}x_4 - \frac{11}{10}, \\ x_4 &= -\frac{3}{8}x_2 + \frac{1}{8}x_3 + \frac{15}{8}, \end{aligned}$$

a partir de la aproximación inicial $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0, 0, 0)^t$ tenemos que $\mathbf{x}^{(1)}$ está dada por

$$\begin{aligned} x_1^{(1)} &= \frac{1}{10}x_2^{(0)} - \frac{1}{5}x_3^{(0)} + \frac{3}{5} = 0.6000, \\ x_2^{(1)} &= -\frac{1}{11}x_1^{(0)} + \frac{1}{11}x_3^{(0)} - \frac{3}{11}x_4^{(0)} + \frac{25}{11} = 2.2727, \\ x_3^{(1)} &= -\frac{1}{5}x_1^{(0)} + \frac{1}{10}x_2^{(0)} + \frac{1}{10}x_4^{(0)} - \frac{11}{10} = -1.100, \\ x_4^{(1)} &= -\frac{3}{8}x_2^{(0)} + \frac{1}{8}x_3^{(0)} + \frac{15}{8} = 1.875, \end{aligned}$$

Las siguientes iteraciones $\mathbf{x}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, x_3^{(k)}, x_4^{(k)})^t$, se generan de manera semejante y se producen los valores que se muestran en la tabla 4.1.

k	0	1	2	3	4	5	6	7	8
$x_1^{(k)}$	0.0000	0.6000	1.0473	0.9326	1.0152	0.9890	1.0032	0.9981	1.0006
$x_2^{(k)}$	0.0000	2.2727	1.7159	2.0530	1.9537	2.0114	1.9922	2.0023	1.9987
$x_3^{(k)}$	0.0000	-1.1000	-0.8052	-1.0493	-0.9681	-1.0103	-0.9945	-1.0020	-0.9990
$x_4^{(k)}$	0.0000	1.8750	0.8852	1.1309	0.9739	1.0214	0.9944	1.0036	0.9989

Tabla 4.1: Iteraciones del Ejercicio 4.1

El método termina debido a que ya se ha cumplido con la tolerancia 10^{-2} para los valores obtenidos en la última iteración.

$$\|\mathbf{x}^{(8)} - \mathbf{x}^{(7)}\| = 0.00708715 < 10^{-2}$$

En el algoritmo 5 se implementa el método iterativo de Jacobi. El método resuelve el sistema $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ dada una aproximación inicial $\mathbf{x}^{(0)}$.

Ejercicios

1. Obtenga las dos primeras iteraciones del método de Jacobi para los siguientes sistemas lineales, use $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$.

Algoritmo 5: Método iterativo de Jacobi

Entrada : $n, A = [a_{ij}]$, donde $1 \leq i, j \leq n$, $b = [b_i]$ donde $1 \leq i \leq n$, $XO = x^{(0)}$, TOL y N

Salida : x_1, x_2, \dots, x_n

```

1 begin
2   k = 1
3   while k ≤ N do
4     for i = 1 to n do
5       
$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left[ - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (a_{ij} XO_j) + b_i \right]$$

6     if  $\|x - XO\| < TOL$  then
7       Salida( $x_1, x_2, \dots, x_n$ )
8     fin
9     k = k + 1
10    for i = 1 to n do
11       $XO_i = x_i$ 
12  Salida(Número máximo de iteraciones excedido.)

```

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

a) $3x_1 + 6x_2 + 2x_3 = 0$

$$3x_1 + 3x_2 + 7x_3 = 4$$

$$10x_1 - x_2 = 9$$

b) $-x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 7$

$$-2x_2 + 10x_3 = 6$$

$$10x_1 + 5x_2 = 6$$

c) $5x_1 + 10x_2 - 4x_3 = 25$

$$-4x_2 + 8x_3 - x_4 = -11$$

$$-x_3 + 5x_4 = -11$$

$$4x_1 + x_2 + x_3 + x_5 = 6$$

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

d) $2x_1 + x_2 + 5x_3 - x_4 - x_5 = 6$

$$-x_1 - x_2 - x_3 + 4x_4 = 6$$

$$2x_2 - x_3 + x_4 + 4x_5 = 6$$

2. Obtenga las dos primeras iteraciones del método de Jacobi para los siguientes sistemas lineales, use $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$.

$$4x_1 + x_2 - x_3 = 5$$

a) $-x_1 + 3x_2 + x_3 = -4$

$$2x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 1$$

$$-2x_1 + x_2 + \frac{1}{2}x_3 = 4$$

b) $x_1 - 2x_2 - \frac{1}{2}x_3 = -4$

$$x_2 + 2x_3 = 0$$

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

c) $x_1 + 4x_2 - x_3 - x_4 = -1$

$$-x_1 - x_2 + 5x_3 + x_4 = 0$$

$$x_1 - x_2 + x_3 + 3x_4 = 1$$

$$4x_1 - x_2 - x_4 = 0$$

$$-x_1 + 4x_2 - x_3 - x_5 = 5$$

$$-x_2 + 4x_3 - x_6 = 0$$

d) $-x_1 + 4x_4 - x_5 = 6$

$$-x_2 - x_4 + 4x_5 - x_6 = -2$$

$$-x_3 - x_5 + 4x_6 = 6$$

4.1.2 Método de Gauss-Seidel

Si se analiza la expresión 4.1 se puede observar una posible mejora del algoritmo 5. Utilizamos las componentes de $\mathbf{x}^{(k-1)}$ para calcular todas las componentes $x_i^{(k)}$ de $\mathbf{x}^{(k)}$. Pero para $i > 1$, ya se calcularon los componentes $x_1^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ de $\mathbf{x}^{(k)}$, y probablemente sean mejores aproximaciones a las soluciones reales x_1, \dots, x_{i-1} que $x_1^{(k-1)}, \dots, x_{i-1}^{(k-1)}$. Entonces parece más razonable calcular $x_i^{(k)}$ por medio de los valores calculados más recientemente. Esto es, podemos usar

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[- \sum_{j=1}^{i-1} (a_{ij} x_j^{(k)}) - \sum_{j=i+1}^n (a_{ij} x_j^{(k-1)}) + b_i \right], \quad (4.2)$$

para cada $i = 1, 2, \dots, n$, en vez de la ecuación 4.1. A esta modificación se le llama **método iterativo de Gauss-Seidel**.

