Computación Numérica

Tema 1. Conceptos básicos (I): Errores

Irene Parada

irene.parada@upc.edu

Departamento de Matemáticas Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech

12 de febrero de 2024

Introducción

Introducción

Durante los siglos XX y XXI, se han aplicado modelos matemáticos avanzados en diferentes áreas del conocimiento como la ingeniería, la medicina, la economía o las ciencias sociales. A menudo, las aplicaciones generan problemas matemáticos que, debido a su complejidad, no pueden resolverse de manera exacta.

La matemática computacional se ocupa del diseño, análisis e implementación de algoritmos para obtener soluciones numéricas aproximadas de modelos físicos, químicos, matemáticos, estadísticos, ...

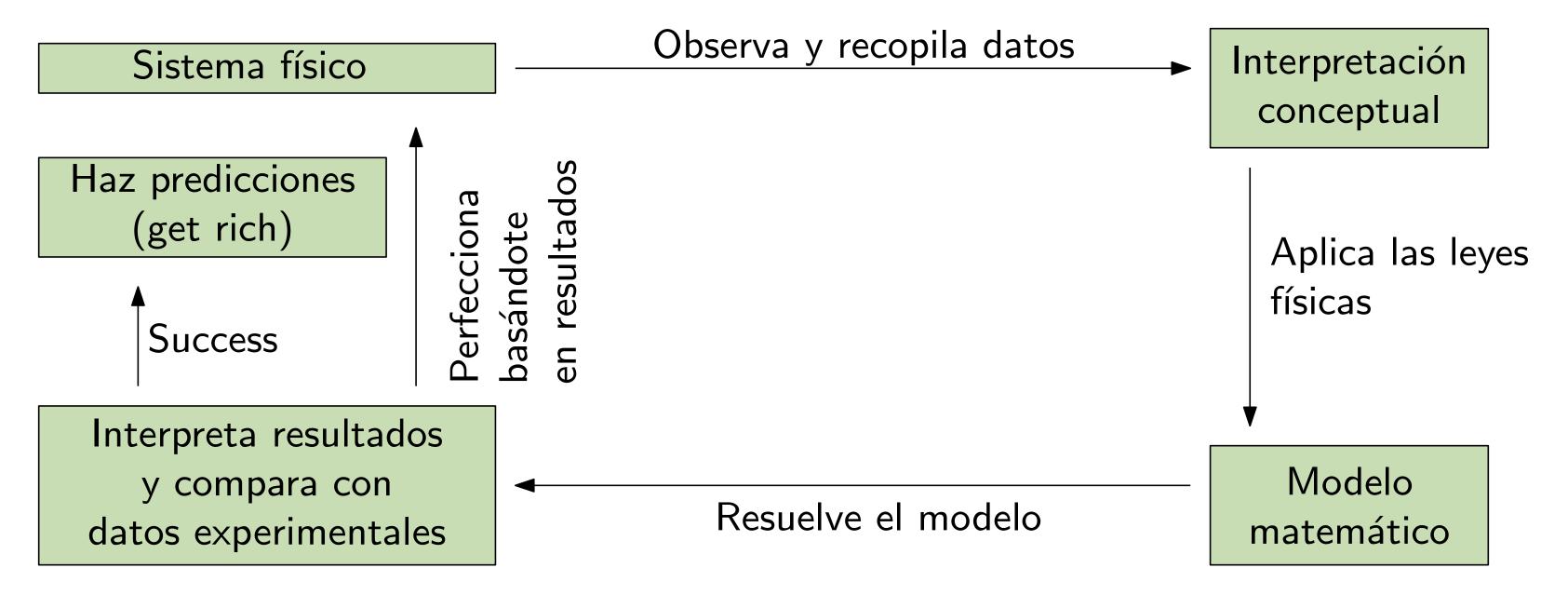
Además, los métodos numéricos desempeñan un papel fundamental en machine learning, deep learning, artificial intelligence y data science, por ejemplo, un elemento clave en deep learning es el entrenamiento y ajuste de parámetros en la red neuronal subyacente mediante la minimización (aproximada) de funciones de pérdida.

Introducción

Ante un hecho real, la modelización consiste en construir un conjunto de fórmulas y ecuaciones que lo representen de la manera más fiel posible, de manera que nos permita realizar predicciones correctas.

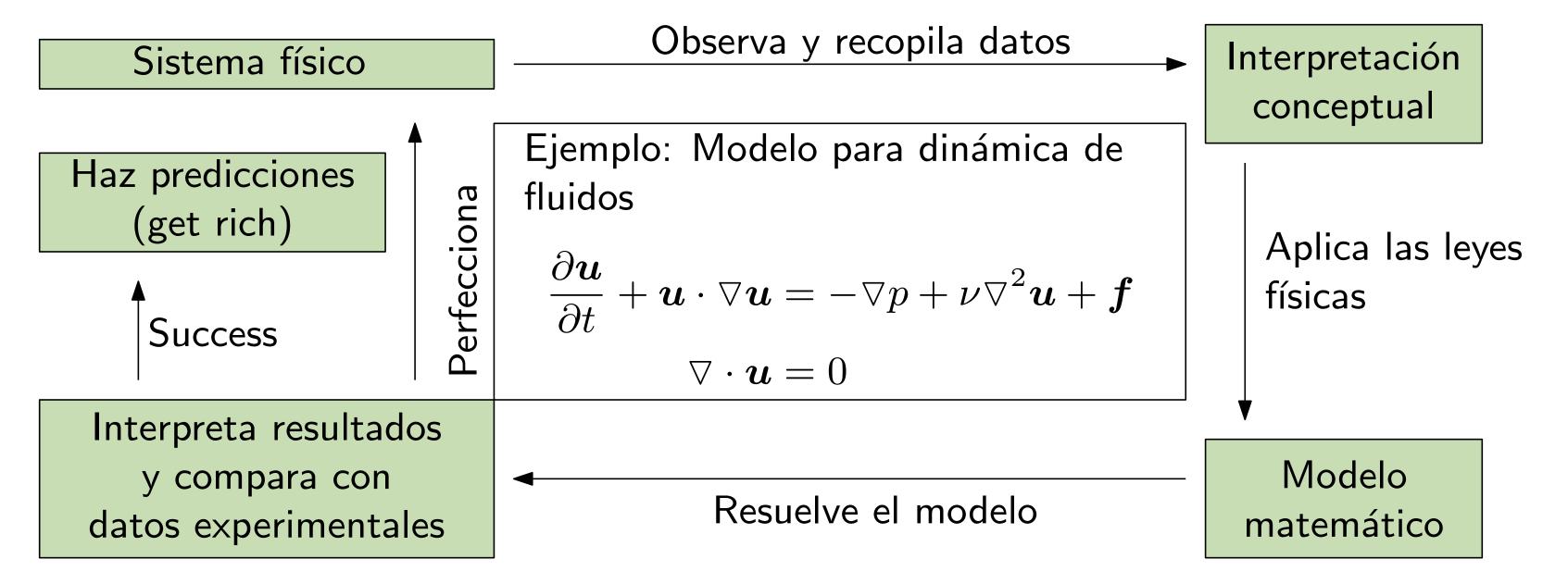
Los modelos resultantes casi nunca pueden resolverse por completo utilizando métodos de análisis (lápiz y papel). La simulación en un ordenador nos permite interpretar los resultados y compararlos con los datos experimentales.

