

### 3 Derivación e integración numérica

La derivación numérica, presenta problemas de sustracción cancelativa, por lo que los paquetes numéricos recientes tienden a realizar una derivación simbólica. Sin embargo, la integración numérica es un problema estable, produciendo resultados aceptables aún con fórmulas muy simples.

#### 3.1 Derivación numérica: Fórmulas básicas e interpolatorias. Errores.

Lo que generalmente se hace es evaluar la función a derivar en varios puntos, interpolar una función (generalmente polinómica) y considerar la derivada de la función interpolatoria, como la derivada en el punto.

Sabemos que:  $f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ , por lo que una primera aproximación de la derivada será:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}, \text{ para un } h \text{ pequeño}$$

Como la función  $f$  se evalúa dos veces la fórmula se llama de 2 puntos, sin embargo para estimar la derivada  $f'(x_0)$  es preferible la fórmula centrada siguiente.

##### 3.1.1 Fórmula centrada 2 puntos

Para estimar  $f'(x_0)$ , evaluamos la función en  $x_0 + h$  y en  $x_0 - h$ , obteniendo la fórmula:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{3!} f'''(\xi) \text{ con } \xi \in [\xi_2, \xi_1]$$

que se deduce del desarrollo de Taylor:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_1)}{3!}h^3 \quad \xi_1 \in [x_0, x_0 + h]$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 - \frac{f'''(\xi_2)}{3!}h^3 \quad \xi_2 \in [x_0 - h, x_0]$$

Restando:

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2f'(x_0)h + \frac{f'''(\xi_1)}{3!}h^3 + \frac{f'''(\xi_2)}{3!}h^3$$

$$\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h} = f'(x_0) + \frac{h^2}{23!}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] = f'(x_0) + \frac{h^2}{12}[2f'''(\xi)] \text{ con } \xi \in [\xi_2, \xi_1]$$

Hemos aplicado la propiedad de que si una función es continua en  $[a, b]$ , entonces toma sus valores intermedios (aquí la función es  $f'''$  y el valor intermedio  $\frac{f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)}{2} \Rightarrow \exists \xi \in [\xi_2, \xi_1]/f'''(\xi) = \frac{f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)}{2}$ ).

**Comentario:** En las fórmulas de derivación, integración y de ecuaciones diferenciales, el resultado buscado (en este caso  $f'(x_0)$ ) se obtendrá mediante una expresión que da su valor aproximado (en este caso  $\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$ ), más un error de truncamiento ( $E_T = -\frac{h^2}{3!}f'''(\xi)$ ).

El error de truncamiento se llama así pues se produce al truncar el desarrollo en serie de Taylor.

El error total cometido será el error de truncamiento más el error de redondeo, que se produce al intentar evaluar la expresión (en este caso  $\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$ ).

La expresión del error de truncamiento, nos dice que al intervenir la derivada tercera, los polinomios de segundo grado (tienen  $f'''(x) = 0$ ) serán evaluados correctamente, por lo que se dice que la fórmula es de **grado de exactitud 2**. Además al intervenir  $h^2$ , sabemos que

al disminuir  $h$  a la mitad, el error de truncamiento disminuye a la cuarta parte, es decir al cuadrado, por lo que decimos que la fórmula es de **orden 2**.

De todas formas no podremos reducir  $h$  indefinidamente, ya que al calcular  $f(x_0+h) - f(x_0-h)$ , se produce sustracción cancelativa, que se incrementa al dividir por  $2h$  (valor pequeño). Por lo que se debe llegar a un compromiso entre los errores de truncamiento y de redondeo.

### 3.1.2 Fórmula de 3 puntos en $x_0$ , $x_0 + h$ y $x_0 + 2h$ :

La fórmula centrada de dos puntos, no puede ser usada si buscamos derivadas laterales, donde solo podemos tomar puntos a uno de los lados del punto  $x_0$ . Como inconveniente, al no ser una fórmula centrada, necesitaremos más puntos para obtener similar precisión.

$$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{2h} + \frac{f'''(\xi)}{3}h^2$$

que tiene menos precisión (su orden es 2 y su grado de exactitud también es 2, pero la constante multiplicativa del error es mayor) y más costo computacional que la centrada de 2 puntos anterior.

La demostración puede hacerse desarrollando por Taylor  $f(x_0 + h)$  y  $f(x_0 + 2h)$ .

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_1)}{3!}h^3 \quad \xi_1 \in [x_0, x_0 + h]$$

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + f'(x_0)2h + \frac{f''(x_0)}{2!}(2h)^2 + \frac{f'''(\xi_2)}{3!}(2h)^3 \quad \xi_2 \in [x_0, x_0 + 2h]$$

Multiplicando la primera ecuación por 4 y restando la segunda, para eliminar la derivada segunda:

$$4f(x_0+h) - f(x_0+2h) = 3f(x_0) + f'(x_0)2h + \frac{4f'''(\xi_1)}{3!}h^3 - \frac{8f'''(\xi_2)}{3!}h^3 = 3f(x_0) + f'(x_0)2h - \frac{4f'''(\xi)}{3!}h^3$$

$$\text{Despejando: } f'(x_0) = \frac{4f(x_0+h) - f(x_0+2h) - 3f(x_0)}{2h} + \frac{2f'''(\xi)}{3!}h^2$$

**NOTA:** Podemos hacer  $h$  negativo y servirá para derivadas por la izquierda.

### 3.1.3 Fórmulas interpolatorias

Conocida la función en unos puntos  $x_i$ , se desea estimar  $f'(x)$  mediante una expresión  $f'(x) = \sum_i a_i f(x_i)$ , con el mayor grado de exactitud posible. Se llama interpolatoria por ser equivalente a la interpolación por dichos puntos de un polinomio del menor grado posible, y calcular su derivada en  $x_0$ .

Una fórmula de  $n+1$  puntos, que sea exacta hasta el grado  $n$ , será interpolatoria, ya que conocido el valor de la función en esos  $n+1$  puntos existe un único polinomio de grado  $n$  que pase por ellos y la fórmula proporciona el valor de la derivada de ese polinomio en el punto  $x_0$ . Si  $f(x)$  es un polinomio de grado  $n$ , la fórmula proporcionará el valor exacto de su derivada.

#### Ejemplo:

Encontrar una fórmula interpolatoria para  $f'(x_0)$  conocida la función en  $x_0 - 2h$ ,  $x_0 - h$ ,  $x_0 + h$  y  $x_0 + 2h$ .

La fórmula a obtener será de la forma:

$$f'(x_0) = a_1 f(x_0 - 2h) + a_2 f(x_0 - h) + a_3 f(x_0 + h) + a_4 f(x_0 + 2h) + E_T$$

Vamos a ir obteniendo sucesivamente ecuaciones, que fuerzan a que  $E_T$  sea 0, para las funciones  $f(x)=1$ ,  $f(x)=x$ ,  $f(x)=x^2$  y  $f(x)=x^3$ . (4 ecuaciones para los 4 coeficientes a determinar).

$$f(x) = 1 \Rightarrow f'(x_0) = 0 = a_1 \cdot 1 + a_2 \cdot 1 + a_3 \cdot 1 + a_4 \cdot 1$$

$$f(x) = x \Rightarrow f'(x_0) = 1 = a_1(x_0 - 2h) + a_2(x_0 - h) + a_3(x_0 + h) + a_4(x_0 + 2h)$$

$$f(x) = x^2 \Rightarrow f'(x_0) = 2x_0 = a_1(x_0 - 2h)^2 + a_2(x_0 - h)^2 + a_3(x_0 + h)^2 + a_4(x_0 + 2h)^2$$

$$f(x) = x^3 \Rightarrow f'(x_0) = 3x_0^2 = a_1(x_0 - 2h)^3 + a_2(x_0 - h)^3 + a_3(x_0 + h)^3 + a_4(x_0 + 2h)^3$$

Donde se despejan los  $a_i$  (Cramer u otro método cualquiera) obteniéndose:

$$a_1 = \frac{1}{12h} \quad a_2 = -\frac{8}{12h} \quad a_3 = \frac{8}{12h} \quad a_4 = -\frac{1}{12h}$$

que se sustituye en la expresión obteniéndose:

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

Para obtener la expresión del error de truncamiento, tenemos en cuenta que sabemos que es de la forma  $E_T = K f^{n+1}(\xi)$ , donde  $n$  es el grado de exactitud.