Ejercicio 4.2 Utilice el método iterativo Gauss-Seidel para encontrar las soluciones aproximadas de

$$\begin{aligned} 10x_1 - x_2 + 2x_3 &= 6, \\ -x_1 + 11x_2 - x_3 + 3x_4 &= 25, \\ 2x_1 - x_2 + 10x_3 - x_4 &= -11, \\ 3x_2 - x_3 + 8x_4 &= 15 \end{aligned}$$

comenzando con $\mathbf{x} = (0, 0, 0, 0)^t$ e iterando hasta 10^{-2} .

Solución.

En primer lugar se escribe el sistema de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} x_1^{(k)} &= \frac{1}{10} x_2^{(k-1)} - \frac{1}{5} x_3^{(k-1)} + \frac{3}{5}, \\ x_2^{(k)} &= -\frac{1}{11} x_1^{(k)} + \frac{1}{11} x_3^{(k-1)} - \frac{3}{11} x_4^{(k-1)} + \frac{25}{11}, \\ x_3^{(k)} &= -\frac{1}{5} x_1^{(k)} + \frac{1}{10} x_2^{(k)} + \frac{1}{10} x_4^{(k-1)} - \frac{11}{10}, \\ x_4^{(k)} &= -\frac{3}{8} x_2^{(k)} + \frac{1}{8} x_3^{(k)} + \frac{15}{8}. \end{aligned}$$

La sustitución ocurre de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} x_1^{(k)} &= \frac{1}{10}(0) - \frac{1}{5}(0) + \frac{3}{5} = \frac{3}{5} = 0.6000, \\ x_2^{(k)} &= \frac{1}{11}(0.6) + \frac{1}{11}(0) - \frac{3}{11}(0) + \frac{25}{11} = \frac{128}{55} = 2.3272, \\ x_3^{(k)} &= -\frac{1}{5}\left(\frac{3}{5}\right) + \frac{1}{10}\left(\frac{128}{55}\right) + \frac{1}{10}(0) - \frac{11}{10} = -\frac{543}{550} = -0.9873, \\ x_4^{(k)} &= -\frac{3}{8}\left(\frac{128}{55}\right) + \frac{1}{8}\left(-\frac{543}{550}\right) + \frac{15}{8} = \frac{3867}{4400} = 0.8789. \end{aligned}$$

Por tanto cuando $\mathbf{x}^{(0)} = (0, 0, 0, 0)^t$ tenemos $\mathbf{x}^{(1)} = (0.6000, 2.3272, -0.9873, 0.8789)^t$. Las iteraciones subsecuentes generan los valores de la tabla 4.2.

k	0	1	2	3	4
$x_1^{(k)}$	0.0000	0.6000	1.030	1.0065	1.0009
$x_2^{(k)}$	0.0000	2.2727	2.037	2.0036	2.0003
$x_3^{(k)}$	0.0000	-0.9873	-1.014	-1.0025	-1.0003
$x_4^{(k)}$	0.0000	0.8789	0.9844	0.9983	0.9999

Tabla 4.2: Iteraciones del Ejercicio 4.2

Dado que $\|\mathbf{x}^{(4)} - \mathbf{x}^{(3)}\| = 0.00710962 < 10^{-2}$ se acepta $\mathbf{x}^{(4)}$ como una aproximación razonable a la solución.

El algoritmo 6 describe el método Gauss-Seidel.

Algoritmo 6: Método iterativo de Gauss-Seidel

Entrada : $n, A = [a_{ij}]$, donde $1 \leq i, j \leq n$, $b = [b_i]$ donde $1 \leq i \leq n$, $XO = x^{(0)}$, TOL y N

Salida : x_1, x_2, \dots, x_n

```

1 begin
2    $k = 1$ 
3   while  $k \leq N$  do
4     for  $i = 1$  to  $n$  do
5       
$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left[ - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}XO_j + b_i \right]$$

6       if  $\|\mathbf{x} - XO\| < TOL$  then
7         Salida( $x_1, x_2, \dots, x_n$ )
8         fin
9        $k = k + 1$ 
10      for  $i = 1$  to  $n$  do
11         $XO_i = x_i$ 
12  Salida(Número máximo de iteraciones excedido.)
  
```

Los resultados de los ejemplos 4.1 y 4.2 parecen indicar que este método es superior al de Jacobi, y generalmente es así. Sin embargo hay sistemas lineales en los que el método de Jacobi converge y el de Gauss-Seidel no.

Ejercicios

- Obtenga las dos primeras iteraciones del método de Gauss-Seidel para los siguientes sistemas lineales, use $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$.

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

a) $3x_1 + 6x_2 + 2x_3 = 0$

$$3x_1 + 3x_2 + 7x_3 = 4$$

$$10x_1 - x_2 = 9$$

b) $-x_1 + 10x_2 - 2x_3 = 7$

$$-2x_2 + 10x_3 = 6$$

$$10x_1 + 5x_2 = 6$$

c) $5x_1 + 10x_2 - 4x_3 = 25$

$$-4x_2 + 8x_3 - x_4 = -11$$

$$-x_3 + 5x_4 = -11$$

$$4x_1 + x_2 + x_3 + x_5 = 6$$

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

d) $2x_1 + x_2 + 5x_3 - x_4 - x_5 = 6$

$$-x_1 - x_2 - x_3 + 4x_4 = 6$$

$$2x_2 - x_3 + x_4 + 4x_5 = 6$$

- Obtenga las dos primeras iteraciones del método de Gauss-Seidel para los siguientes sistemas lineales, use $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{0}$.

