Métodos Numéricos Aplicados I

Preliminares de Cálculo Numérico

Índice

Esquema

PRELIMINARES DE CÁLCULO NUMÉRICO

DEFINICIÓN DE ERRORES	ERRORES DE REDONDEO	ERRORES DE TRUNCAMIENTO
	Debidos a la **precisión finita** de la computación	Debidos al uso de **aproximaciones matemáticas**
Numérico	Cifras significativas	Taylor
Iterativo	Errores de redondeo en Matlab	Diferencias finitas

Ideas clave

2.1 Introducción y objetivos

Los problemas matemáticos a los que se han enfrentado a lo largo de la historia y se enfrentan a día de hoy tanto matemáticos como ingenieros son múltiples. La forma ideal de dar solución a un problema es proporcionar una respuesta en forma de ecuación, de número, de resultado que siempre se cumpla bajo cualesquiera condiciones. No obstante, no siempre es posible obtener la solución analítica a todos los problemas con los que nos vayamos a enfrentar, o no siempre quien debe resolver los problemas tiene suficiente experiencia o antecedentes matemáticos específicos para resolver un problema en particular.

Por ejemplo, supongamos que queremos resolver la ecuación

$$f(x) = x^2 + 2x - 3 = 0.$$

Esta ecuación tiene una solución analítica y, además, es muy sencilla de obtener. De este modo, cualquier persona que haya cursado algún estudio de matemáticas, por mínimo que sea, sería capaz de indicar que las soluciones son $x \in \{-3, 1\}$.

Sin embargo, si planteamos otro problema que a priori parece inofensivo como

$$f(x) = x - e^{-x} = 0,$$

vamos a saber que no podremos obtener por métodos analíticos su solución. A no ser que la persona que deba resolver este problema tenga intuición o algo de idea acerca de métodos numéricos, nunca sería capaz de adivinar que la solución está cerca del punto $x = 0.568$.

La alternativa, por tanto, a la resolución analítica de los problemas es la resolución numérica. Para poder abordar las soluciones numéricas nos adentramos en el campo del análisis numérico, dentro del cual entran los métodos numéricos. A lo largo de este curso vamos a presentar los métodos numéricos más elementales que se utilizan en las ciencias aplicadas y las ingenierías.

Lo primero a destacar acerca de «lo numérico» es que no vamos a obtener soluciones exactas. Es por ello que previamente indicábamos que la solución de $f(x) = x - e^{-x} = 0$ iba a estar cerca del punto $x = 0.568$. Por tanto, cualquier solución numérica va a ser una solución aproximada. Pero será tan aproximada como deseemos. Para ello, existen diferentes métodos numéricos que van a conseguir obtener una solución aproximada. Aquellos métodos con mayor simplicidad, también serán los que menor aproximación obtengan. Por el contrario, aquellos métodos que tengan una mayor complejidad, gozarán de obtener una aproximación mucho más precisa.

En este tema haremos hincapié en la característica fundamental del análisis numérico, que no es ni más ni menos que las soluciones aproximadas. De forma que, al ser las soluciones aproximadas, siempre vamos a cometer un error, que será inherente al proceso numérico. Pero también va a haber otros errores derivados de la toma de datos o de la precisión de las máquinas sobre las que trabajemos. De modo que en este tema nos centraremos en todos los errores que se van a dar en los métodos numéricos, tanto por obtener soluciones aproximadas como por las herramientas que vamos a utilizar.

Los objetivos que trataremos de alcanzar en este tema serán los siguientes:

- Clasificar los diferentes tipos de errores
- Conocer los errores de redondeo
- Dominar el teorema de Taylor
- Identificar los errores de truncamiento

2.2 Definiciones de error

El error se conoce como la discrepancia existente entre un valor verdadero y una aproximación. Es la magnitud del error la que nos permite discernir si hemos hecho una aproximación adecuada o no.

Los errores se dividen en dos grandes grupos:

- **errores de redondeo**, cometidos cuando disponemos de un número finito de símbolos para representar un resultado, y
- **errores de truncamiento**, originados por utilizar un método numérico en lugar de un procedimiento matemático exacto.

Los primeros los veremos en el apartado 2.3 mientras que los segundos serán objeto de estudio en el apartado 2.4.

Veamos a continuación algunas definiciones.