Hasta ahora la fórmula es exacta hasta el grado 3, por lo que buscamos su error para  $x^4$ :

$$f(x) = x^4 \Rightarrow f'(x_0) = 4x_0^3 = a_1(x_0 - 2h)^4 + a_2(x_0 - h)^4 + a_3(x_0 + h)^4 + a_4(x_0 + 2h)^4 + E_T$$

si tenemos en cuenta que debe salir  $K$  independiente de  $x_0$ , sustituyo  $x_0$  por 0, obteniendo:

$$0 = \frac{1}{12h} [(-2h)^4 - 8(-h)^4 + 8h^4 - (2h)^4] + E_T = E_T$$

lo que significa que la fórmula es exacta para el grado 4 (en las fórmulas simétricas ocurre esto) y probaremos para el grado 5, con  $f(x)=x^5$ :

$$f(x) = x^5 \Rightarrow f'(x_0) = 5x_0^4 = a_1(x_0 - 2h)^5 + a_2(x_0 - h)^5 + a_3(x_0 + h)^5 + a_4(x_0 + 2h)^5 + E_T$$

Haciendo  $x_0 = 0 \Rightarrow 0 = \frac{1}{12h} [(-2h)^5 - 8(-h)^5 + 8h^5 - (2h)^5] + E_T = -4h^4 + E_T \Rightarrow E_T = K f^{(5)}(\xi) = K 5! = 4h^4$ , luego  $K = \frac{h^4}{30} \Rightarrow E_T = \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi)$  con  $\xi \in [x_0 - 2h, x_0 + 2h]$

Nos ha resultado una fórmula de orden 4 y grado de exactitud también 4.

**Grado de exactitud:** Dada una fórmula cualquiera de derivación, integración, etc, ... se dice que es exacta de grado  $k$ , si las funciones  $f_i(x) = x^i$  no tienen error si  $i \leq k$ . ( $i$  entero no negativo).

### 3.1.4 Derivadas de orden superior

Es importante la fórmula centrada 3 puntos para la derivada segunda:

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

El procedimiento de obtención es similar al caso de la estimación de la primera derivada:

Ejemplo: Estimar  $f'''(2)$  conociendo  $f(1) = 1$ ,  $f(1.5) = 1.3$ ,  $f(2) = 1.5$ ,  $f(2.2) = 1.6$

Buscamos una fórmula de la forma:  $f'''(2) = af(1) + bf(1.5) + cf(2) + df(2.2)$  a la que imponemos las condiciones:

$$\left. \begin{array}{lcl} f(x) = 1 & \Rightarrow & 0 = a + b + c + d \\ f(x) = x & \Rightarrow & 0 = a + 1.5b + 2c + 2.2d \\ f(x) = x^2 & \Rightarrow & 0 = a + 2.25b + 4c + 4.84d \\ f(x) = x^3 & \Rightarrow & 6 = a + 3.375b + 8c + 10.648d \end{array} \right\}$$

resolviendo obtenemos:  $a=35.71428$ ;  $b=-60$ ;  $c=120$ ;  $d=-95.7142$ , luego:  $f'''(2) \approx 5.43$

Una fórmula importante es la simétrica de 3 puntos para la estimación de la segunda derivada:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h))}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

que resulta ser de grado de exactitud 3 y de orden 2.

### Cálculo del error de truncamiento

Si una fórmula es exacta hasta el grado  $n$ , entonces el error de truncamiento será de la forma  $k f^{(n+1)}(\xi)$  donde la constante se calcula empleando la función  $f(x) = x^{n+1}$  y teniendo en cuenta que  $f^{(n+1)}(\xi) = (n+1)!$ .

## 3.2 Integración numérica: Fórmulas simples y compuestas. Métodos de Newton-Cotes

La obtención de métodos numéricos de integración se hace de forma similar a los de derivación, es decir, conocida la función en unos puntos, se interpola una función (generalmente polinómica) y se evalúa la integral de ésta. Sin embargo, los métodos de integración numérica (cuadratura) son estables, no presentando los problemas de sustracción cancelativa que tenían aquellos.

Generalmente se mide la complejidad de un método por el número de veces que se evalúa la función a integrar, en un intervalo.

### 3.2.1 Fórmula de un punto

Serán de la forma:  $\int_a^b f(x)dx = f(x_0)(b-a)$  y se conoce como **fórmula del rectángulo**, que tiene un error de truncamiento:  $E_T = (\frac{a+b}{2} - x_0)(b-a)f'(\xi)$

Si  $x_0 = (a+b)/2$  se conoce como **fórmula del punto medio** y debido a la simetría, aumenta el grado de exactitud del método, quedando:

$$\int_a^b f(x)dx = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) + f''(\xi)\frac{(b-a)^3}{24}$$

### 3.2.2 Fórmula de dos puntos

La más conocida es la que evalúa la función en los extremos del intervalo y que se denomina **fórmula del trapecio**:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{f(a) + f(b)}{2}(b-a) - f''(\xi)\frac{(b-a)^3}{12}$$

**NOTA:** Las fórmulas hasta ahora vistas son fórmulas simples, mientras que usualmente se emplean fórmulas compuestas, es decir, el intervalo  $[a,b]$ , se descompone en varios subintervalos de menor amplitud, en los que se evalúa la fórmula simple, sumándose las integrales obtenidas en cada subintervalo.

### 3.3 Fórmulas de Newton-Cotes. Errores.

Las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes, son fórmulas interpolatorias, que evalúan la función en puntos igualmente espaciados  $x_k$  en el intervalo  $[a,b]$ , donde  $x_k = a + \frac{b-a}{N}k$

Consiste en dividir el intervalo  $[a,b]$  en  $N$  partes iguales de amplitud  $h = \frac{b-a}{N}$ , evaluando la función en  $x_k = a + kh$ . ( $0 \leq k \leq N$ )

Si las fórmulas emplean la información de  $f(a) = f(x_0)$  y  $f(b) = f(x_N)$  se llamarán cerradas, en otro caso abiertas.

#### 3.3.1 Fórmulas cerradas de Newton Cotes

En las fórmulas cerradas de  $M$  puntos, el número de intervalos  $N$ , será:  $N=M-1$ , y por tanto ( $h = \frac{b-a}{N}$ ).

**Fórmula del trapecio:** (Cerrada 2 puntos  $N=1$ ).

La fórmula del trapecio es la más simple cerrada, ya que es cerrada (evalúa en  $f(a)$  y  $f(b)$ ) y solo de 2 puntos (no evalúa en ningún otro punto).

**Fórmula de Simpson:** (Cerrada de 3 puntos  $N=2$ ).

$$\int_a^b f(x)dx = \left[ f(a) + f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \frac{b-a}{6} - f^{(4)}(\xi) \frac{h^5}{90} \quad h = \frac{b-a}{2}$$

**Fórmula de Simpson 3/8:** (Cerrada de 4 puntos  $N=3$ )

$$\int_a^b f(x)dx = [f(a) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(b)] \frac{b-a}{8} - f^{(4)}(\xi) \frac{3h^5}{80} \quad h = \frac{b-a}{3}$$

**Fórmula cerrada de 5 puntos:**

$$\int_a^b f(x)dx = [7f(a) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(b)] \frac{b-a}{90} - f^{(6)}(\xi) \frac{8h^7}{945} \quad h = \frac{b-a}{4}$$

#### 3.3.2 Fórmulas abiertas de Newton Cotes

Se usan menos que las cerradas, pues en general tienen más error, para el mismo número de evaluaciones, sin embargo son útiles para Ecuaciones Diferenciales. Si el número de puntos es  $M$ , el número de intervalos es  $N=M+1$ , y  $h = \frac{b-a}{N}$ .

**Fórmula del punto medio:**

La más simple fórmula abierta es la de un punto, que es la del punto medio, vista anteriormente.