$$\begin{aligned} &4x_1 + x_2 - x_3 = 5 \\ a) \quad &-x_1 + 3x_2 + x_3 = -4 \\ &2x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 1 \\ &-2x_1 + x_2 + \frac{1}{2}x_3 = 4 \\ b) \quad &x_1 - 2x_2 - \frac{1}{2}x_3 = -4 \\ &x_2 + 2x_3 = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &4x_1 + x_2 - x_3 + x_4 = -2 \\ &x_1 + 4x_2 - x_3 - x_4 = -1 \\ c) \quad &-x_1 - x_2 + 5x_3 + x_4 = 0 \\ &x_1 - x_2 + x_3 + 3x_4 = 1 \\ &4x_1 - x_2 - x_4 = 0 \\ &-x_1 + 4x_2 - x_3 - x_5 = 5 \\ &-x_2 + 4x_3 - x_6 = 0 \\ d) \quad &-x_1 + 4x_4 - x_5 = 6 \\ &-x_2 - x_4 + 4x_5 - x_6 = -2 \\ &-x_3 - x_5 + 4x_6 = 6 \end{aligned}$$

5. Sistemas de ecuaciones no lineales

5.1 Método del Punto Fijo

5.1.1 Iteración funcional

Un sistema de ecuaciones no lineales tiene la forma

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ &\vdots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \end{aligned} \tag{5.1}$$

donde podemos considerar cada función f_i como un mapeo de un vector $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^t$ del espacio \mathbb{R}^n de dimensión n en la recta real \mathbb{R} . Este sistema de n ecuaciones no lineales con n incógnitas puede representarse también mediante la definición de una función \mathbb{F} que mapea \mathbb{R}^n en \mathbb{R}^n como

$$\mathbb{F}(x_1, x_2, \dots, x_n) = (f_1(x_1, x_2, \dots, x_n), f_2(x_1, x_2, \dots, x_n), \dots, f_n(x_1, x_2, \dots, x_n))^t.$$

Si se emplea una notación vectorial para representar las variables x_1, x_2, \dots, x_n , el sistema 5.1 adopta la forma

$$\mathbb{F}(\mathbf{x}) = 0 \tag{5.2}$$

Las funciones f_1, f_2, \dots, f_n se denominan las **funciones coordenadas** de \mathbb{F} .

Ejercicio 5.1 Aplique la iteración funcional para aproximar la solución con una exactitud de 10^{-5} .

$$\begin{aligned} 3x_1 - \cos(x_2 x_3) - \frac{1}{2} &= 0, \\ x_1^2 - 81(x_2 + 0.1)^2 + \sin x_3 + 1.06 &= 0, \\ e^{-x_1 x_2} + 20x_3 + \frac{10\pi - 3}{3} &= 0 \end{aligned}$$

en la forma de punto fijo $x = G(x)$ resolviendo la i -ésima ecuación para x_i , para demostrar que existe una única solución en

$$D = \{(x_1, x_2, x_3)^t \mid -a \leq x_i \leq 1, \text{ para cada } i = 1, 2, 3\}.$$

e itere comenzando con $x^{(0)} = (0.1, 0.1, -0.1)^t$ hasta obtener una precisión de 10^{-5} en la norma l_∞ .

Solución.

Si resolvemos la i -ésima ecuación para x_i , el sistema se transforma en un problema de punto fijo.

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{3} \cos(x_2 x_3) + \frac{1}{6}, \\ x_2 &= \frac{1}{9} \sqrt{x_1^2 + \sin x_3 + 1.06} - 0.1, \\ x_3 &= -\frac{1}{20} e^{-x_1 x_2} - \frac{10\pi-3}{60}. \end{aligned} \quad (5.3)$$

Sea $G: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ definida por $G(x) = (g_1(x), g_2(x), g_3(x))^t$, donde

$$\begin{aligned} g_1(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{3} \cos(x_2 x_3) + \frac{1}{6}, \\ g_2(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{9} \sqrt{x_1^2 + \sin x_3 + 1.06} - 0.1, \\ g_3(x_1, x_2, x_3) &= -\frac{1}{20} e^{-x_1 x_2} - \frac{10\pi-3}{60}. \end{aligned}$$

Para aproximar el punto fijo \mathbf{p} , escogemos $x^{(0)} = (0.1, 0.1, -0.1)^t$. La sucesión de vectores generada por

$$\begin{aligned} x_1^{(k)} &= \frac{1}{3} \cos(x_2^{(k-1)} x_3^{(k-1)}) + \frac{1}{6}, \\ x_2^{(k)} &= \frac{1}{9} \sqrt{(x_1^{(k-1)})^2 + \sin x_3^{(k-1)} + 1.06} - 0.1, \\ x_3^{(k)} &= -\frac{1}{20} e^{-x_1^{(k-1)} x_2^{(k-1)}} - \frac{10\pi-3}{60}. \end{aligned}$$

converge en la solución única del sistema en 5.3. Los resultados en la tabla 5.1 se generan hasta que

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\|_\infty < 10^{-5}.$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\ \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\ _\infty$
0	0.10000000	0.10000000	-0.10000000	
1	0.49998333	0.00944115	-0.52310127	0.423
2	0.49999593	0.00002557	-0.52336331	9.4×10^{-3}
3	0.50000000	0.00001234	-0.52359814	2.3×10^{-4}
4	0.50000000	0.00000003	-0.52359847	1.2×10^{-5}
5	0.50000000	0.00000002	-0.52359877	3.1×10^{-7}

Tabla 5.1: Iteraciones del Ejercicio 5.1

Por lo tanto, la aproximación a la solución es $x^{(5)} = (0.50000000, 0.00000002, -0.52359877)$.