Definición 1: Error numérico

Sean y e $\hat{y}$ las soluciones verdadera y aproximada, respectivamente. Se define el **error numérico** ϵ como

$$\epsilon = |y - \hat{y}| . \tag{1}$$

En (1) vemos que se trata de una diferencia en términos absolutos. El problema de esta definición es que no nos va a facilitar el conocimiento de la bondad de la aproximación, puesto que dependerá de las unidades de trabajo. Como alternativa complementaria, se define el error porcentual.

Definición 2: Error porcentual

Se define el **error porcentual** ϵ_r como

$$\epsilon_r[\,\%] = 100 \left| \frac{\epsilon}{y} \right| . \tag{2}$$

Ejemplo 1. La función $\sin(x) \approx x$ cuando tenemos valores «pequeños» de x. Calcular los errores numérico y porcentual al utilizar la aproximación para $x = \frac{\pi}{8}$.

La solución analítica es

$$y = \sin\left(\frac{\pi}{8}\right) = \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2},$$

mientras que la solución numérica es

$$\hat{y} = \frac{\pi}{8}.$$

De este modo, el error numérico (1) es

$$\epsilon = |y - \hat{y}| = \left| \frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2} - \frac{\pi}{8} \right| = 0.010016,$$

así que el error porcentual (2) es

$$\epsilon_r = 100 \left| \frac{\epsilon}{y} \right| = 100 \left| \frac{0.010016}{\frac{\sqrt{2-\sqrt{2}}}{2}} \right| = 2.617306\,\%.$$

Es necesario mencionar que en el cálculo de ϵ se ha redondeado a seis decimales, y con ese valor se ha calculado ϵ_r.

Cuando no conocemos la solución analítica y, no podemos calcular los errores numérico y porcentual. Esta situación se da generalmente cuando trabajamos con métodos iterativos. El procedimiento de estos métodos consiste en obtener una secuencia que se va a aproximando a la solución esperada. En este caso, los errores se obtienen a partir de la diferencia entre dos aproximaciones.

Definición 3: Error iterativo

Sean $\hat{y}_k$ e $\hat{y}_{k+1}$ las aproximaciones numéricas en las iteraciones k y $k+1$, respectivamente. Se define el **error iterativo** como

$$\epsilon_k = |\hat{y}_{k+1} - \hat{y}_k|\,, \tag{3}$$

que en su versión porcentual podemos utilizar

$$\epsilon_{k,r}[\,\%] = 100\frac{\epsilon_k}{|\hat{y}_{k+1}|}. \tag{4}$$

Ejemplo 2. La función e^x se puede aproximar por

$$e^x \approx \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}.$$

Calcular $e^{0.5}$ tomando términos de la aproximación hasta que $\epsilon_k, r < 0.05\,\%$.

Para $k = 0$ tenemos que $e^{0.5} \approx 1$. Tomando el término $k = 1$,

$$e^x \approx 1 + x \rightarrow e^{0.5} \approx 1 + 0.5 = 1.5,$$

por lo que el error iterativo es

$$\epsilon_{1,r} = \left|\frac{1.5 - 1}{1.5}\right| = 33.33\,\%,$$

así que continuamos tomando términos. Para $k = 2$,

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} \rightarrow e^{0.5} \approx 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} = 1.625,$$

siendo su error iterativo

$$\epsilon_{2,r} = \left|\frac{1.625 - 1.5}{1.625}\right| = 7.6923\,\%.$$

Para $k = 3$,

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} \to e^{0.5} \approx 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} + \frac{0.5^3}{6} = 1.6458,$$

por lo que su error iterativo es

$$\epsilon_{3,r} = \left|\frac{1.6458 - 1.625}{1.6458}\right| = 1.2658\,\%.$$

Para $k = 4$,

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} \to e^{0.5} \approx 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} + \frac{0.5^3}{6} + \frac{0.5^4}{24} = 1.6484,$$

siendo su error iterativo

$$\epsilon_{4,r} = \left|\frac{1.6484 - 1.6458}{1.6484}\right| = 0.1577\,\%.$$

Continuamos con $k = 5$,

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + \frac{x^5}{120} \to$$

$$\to e^{0.5} \approx 1 + 0.5 + \frac{0.5^2}{2} + \frac{0.5^3}{6} + \frac{0.5^4}{24} + \frac{0.5^5}{120} = 1.6487.$$

En este caso, el error iterativo es

$$\epsilon_{5,r} = \left|\frac{1.6487 - 1.6484}{1.6487}\right| = 0.0181\,\%,$$

que ya es menor a $0.05\,\%$.

Nótese que en este ejemplo hemos utilizado siempre cuatro decimales en todas las operaciones.