**Fórmula abierta de dos puntos:**

$$\int_a^b f(x)dx = [f(x_1) + f(x_2)] \frac{b-a}{2} - f''(\xi) \frac{h^3}{4} \quad h = \frac{b-a}{3}$$

**Fórmula abierta de tres puntos:**

$$\int_a^b f(x)dx = [2f(x_1) - f(x_2) + 2f(x_3)] \frac{b-a}{3} - f^{(4)}(\xi) \frac{14h^5}{45} \quad h = \frac{b-a}{3}$$

### 3.4 Fórmulas compuestas

Las fórmulas vistas hasta ahora son fórmulas simples que evalúan en varios puntos del intervalo a integrar [a,b], las fórmulas compuestas, subdividen el intervalo a integrar en varios subintervalos de amplitudes iguales o diferentes, aplicando la fórmula simple en cada uno de ellos. La integral a calcular será la suma de las diferentes integrales.

Si  $x_i$  es un conjunto ordenado de puntos, con  $x_0 = a$  y  $x_n = b$ :

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{i=n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$$

donde las integrales  $\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ , se calculan por cualquier fórmula de cuadratura.

Las fórmulas compuestas basadas en las cerradas de Newton-Cotes, pueden ser evaluadas más eficientemente teniendo en cuenta que el punto extremo de un subintervalo coincide con el inicial del siguiente, por lo que solo se evalúa una vez. Resultando:

**Fórmula del trapecio compuesta:**

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{i=n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \left[ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{i=n-1} f(x_i) + f(b) \right] \frac{b-a}{2n} - \frac{f''(\xi)}{12} h^2 (b-a)$$

y donde  $h = \frac{b-a}{n}$  (n=número de subintegrales).

**Fórmula de Simpson compuesta:**

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{i=n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \left[ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{i=n-1} f(x_i) + 4 \sum_{i=0}^{i=n-1} f(x_i + \frac{h}{2}) + f(b) \right] \frac{b-a}{2n} - \frac{f^{(4)}(\xi)}{2880} h^4 (b-a)$$

donde  $h = \frac{b-a}{n}$  (n=número de subintegrales).

**Fórmula de Simpson 3/8 compuesta:**

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{i=n} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \left[ f(a) + f(b) + 2 \sum_{i=1}^{i=n-1} f(x_i) + 3 \left( \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i + \frac{h}{3}) + f(x_i + \frac{2h}{3}) \right) \right] \frac{b-a}{2n}$$

con error de truncamiento  $-\frac{f^{(4)}(\xi)}{6480} h^4 (b-a)$  y donde  $h = \frac{b-a}{n}$  (n=número de subintegrales).

### 3.4.1 Errores

Al igual que en derivación, existen dos tipos de errores, al evaluar una cuadratura: el error propio de la fórmula (error de truncamiento) y el error al evaluar en punto flotante las operaciones necesarias para su cálculo (error de redondeo).

El error de redondeo en integración está generalmente bien condicionado, ya que en general son sumas y no se producen las sustracciones cancelativas de la derivación numérica. De todas formas será necesario considerarlo, si se desea alta precisión, lo cual produce muchos cálculos.

El error de truncamiento se mide por el grado de exactitud y el orden, al igual que en derivación.

Las fórmulas compuestas, tendrán el mismo grado de exactitud, pero un orden menos, pues si una fórmula simple es de orden 5,  $E_T = Kh^5$  (Simpson), al dividir el intervalo en 2 partes,  $E_{T_1} + E_{T_2} \approx K\frac{h^5}{2^5} + K\frac{h^5}{2^5} = K\frac{h^5}{2^4}$ , luego el error tiene orden 4.

## 3.5 Integrales impropias: Fórmulas de cuadratura gaussianas

En las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes, los puntos están equiespaciados en el intervalo, podría pensarse en si esta elección es la más conveniente, o como en el caso de interpolación polinómica, existe otro conjunto de puntos más conveniente. Realmente es así y los puntos que reducen el error no están igualmente espaciados y resultan ser los ceros de determinados polinomios ortogonales. Las fórmulas obtenidas en estos puntos se llaman fórmulas superseguras o fórmulas gaussianas.

Se plantea encontrar unos coeficientes  $a_j$  y unos puntos  $x_j$  tales que:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^n a_j f(x_j) + E_T(f)$$

sea exacta hasta el mayor grado posible.

### Teorema:

Existe un único conjunto de  $n+1$  puntos, tales que al formar con ellos una fórmula de cuadratura de tipo interpolatorio, dicha fórmula es exacta para todos los polinomios de grado inferior o igual a  $2n+1$ , además los puntos  $x_j$  pertenecen al intervalo  $[a,b]$ .

### Obtención de los puntos $x_j$ mediante polinomios ortogonales:

Un conjunto de funciones  $\phi_i$  se dice ortogonal en  $[a,b]$ , respecto a una función peso  $w(x) \geq 0$  si y solo si:

$$\int_a^b \phi_i \phi_j w(x) dx = 0 \quad (i \neq j)$$

Generalmente se usan polinomios ortogonales de grado creciente.

Los  $x_j$  óptimos son las raíces de un polinomio de grado  $n+1$ , ortogonal en  $[a,b]$ .

### 3.5.1 Polinomios ortogonales de Legendre

Son ortogonales en  $[-1,1]$  respecto a  $w(x)=1$ . Sus raíces son reales y distintas en  $[-1,1]$ , encontrándose tabuladas tanto éstas como los coeficientes.

$n$	$Raices$	$Coeficientes$
1	$\pm 0.5773502692$	1.0000000000
2	$\pm 0.7745966692$	0.5555555556
	0.0000000000	0.8888888889
3	$\pm 0.8611363116$	0.3478548451
	$\pm 0.3399810436$	0.6521451549
4	$\pm 0.9061798459$	0.2369268850
	$\pm 0.5384693101$	0.4786286705
	0.0000000000	0.5688888889

Por ejemplo la fórmula de integración de Gauss-Legendre para  $n=2$ , queda:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = 0.5 f(0.7745966692) + 0.5 f(-0.7745966692) + 0.8 f(0)$$

que al tratarse de una fórmula 3 puntos tendrá un grado de exactitud de  $2(3)-1=5$ .

Si el intervalo de integración fuese  $[a, b]$ , puede realizarse un cambio de variable  $x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}$ , que transforma los límites de integración a  $[-1, 1]$ , o bien el contrario que lleva la fórmula del intervalo  $[-1, 1]$  al  $[a, b]$ , quedando:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \sum_{j=1}^n a_j f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}r_j\right)$$

donde  $a_j$  son los coeficientes de la fórmulas y  $r_j$  son las raíces de los polinomios de Legendre.

### 3.5.2 Fórmulas de Gauss-Laguerre

Los polinomios de Laguerre son ortogonales en  $(0, \infty)$ , con la función peso  $w(x) = e^{-x}$ . Se usan para hallar integrales del tipo:  $\int_a^\infty F(x)dx$  o del tipo  $\int_{-\infty}^b F(x)dx$

### 3.5.3 Fórmulas de Gauss-Hermite:

Los polinomios de Hermite son ortogonales en  $(-\infty, \infty)$ , con la función peso  $e^{-x^2}$ , permitiendo hallar  $\int_{-\infty}^\infty F(x)dx$

### 3.5.4 Fórmulas de Gauss-Chebysheff:

Los polinomios de Chebysheff son ortogonales en  $(-1, 1)$  respecto a la función peso  $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ , empleándose para resolver cuadraturas del tipo:  $\int_a^b F(x)dx$ .

### 3.5.5 Errores de los Métodos gaussianos

Para cualquiera de los métodos gaussianos existe una expresión del error de truncamiento, en función del polinomio ortogonal correspondiente de grado  $n+1$ :

$$E_T = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_a^b [P_{n+1}(x)]^2 dx$$



### 3.5.6 Ventajas de los métodos gaussianos

Para un grado de exactitud prefijado, solo es necesaria la evaluación de la función la mitad de las veces que para los métodos de Newton-Cotes.

Si se aumenta el número de puntos, el resultado converge al valor de la integral. Nótese también la simplicidad de cálculo para la integración exacta de un polinomio, por ejemplo para uno de 5º grado se evalúa en solo 3 puntos, en 2 puntos para uno cúbico, que simplifica la integración de una función espline con solo evaluar 2 veces entre cada dos nodos consecutivos.

## 3.6 Método de extrapolación de Richardson. Aplicación a la derivación e integración

Sirve para obtener mayor precisión con fórmulas de bajo orden. Se basa en que el resultado obtenido por una fórmula es función de  $h$ , por lo que si conocemos varios valores para diferentes  $h$ , es posible realizar la extrapolación para  $h=0$ .