5.1.2 Iteración funcional acelerada

Una forma de acelerar la convergencia de la iteración de punto fijo consiste en usar las estimaciones más recientes de $x_1^{(k)}, \dots, x_{i-1}^{(k)}$ para calcular $x_i^{(k)}$, igual que en el método de Gauss-Seidel para sistemas lineales. Entonces las ecuaciones componentes se transforman en

$$\begin{aligned}x_1^{(k)} &= \frac{1}{3} \cos(x_2^{(k-1)} x_3^{(k-1)}) + \frac{1}{6}, \\x_2^{(k)} &= \frac{1}{9} \sqrt{(x_1^{(k)})^2 + \sin x_3^{(k-1)}} + 1.06 - 0.1, \\x_3^{(k)} &= -\frac{1}{20} e^{-x_1^{(k)} x_2^{(k)}} - \frac{10\pi - 3}{60}.\end{aligned}$$

Con $x^{(0)} = (0.1, 0.1, -0.1)^t$, los resultados de estos cálculos se dan en la tabla 5.2.

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$	$\ \mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\ _\infty$
0	0.10000000	0.10000000	-0.10000000	
1	0.49998333	0.02222979	-0.52304613	0.423
2	0.49997747	0.00002815	-0.52359807	2.2×10^{-2}
3	0.50000000	0.00000004	-0.52359877	2.8×10^{-5}
4	0.50000000	0.00000000	-0.52359877	3.8×10^{-8}

Tabla 5.2: Convergencia Acelerada del Ejercicio 5.1

Por lo tanto, la aproximación a la solución es $x^{(4)} = (0.50000000, 0.00000000, -0.52359877)$.

Ejercicios

Aplique la iteración funcional para aproximar la solución con una exactitud de 10^{-4} .

1.

$$G(x_1, x_2, x_3) = \left(\frac{\cos(x_2 x_3) + 0.5}{3}, \frac{1}{25} \sqrt{x_1^2 + 0.3125} - 0.03, -\frac{1}{20} e^{-x_1 x_2} - \frac{10\pi - 3}{60} \right)$$

$$D = \{(x_1, x_2, x_3) \mid -1 \leq x_i \leq 1, i = 1, 2, 3\}$$

2.

$$G(x_1, x_2, x_3) = \left(\frac{13 - x_2^2 + 4x_3}{15}, \frac{11 + x_3 - x_1^2}{10}, \frac{22 + x_2^3}{25} \right)$$

$$D = \{(x_1, x_2, x_3) \mid 0 \leq x_i \leq 1.5, i = 1, 2, 3\}$$

3.

$$G(x_1, x_2, x_3) = \left(1 - \cos(x_2 x_3), 1 - (1 - x_1)^{1/4} - 0.05x_3^2 + 0.15x_3, x_1^2 + 0.1x_2^2 - 0.01x_2 + 1 \right)$$

$$D = \{(x_1, x_2, x_3) \mid -0.1 \leq x_1 \leq 0.1, -0.1 \leq x_2 \leq 0.3, 0.5 \leq x_3 \leq 1.1\}$$

4.

$$G(x_1, x_2, x_3) = \left(\frac{1}{3} \cos(x_2 x_3) + \frac{1}{6}, -\frac{1}{9} \sqrt{x_1^2 + \sin x_3} + 1.06 - 0.1, -\frac{1}{20} e^{-x_1 x_2} - \frac{10\pi - 3}{60} \right)$$

$$D = \{(x_1, x_2, x_3) \mid -1 \leq x_i \leq 1, i = 1, 2, 3\}$$

5.2 Solución de sistemas de ecuaciones mediante Newton

El problema del ejemplo 5.1 de la sección anterior convierte un problema de punto fijo convergente si se resuelve algebraicamente las tres ecuaciones para las tres variables x_1, x_2 y x_3 . Sin embargo, no es usual poder encontrar una representación explícita para todas las variables. En esta sección estudiaremos un procedimiento algorítmico para efectuar la transformación en una situación más general.

Para construir el algoritmo que nos lleve a un método de punto fijo apropiado en el caso unidimensional, obtuvimos una función ϕ con la siguiente propiedad

$$g(x) = x - \phi(x)f(x)$$

da una convergencia cuadrática en el punto fijo p de la función g . A partir de esta condición, el método de Newton se desarrolla seleccionando $\phi(x) = 1/f'(x)$, suponiendo que $f'(x) \neq 0$.

La aplicación de un procedimiento semejante en el caso de dimensión n incluye una matriz

$$A = \begin{bmatrix} a_{11}(x) & a_{12}(x) & \cdots & a_{1n}(x) \\ a_{21}(x) & a_{22}(x) & \cdots & a_{2n}(x) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}(x) & a_{n2}(x) & \cdots & a_{nn}(x) \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

donde todos los elementos $a_{ij}(x)$ son una función de \mathbb{R}^n en \mathbb{R} . Esto requiere obtener $A(x)$ de modo que

$$G(x) = x - A(x)^{-1}F(x)$$

de la convergencia cuadrática a la solución de $F(x) = 0$, suponiendo que $A(x)$ es no singular en el punto fijo p de G .

Teorema 5.2.1 Sea p una solución de $G(x) = x$. Suponga que existe un número $\delta > 0$ con

- (I) $\delta g_i/\delta x_j$ es continua en $N_\delta = \{x \mid \|x - p\| < \delta\}$, para cada $i = 1, 2, \dots, n$ y $j = 1, 2, \dots, n$;
- (II) $\delta^2 g_i(x)/(\delta x_j \delta x_k)$ es continua y $|\delta^2 g_i(x)/(\delta x_j \delta x_k)| \leq M$ para alguna constante M , siempre que $x \in N_\delta$, para cada $i = 1, 2, \dots, n$, $j = 1, 2, \dots, n$ y $k = 1, 2, \dots, n$;
- (III) $\delta g_i(p)/\delta x_k = 0$, para cada $i = 1, 2, \dots, n$ y $k = 1, 2, \dots, n$.

Entonces existe un número $\hat{\delta} \leq \delta$ tal que la sucesión generada por $x^{(k)} = G(x^{(k-1)})$ converge cuadráticamente a p para cualquier elección de $x^{(0)}$ a condición de que $\|x^{(0)} - p\| < \hat{\delta}$. Más aún,

$$\|x^{(k)} - p\|_\infty \leq \frac{n^2 M}{2} \|x^{(k-1)} - p\|_\infty^2, \text{ para cada } k \geq 1.$$

Para utilizar el teorema 5.2.1 supongamos que $A(x)$ es una matriz de funciones $n \times n$ de $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ en la forma de la ecuación 5.4, cuyas entradas específicas se escogerán más adelante. Supongamos además que $A(x)$ es no singular cerca de una solución p de $F(x) = 0$, y denotemos con $b_{ij}(x)$ la entrada de $A(x)^{-1}$ en el i -ésimo renglón y la j -ésima columna.