Modelización



Frente a un hecho real, la modelización consiste en construir un conjunto de fórmulas y ecuaciones que lo representen de la manera más fiel posible, permitiéndonos realizar predicciones correctas.

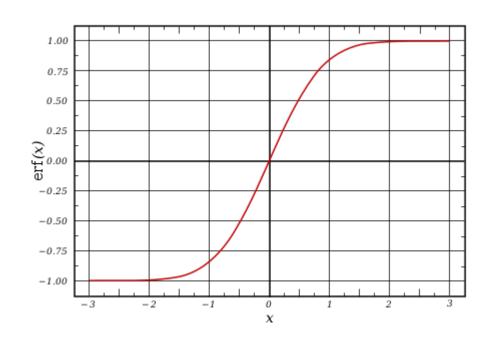
Modelización



Los modelos resultantes casi nunca pueden resolverse por completo utilizando métodos de análisis (lápiz y papel). La simulación en un ordenador nos permite interpretar los resultados y compararlos con los datos experimentales.

Función error

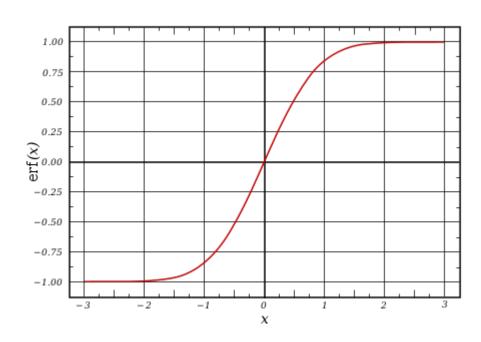
$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$



Se denomina función error y se aplica si los resultados de un conjunto de medidas se describen por una distribución normal con media cero y desviación estándar σ . Luego, erf $\left(\frac{\varepsilon}{\sigma\sqrt{2}}\right)$ es la probabilidad de que el error en una de las medidas se encuentre entre $-\varepsilon$ y ε .

Función error

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \qquad {\stackrel{{}_{\bullet}^{0.25}}{\stackrel{{}_{\bullet}}{\downarrow}_{0.00}}}$$



- Se denomina función error y se aplica si los resultados de un conjunto de medidas se describen por una distribución normal con media cero y desviación estándar σ . Luego, erf $\left(\frac{\varepsilon}{\sigma\sqrt{2}}\right)$ es la probabilidad de que el error en una de las medidas se encuentre entre $-\varepsilon$ y ε .
- Pero la integral definida no se puede expresar mediante funciones elementales.

► ¡Es necesario obtener aproximaciones numéricas!

Función error

La serie de potencias en un entorno de 0 es:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)}$$

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \frac{x^7}{42} + \frac{x^9}{216} - \dots \right)$$

Serie de convergencia lenta. Es conocida por su mala convergencia cuando x>1.

Un algoritmo (matemático) es un procedimiento formal que describe una secuencia ordenada y finita de operaciones para realizar un número finito de veces con el fin de obtener la solución a un problema.

Los algoritmos son como recetas con bloques básicos de operaciones de suma, resta, multiplicación y división, así como las estructuras de programación: for, while y if, si se resuelve con la ayuda de ordenadores.

En general, cualquier algoritmo que desarrollemos o utilicemos debe ser: exacto, estable, eficiente y robusto.

Exacto ¿Qué tan bueno es el algoritmo en la aproximación de la cantidad a calcular (accuracy/precision)?

Estable ¿La salida del algoritmo es sensible a pequeños cambios en los datos de entrada (stability)?

Eficiente ¿Cuánto cuesta (en número de operaciones) obtener una aproximación razonable (efficiency)?

Robusto ¿Para cuántos casos puedo utilizar el algoritmo (robustness)?

En algunos casos, también importa la memoria necesaria (storage) y si es paralelizable (parallelization).

En este curso trabajaremos con dos tipos de algoritmos

Directos Obtienen la solución en un número finito de pasos.

Ejemplos Ecuaciones de segundo grado. Eliminación gaussiana.

Iterativos Generan una secuencia de valores aproximados que convergen a la solución cuando el número de pasos tiende a infinito.

Ejemplo El siguiente método iterativo converge a $\sqrt{2}$.

$$x_k = \frac{1}{2} \left(x_{k-1} + \frac{2}{x_{k-1}} \right) \quad k \ge 1 \text{ y } x_0 = 3$$

Los Babilonios calcularon $\sqrt{2}$ hace 3000 años con seis decimales! (usaban un sistema mixto con bases 10 y 60).

Los Babilonios calcularon $\sqrt{2}$ hace 3000 años con seis decimales! (usaban un sistema mixto con bases 10 y 60).

ldea: cada lado de un cuadrado es la raíz cuadrada del área.

$$bh = \ell^2$$

$$b$$

Los Babilonios calcularon $\sqrt{2}$ hace 3000 años con seis decimales! (usaban un sistema mixto con bases 10 y 60).

ldea: cada lado de un cuadrado es la raíz cuadrada del área.

$$bh = \ell^2$$

$$b$$

- 1. Escoger dos números b y h tales que $bh = \ell^2$.
- 2. Si $h \approx b$, ir al paso 6; si no, ir al paso 3.
- 3. Asignar $b \leftarrow \frac{h+b}{2}$.
- 4. Asignar $h \leftarrow \frac{\ell^2}{b}$.
- 5. Ir al paso 2.
- 6. Resultado: $\sqrt{\ell} \approx b$.

Los Babilonios calcularon $\sqrt{2}$ hace 3000 años con seis decimales! (usaban un sistema mixto con bases 10 y 60).

ldea: cada lado de un cuadrado es la raíz cuadrada del área.

$$bh = \ell^2$$
 b

Función recursiva:

$$x_k = \frac{1}{2} \left(x_{k-1} + \frac{\ell^2}{x_{k-1}} \right)$$
 5. Ir all paso 2.

$$x_0 = \text{e.g. } x^2$$

- 1. Escoger dos números b y h tales que $bh = \ell^2$.
- 2. Si $h \approx b$, ir al paso 6; si no, ir al paso 3.
 - 3. Asignar $b \leftarrow \frac{h+b}{2}$.
 - 4. Asignar $h \leftarrow \frac{\ell^2}{h}$.

 - 6. Resultado: $\sqrt{\ell} \approx b$.

¿Se os ocurre alguna otra forma de calcular la raíz cuadrada de un número?

¿Se os ocurre alguna otra forma de calcular la raíz cuadrada de un número?

¿Se os ocurre alguna otra forma de calcular la raíz cuadrada de un número?

Resolver $f(x) = x^2 - 2$.