En la practica se realiza de forma diferente, pues solo evaluaremos la función para  $h, \frac{h}{2}, \frac{h}{4}, \dots$

Necesitaremos conocer el orden  $n$  del error de truncamiento, entonces una fórmula será de la forma:

$f^k(x_0) = M(h) + E_T(h) = M(h) + Ch^n$ , y si la evaluamos para  $h/2$ , resulta:

$$f^k(x_0) = M\left(\frac{h}{2}\right) + E_T\left(\frac{h}{2}\right) = M\left(\frac{h}{2}\right) + C\frac{h^n}{2^n}$$

si multiplicamos la segunda por  $2^n$  y restamos la primera:

$$(2^n - 1)f^k(x_0) = 2^n M\left(\frac{h}{2}\right) - M(h) \Rightarrow I_{1,1} = f^k(x_0) = \frac{2^n M\left(\frac{h}{2}\right) - M(h)}{2^n - 1}$$

con lo que se ha eliminado el término  $Ch^n$  y aparecerá el siguiente más importante del desarrollo de Taylor  $C_1 h^{n+1}$ , (en las fórmulas simétricas se avanza de 2 en 2 pasos por anularse los términos impares).

Podremos ahora realizar la extrapolación entre  $M(h/2)$  y  $M(h/4)$ , obteniendo  $I_{1,2}$ , que valdrá:

$$I_{1,2} = \frac{2^n M\left(\frac{h}{4}\right) - M\left(\frac{h}{2}\right)}{2^n - 1}$$

que sabemos es de orden  $n+1$  (en algunos casos  $n+2$ ), por lo que podremos calcular:

$$I_{2,1} = \frac{2^{n+1} I_{1,2} - I_{1,1}}{2^{n+1} - 1}$$

El procedimiento podría continuar calculando  $I_{1,3}, I_{2,2}, I_{3,1}, \dots$

### 3.6.1 Extrapolación de Romberg

Es la misma idea de la extrapolación de Richardson, pero aplicada a la integración. Romberg realmente se lo aplicó a la fórmula de Simpson, pero la idea puede aplicarse a otras fórmulas de cuadratura, ecuaciones diferenciales, etc, ...

El esquema es tambien aplicar la fórmula de Simpson con  $h, h/2, h/4, \dots$  y extrapolar su valor para  $h=0$ .

Por ejemplo veámoslo con Simpson:

Partimos de la fórmula de Simpson compuesta que es de orden 4, además sabemos que debido a la simetría, el error de truncamiento solo tiene términos de grado par:  $E_T = Kh^4 + K_2h^6 + \dots$

Entonces, si llamamos  $M(h) = \left[ f(a) + 2 \sum_{i=1}^{i=n-1} f(x_i) + 4 \sum_{i=0}^{i=n-1} f(x_i + \frac{h}{2}) + f(b) \right] \frac{b-a}{2n}$ , resulta:

$$I = \int_a^b f(x)dx = M(h) + Kh^4 + K_2h^6 + \dots$$

Calculando para  $\frac{h}{2}$ :

$$I = \int_a^b f(x)dx = M\left(\frac{h}{2}\right) + K\frac{h^4}{16} + K_2\frac{h^6}{2^6} + \dots$$

Multiplicando la segunda por  $2^4$  y restando la primera:

$$(2^4 - 1)I = 2^4 M\left(\frac{h}{2}\right) - M(h) + K_2h^6\left(\frac{1}{2^2} - 1\right) + \dots$$

Despejando I:

$$I_{1,1} = I = \frac{2^4 M\left(\frac{h}{2}\right) - M(h)}{2^4 - 1} + Ch^6 + \dots$$

que es una fórmula nueva de orden 6.

Repitiendo el procedimiento con  $\frac{h}{2}$  y  $\frac{h}{4}$ , resulta:  $I_{1,2} = I = \frac{2^4 M\left(\frac{h}{4}\right) - M\left(\frac{h}{2}\right)}{2^4 - 1} + C\left(\frac{h}{2}\right)^6 + \dots$ , entre ambas podremos eliminar el término  $Ch^6$ , (quedando el siguiente más importante en el desarrollo de Taylor (grado 8)), multiplicando la última por  $2^6$  y restando la anterior:  $I_{2,1} = I = \frac{2^6 I_{1,2} - I_{1,1}}{2^6 - 1} + Ah^8$

Se podría continuar calculando  $I_{1,3} = \frac{2^4 M\left(\frac{h}{8}\right) - M\left(\frac{h}{4}\right)}{2^4 - 1}$ ,  $I_{2,2} = \frac{2^6 I_{1,3} - I_{1,2}}{2^6 - 1}$ , para realizar una nueva extrapolación que elimine el grado 8:  $I_{3,1} = \frac{2^8 I_{2,2} - I_{2,1}}{2^8 - 1}$  resultando una fórmula de orden 10.

Se podría continuar calculando  $I_{1,4}$ ,  $I_{2,3}$ ,  $I_{3,2}$ ,  $I_{4,1}$ , etc., ..., consiguiendo un orden 2 unidades superior en cada paso.

En rutinas comerciales se calcula  $I_{k,1}$  sucesivamente hasta un criterio de parada.

### Caso general:

Si una fórmula tiene un error de truncamiento:  $E_T = K_0h^n + K_1h^{n+1} + K_2h^{n+2} + \dots$ , podrá incrementarse su orden a  $n+1$ , mediante su aplicación para determinado  $h$  y para  $\frac{h}{2}$ , para posteriormente calcular:

$$I = \frac{2^n F\left(\frac{h}{2}\right) - F(h)}{2^n - 1}$$

## 4 Introducción de valores iniciales para Ecuaciones Diferenciales

Una ecuación  $f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0$  se llamará **ecuación diferencial ordinaria (EDO) de orden n**. El orden de la ecuación diferencial es el mayor orden de la derivada que interviene.

Si intervienen derivadas parciales, se llamará **ecuación diferencial en derivadas parciales**.

$$f(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \dots) = 0$$

Resolver la ecuación diferencial ordinaria (EDO), consistirá en encontrar todas las funciones  $y=f(x)$  que verifican la ecuación (**Solución general**). Si tenemos datos adicionales, como los valores iniciales, podremos determinar la función concreta que satisface la EDO (**Solución particular**).

Ejemplos:

A) La solución de  $y' = f(x) = x^3 + 8$  será  $y = \int x^3 + 8 dx = \frac{x^4}{4} + 8x + C$ , donde si conocemos que  $f(0) = 3$  podremos calcular C: (C=3) y la solución particular quedará:  $y = x^4/4 + 8x + 3$ .

B) Una EDO de primer orden  $y' = f(x, y) = \frac{\sin(x)}{\cos(y)}$  que puede separarse fácilmente es:  $y' = \frac{dy}{dx} = \frac{\sin(x)}{\cos(y)} \Rightarrow \cos(y)dy = \sin(x)dx \Rightarrow \sin(y) = -\cos(x) + C \Rightarrow y = \arcsen(-\cos(x) + C)$  (**Solución general de la EDO**).

Si tenemos alguna información adicional por ejemplo:  $f(\frac{\pi}{2}) = \frac{\pi}{6}$  podremos hallar la solución particular:  $\sin(\frac{\pi}{6}) + \cos(\frac{\pi}{2}) = C \Rightarrow C = 0.5$  quedando:  $\sin(y) = -\cos(x) + 0.5 \Rightarrow y = \arcsen(-\cos(x) + 0.5)$  (**Solución particular de la EDO**).

C) A la inversa una familia de curvas en determinadas condiciones puede expresarse como solución de una ecuación diferencial. Las parábolas de la forma  $y = Cx^2$ , puede expresarse como las soluciones de una ecuación diferencial. Para ello derivamos quedando  $y' = 2Cx \Rightarrow C = \frac{y'}{2x} \Rightarrow y = \frac{y'}{2x}x^2 = \frac{y'x}{2} \Rightarrow y' = \frac{2y}{x}$  lo que expresa una propiedad de todas las curvas del haz de parábolas: la pendiente en un punto es doble del cociente  $y/x$ .

#### 4.1 Problemas de valores iniciales para Ecuaciones Diferenciales Ordinarias de orden n y sistemas de Ecuaciones Diferenciales

##### Problemas de valores iniciales:

Las condiciones adicionales están dadas en un punto  $x_0$  y consisten en el valor de la función y de las primeras derivadas en ese punto. (El número de condiciones debe coincidir con el orden). Ejemplo:  $y'' + 3y' + \sin y = x^2$ , con  $y(\frac{\pi}{2}) = 3$ ,  $y'(\frac{\pi}{2}) = 1$ .