Para $G(x) = x - A(x)^{-1}F(x)$, tenemos $g_i(x) = x_i - \sum_{j=1}^n b_{ij}(x)f_j(x)$. Entonces

$$\frac{\delta g_i}{\delta x_k}(x) = \begin{cases} 1 - \sum_{j=1}^n \left(b_{ij}(x) \frac{\delta f_j}{\delta x_k}(x) + \frac{\delta b_{ij}}{\delta x_k}(x) f_j(x) \right), & \text{si } i = k, \\ - \sum_{j=1}^n \left(b_{ij}(x) \frac{\delta f_j}{\delta x_k}(x) + \frac{\delta b_{ij}}{\delta x_k}(x) f_j(x) \right), & \text{si } i \neq k. \end{cases}$$

El teorema 5.2.1 implica que necesitamos $\frac{\delta g_i(p)}{\delta x_k} = 0$, para cada $i = 1, 2, \dots, n$ y $k = 1, 2, \dots, n$. Esto significa que, para $i = k$,

$$0 = 1 - \sum_{j=1}^n b_{ij}(p) \frac{\delta f_j}{\delta x_i}(p),$$

esto es,

$$\sum_{j=1}^n b_{ij}(p) \frac{\delta f_j}{\delta x_i}(p) = 1 \quad (5.5)$$

Cuando $k \neq i$,

$$0 = - \sum_{j=1}^n b_{ij}(p) \frac{\delta f_j}{\delta x_k}(p) = 0,$$

por lo que

$$\sum_{j=1}^n b_{ij}(p) \frac{\delta f_j}{\delta x_k}(p) = 0. \quad (5.6)$$

Matriz Jacobiana

Al definir la matriz $J(x)$ por medio de

$$J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\delta f_1}{\delta x_1}(x) & \frac{\delta f_1}{\delta x_2}(x) & \cdots & \frac{\delta f_1}{\delta x_n}(x) \\ \frac{\delta f_2}{\delta x_1}(x) & \frac{\delta f_2}{\delta x_2}(x) & \cdots & \frac{\delta f_2}{\delta x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\delta f_n}{\delta x_1}(x) & \frac{\delta f_n}{\delta x_2}(x) & \cdots & \frac{\delta f_n}{\delta x_n}(x) \end{bmatrix}.$$

Las condiciones 5.5 y 5.6 requieren que $A(p)^{-1}J(p) = I$, por lo que $A(p) = J(p)$. En consecuencia, una elección apropiada de $A(x)$ es aquella que $A(x) = J(x)$, dado que cumple la condición (iii) del teorema 5.2.1. La función G definida por

$$G(x) = x - J(x)^{-1}F(x),$$

y el procedimiento de iteración funcional es consecuencia de seleccionar $x^{(0)}$ y generar, para $k \geq 1$,

$$x^{(k)} = G\left(x^{(k-1)}\right) = x^{(k-1)} - J\left(x^{(k)}\right)^{-1} F\left(x^{(k-1)}\right).$$

A esto se le llama **método de Newton para sistemas no lineales** y generalmente se espera que dé una convergencia cuadrática, siempre y cuando se conozca un valor inicial suficientemente preciso y exista $J(p)^{-1}$.

Ejercicio 5.2 Utilice el método de Newton para sistemas de ecuaciones no lineales para encontrar una aproximación a una solución. Considere una tolerancia 10^{-3} .

$$\begin{aligned} 3x_1 - \cos(x_2x_3) - \frac{1}{2} &= 0, \\ x_1^2 - 81(x_2 + 0.1)^2 + \sin x_3 + 1.06 &= 0, \\ e^{-x_1x_2} + 20x_3 + \frac{10\pi-3}{3} &= 0 \end{aligned}$$

Considere además que se sabe que la solución se encuentra en la región:

$$D = \{(x_1, x_2, x_3)^t \mid -a \leq x_i \leq 1, \text{ para cada } i = 1, 2, 3\}.$$

Planteamiento

Se define la función $F(x)$:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3) &= 3x_1 - \cos(x_2x_3) - \frac{1}{2} \\ f_2(x_1, x_2, x_3) &= x_1^2 - 81(x_2 + 0.1)^2 + \sin x_3 + 1.06 \\ f_3(x_1, x_2, x_3) &= e^{-x_1x_2} + 20x_3 + \frac{10\pi-3}{3} \\ F(x_1, x_2, x_3) &= (f_1(x_1, x_2, x_3), f_2(x_1, x_2, x_3), f_3(x_1, x_2, x_3)) \end{aligned}$$

Se define la matriz Jacobiana $J(x)$:

$$J(x) = \begin{bmatrix} 3 & x_3 \sin x_2x_3 & x_2 \sin x_2x_3 \\ 2x_1 & -162(x_2 + 0.1) & \cos x_3 \\ -x_2e^{-x_1x_2} & -x_1e^{-x_1x_2} & 20 \end{bmatrix}.$$

Se define el vector inicial $x^{(0)}$:

$$x^{(0)} = (0.1, 0.1, -0.1)$$

Desarrollo

Es necesario hacer las evaluaciones en la siguiente expresión

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} - J\left(x^{(k)}\right)^{-1} F\left(x^{(k-1)}\right) \quad \forall k \geq 1$$

comenzando con el vector inicial $x^{(0)}$. Cuando $k = 1$, esta expresión se reduce a:

$$\begin{aligned} x^{(1)} &= x^{(0)} - J\left(x^{(0)}\right)^{-1} F\left(x^{(0)}\right) \\ &= (0.1, 0.1, -0.1) - J((0.1, 0.1, -0.1))^{-1} F((0.1, 0.1, -0.1)) \\ &= (0.4998696782, 0.01946684853, -0.5215204718) \end{aligned}$$