Método de Newton-Raphson:

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$$

Sustituyendo la función y su derivada f'(x) = 2x, la fórmula específica para este problema es:

$$x_k = x_{k-1} - \frac{x_{k-1}^2 - 2}{2x_{k-1}} = \frac{1}{2} \left(x_{k-1} - \frac{2}{x_{k-1}} \right)$$

Ejemplo. El siguiente método iterativo converge a $\sqrt{2}$.

$$x_k = \frac{1}{2} \left(x_{k-1} + \frac{2}{x_{k-1}} \right) \quad k \ge 1 \text{ y } x_0 = 3$$

Las seis primeras iteraciones de $x_k = \frac{1}{2} \left(x_{k-1} + \frac{2}{x_{k-1}} \right)$ son:

n	x_n	$ x_n - \sqrt{2} $
0	3.0000000000000	$1.58578643762690 \times 10^{0}$
1	1.83333333333333	$4.19119770960238 \times 10^{-1}$
2	1.462121212121212	$4.79076497481170 \times 10^{-2}$
3	1.414998429894803	$7.84867521707922 \times 10^{-4}$
4	1.414213780047198	$2.17674102520604 \times 10^{-7}$
5	1.414213562373112	$1.66533453693773 \times 10^{-14}$
6	1.414213562373095	$2.22044604925031 \times 10^{-16}$

Fuentes de error

Problema. Calcular la masa de la Tierra.

Solución. Utilizando la Ley de Gravitación Universal de Newton y la ley de caída de los cuerpos de Galileo, obtenemos

$$M = \frac{gR^2}{G},$$

donde g es la aceleración de la gravedad, R es el radio de la Tierra y G es la constante de gravitación, con valores experimentales

$$g = 9.80665 \,\mathrm{m \, s^{-2}}$$
 $G = 6.67430 \times 10^{-11} \,\mathrm{m^3/kg/s^2}$ $R = 6371.0 \,\mathrm{km}$.

Por lo tanto, $M=5.9639\times 10^{24}\,\mathrm{kg}$.

Nota $M=5.9722\times 10^{24}\,\mathrm{kg}$ (Wikipedia 2024, NASA).

 $M=5.9742\times 10^{24}\,\mathrm{kg}$ (J.M.A. Danby, Fundamentals of Celestial Mechanics, 1992).

Fuentes de error

Fijaremos cuatro grandes fuentes de error que pueden influir en una aproximación "pobre" del hecho observado:

Error de modelización Elección equivocada o inapropiada de modelo.

Error experimental Mediciones incorrectas o deficientes.

- Errores aleatorios. Las medidas.
- Errores sistemáticos. Calibración incorrecta.
- Errores aberrantes. También hay un factor humano: error por descuido o ignorancia.

Error de redondeo Error acumulado debido a la ejecución de nuestro modelo donde las operaciones descritas por el algoritmo se realizan con un número finito de dígitos.

Error de truncamiento/discretización Aproximaciones discretas y finitas del modelo matemático (algoritmos).

Algoritmos y error

Este curso se centrará principalmente en estudiar los errores en el proceso de cálculo del algoritmo empleado para resolver:

De truncamiento Convertir un proceso infinito en finito.

$$\operatorname{erf}(x) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \frac{x^7}{42} + \frac{x^9}{216} \right)$$

De redondeo Debidos a la aritmética de punto flotante del ordenador. Menos importantes que los de truncamiento, pero pueden volverse catastróficos.

Algoritmos y error

Este curso se centrará principalmente en estudiar los errores en el proceso de cálculo del algoritmo empleado para resolver:

De truncamiento Convertir un proceso infinito en finito.

$$\operatorname{erf}(x) \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \frac{x^7}{42} + \frac{x^9}{216} \right)$$

De redondeo Debidos a la aritmética de punto flotante del ordenador. Menos importantes que los de truncamiento, pero pueden volverse catastróficos.

También veremos como se propagan los errores.

Algoritmos y error

Nos centraremos en estudiar los errores en el proceso de cálculo, errores producidos al interrumpir los procesos infinitos, errores de redondeo y de truncamiento.

Para ello, haremos lo siguiente:

- Definir lo que entendemos por error.
- Analizar los errores asociados a la aritmética flotante.
- Presentar algoritmos que minimizan este error.

Error absoluto y error relativo

Error absoluto

Denotamos con x el valor exacto y con \widetilde{x} un valor aproximado.

Definición

$$e_a(x) = \Delta x = x - \widetilde{x}$$

Nótese que en ocasiones solo es relevante el valor absoluto y a veces se usa $e_a(x) = |x - \widetilde{x}|$.

Práctica

$$x = 1/3,$$
 $\widetilde{x} = 0.3333$
 $x = \pi,$ $\widetilde{x} = 3.141$

Usualmente se trabaja con cotas del error absoluto, se denota con ε_a una cota del error absoluto: $|e_a(x)| \leq \varepsilon_a$.

Una deficiencia que tiene el concepto es que no considera la magnitud del valor y depende de las unidades.

Error relativo

Denotamos por x el valor exacto y por \widetilde{x} un valor aproximado.

Definición

$$e_r(x) = \frac{\Delta x}{|x|}$$

Práctica

$$x = 1/3,$$
 $\widetilde{x} = 0.3333$ $x = \pi,$ $\widetilde{x} = 3.141$

Error relativo aproximado: $e_r(\widetilde{x}) = \frac{\Delta x}{|\widetilde{x}|}$.

Cota del error relativo ε_r : $|e_r(x)| \leq \varepsilon_r$.

Error relativo porcentual: el error relativo expresado como porcentaje, es decir, el error relativo multiplicado por 100.

Definición cifras decimales correctas

Diremos que \widetilde{x} es una aproximación a x con d cifras decimales correctas si d es el número natural más grande tal que

$$|x - \widetilde{x}| < 0.5 \cdot 10^{-d}$$

Definición cifras decimales correctas

Diremos que \widetilde{x} es una aproximación a x con d cifras decimales correctas si d es el número natural más grande tal que

$$|x - \tilde{x}| < 0.5 \cdot 10^{-d}$$
 $d = \lfloor -\log_{10}(2|e_a|) \rfloor$

Definición cifras decimales correctas

Diremos que \widetilde{x} es una aproximación a x con d cifras decimales correctas si d es el número natural más grande tal que

$$|x - \widetilde{x}| \le 0.5 \cdot 10^{-d}$$
 $d = \lfloor -\log_{10}(2|e_a|) \rfloor$

Definición cifras decimales correctas

Diremos que \widetilde{x} es una aproximación a x con d cifras decimales correctas si d es el número natural más grande tal que

$$|x - \widetilde{x}| < 0.5 \cdot 10^{-d}$$
 $d = |-\log_{10}(2|e_a|)|$

Definición cifras significativas correctas

Diremos que \widetilde{x} es una aproximación a x con t cifras significativas si t es el número natural más grande tal que

$$\frac{|x-\widetilde{x}|}{|x|} < 0.5 \cdot 10^{-t}$$

(A veces: dígitos de la mantissa (no ceros de posición) de exponente $\geq 10^{-d}$.)