##### Problemas de contorno:

Las condiciones adicionales están dadas en dos puntos (inicial y final).

Ejemplo:  $y'' + 3y' + \sin y = x^2$ , con  $y(\frac{\pi}{2}) = 3$ ,  $y(\pi) = 1$

##### 4.1.1 Existencia de la solución de un problema de valores iniciales

Sea  $D = \{(x, y) / a \leq x \leq b\}$  el dominio de definición de  $f(x, y)$ .

Si  $f(x, y)$  es continua en D y es Lipschitziana para y, entonces  $y' = f(x, y)$ ,  $y(a) = \alpha$  tiene solución única en  $[a, b]$ .

NOTA: Si es una función es derivable en D, es Lipschitziana.

**Problema bien planteado (BIEN CONDICIONADO)**

Generalmente no basta con que la solución exista y sea única, pues los datos vendrán con errores y la solución para ser utilizable deberá estar bien condicionada. En Cálculo Numérico, se dice que un problema está bien condicionado, si pequeñas perturbaciones en los datos, produce pequeñas variaciones en el resultado real, en caso contrario se hablará de problema mal condicionado.

Se buscan condiciones suficientes para que el problema esté bien condicionado.

$y' = f(x, y)$  con  $y(a) = \alpha$  se dirá bien planteado si:

- 1) Existe una solución única para el problema.
- 2) Existen  $\epsilon$  y  $k$  (constantes) tales que el problema perturbado  $z' = f(x, y) + \delta(x)$ ,  $z(a) = \alpha + \epsilon_0$  tiene solución única en  $[a, b]$  y  $|z(x) - y(x)| < k\epsilon$  si  $x \in [a, b]$ ,  $|\epsilon_0| < \epsilon$  y  $|\delta(x)| < \epsilon$ .

En las condiciones del Teorema de existencia, el problema además de tener solución única, está bien planteado.

#### 4.1.2 Transformación de un problema de valores iniciales de orden $n$ en un sistema de ecuaciones de primer orden

Dado un problema de valores iniciales de orden  $n$ :  $f(x, y, y', y'', \dots, y^{(n)}) = 0$ , con  $y(x_0) = y_0$ ,  $y'(x_0) = y_1, \dots, y^{(n-1)}(x_0) = y_{n-1}$  podemos definir las variables adicionales:  $u_1 = y'$ ,  $u_2 = y''$ ,  $\dots$ ,  $u_{n-1} = y^{(n-1)}$ , quedando el sistema:

$$\left. \begin{array}{l} y' = u_1 \\ u_1' = u_2 \\ \dots \\ u_{n-2}' = u_{n-1} \\ f(x, y, u_1, u_2, \dots, u_{n-1}, u_{n-1}') = 0 \end{array} \right\} \text{ con las condiciones iniciales: } \left\{ \begin{array}{l} y(x_0) = y_0 \\ u_1(x_0) = y_1 \\ \dots \\ u_{n-1}(x_0) = y_{n-1} \end{array} \right.$$

que es un sistema diferencial de primer orden, con condiciones iniciales.

## 4.2 Métodos unipaso: Método de Taylor y de Runge-Kutta

Los métodos unipaso se caracterizan por por estimar el valor de la función en  $y(x_0+h)$  conocidas diversas características de la función en el punto  $x_0$ . El más simple es el método de Euler.

### 4.2.1 Método de Euler

Dada la EDO de primer orden  $y' = f(x, y)$  con  $y(a) = \alpha$ , para resolverla se toman puntos a intervalos regulares en  $[a, b]$ :  $x_i = a + ih$  con  $h = \frac{b-a}{n}$ , donde  $h$  se le llama **tamaño de paso**.

Desarrollando  $y=y(x)$  por Taylor en  $x_i$ :

$y(x_{i+1}) = y(x_i) + (x_{i+1} - x_i)y'(x_i) + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2}y''(x_i) + \dots$  y tomando solo el primer término del desarrollo y llamando  $h = x_{i+1} - x_i$   $f_i = y'(x_i) = f(x_i, y(x_i))$  resulta:  $y_{i+1} = y_i + hf_i + \frac{h^2}{2}y''(\xi)$

Se llama **error de truncamiento local** a  $\tau_{i+1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - f(x_i, y_i)$  que para este caso valdrá:  $\tau_{i+1} = \frac{h}{2}y''(\xi)$ . (Error cometido en el paso de  $x_i$  a  $x_{i+1}$  supuesto que tuviésemos el valor correcto en  $y(x_i)$ ). Se dice que el método de Euler tiene error de truncamiento local del orden  $O(h)$ .

### 4.2.2 Métodos de Taylor

Dad el problema de valores iniciales:  $y' = f(x, y)$  con  $y(a) = \alpha$ , podemos desarrollar por Taylor en  $x_i$  la solución, pero ahora tomamos más términos que en Euler (Euler es el método de Taylor de orden 1).

$$y(x_{i+1}) = y(x_i) + hy'(x_i) + \frac{h^2}{2!}y''(x_i) + \dots + \frac{h^n}{n!}y^n(x_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}y^{(n+1)}(\xi)$$

pero como:  $y'(x) = f(x, y)$ ;  $y''(x) = f'(x, y)$ ; etc ...

$$y_{i+1} = y_i + hf_i + \frac{h^2}{2}f'(x_i, y_i) + \dots + \frac{h^n}{n!}f^{(n-1)}(x_i, y_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n)}(\xi, y(\xi))$$

El error de truncamiento local de un método de Taylor de orden  $n$ , (tomando  $n$  términos en el desarrollo) resulta ser:  $\tau_{i+1} = \frac{h^n}{(n+1)!}f^{(n)}(\xi, y(\xi))$ , en el supuesto de que  $f(x, y) \in C^{n+1}[a, b]$ .

Ejemplo: Resolver  $y' = x^2 - y$  con  $y(0) = 1$  por el método de Taylor de orden 4 hasta  $x = 1.5$  con  $h = 0.05$

$$\begin{aligned} y'' = f'(x, y) &= \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}y' = 2x - y' = 2x - (x^2 - y) \Rightarrow f'' = \frac{\partial f'}{\partial x} + \frac{\partial f'}{\partial y}y' = 2 - 2x + y' = 2 - 2x + x^2 - y \\ &\Rightarrow f''' = -2 + 2x - y' = -2 + 2x - x^2 + y \end{aligned}$$

El método quedaría:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h(x_i^2 - y_i) + \frac{h^2}{2!}(2x_i - x_i^2 + y_i) + \frac{h^3}{3!}(2 - 2x_i + x_i^2 - y_i) + \frac{h^4}{4!}(-2 + 2x_i - x_i^2 + y_i) \\ y(0.05) &= 1 + 0.05 \left[ -1 + \frac{0.05(1)}{2} + \frac{(0.05)^2 1}{6} + \frac{(0.05)^3 (-1)}{24} \right] = 0.951270; \quad y(0.1) = 0.905162; \\ y(0.15) &= 0.861792; \quad y(0.2) = 0.821269; \quad y(0.25) = 0.783699; \quad y(0.3) = 0.749181; \dots \\ y(0.75) &= 0.590133; \dots \quad y(1.5) = 1.026896 \end{aligned}$$

Una cota del error sería:  $0 \leq x \leq 1.5 \quad 0.5 \leq y \leq 1.03 \quad f^{(4)} = 2 - 2x + y' = 2 - 2x + x^2 - y$

$$|f^4(\xi, y(\xi))| \leq 2 - 0 + (1.5)^2 - 0.5 \leq 3.25 \quad \text{Error} \leq \frac{(0.05)^5 (3.25)}{120} \leq 10^{-8}$$

### 4.2.3 Método de Runge-Kutta

Evitan el cálculo de derivadas de  $f$ , manteniendo el alto orden del error de truncamiento local, a cambio deberá evaluar la función en varios puntos intermedios del intervalo  $[x_i, x_{i+1}]$ .