Este vector x_1 es la primer aproximación del método, se repite el procedimiento hasta alcanzar la tolerancia. Los resultados se presentan en la tabla siguiente:

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
1	0.4998696782	0.0194668485	-0.5215204718
2	0.5000142403	0.0015885914	-0.5235569638
3	0.5000000113	0.0000124448	-0.5235984500
4	0.5000000000	8.516×10^{-10}	-0.5235987755

En esta iteración se cumple la tolerancia:

$$|x^{(4)} - x^{(3)}| = 1.244 \times 10^{-5} < 10^{-3}$$

Resultado

$$x^{(4)} = (0.5, 8.516 \times 10^{-10}, -0.5235987755)$$

$$ER = 0.001718\%$$

5.3 Aplicaciones

6. Diferenciación e integración numérica

6.1 Fórmula de diferencia progresiva y regresiva

La definición de la derivada de una función $f(x)$ en un punto x es

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (6.1)$$

la cual se puede interpretar geométricamente como la pendiente de la recta tangente al punto dado por x .

6.1.1 Diferencia progresiva

De manera alternativa, se puede obtener una aproximación a la derivada a través de una recta secante a la función. Esto se puede ver en la figura 6.1.

Calculando la pendiente de la recta secante de la figura 6.1 se obtiene una aproximación a la derivada.

$$\begin{aligned} m &= \frac{f(x+h) - f(x)}{x+h-x} \\ &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \\ f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \end{aligned} \quad (6.2)$$

La expresión (6.2) es una aproximación a la derivada de la función $f(x)$ siempre y cuando el valor de h sea pequeño. Sin embargo, para una aproximación más exacta a la primera derivada se puede

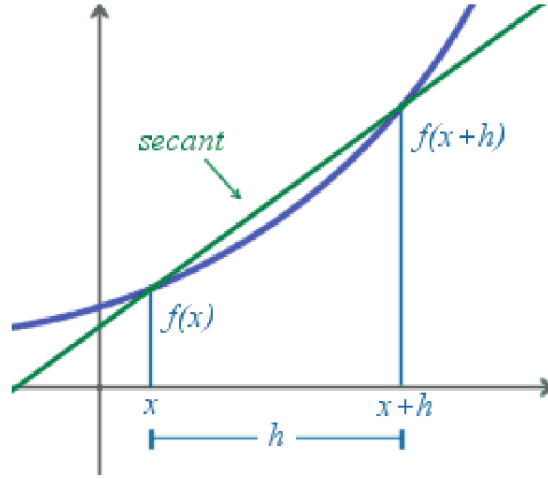


Figura 6.1: Derivada progresiva

utilizar una serie de Taylor (6.3).

$$\begin{aligned}
 f(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x-a)^n \\
 &= f(a) + \frac{f'(a)}{1!} (x-a) + \frac{f''(a)}{2!} (x-a)^2 + \frac{f^{(3)}(a)}{3!} (x-a)^3 + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!} (x-a)^n \quad (6.3)
 \end{aligned}$$

Desarrollando la serie para $f(x)$ centrada en $a = x$ y para $x = x+h$.

$$\begin{aligned}
 f(x+h) &= f(x) + \frac{f'(x)}{1!} (x+h-x) + \frac{f''(x)}{2!} (x+h-x)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!} (x+h-x)^n \\
 &= f(x) + f'(x) \cdot h + \frac{f''(x)}{2!} \cdot h^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!} \cdot h^n
 \end{aligned}$$

Dado que sólo nos interesa la primera derivada, se toman los primeros tres términos de la serie.

$$f(x+h) \approx f(x) + f'(x) \cdot h + \frac{f''(x)}{2!} \cdot h^2$$

Despejando $f'(x)$ se obtiene la expresión (6.4)

Definición 6.1.1

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(x)}{2!} \cdot h. \quad (6.4)$$

6.1.2 Diferencia regresiva

Otra alternativa es aproximar la derivada de nueva cuenta con una recta secante a la función. Vease la figura 6.2.

La diferencia sustancial en esta variante del procedimiento es que el valor diferencial h se resta, en lugar de sumarse tal como el caso anterior. Esto implica que el punto para formar la recta secante será anterior a x .

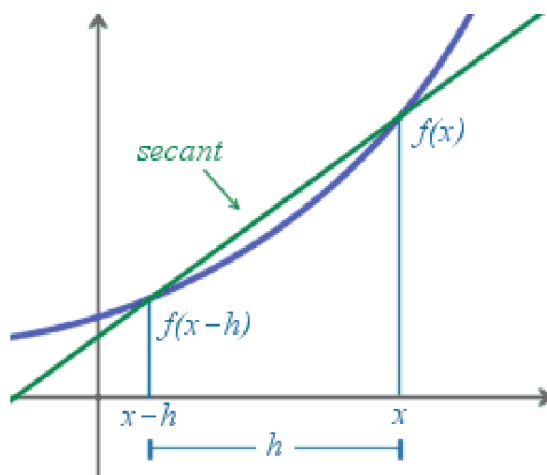


Figura 6.2: Derivada regresiva

Calculando la pendiente de la recta secante para esta alternativa de la figura 6.2 se obtiene otra aproximación a la derivada.

$$m = \frac{f(x) - f(x-h)}{x - (x-h)}$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad (6.5)$$

De nueva cuenta la expresión (6.5) es una aproximación a la derivada de la función $f(x)$ siempre y cuando el valor de h sea pequeño. Se desarrolla ahora la serie de Taylor para $f(x)$ centrada en $a = x - h$ y para $x = x$.

$$\begin{aligned} f(x-h) &= f(x) + \frac{f'(x)}{1!}(x-h-x) + \frac{f''(x)}{2!}(x-h-x)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(x-h-x)^n \\ &= f(x) - f'(x) \cdot h + \frac{f''(x)}{2!} \cdot h^2 + \cdots + (-1)^n \cdot \frac{f^{(n)}(x)}{n!} \cdot h^n \end{aligned}$$

Dado que sólo nos interesa la primera derivada, se toman los primeros tres términos de la serie.

$$f(x-h) \approx f(x) - f'(x) \cdot h + \frac{f''(x)}{2!} \cdot h^2$$

Despejando $f'(x)$ se obtiene la expresión (6.6)

Definición 6.1.2 — Derivada Regresiva.