Definición cifras decimales correctas

Diremos que \widetilde{x} es una aproximación a x con d cifras decimales correctas si d es el número natural más grande tal que

$$|x - \widetilde{x}| < 0.5 \cdot 10^{-d}$$
 $d = \lfloor -\log_{10}(2|e_a|) \rfloor$

Definición cifras significativas correctas

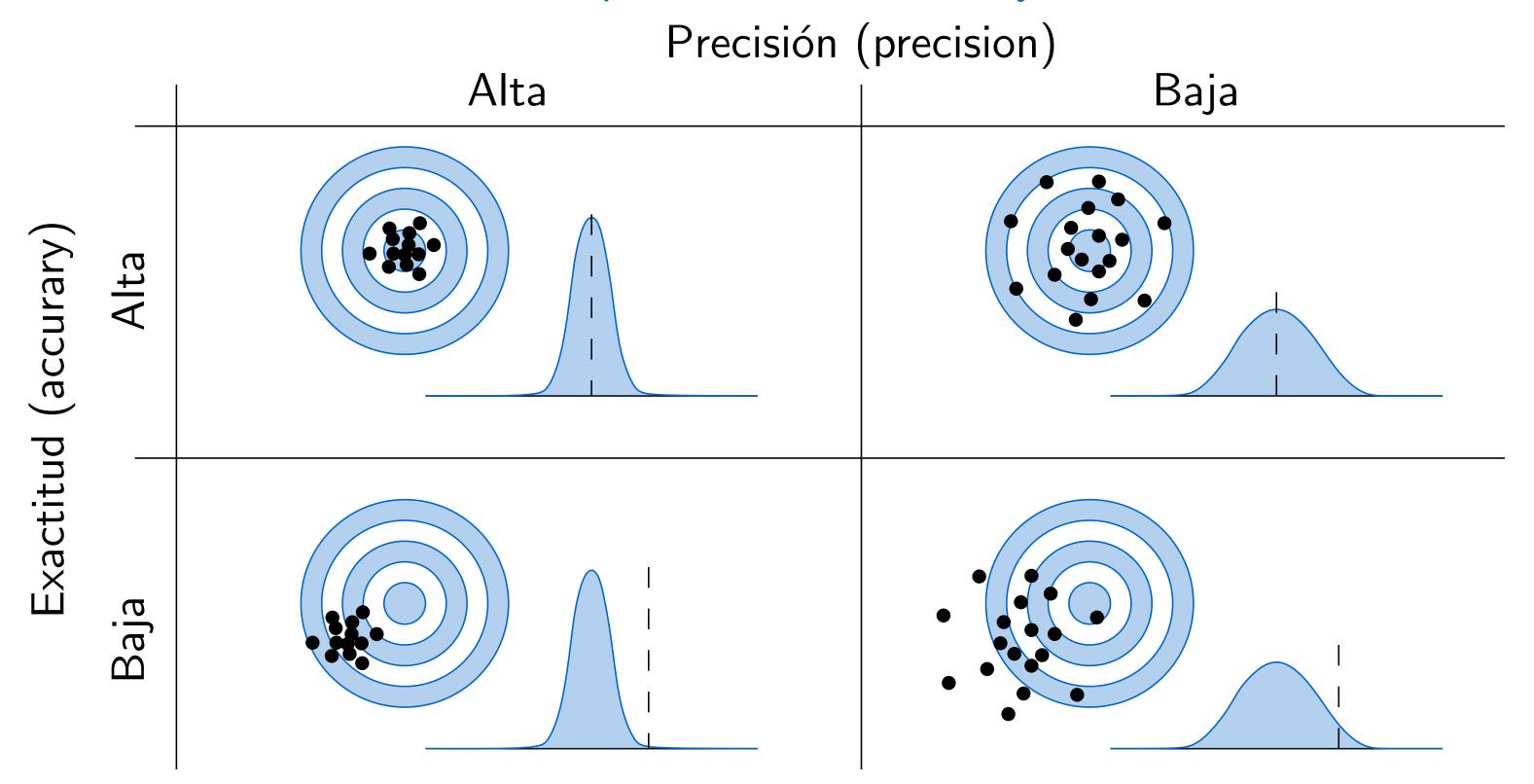
Diremos que \widetilde{x} es una aproximación a x con t cifras significativas si t es el número natural más grande tal que

$$\frac{|x - \widetilde{x}|}{|x|} < 0.5 \cdot 10^{-t}$$
 $t = \lfloor -\log_{10}(2|e_r|) \rfloor$

(A veces: dígitos de la mantissa (no ceros de posición) de exponente $\geq 10^{-d}$.)

Precisión y exactitud

Whats the difference between precision and accuracy?



Estimaciones: cotas de error

Para
$$x=\pi$$
 y $\widetilde{x}=3.141$, tenemos

$$\Delta x = 0.00059265...$$
 $\varepsilon_x = 0.000188647...$ $|\Delta x| \le 0.6 \cdot 10^{-3}$ $|\varepsilon_x| \le 0.2 \cdot 10^{-3} = 0.02\%$

Estimaciones (II)

Sea
$$x = \sqrt{2} = 1.414213562...$$
 y $\widetilde{x} = 1.414$, entonces

$$e_a(\sqrt{2}) = 0.0002135...$$

$$e_r(\sqrt{2}) = 0.00015099$$

y las cotas podrían ser

$$\varepsilon_a = 0.0003,$$

$$\varepsilon_r = 0.0002.$$

Autoevaluación

Ejercicio 1 Calcula el error absoluto, el error relativo y el error relativo aproximado de las cantidades:

$$x = 9234.567,$$

$$\tilde{x} = 9234.564;$$

$$x = 0.634$$
,

$$\tilde{x} = 0.631.$$

¿Qué se observa?

Ejercicio 2 Calcula el error absoluto, el relativo y las cifras decimales correctas de

las cantidades:

$$x = 1/3,$$

$$\tilde{x} = 0.3333,$$

$$x = 1/3,$$

$$\tilde{x} = 0.3334,$$

Ejercicio 3 Calcula las cifras significativas correctas de las cantidades:

$$x = 10000,$$

$$\tilde{x} = 9998,$$

$$x = 10000$$
,

$$\tilde{x} = 9999.99998,$$

$$x = 0.0000025$$

$$\tilde{x} = 0.0000018,$$

Clases de errores Errores de redondeo

Errores de redondeo: errores en la representación de números reales

La representación decimal de un **número real** se reduce para representar/utilizar los números reales en el ordenador o en cálculos manuales.

La representación decimal de un número se puede reducir por truncamiento o por redondeo a un número finito de dígitos.

Ejemplo. Representar $\frac{2}{3}$ mediante una expresión decimal de 5 dígitos.