2.3 Error de redondeo

Los errores de redondeo vienen dados por la capacidad finita de representación de los números. Los humanos tendemos a utilizar una serie de redondeos, y las computadoras que tienen un límite de memoria para las representaciones.

Cifras significativas

Un número tiene diferentes representaciones posibles. Estas representaciones están basadas en las **cifras significativas**. No existe una definición uniforme de este concepto, pero sí hay establecidas unas normas habituales en función del número que queremos representar.

- Para **números superiores a 1**, las cifras significativas son las cifras que representamos, sin contar los ceros a la derecha de la parte decimal.
- Para **números inferiores a 1**, las cifras significativas son las cifras que representamos, sin contar los ceros a la izquierda del primer valor distinto de cero, ni los ceros a la derecha de la parte decimal.
- Cuando trabajamos con **notación científica** $x \cdot 10^z$, las cifras significativas coinciden con la descripción de los números superiores a 1 para la mantisa x, sumadas a las cifras utilizadas para el exponente z.

La Tabla 1 recoge algunos de los casos descritos anteriormente.

Número	Cifras significativas	Característica
232.870000	5	Número decimal superior a 1
0.001100	2	Número decimal inferior a 1
$3{\cdot}10^8$	2	Notación científica

Tabla 1: Ejemplos de cifras significativas.

Error de redondeo en Matlab

Cuando trabajamos con el software Matlab, de forma interna almacena las variables numéricas con formato `double`. Este formato trabaja con 32 cifras significativas.

Para valores con mayor profundidad cometeremos errores de redondeo. Sin embargo, en esta situación se puede utilizar un mayor número de cifras significativas con el comando `digits(d)`, donde `d` determina el número de cifras significativas sobre las que trabajar.

No hay que confundir las cifras almacenadas por Matlab con las cifras que muestra por pantalla. Este es el objetivo del comando `format`.

Ejemplo 3. La representación de π en Matlab con diferentes formatos

Veamos los resultados de algunas ejecuciones.

- 5 dígitos significativos.

```
>> format short
>> pi
ans =
    3.1416
```

- 16 dígitos significativos.

```
>> format long
>> pi
ans =
   3.141592653589793
```

- 32 dígitos significativos.

```
>> vpa(pi)
ans =
3.1415926535897932384626433832795
```

- 50 dígitos significativos. Debemos indicar que debe trabajar con una precisión superior a la estándar.

```
>> digits(50)
>> vpa(pi)
ans =
3.14159265358979323846264338327950288419716939937 51
```

2.4 Error de truncamiento

El error de truncamiento tiene un origen puramente matemático. Se trata de un error que aparece por utilizar una aproximación en lugar de un procedimiento exacto.

Una de las aproximaciones que nos vamos a encontrar a lo largo de la asignatura está basada en el desarrollo en serie de Taylor.

Desarrollo en serie de Taylor

La serie de Taylor es un desarrollo polinómico de una función $f(x)$ alrededor de un punto a. El desarrollo es una serie infinita, de modo que al tomar solo los n primeros términos del desarrollo estamos cometiendo un error de truncamiento.

Teorema 1: Teorema de Taylor

Sea la función f y sus primeras $n+1$ derivadas continuas en un intervalo que contiene a y x. Entonces, el valor de la función f en x viene dada por

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2}(x-a)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(a)}{n!}(x-a)^n + R_n, \quad (5)$$

donde a R_n se le denomina residuo, y viene dado por

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-a)^{n+1}, \quad \xi \in (a, x). \quad (6)$$

El Teorema 1 muestra que cualquier función suave se puede aproximar por un polinomio.

Ejemplo 4. Determina el desarrollo en serie de Taylor de la función

$$f(x) = \cos(x),$$

alrededor del cero, tomando términos hasta orden 3.

El Teorema 1 hasta orden 3, tomando $a = 0$, aproxima la función $f(x)$ por

$$f(x) \approx f(0) + f'(0)x + \frac{f''(0)}{2}x^2 + \frac{f'''(0)}{6}x^3.$$

Calculemos las derivadas y su evaluación sobre el valor $a = 0$.

$$\begin{aligned}
f(x) &= \cos(x) \rightarrow f(0) = 1, \\
f'(x) &= -\sin(x) \rightarrow f'(0) = 0, \\
f''(x) &= -\cos(x) \rightarrow f''(0) = -1, \\
f'''(x) &= \sin(x) \rightarrow f'''(0) = 0.
\end{aligned}$$

De este modo, la aproximación de $f(x) = \cos(x)$ por Taylor es

$$\cos(x) \approx 1 + 0x + \frac{-1}{2}x^2 + \frac{0}{6}x^3 = 1 - \frac{x^2}{2}.$$

Accede al vídeo: Algunos desarrollos en serie de Taylor

Diferencias finitas

Las diferencias finitas son aproximaciones que se realizan de las derivadas de las funciones. Estas aproximaciones son ampliamente utilizadas en los métodos numéricos para resolver diferentes problemas de las matemáticas.