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{f''(x)}{2!} \cdot h. \quad (6.6)$$

Ejercicio 6.1 Utilice la derivada progresiva y regresiva para encontrar una aproximación a la derivada de la función $f(x) = xe^x$ en $x = 2$. Compare los resultados obtenidos por ambos métodos.

Planteamiento

Para este ejercicio se utilizará $h = 0.1$.

Desarrollo

Derivación Progresiva

$$\begin{aligned} f'(2) &\approx \frac{f(2+0.1) - f(2)}{0.1} = \frac{f(2.1) - f(2)}{0.1} \\ &\approx \frac{2.1e^{2.1} - 2e^2}{0.1} \\ &\approx 23.7084 \end{aligned}$$

Derivación Regresiva

$$\begin{aligned} f'(2) &\approx \frac{f(2) - f(2-0.1)}{0.1} = \frac{f(2) - f(1.9)}{0.1} \\ &\approx \frac{2e^2 - 1.9e^{1.9}}{0.1} \\ &\approx 20.7491 \end{aligned}$$

La figura 6.3 muestra una comparación de las rectas obtenidas por estos cálculos, estas rectas secante son aproximaciones a la tangente, que a su vez es la derivada de la función para $x = 2$.

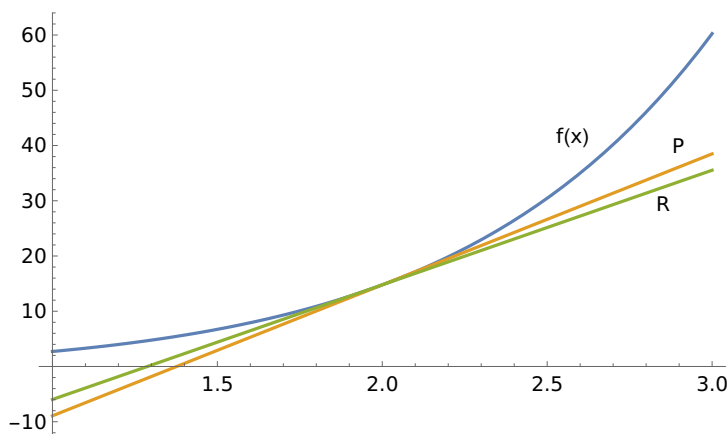


Figura 6.3: Comparación de las primeras aproximaciones del Ejemplo 6.1

La recta naranja (marcada con la letra P) corresponde a la obtenida por la derivación progresiva, mientras que la recta verde (marcada con la letra R) corresponde a la obtenida por derivación regresiva.

Es notorio que para obtener un mejor resultado en las aproximaciones se debe utilizar un valor más pequeño para h . Gráficamente observaríamos que las rectas secantes se aproximan cada vez más a la tangente. La tabla 6.1 muestra los cálculos para diversos valores de h .

h	D. Progresiva	D. Regresiva
0.1	23.7084	20.7491
0.05	22.9217	21.4434
0.01	22.3156	22.02
0.005	22.2412	22.0934
0.001	22.182	22.1524
0.0001	22.1686	22.1657
0.00001	22.1673	22.167

Tabla 6.1: Resultados del Ejercicio 6.1

6.2 Fórmula de tres puntos

Una estrategia distinta para obtener aproximaciones a la derivada de una función consiste en utilizar la interpolación para ello. La idea se basa en el hecho de que un polinomio es continuo y derivable para todos los números reales. Como una ventaja adicional, el polinomio es fácilmente derivable.

De esta forma la estrategia consiste en construir un polinomio de interpolación que aproxime a la función que se desea derivar, ahora se deriva el polinomio y se evalúa en el punto que se desea aproximar. De acuerdo al grado del polinomio que se haya construido, la aproximación del resultado con la derivada será mejor. En términos generales se puede decir que *a mayor grado del polinomio mejor la aproximación a la derivada*.

Para la construcción del polinomio se utiliza la interpolación de Lagrange de la ecuación (2.7). Supongamos que $\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ son $(n+1)$ números distintos en algún intervalo I y que $f \in C^{n+1}(I)$. Entonces:

$$f(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L_{n,k}(x)$$

Al derivar esta expresión y evaluar $x = x_j$ se obtiene

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L'_{n,k}(x_j) \quad (6.7)$$

que recibe el nombre de fórmula de $(n+1)$ puntos para aproximar $f'(x_j)$ donde x_j es el valor en el que se evalúa la derivada.

En términos generales, la utilización de más puntos de evaluación en la ecuación (6.7) produce una mayor exactitud, aunque esto puede no ser conveniente dada la cantidad de evaluaciones funcionales y el aumento en el error de redondeo. Por esta razón es que se limita a formulas de tres y cinco puntos de evaluación.

Para los tres puntos el polinomio de interpolación de Lagrange que corresponde es de segundo grado

$$f(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x)$$

y su derivada es

$$f'(x) = f(x_0)L'_0(x) + f(x_1)L'_1(x) + f(x_2)L'_2(x).$$

De esta forma, el primer término de Lagrange es

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

y su derivada con respecto a x es

$$L'_0(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}.$$

Para los términos de Lagrange L_1 y L_2 el resultado es muy similar, por lo que son

$$L'_1(x) = \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}$$

y

$$L'_2(x) = \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.$$

Ahora sustituyendo la derivada de los términos de Lagrange en la ecuación 6.7 queda,

$$f'(x_j) = f(x_0) \left[\frac{2x_j-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \right] + f(x_1) \left[\frac{2x_j-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \right] + f(x_2) \left[\frac{2x_j-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \right]. \quad (6.8)$$

La ecuación (6.8) es una aproximación a la derivada de f evaluada en x_j para tres puntos: x_0 , x_1 y x_2 .