Las fórmulas de paso serán de la forma:  $y_{i+1} = y_i + h \sum_i^R c_i K_i$ , resultando entre ellos:

- Si  $R=1$ :  $c_1 = 1$  y resulta el método de Euler.
- Si  $R=2$ : Los más conocidos son los métodos de **Euler modificado**:  $y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f_i + f(x_i + h, y_i + hf_i)]$  y el del **Punto medio**:  $y_{i+1} = y_i + hf(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}f_i)$
- Los métodos para  $R=3$  no resultan prácticos.

- Para  $R=4$  resulta el método más usual de todos, que llamaremos **método de Runge-Kutta de orden 4 (RK4)**:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}[K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4]$$

$$K_1 = f_i = f(x_i, y_i); \quad K_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_1\right); \quad K_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}K_2\right);$$

$$K_4 = f(x_i + h, y_i + hK_3)$$

El orden del error de truncamiento local del método RK4 es 4.

El orden de truncamiento local del mejor método de Runge-Kutta con  $n$  evaluaciones de la función es  $n$  si  $n < 5$ ,  $n-1$  si  $5 \leq n < 8$ ,  $n-2$  si  $8 \leq n$ .

Son preferidos métodos de orden menor de 5 con  $h$  pequeño, a métodos de orden mayor con tamaño de paso mayor, debido a que a igual número de evaluaciones de la función, los de bajo orden obtienen un error menor.

### 4.3 Métodos multipaso. Método predictor-corrector

Los métodos anteriores, utilizan para el cálculo de  $y(x_{i+1})$  la información del punto  $(x_i, y(x_i))$ , aunque evalúen la función en otros puntos intermedios, los multipaso guardarán los valores de algunos puntos anteriores (ya conocidos), para usarlos en el cálculo de  $y(x_{i+1})$ .

Se llama **método de M pasos**, al método que emplea para calcular el punto siguiente  $y(x_{i+1})$ , el valor conocido de  $y(x_i)$  y de  $y'_i = f(x_i, y(x_i))$ , en los  $M$  puntos anteriores:  $x_i, x_{i-1}, x_{i-2}, \dots, x_{i-m+1}$ .

Si en el cálculo de  $y_{i+1}$  se emplea información de  $y_{i+1}$  o de su derivada  $y'(x_{i+1})$ , se llamará **método implícito o corrector** y en caso contrario se llamará **explícito o predictor**.

#### 4.3.1 Métodos explícitos (o predictores) de Adams-Bashforth

Los métodos predictores de Adams de  $M$  pasos, resultan ser también de orden  $M$  y grado de exactitud  $M$ . Llamaremos  $y_i = y(x_i)$  y  $f_i = f(x_i, y_i)$ .

$M = 2$ :	$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} [3f_i - f_{i-1}]$	ETL = $\frac{5h^2}{12} y'''(\xi)$
$M = 3$ :	$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [23f_i - 16f_{i-1} + 5f_{i-2}]$	ETL = $\frac{3h^3}{8} y^{(4)}(\xi)$
$M = 4$ :	$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}]$	ETL = $\frac{251h^4}{720} y^{(5)}(\xi)$
$M = 5$ :	$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720} [1901f_i - 2774f_{i-1} + 2616f_{i-2} - 1274f_{i-3} + 251f_{i-4}]$	ETL = $\frac{95h^5}{288} y^{(6)}(\xi)$

#### 4.3.2 Métodos implícitos (o correctores) de Adams-Moulton

Los métodos correctores de Adams de  $M$  pasos resultan ser de orden  $M+1$  y de grado de exactitud  $M+1$ . Para calcular  $y_{i+1}$ , emplean un valor a priori, de  $y_{i+1}$  y de  $f_{i+1}$ , mejorando su estimación en cada iteración. Su uso como método independiente no es eficaz, pero consistiría en dar un valor a priori, iterando hasta obtener el punto fijo. Llamaremos  $y_i = y(x_i)$  y  $f_i =$

$f(x_i, y_i)$ .

$$\begin{array}{ll} \mathbf{M} = \mathbf{2}: & y_{i+1} = y_i + \frac{h}{12} [5f_{i+1} + 8f_i - f_{i-1}] & \text{ETL} = \frac{-h^3}{24} y^{(4)}(\xi) \\ \mathbf{M} = \mathbf{3}: & y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}] & \text{ETL} = \frac{-19h^4}{720} y^{(5)}(\xi) \\ \mathbf{M} = \mathbf{4}: & y_{i+1} = y_i + \frac{h}{720} [251f_{i+1} + 646f_i - 264f_{i-1} + 106f_{i-2} - 19f_{i-3}] & \text{ETL} = \frac{-3h^5}{160} y^{(6)}(\xi) \end{array}$$

#### 4.3.3 Técnica predictora-correctora

Para realizar una técnica predictora-correctora son necesarios 3 métodos: Unipaso, Explícito e Implícito.

La técnica predictora-correctora consta de los siguientes pasos:

1. Dado un punto inicial ( $a$ ), se estiman los primeros  $M$  puntos mediante el método unipaso, donde  $M$  es el número de pasos de los métodos explícito e implícito empleados.
2. Se estima el valor de la función para el punto siguiente mediante el método explícito o predictor.
3. Se corrige el valor obtenido para el punto siguiente mediante **una** aplicación del método implícito o corrector.
4. Volver al paso 2, mientras que no se haya obtenido el valor para el punto que se desea ( $b$ ).

Una técnica predictora-correctora que se usa frecuentemente se basa en el método RK4, y los Adams de orden 4. Calculará a partir de  $(x_0, y_0)$  mediante RK4 los puntos:  $(x_1, y_1)$ ,  $(x_2, y_2)$  y  $(x_3, y_3)$ , con lo que tendremos 4 puntos y podremos comenzar a emplear la fórmula de Adams-Bashforth ( $M=4$ ) para estimar  $(x_4, y_4)$ , corrigiendo el valor obtenido para  $y_4$ , mediante la fórmula de Adams-Moulton ( $M=3$ , que tiene orden 4), obteniendo un valor corregido para  $y_4$ , que es el que usaremos para estimar  $y_5$ , que corregiremos posteriormente, y así sucesivamente.

#### 4.3.4 Notas sobre los métodos predictores-correctores.

1. El orden de una técnica predictora-correctora es el menor de los órdenes de los 3 métodos que se emplean, por lo que usualmente se toman del mismo orden.
2. Toda fórmula de integración numérica, puede usarse para Ecuaciones Diferenciales y viceversa. Pues  $y' = f(x, y) \Rightarrow \int_{x_i}^{x_{i+1}} y' dx = y(x_{i+1}) - y(x_i) = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x, y) dx$ . Es decir una integral es un caso particular de ecuación diferencial.
3. Existen métodos adaptativos, necesitando al igual que en integración de una estimación del error cometido en cada paso, para subdividir o no el intervalo.
4. Realizando estimaciones de  $y_{i+1}$  mediante diferentes  $h$ , pueden realizarse extrapolaciones de una forma similar a la vista en integración (Romberg) y en derivación (Richardson).

## 5 Ecuaciones no lineales.

En este tema se analizan los métodos de resolución numérica de ecuaciones, comenzaremos con la resolución en una variable, para posteriormente estudiar los métodos para sistemas.

### 5.1 Métodos de intervalos encajados.

Se basan en el Teorema de Bolzano.

#### 5.1.1 Teorema de Bolzano

Sea  $f \in C[a, b]$  que verifica  $f(a)f(b) < 0$ , entonces existe al menos un  $x^* \in (a, b)$  tal que  $f(x^*) = 0$ .

**Corolario:** Si  $g(x)$  es una función continua de un intervalo real  $I$ , en si mismo, entonces existe un punto  $x \in I$  tal que  $g(x)=x$ .

#### 5.1.2 Método de bisección o de bipartición

Es un método para resolver la ecuación  $f(x)=0$  y consiste en encontrar un intervalo inicial  $[a_0, b_0]$  que verifique  $f(a_0)f(b_0) < 0$ , tomando como solución inicial su punto medio:  $x_0 = (a_0 + b_0)/2$ .

A continuación se forman las sucesiones  $a_i, b_i, x_i$  de la forma:

Si  $f(x_i) = 0$  entonces  $x_i$  será la solución.