Errores de redondeo: redondear números decimales

Sea x un número decimal positivo de la forma $x=0.d_1d_2\ldots d_{n-1}d_nd_{n+1}\ldots d_m$ entonces, \widetilde{r}_x , el redondeo de x a n cifras decimales (n< m) depende del valor del dígito n+1.

$$\widetilde{r_x} = 0.d_1 d_2 \dots d_{n-1} d,$$

$$d = \begin{cases} d \\ d \end{cases}$$

$$d = \begin{cases} d_n & \text{si } d_{n+1} \in \{0, 1, 2, 3, 4\}, \\ d_n + 1 & \text{si } d_{n+1} \in \{5, 6, 7, 8, 9\}. \end{cases}$$

Errores de redondeo: redondear números decimales

Sea x un número decimal positivo de la forma $x=0.d_1d_2\ldots d_{n-1}d_nd_{n+1}\ldots d_m$ entonces, \widetilde{r}_x , el redondeo de x a n cifras decimales (n< m) depende del valor del dígito n+1.

$$\widetilde{r_x} = 0.d_1 d_2 \dots d_{n-1} d,$$

$$d = \begin{cases} d_n & \text{si } d_{n+1} \in \{0, 1, 2, 3, 4\}, \\ d_n + 1 & \text{si } d_{n+1} \in \{5, 6, 7, 8, 9\}. \end{cases}$$

Teorema

Si el número x se redondea, y $\widetilde{r_x}$ es su valor redondeado a n dígitos, entonces la cota del error absoluto es

$$|x - \widetilde{r_x}| \le \frac{1}{2} \cdot 10^{-n}.$$

Errores de redondeo: redondear números decimales

Sea x un número decimal positivo de la forma $x=0.d_1d_2\ldots d_{n-1}d_nd_{n+1}\ldots d_m$ entonces, \widetilde{r}_x , el redondeo de x a n cifras decimales (n< m) depende del valor del dígito n+1.

$$\widetilde{r_x} = 0.d_1 d_2 \dots d_{n-1} d,$$

$$d = \begin{cases} d_n & \text{si } d_{n+1} \in \{0, 1, 2, 3, 4\}, \\ d_n + 1 & \text{si } d_{n+1} \in \{5, 6, 7, 8, 9\}. \end{cases}$$

Teorema

Si el número x se redondea, y $\widetilde{r_x}$ es su valor redondeado a n dígitos, entonces la cota del error absoluto es

$$|x - \widetilde{r_x}| \le \frac{1}{2} \cdot 10^{-n}.$$

Ejercicio. Representa los números 0.1735499, 0.99995000 y 0.4321609 con cuatro dígitos decimales mediante redondeo (incluyendo el error).

Errores de redondeo: truncar números decimales

La aproximación por truncamiento del número x a n dígitos (n < m) es el número $\hat{t_x}$ obtenido al descartar todos los dígitos posteriores al dígito n.

$$x = 0.d_1 d_2 \dots d_n \dots d_m \xrightarrow[n \text{ dígitos}]{\text{truncar}} \hat{t_x} = 0.d_1 d_2 \dots d_n,$$

Errores de redondeo: truncar números decimales

La aproximación por truncamiento del número x a n dígitos (n < m) es el número $\hat{t_x}$ obtenido al descartar todos los dígitos posteriores al dígito n.

$$x = 0.d_1 d_2 \dots d_n \dots d_m \xrightarrow[n \text{ dígitos}]{\text{truncar}} \hat{t_x} = 0.d_1 d_2 \dots d_n,$$

Teorema

Si el número x se trunca y $\hat{t_x}$ es su valor aproximado a n dígitos, entonces la cota del error absoluto es

$$|x - \hat{t_x}| \le 10^{-n}$$
.

Errores de redondeo: truncar números decimales

La aproximación por truncamiento del número x a n dígitos (n < m) es el número $\hat{t_x}$ obtenido al descartar todos los dígitos posteriores al dígito n.

$$x = 0.d_1 d_2 \dots d_n \dots d_m \xrightarrow[n \text{ dígitos}]{\text{truncar}} \hat{t_x} = 0.d_1 d_2 \dots d_n,$$

Teorema

Si el número x se trunca y $\hat{t_x}$ es su valor aproximado a n dígitos, entonces la cota del error absoluto es

$$|x - \hat{t_x}| \le 10^{-n}$$
.

Ejercicio. Representa los números 0.1735499, 0.99995000 y 0.4321609 con cuatro dígitos por truncamiento (incluyendo el error).

Errores de redondeo: precisión implícita

Para escribir una medida como un número decimal (o binario, o...), hay un nivel de precisión implícito, que, si no se menciona lo contrario, es de 0.5 unidades en la última posición escrita. De lo contrario, es conveniente escribir los datos con el error máximo explícitamente.

- \triangleright Si escribimos 23.4567, debemos entender 23.4567 \pm 0.00005.
- De lo contrario, escribiríamos la cota del error, ej. 23.4567 ± 0.0012 .
- La precisión implícita de Matlab siempre es la misma.

Cuando se muestre un valor aproximado, es necesario que la precisión refleje la exactitud (error absoluto/relativo).

Clases de errores

Errores de truncamiento / discretización

Errores de truncamiento / discretización

Los errores de truncamiento surgen al aproximar un proceso infinito por uno finito. $5 c^x$

 $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \frac{x^7}{42} + \frac{x^9}{216} \right)$

Son errores de discretización o al sustituir expresiones continuas por discretas.

- Un proceso numérico es generalmente una aproximación del modelo matemático obtenido como función de un parámetro de discretización h, que supondremos positivo.
- ightharpoonup Si, cuando h tiende a 0, el proceso numérico devuelve la solución del modelo matemático, decimos que el proceso numérico es convergente.
- Además, si el error (absoluto o relativo) puede acotarse en función de h, de la forma

$$e_d \le C \cdot h^p$$
, $C > 0$, $p > 0 \Leftrightarrow e_d = \mathcal{O}(h^p)$,

se dice que el método es convergente de orden p y escribimos $e_d = \mathcal{O}(h^p)$.

Errores de truncamiento / discretización

Los errores de truncamiento surgen al aproximar un proceso infinito por uno finito. $5 c^x$

 $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \approx \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \frac{x^7}{42} + \frac{x^9}{216} \right)$

Son errores de discretización o al sustituir expresiones continuas por discretas.

- Un proceso numérico es generalmente una aproximación del modelo matemático obtenido como función de un parámetro de discretización h, que supondremos positivo.
- ightharpoonup Si, cuando h tiende a 0, el proceso numérico devuelve la solución del modelo matemático, decimos que el proceso numérico es convergente.
- Además, si el error (absoluto o relativo) puede acotarse en función de h, de la forma $e_d \leq C \cdot h^p, \quad C > 0, \quad p > 0 \quad \Leftrightarrow \quad e_d = \mathcal{O}(h^p), \quad \text{notación Big O}$

se dice que el método es convergente de orden p y escribimos $e_d = \mathcal{O}(h^p)$.

Errores de truncamiento

Truncamiento de un proceso infinito

$$S = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n a_n \approx S_k = \sum_{n=1}^{k} (-1)^n a_n$$

Errores de truncamiento

Truncamiento de un proceso infinito

$$S = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^n a_n \approx S_k = \sum_{n=1}^{k} (-1)^n a_n$$

Serie de Leibniz:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{2n+1} = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \dots = \frac{\pi}{4}$$

En ocasiones llamada serie de Madhava-Leibniz, ya que fue descubierta por el matemático indio Madhava de Sangamagrama o sus seguidores en los siglos XIV-XV y fue redescubierta de manera independiente por James Gregory en 1671 y Leibniz en 1673. Es un caso especial de la serie de Taylor para $\arctan 1 = \pi/4$.