Las diferencias finitas tienen su origen en el desarrollo en serie de Taylor. Discreticemos la variable independiente como

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

A h se le denomina **paso**, y viene dado por la distancia entre dos puntos discretizados consecutivos, además de por

$$h = \frac{b-a}{n}.$$

Vamos a distinguir entre diferencias finitas progresivas, regresivas o centrales, en función de los nodos que se utilicen para su estimación. La Figura 1 representa dichos nodos.

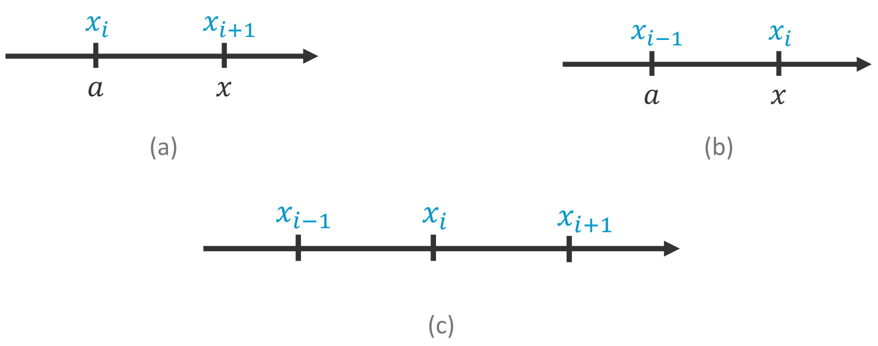

Figura 1: Nodos para las aproximaciones de diferencias finitas (a) progresivas, (b) regresivas y (c) centrales

Tomemos el polinomio de Taylor (5) con $a = x_i$ y $x = x_{i+1}$, como se ilustra en la Figura

1a. Desarrollando la expresión obtenemos

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + R_1 \leftrightarrow \tag{7}$$

$$\leftrightarrow f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}. \tag{8}$$

A la expresión (8) se le conoce como **diferencia finita progresiva**.

Podemos hacer algo similar con los nodos de la Figura 1b, donde $a = x_{i-1}$ y $x = x_i$.

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i-1} - x_i) + R_1 \leftrightarrow \tag{9}$$

$$\leftrightarrow f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}. \tag{10}$$

A la expresión (10) se le conoce como **diferencia finita regresiva**.

Por último, presentaremos la expresión de la **diferencia finita central**, cuyos nodos se ilustran en la Figura 1c. Para obtenerla, restamos (7) menos (9), de modo que

$$f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}) = f'(x_i)(x_{i+1} - x_{i-1}) \leftrightarrow$$

$$\leftrightarrow f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}}. \tag{11}$$

Habitualmente, los nodos están equiespaciados, por lo que

$$x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = h, \quad x_{i+1} - x_{i-1} = 2h,$$

así que la diferencia finita progresiva (8) también se escribe como

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h},$$

la diferencia finita regresiva (10) como

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h},$$

y la diferencia finita central (11) como

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}.$$

Accede al vídeo: Error en las aproximaciones de las derivadas por diferencias finitas

Ejemplo 5. Discretiza la expresión

$$y'(x) - y(x) + x = 0,$$

donde $a \leq x \leq b$, utilizando diferencias finitas progresivas.

Para discretizar una ecuación, definimos el tamaño de paso

$$h = \frac{b-a}{n},$$

a partir del cual discretizamos la variable independiente

$$x_i = a + ih, \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

La función $y(x)$ quedará discretizada por $y(x_i)$, lo que escribimos como y_i. Para la función derivada $y'(x)$ utilizaremos la aproximación por diferencias finitas progresivas, de modo que

$$y'(x) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h}.$$

Reuniendo todos los términos, obtenemos

$$y'(x) - y(x) + x = 0 \rightarrow \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - y(x_i) + x_i = 0 \leftrightarrow$$

$$\leftrightarrow \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - y_i + x_i = 0 \leftrightarrow y_{i+1} - (1+h)y_i + hx_i = 0.$$