Ahora, si se distribuyen los puntos de forma equidistante, esto es

Sea $h \in \mathbb{R} \wedge h \neq 0$

$$x_j = x_0$$

$$x_1 = x_0 + h$$

$$x_2 = x_1 + h = x_0 + 2h,$$

entonces la ecuación (6.8) se reduce a la expresión (6.9).

Definición 6.2.1 — Fórmula de tres puntos - punto extremo.

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] \quad (6.9)$$

Ahora, utilizando nuevamente la expresión (6.8) con los tres puntos x_0 , x_1 y x_2 pero acomodandolos de manera equidistante pero con x_0 al centro, esto es:

Sea $h \in \mathbb{R} \wedge h \neq 0$

$$x_j = x_0$$

$$x_1 = x_0 - h$$

$$x_2 = x_0 + h,$$

entonces la ecuación (6.8) se reduce a la expresión (6.10).

Definición 6.2.2 — Fórmula de tres puntos - punto medio.

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h} [f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] \quad (6.10)$$

6.3 Fórmula de cinco puntos

Los métodos presentados en las ecuaciones (6.9) y (6.10) reciben el nombre de **fórmulas de tres puntos**. Así mismo, existen las llamadas **fórmulas de cinco puntos** que implican la evaluación de la función en dos puntos más, pero cuyo término de error tiene la forma $O(h^4)$.

Retomando la estrategia utilizada para las fórmulas de los tres puntos, en la expresión (6.7) pero ahora se consideran cinco puntos. La expresión se reduce a

$$f(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x) + f(x_3)L_3(x) + f(x_4)L_4(x)$$

y su derivada es

$$f'(x_j) = f(x_0)L'_0(x) + f(x_1)L'_1(x) + f(x_2)L'_2(x) + f(x_3)L'_3(x) + f(x_4)L'_4(x). \quad (6.11)$$

De esta forma, el primer término de Lagrange es

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)(x_0-x_4)}$$

y su derivada con respecto a x es

$$L'_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3) + (x-x_1)(x-x_2)(x-x_4) + (x-x_1)(x-x_3)(x-x_4) + (x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)(x_0-x_4)}.$$

Para los términos de Lagrange restantes L'_1 , L'_2 , L'_3 y L'_4 el resultado es muy similar. Sustituyendo todos ellos en la expresión (6.11), reducir los términos se obtiene una expresión semejante a (6.8).

Ahora, si se distribuyen los 5 puntos x_0 , x_1 , x_2 , x_3 y x_4 de forma equidistante, y el valor x_0 encontrándose en el extremo izquierdo, esto es:

$$\text{Sea } h \in \mathbb{R} \wedge h \neq 0$$

$$x_j = x_0$$

$$x_1 = x_0 + h$$

$$x_2 = x_0 + 2h$$

$$x_3 = x_0 + 3h$$

$$x_4 = x_0 + 4h$$

entonces se reduce a la expresión (6.12).

Definición 6.3.1 — Fórmula de cinco puntos - punto extremo.

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [-25f(x_0) + 48f(x_0 + h) - 36f(x_0 + 2h) + 16f(x_0 + 3h) - 3f(x_0 + 4h)] \quad (6.12)$$

Si por otro lado se distribuyen los 5 puntos x_0 , x_1 , x_2 , x_3 y x_4 de forma equidistante, y el valor x_0 encontrándose en el centro, esto es:

$$\text{Sea } h \in \mathbb{R} \wedge h \neq 0$$

$$x_j = x_0$$

$$x_1 = x_0 - h$$

$$x_2 = x_0 - 2h$$

$$x_3 = x_0 + h$$

$$x_4 = x_0 + 2h$$

entonces se reduce a la expresión (6.13).

Definición 6.3.2 — Fórmula de cinco puntos - punto medio.

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} [f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] \quad (6.13)$$

6.4 Fórmula de 3 puntos para la segunda derivada

Si se retoma el procedimiento de la sección 6.2 y en particular la expresión (6.7), sólo que en esta ocasión se deriva nuevamente la expresión para obtener una segunda derivada del polinomio $f(x)$ dado por la serie de Taylor. Esto es:

$$f''(x_j) = \sum_{k=0}^n f(x_k) L''_{n,k}(x_j) \quad (6.14)$$

Esta expresión (6.14) requiere a su vez de la segunda derivada de L_0 , L_1 y L_2 . Derivando estos términos y sustituyendo se obtendría una expresión semejante a (6.8). Ahora distribuyendo de forma equidistante los valores x_0 , x_1 y x_2 , con el valor x_0 en el centro, esto es:

Sea $h \in \mathbb{R} \wedge h \neq 0$

$$x_j = x_0$$

$$x_1 = x_0 - h$$

$$x_2 = x_0 + h,$$

entonces la ecuación (6.14) se reduce a la expresión (6.15).

Definición 6.4.1 — Fórmula segunda derivada tres puntos - punto medio.

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2} [f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)] \quad (6.15)$$

Ejercicio 6.2 Dada la función $f(x) = xe^x$,

- Utilice las fórmulas de los 3 y 5 puntos para encontrar aproximaciones a la primera derivada de la función $f(x)$ en $x = 2$.
- ¿Qué fórmula permite encontrar un mejor resultado?, ¿porque?
- Utilice también la fórmula de los 3 puntos para obtener una aproximación a la segunda derivada de $f(x)$ en $x = 2$.

6.5 Integración numérica: Método del trapecio

6.6 Integración numérica: Métodos de Simpson

6.7 Integración numérica: Integración de Romberg

6.8 Integración numérica: Método de cuadratura gaussiana

6.9 Integración múltiple

6.10 Aplicaciones

7. Solución de ecuaciones diferenciales

- 7.1 Método de Euler y Euler mejorado
- 7.2 Método de Ruge-Kutta
- 7.3 Método de pasos múltiples
- 7.4 Sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias
- 7.5 Aplicaciones

Bibliography

Articles

Books