Enunciado por Taylor en 1712 (pero antes descubierto por Gregory en 1671) permite obtener aproximaciones polinómicas de una función f en un entorno de un punto x_0 en el que sea diferenciable. Además, permite acotar el error.

Enunciado por Taylor en 1712 (pero antes descubierto por Gregory en 1671) permite obtener aproximaciones polinómicas de una función f en un entorno de un punto x_0 en el que sea diferenciable. Además, permite acotar el error.

Teorema de Taylor (con resto de Lagrange, 1797)

Sea $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, diferenciable k+1 veces en el intervalo abierto entre x_0 y x y con $f^{(k+1)}$ continua en el intervalo cerrado entre x_0 y x. Entonces:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^n + R_k(x)$$

con un ξ entre x y x_0 tal que

$$R_k(x) = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!} (x - x_0)^{k+1}.$$

Enunciado por Taylor en 1712 (pero antes descubierto por Gregory en 1671) permite obtener aproximaciones polinómicas de una función f en un entorno de un punto x_0 en el que sea diferenciable. Además, permite acotar el error.

Teorema de Taylor (con resto de Lagrange, 1797)

Sea $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, diferenciable k+1 veces en el intervalo abierto entre x_0 y x y con $f^{(k+1)}$ continua en el intervalo cerrado entre x_0 y x. Entonces:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^n + R_k(x)$$

con un ξ entre x y x_0 tal que

$$R_k(x) = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!} (x - x_0)^{k+1}.$$

Enunciado por Taylor en 1712 (pero antes descubierto por Gregory en 1671) permite obtener aproximaciones polinómicas de una función f en un entorno de un punto x_0 en el que sea diferenciable. Además, permite acotar el error.

Teorema de Taylor (con resto de Lagrange, 1797)

Sea $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, diferenciable k+1 veces en el intervalo abierto entre x_0 y x y con $f^{(k+1)}$ continua en el intervalo cerrado entre x_0 y x. Entonces:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^n + R_k(x)$$

con un ξ entre x y x_0 tal que

tal que
$$R_k(x) = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!} (x - x_0)^{k+1}.$$
 $\mathcal{O}\left((x - x_0)^{k+1}\right)$

Enunciado por Taylor en 1712 (pero antes descubierto por Gregory en 1671) permite obtener aproximaciones polinómicas de una función f en un entorno de un punto x_0 en el que sea diferenciable. Además, permite acotar el error.

Teorema de Taylor (con resto de Lagrange, 1797)

Sea $f: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, diferenciable k+1 veces en el intervalo abierto entre x_0 y x y con $f^{(k+1)}$ continua en el intervalo cerrado entre x_0 y x. Entonces:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \dots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^n + R_k(x)$$

con un ξ entre x y x_0 tal que

tal que
$$R_k(x) = \frac{f^{(k+1)}(\xi)}{(k+1)!} (x - x_0)^{k+1}.$$

$$P_k(x)$$

$$\mathcal{O}\left((x - x_0)^{k+1}\right)$$

El polinomio de Taylor de orden k de f en el punto x_0 , $P_k(x)$, es la mejor aproximación posible con un polinomio de tal grado.

Errores de discretización

Por definición, la derivada de una función f(x) en un punto x_0 es:

$$f'(x_0) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Podemos realizar aproximaciones numéricas (h > 0):

Derivación numérica

De la fórmula de Taylor para $f(x_0 + h)$ se obtiene:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(\xi)}{2}h,$$

con ξ entre x_0 y $x_0 + h$. Luego,

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad e_d = \mathcal{O}(h)$$

Clases de errores Propagación del error

Problema: Si queremos calcular f(x) para un cierto valor x dado con una cota de error absoluto ε , ¿cómo podemos estimar el error en la evaluación?

Problema: Si queremos calcular f(x) para un cierto valor x dado con una cota de error absoluto ε , ¿cómo podemos estimar el error en la evaluación? Teorema del valor medio. Sea $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ una función continua y derivable en (a,b). Entonces, existe un punto $\xi=\xi_{a,b}$ dentro del intervalo (a,b) tal que $f(b)-f(a)=f'(\xi)(b-a)$.

Problema: Si queremos calcular f(x) para un cierto valor x dado con una cota de error absoluto ε , ¿cómo podemos estimar el error en la evaluación?

Teorema del valor medio. Sea $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ una función continua y derivable en (a,b). Entonces, existe un punto $\xi=\xi_{a,b}$ dentro del intervalo (a,b) tal que

$$f(b) - f(a) = f'(\xi)(b - a).$$

Sea $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ es una función derivable, x un número real, \widetilde{x} una aproximación de x con cota de error $|\Delta x|$, $x=\widetilde{x}\pm |\Delta x|$, el teorema del valor medio dice

$$|f(x) - f(\widetilde{x})| = |f'(\xi)||x - \widetilde{x}|, \text{ con } \xi \text{ en } (\widetilde{x} - |\Delta x|, \widetilde{x} + |\Delta x|).$$

Problema: Si queremos calcular f(x) para un cierto valor x dado con una cota de error absoluto ε , ¿cómo podemos estimar el error en la evaluación?

Teorema del valor medio. Sea $f:[a,b] \to \mathbb{R}$ una función continua y derivable en (a,b). Entonces, existe un punto $\xi = \xi_{a,b}$ dentro del intervalo (a,b) tal que

$$f(b) - f(a) = f'(\xi)(b - a).$$

Sea $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ es una función derivable, x un número real, \widetilde{x} una aproximación de x con cota de error $|\Delta x|$, $x=\widetilde{x}\pm |\Delta x|$, el teorema del valor medio dice

$$|f(x) - f(\widetilde{x})| = |f'(\xi)||x - \widetilde{x}|, \text{ con } \xi \text{ en } (\widetilde{x} - |\Delta x|, \widetilde{x} + |\Delta x|).$$

$$\downarrow \qquad \qquad \leq \varepsilon$$

$$\leq \max_{\zeta \in [\widetilde{x} - \varepsilon, \widetilde{x} + \varepsilon]} |f'(\zeta)|$$

Problema: Si queremos calcular f(x) para un cierto valor x dado con una cota de error absoluto ε , ¿cómo podemos estimar el error en la evaluación?

Teorema del valor medio. Sea $f:[a,b] \to \mathbb{R}$ una función continua y derivable en (a,b). Entonces, existe un punto $\xi = \xi_{a,b}$ dentro del intervalo (a,b) tal que

$$f(b) - f(a) = f'(\xi)(b - a).$$

Sea $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ es una función derivable, x un número real, \widetilde{x} una aproximación de x con cota de error $|\Delta x|$, $x=\widetilde{x}\pm |\Delta x|$, el teorema del valor medio dice

$$|f(x) - f(\widetilde{x})| = |f'(\xi)||x - \widetilde{x}|, \text{ con } \xi \text{ en } (\widetilde{x} - |\Delta x|, \widetilde{x} + |\Delta x|).$$

$$\approx |f'(\widetilde{x})| \leq \varepsilon$$

Problema: Si queremos calcular f(x) para un cierto valor x dado con una cota de error absoluto ε , ¿cómo podemos estimar el error en la evaluación?