Si  $f(a_i)f(x_i) < 0$ , entonces:  $a_{i+1} = a_i$ ;  $b_{i+1} = x_i$ ;  $x_{i+1} = (a_{i+1} + b_{i+1})/2$

Si  $f(x_i)f(b_i) < 0$ , entonces:  $a_{i+1} = x_i$ ;  $b_{i+1} = b_i$ ;  $x_{i+1} = (a_{i+1} + b_{i+1})/2$

Nos paramos cuando se cumpla algún criterio de parada (número de iteraciones, proximidad a la solución,...) dando como solución el último  $x_i$

**Error cometido:** Si nos paramos en la iteración  $n$ :  $|x_n - x^*| \leq \frac{b-a}{2^{n+1}}$

#### 5.1.3 Método de la Regula Falsi

Se basa en un algoritmo análogo al de bisección, pero tomamos el  $x_i$  de forma diferente, para acelerar la convergencia.

$$x_{i+1} = \frac{a_i f(b_i) - b_i f(a_i)}{f(b_i) - f(a_i)}$$

#### Comentarios:

1) Los métodos basados en el Teorema de Bolzano (Métodos de acotación o de bracketing), son en general lentos pero seguros, ya que si partimos de un intervalo con cambio de signo en  $f(x)$ , el algoritmo produce intervalos encajados que siguen conteniendo a la solución.

2) El método de la Regula Falsi (también llamado de la cuerda), es casi siempre más rápido que el de Bipartición, pero existen determinadas ecuaciones en los que es mucho más lento, por lo que existen algoritmos modificados que mejoren su comportamiento en estos casos.

### 5.2 Teorema del punto fijo. Métodos de aproximaciones sucesivas

Dada una ecuación  $f(x) = 0$  podemos encontrar de muchas formas una ecuación equivalente de la forma  $g(x) = x$ , para los que la solución es un punto fijo de  $g(x)$ . Por ejemplo:  $f(x) =$



$x^3 + \text{sen}(x) - 2 = 0$  puede ponerse como  $g(x) = x^3 + x + \text{sen}(x) - 2 = x$ . El próximo teorema dará condiciones suficientes para la existencia y unicidad del punto fijo.

### 5.2.1 Teorema del Punto Fijo

Su enunciado en una forma general es:

**Si  $T$  es una contracción de un espacio métrico completo, entonces posee un único punto fijo.**

**Espacio métrico:** Espacio donde existe una distancia.

**Contracción:** Aplicación de  $X$  en  $X$ , que verifica:  $\forall x, y \in X \quad d(T(x), T(y)) \leq kd(x, y)$  con  $k \in [0, 1)$  (es decir, que reduce las distancias.)

**Completo:** Un espacio métrico es completo si y solo si todas las sucesiones de Cauchy tienen límite en  $X$ .

**Punto fijo:** Los puntos fijos de una transformación  $T$ , son los que verifican  $T(x)=x$ .

-Demostración- (Se hará al ser constructiva)

**Si  $k=0$  es evidente que se verifica**, pues  $d(T(x), T(y))=0$ , luego se trata de una transformación constante y todos los  $x$  se transforman en el mismo aplicado 'a'. Así  $T(a)=a$  y por tanto  $a$  es un punto fijo.

Si  $k > 0$  formamos la sucesión  $x_{j+1} = T(x_j)$ , por lo que:

$$d(x_j, x_{j+1}) \leq kd(x_{j-1}, x_j) \leq k^2 d(x_{j-2}, x_{j-1}) \leq \dots \leq k^j d(x_0, x_1)$$

$$d(x_p, x_{p+q}) \leq \sum_{j=p}^{p+q-1} d(x_j, x_{j+1}) \leq \sum_{j=p}^{p+q-1} k^j d(x_0, x_1) < \sum_{j=p}^{\infty} k^j d(x_0, x_1) = \frac{k^p}{1-k} d(x_0, x_1) < \epsilon$$

Luego para todo  $\epsilon > 0$  existe un  $m$  (que verifica  $\frac{k^m}{1-k} d(x_0, x_1) < \epsilon$ ) tal que si  $p, q \geq m$  entonces  $d(x_p, x_q) < \epsilon$ , es decir la sucesión  $x_j$ , así formada es una **sucesión de Cauchy**.

Por ser de Cauchy en un espacio completo tendrá límite ( $x$ ), que veremos es un punto fijo de  $T$ .

$$d(x_{n+1}, x) = d(T(x_n), T(x)) \leq kd(x_n, x) \leq \dots \leq k^{n+1} d(x_0, x) \Rightarrow \lim_{n \rightarrow \infty} T(x_n) = T(x)$$

$$x = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \lim_{n \rightarrow \infty} x_{n+1} = \lim_{n \rightarrow \infty} T(x_n) = T(x)$$

**Unicidad:** Lo veremos por reducción al absurdo, ya que si existiesen 2 puntos fijos  $x$  y  $x'$ , entonces  $d(x, x') = d(T(x), T(x')) < d(x, x')$ , que es absurdo.

Sabemos que  $\mathbb{R}, \mathbb{R}^2, \dots, \mathbb{R}^n$  son espacios métricos completos y en ellos los cerrados también lo son, por tanto:

**Corolario 1:** Si  $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$ ,  $g(x) : I \rightarrow I$  que verifica:  $\exists k/0 \leq k < 1$  tal que  $|g(x_1) - g(x_2)| < k|x_1 - x_2|$  para todo  $x_1, x_2$  del intervalo  $[a, b]$ . Entonces  $\exists x^* \in I / g(x^*) = x^*$ . El método  $x_{k+1} = g(x_k)$  convergerá hacia el punto fijo para cualquier punto inicial en  $I$ . (**Convergencia global**)

**Corolario 2:** Si  $y = g(x)$  verifica: 1)  $g$  es continua en  $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$  y derivable en el  $(a, b)$ .

2)  $g: I \rightarrow I$ , es decir:  $g[a, b] \subset [a, b]$

$$3) |g'(x)| \leq k < 1 \quad \forall x \in I,$$

entonces existe el punto fijo de  $g$  en  $I$  y el método  $x_{k+1} = g(x_k)$  convergerá hacia él para todo  $x_0 \in I$ . (**Convergencia global**)

**Corolario 3:** Si un método iterativo  $x_{i+1} = g(x_i)$  con  $g(x) \in C^1[a, b]$  tiene un punto fijo (solución)  $x^* = g(x^*) \in [a, b]$  y  $|g'(x^*)| \leq k < 1$  entonces existe un entorno de  $x^*$  donde el método es convergente a la solución. (**Condición de convergencia local**).

### 5.2.2 Análisis del error

En las hipótesis de convergencia:  $|x_n - x^*| \leq \frac{k^n}{1-k} |x_1 - x_0|$

#### Orden de un método

Sea el método iterativo  $x_{k+1} = g(x_k)$  donde  $g(x)$  es una función que admite un desarrollo de Taylor en un entorno del punto fijo  $x^*$

Llamamos  $\epsilon_n = x_n - x^* \Rightarrow x_{n+1} = x^* + \epsilon_{n+1} = g(x_n) = g(x^* + \epsilon_n) = g(x^*) + g'(x^*)\epsilon_n + g''(x^*)\frac{\epsilon_n^2}{2!} + \dots = x^* + g'(x^*)\epsilon_n + g''(x^*)\frac{\epsilon_n^2}{2!} + \dots$

Obteniéndose la **ley del error**  $\epsilon_{n+1} = g'(x^*)\epsilon_n + g''(x^*)\frac{\epsilon_n^2}{2!} + \dots$

Método de primer orden:

Si  $g'(x^*) \neq 0$  se dice que es un método de primer orden, obteniendo la ley del error:  $\epsilon_{k+1} \approx \epsilon_k g'(x^*)$

(Sabemos que si  $|g'(x^*)| < 1$  convergerá localmente).

Método de orden  $n$ :

Si  $g'(x^*) = g''(x^*) = g'''(x^*) = \dots = g^{(n-1)}(x^*) = 0$  y  $g^{(n)}(x^*) \neq 0$  entonces diremos que es un método de orden  $n$  y su ley de error será:  $\epsilon_{k+1} \approx g^{(n)}(x^*) \frac{\epsilon_k^n}{n!}$

NOTA: El orden de un método es un indicador de la velocidad de convergencia de éste, considerándose preferible un método de orden de convergencia mayor. En caso de dos métodos de igual orden será preferible el que tenga  $g^{(n)}(x^*)$  menor.