Teorema del valor medio. Sea $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ una función continua y derivable en (a,b). Entonces, existe un punto $\xi=\xi_{a,b}$ dentro del intervalo (a,b) tal que

$$f(b) - f(a) = f'(\xi)(b - a).$$

Sea $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ es una función derivable, x un número real, \widetilde{x} una aproximación de x con cota de error $|\Delta x|$, $x=\widetilde{x}\pm |\Delta x|$, el teorema del valor medio dice

$$|f(x) - f(\widetilde{x})| = |f'(\xi)||x - \widetilde{x}|, \text{ con } \xi \text{ en } (\widetilde{x} - |\Delta x|, \widetilde{x} + |\Delta x|).$$

Fórmula de la propagación del error absoluto

Efecto que de los errores en datos iniciales $x = \tilde{x} \pm \varepsilon$ en el cálculo de y = f(x):

$$|\Delta f(x)| \approx |f'(\widetilde{x})|\varepsilon.$$

Problema: Si queremos calcular f(x) para un cierto valor x dado con una cota de error absoluto ε , ¿cómo podemos estimar el error en la evaluación?

Teorema del valor medio. Sea $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ una función continua y derivable en (a,b). Entonces, existe un punto $\xi=\xi_{a,b}$ dentro del intervalo (a,b) tal que

$$f(b) - f(a) = f'(\xi)(b - a).$$

Sea $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ es una función derivable, x un número real, \widetilde{x} una aproximación de x con cota de error $|\Delta x|$, $x=\widetilde{x}\pm |\Delta x|$, el teorema del valor medio dice

$$|f(x) - f(\widetilde{x})| = |f'(\xi)||x - \widetilde{x}|, \text{ con } \xi \text{ en } (\widetilde{x} - |\Delta x|, \widetilde{x} + |\Delta x|).$$

Fórmula de la propagación del error absoluto

Efecto que de los errores en datos iniciales $x = \tilde{x} \pm \varepsilon$ en el cálculo de y = f(x):

$$|\Delta f(x)| \approx |f'(\widetilde{x})| \varepsilon$$
 no en los cálculos intermedios

Teorema de Taylor (con resto de Lagrange, 1797)

Sea $f: G \subseteq \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ de clase C^2 (las derivadas parciales de orden 2 existen y son continuas) en G. Dados dos puntos \widetilde{x} and x de G tal que el segmento $\widetilde{x}x$ pertenece a G, entonces:

$$f(x) = f(\widetilde{x}) + \frac{\partial f(\widetilde{x})}{\partial x_1} (x_1 - \widetilde{x}_1) + \frac{\partial f(\widetilde{x})}{\partial x_2} (x_2 - \widetilde{x}_2) + R_2(x)$$

con un ξ en ax tal que

$$R_n(x) = \frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial x_i \partial x_j} (x_i - \widetilde{x}_i)(x_j - \widetilde{x}_j).$$

Teorema de Taylor (con resto de Lagrange, 1797)

Sea $f: G \subseteq \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ de clase C^2 (las derivadas parciales de orden 2 existen y son continuas) en G. Dados dos puntos \widetilde{x} and x de G tal que el segmento $\widetilde{x}x$ pertenece a G, entonces:

$$f(x) = f(\widetilde{x}) + \frac{\partial f(\widetilde{x})}{\partial x_1} (x_1 - \widetilde{x}_1) + \frac{\partial f(\widetilde{x})}{\partial x_2} (x_2 - \widetilde{x}_2) + R_2(x)$$

con un ξ en ax tal que

$$R_n(x) = \frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^2 \frac{\partial^2 f(\xi)}{\partial x_i \partial x_j} (x_i - \widetilde{x}_i)(x_j - \widetilde{x}_j).$$

$$f(x_1, x_2) = f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2) + \frac{\partial f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2)}{\partial x_1} (x_1 - \widetilde{x}_1) + \frac{\partial f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2)}{\partial x_2} (x_2 - \widetilde{x}_2) + \mathcal{O}(\varepsilon_{\bullet}^2)$$

$$||(x_1 - \widetilde{x}_1, x_2 - \widetilde{x}_2)||$$

Dada una función real de dos variables, es posible acotar el error propagado:

Formula de propagación de errores en dos variables

Sea $f: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ es una función diferenciable y $x_1 = \widetilde{x_1} \pm \Delta x_1$ y $x_2 = \widetilde{x_2} \pm \Delta x_2$:

$$|\Delta f| \approx \left| \frac{\partial f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2)}{\partial x_1} \right| |\Delta x_1| + \left| \frac{\partial f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2)}{\partial x_2} \right| |\Delta x_2|.$$

$$f(x_1, x_2) = f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2) + \frac{\partial f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2)}{\partial x_1} (x_1 - \widetilde{x}_1) + \frac{\partial f(\widetilde{x}_1, \widetilde{x}_2)}{\partial x_2} (x_2 - \widetilde{x}_2) + \mathcal{O}(\varepsilon^2)$$

$$||(x_1 - \widetilde{x}_1, x_2 - \widetilde{x}_2)||$$

Propagación del error: operaciones

Suma,
$$g(x_1, x_2) = x_1 + x_2$$

$$x_1 + x_2 = (\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2) \pm (\Delta x_1 + \Delta x_2)$$

Resta,
$$g(x_1, x_2) = x_1 - x_2$$

$$x_1 - x_2 = (\tilde{x}_1 - \tilde{x}_2) \pm (\Delta x_1 + \Delta x_2)$$

Las cotas de los errores absolutos se suman en las operaciones de sumar y restar números reales.

Propagación del error: operaciones

Producto, $g(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2$

$$|\Delta g| \approx |\widetilde{x}_2||\Delta x_1| + |\widetilde{x}_1||\Delta x_2|, \quad \left|\frac{\Delta g}{g}\right| \approx \left|\frac{\Delta x_1}{\widetilde{x}_1}\right| + \left|\frac{\Delta x_2}{\widetilde{x}_2}\right|.$$

División, $g(x_1, x_2) = x_1/x_2$

$$|\Delta g| \approx \left| \frac{1}{\widetilde{x}_2} \right| |\Delta x_1| + \left| \frac{\widetilde{x}_1}{\widetilde{x}_2^2} \right| |\Delta x_2|, \quad \left| \frac{\Delta g}{g} \right| \approx \left| \frac{\Delta x_1}{\widetilde{x}_1} \right| + \left| \frac{\Delta x_2}{\widetilde{x}_2} \right|.$$

Las cotas de los errores relativos se suman en las operaciones de multiplicar y dividir números reales.

FGPE: Fórmula General de Propagació del Error

Sea $f: \mathcal{D} \to \mathbb{R}$, \mathcal{D} una región en \mathbb{R}^n , f una función diferenciable en un entorno del vector \widetilde{x} , donde $x = \widetilde{x} \pm \Delta x$, con $\Delta x = (\Delta x_1, \ldots, \Delta x_n)^t$.

Error absoluto propagado

$$|\Delta f(x)| = |f(x) - f(\widetilde{x})| \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f(\widetilde{x})}{\partial x_i} \right| |\Delta x_i|.$$

La fórmula del error absoluto propagado se obtiene aplicando la fórmula de Taylor a f(x) y $f(\widetilde{x})$.

Ejemplo. Queremos calcular la masa de la Tierra, mediante $M=\frac{gR^2}{G}$, y estimar el error propagado dados:

$$g = 9.80665 \,\mathrm{m \, s^{-2}}$$
 $G = 6.67430 \times 10^{-11} \,\mathrm{m^3/kg/s^2}$ $R = 6371.0 \,\mathrm{km}$.

Ejemplo. Queremos calcular la masa de la Tierra, mediante $M=\frac{gR^2}{G}$, y estimar el error propagado dados:

$$g=9.806\,65\,\mathrm{m\,s^{-2}}$$
 $G=6.674\,30\times10^{-11}\,\mathrm{m^3/kg/s^2}$ $R=6371.0\,\mathrm{km}.$ Solución.

Suponemos que los datos son correctos hasta la última cifra significativa: $\Delta g=\frac{1}{2}\times 10^{-5}$, $\Delta G=\frac{1}{2}\times 10^{-16}$, $\Delta R=\frac{1}{2}\times 10^{2}$.

Ejemplo. Queremos calcular la masa de la Tierra, mediante $M=\frac{gR^2}{G}$, y estimar el error propagado dados:

 $g=9.806\,65\,\mathrm{m\,s^{-2}}$ $G=6.674\,30\times10^{-11}\,\mathrm{m^3/kg/s^2}$ $R=6371.0\,\mathrm{km}.$ Solución.

- Suponemos que los datos son correctos hasta la última cifra significativa: $\Delta g=\frac{1}{2}\times 10^{-5}$, $\Delta G=\frac{1}{2}\times 10^{-16}$, $\Delta R=\frac{1}{2}\times 10^{2}$.
- ► Usando FGPE: $\Delta M \approx \left| \frac{\partial M}{\partial g} \Delta g \right| + \left| \frac{\partial M}{\partial G} \Delta G \right| + \left| \frac{\partial M}{\partial R} \Delta R \right|$.

Ejemplo. Queremos calcular la masa de la Tierra, mediante $M=\frac{gR^2}{G}$, y estimar el error propagado dados:

 $g=9.806\,65\,\mathrm{m\,s^{-2}}$ $G=6.674\,30\times10^{-11}\,\mathrm{m^3/kg/s^2}$ $R=6371.0\,\mathrm{km}.$ Solución.

- Suponemos que los datos son correctos hasta la última cifra significativa: $\Delta g=\frac{1}{2}\times 10^{-5}$, $\Delta G=\frac{1}{2}\times 10^{-16}$, $\Delta R=\frac{1}{2}\times 10^{2}$.
- ▶ Usando FGPE: $\Delta M \approx \left| \frac{\partial M}{\partial g} \Delta g \right| + \left| \frac{\partial M}{\partial G} \Delta G \right| + \left| \frac{\partial M}{\partial R} \Delta R \right|$.
- ▶ Donde, en nuestro caso: $\frac{\partial M}{\partial g} = \frac{R^2}{G}$, $\frac{\partial M}{\partial G} = -\frac{gR^2}{G^2}$, $\frac{\partial M}{\partial R} = \frac{2gR}{G}$.
- Evaluamos las derivadas parciales de M en los datos: $\frac{\partial M}{\partial g} \approx 6.0815 \times 10^{23}$; $\frac{\partial M}{\partial G} \approx -8.9356 \times 10^{34}$; $\frac{\partial M}{\partial R} \approx 1.8722 \times 10^{18}$.

Ejemplo. Queremos calcular la masa de la Tierra, mediante $M=\frac{gR^2}{G}$, y estimar el error propagado dados:

 $g=9.806\,65\,\mathrm{m\,s^{-2}}$ $G=6.674\,30\times10^{-11}\,\mathrm{m^3/kg/s^2}$ $R=6371.0\,\mathrm{km}.$ Solución.

- Suponemos que los datos son correctos hasta la última cifra significativa: $\Delta g = \frac{1}{2} \times 10^{-5}$, $\Delta G = \frac{1}{2} \times 10^{-16}$, $\Delta R = \frac{1}{2} \times 10^{2}$.
- ▶ Usando FGPE: $\Delta M \approx \left| \frac{\partial M}{\partial g} \Delta g \right| + \left| \frac{\partial M}{\partial G} \Delta G \right| + \left| \frac{\partial M}{\partial R} \Delta R \right|$.
- ▶ Donde, en nuestro caso: $\frac{\partial M}{\partial g} = \frac{R^2}{G}$, $\frac{\partial M}{\partial G} = -\frac{gR^2}{G^2}$, $\frac{\partial M}{\partial R} = \frac{2gR}{G}$.
- Evaluamos las derivadas parciales de M en los datos: $\frac{\partial M}{\partial g} \approx 6.0815 \times 10^{23}$; $\frac{\partial M}{\partial G} \approx -8.9356 \times 10^{34}$; $\frac{\partial M}{\partial B} \approx 1.8722 \times 10^{18}$.
- Finalmente, sustituyendo en la FGPE: $\Delta M \approx 1.0112 \times 10^{20}$.
- Por lo tanto, $M \approx (5.9639 \pm 0.0001) \times 10^{24} \mathrm{kg}$

FGPE: Números de condición de un problema

Sea $f: \mathcal{D} \to \mathbb{R}$, \mathcal{D} una región en \mathbb{R}^n , f una función diferenciable en un entorno del vector \widetilde{x} , donde $x = \widetilde{x} \pm \Delta x$, con $\Delta x = (\Delta x_1, \ldots, \Delta x_n)^t$.

Error relativo propagado

$$\left| \frac{\Delta f(x)}{f(x)} \right| \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\widetilde{x}_i}{f(\widetilde{x})} \frac{\partial f(\widetilde{x})}{\partial x_i} \right| \left| \frac{\Delta x_i}{\widetilde{x}_i} \right|.$$

La expresión se obtiene dividiendo por \widetilde{y} y multiplicando y dividiendo por \widetilde{x}_i . Los n valores $\left|\frac{\widetilde{x}_i}{f(\widetilde{x})}\frac{\partial f(\widetilde{x})}{\partial x_i}\right|$

se denominan números de condición o factores de propagación. Estos proporcionan una medida de cuán mal condicionado es un problema.

Guia de estudio

Libro Càlcul numèric: teoria i pràctica de M. Grau Sánchez y M. Noguera Batlle

- Conceptos asociados: capítulo 1, de la página 2 a la 30.
- Problema propuesto: 3.

Libro *Cálculo numérico* de M. Grau Sánchez, y M. Noguera Batlle

- Conceptos asociados: capítulo 1, de la página 13 a la 53.
- Problema propuesto: 3.

Otros libros de consulta

- Cálculo Científico con MATLAB y Octave de A. Quarteroni y F. Saleri.
- Métodos numéricos con MATLAB de J. H. Mathews y K. D. Fink.