### 5.2.3 Métodos de aproximaciones sucesivas

Consisten en crear una sucesión  $x_0, x_1, \dots, x_k, \dots \rightarrow x^*$  donde usualmente  $x_{k+1} = g(x_0, x_1, \dots, x_k)$ .

Generalmente  $x_{k+1} = g(x_k)$ , aunque en el método de la secante  $x_{k+1} = g(x_{k-1}, x_k)$

En éstos métodos la ecuación  $f(x)=0$  se ha transformado en  $x = g(x)$ , por lo que la solución será encontrar un punto fijo de  $g(x)$ .

#### Método de la secante

Es un método iterativo que parte de dos puntos iniciales  $x_0$  y  $x_1$ , obteniéndose una sucesión por recurrencia:

$$x_{k+1} = g(x_k, x_{k-1}) = \frac{x_{k-1}f(x_k) - x_k f(x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

#### Método de Newton-Raphson

Partimos de un punto inicial  $x_0$ , los siguientes se obtienen por iteración:

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

**Comentarios:**

1) Los métodos de la secante y de Newton se denominan métodos iterativos y son en general mucho más rápidos que los de acotación (intervalos encajados), sin embargo no estará garantizada la convergencia. En los métodos iterativos habrá que considerar como iniciarlos (obtención del punto o puntos iniciales), convergencia o divergencia, velocidad de la convergencia, posibles problemas, ...

2) En general los métodos de Bipartición o Regula Falsi sirven como inicio (obtención de un punto inicial para los métodos iterativos).

**5.2.4 Análisis de los posibles criterios de parada**

Generalmente los criterios de parada son una combinación de los siguientes:

- 1)  $f(x_k) = 0$  (se obtuvo la solución)
- 2)  $|f(x_k)| \leq F_{TOL}$  (suficientemente cerca de la solución  $f(x_k) \approx 0$ )
- 3)  $|x_k - x^*| < X_{TOL}$  (suficientemente cerca de la solución  $x_k \approx x^*$ )
- 4)  $k \geq N_{TOL}$  (el método ha fracasado tras N iter.)
- 5)  $|F(x_k)| \geq F_{MAX}$  (el método diverge)
- 6)  $|x_k| > X_{MAX}$  (el método diverge)
- 7)  $x_{k+1} = x_k$  (no mejora la solución)
- 8)  $|x_{k+1} - x_k| \leq X_{TOL}$  (No mejora suficientemente la solución)
- 9)  $\frac{|x_{k+1} - x_k|}{|x_k|} \leq X_{TOL}$  (No mejora suficientemente la solución)

Normalmente se emplean diversos criterios conjuntamente.

Existen otros criterios, como el usado para detectar raíces múltiples.

**El método de Newton-Raphson es al menos de orden 2 para una raíz simple:**

Veamos que  $g'(x^*) = 0$ :

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}, \text{ por lo que: } g'(x) = 1 - \frac{f'(x)f'(x) - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}$$

$$\text{Y por tanto: } g'(x^*) = \frac{f(x^*)f''(x^*)}{(f'(x^*))^2} = 0 \text{ pues } f(x^*) = 0.$$

$$\text{Ley del error: } \epsilon_{k+1} \approx \frac{f''(x^*)}{f'(x^*)} \frac{\epsilon_k^2}{2}$$

**Método de Muller**

Este método necesita de 3 puntos iniciales  $(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))$ , posteriormente se calcula recursivamente el punto siguiente  $x_{j+1}$ , dados  $(x_{j-2}, f(x_{j-2})), (x_{j-1}, f(x_{j-1}))$  y  $(x_j, f(x_j))$ , mediante interpolación de una función polinómica de grado menor o igual a 2 (parábola), calculando su intersección con el eje OX, soluciones que llamaremos  $r_1$  y  $r_2$ .

Tomamos como  $x_{j+1}$  la raíz más próxima a  $x_j$ , repitiendo el procedimiento ahora con  $x_{j-1}, x_j$  y  $x_{j+1}$ , hasta un criterio de parada.

**Algoritmo:**

Paso 1: Elegir 3 puntos iniciales  $x_0, x_1$  y  $x_2$ .

Paso 2: Repetir hasta criterio de parada:

Dados  $x_{j-2}, x_{j-1}, x_j$  junto con sus aplicados por  $y = f(x)$ , calculamos:

$$q = \frac{x_j - x_{j-1}}{x_{j-1} - x_{j-2}} \quad A = qf(x_j) - q(1+q)f(x_{j-1}) + q^2f(x_{j-2})$$

$$B = (2q + 1)f(x_j) - (1 + q)^2 f(x_{j-1}) + q^2 f(x_{j-2}) \quad C = (1 + q)f(x_j)$$

$$x_{j+1} = x_j - (x_j - x_{j-1}) \left[ \frac{C}{B \pm \sqrt{B^2 - 4AC}} \right]$$

donde el signo de la raíz es el de B (lo que hace el denominador lo mayor posible en valor absoluto).

- Puede pasar al campo complejo y diverger.

### Caso de raíces múltiples

Si en la ecuación  $f(x)=0$ , para la solución  $x^*$  se verifica:

$f(x^*) = f'(x^*) = \dots = f^{(n-1)}(x^*) = 0$  con  $f^{(n)}(x^*) \neq 0$  diremos que la ecuación posee una raíz múltiple de orden  $n$  en  $x^*$ .

Si el orden de multiplicidad de  $x^*$  es  $n$ , entonces en un entorno de  $x^*$  se cumple:  $f(x) \cong K(x - x^*)^n$  con  $K = \frac{f^{(n)}(x^*)}{n!} \neq 0$ . Por otra parte  $f'(x) \cong nK(x - x^*)^{n-1}$

**Método sin raíces múltiples:** Construyendo  $G(x) = f(x)/f'(x) \cong (x - x^*)/n$  que tendrá la raíz  $x^*$ , pero con multiplicidad 1. Pero  $G'(x) = 0$  tendrá solo orden 1 pues  $G'(x^*) = 1/n$  luego su convergencia será lenta.

### 5.2.5 Deflacción

Si en la ecuación  $f(x)=0$ , hemos encontrado la raíz  $x^*$ , podremos encontrar otras, si existiesen, resolviendo:  $g(x) = \frac{f(x)}{x - x^*} = 0$  que tendrá las mismas raíces de  $f(x) = 0$  excepto la  $x^*$ . A la ecuación  $g(x)=0$  se le llama deflacionada de la  $f(x)=0$ .

## 5.3 Métodos especiales para ecuaciones algebraicas

Una ecuación algebraica es de la forma:  $P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_nx^n = 0 \quad (a_n > 0)$

### 5.3.1 Teoremas básicos

1) **Teorema del resto:** el resto de dividir  $P(x)$  por  $x-a$ , coincide con el valor numérico del polinomio en  $x=a$ . (resto= $P(a)$ ).

2) **Teorema del factor:** Si  $P(a)=0$  entonces  $P(x)$  es divisible por  $x-a$ .

Si  $P(a) = 0 \Rightarrow P(x) = (x - a)P^*(x)$  con  $P^*(x)$  de grado inferior en 1 al de  $P$ .

3) **Conjugado:** Si  $r$  es una raíz de  $P(x)=0$ , con sus coeficientes  $a_i \in \mathbb{R}$ , entonces  $\text{Conj}(r)$  es también raíz de  $P$ .

4) **Raíces enteras:** Si  $a_i \in \mathbb{R}$  y  $P(x)=0$  admite una raíz entera  $r$ , entonces  $r$  debe dividir al término independiente  $a_0$ .

5) **Raíces racionales:** Si  $a_i \in \mathbb{R}$  y  $P(x)=0$  posee la raíz racional  $r = \frac{p}{q}$  (irreducible), entonces  $p$  será divisor del término independiente  $a_0$  y  $q$  será divisor del coeficiente de mayor grado  $a_n$ .

6) **Teorema fundamental del álgebra:** Tiene varios enunciados, entre ellos:

a) Toda ecuación algebraica (no constante), posee al menos una raíz (real o compleja).

b) El número de raíces (reales o complejas) de una ecuación algebraica, coincide con el grado del polinomio. (Considerándose como  $n$  raíces las de multiplicidad  $n$ ).

7) **Reglas de los signos de Descartes:** a) El número de raíces reales positivas de  $P(x)=0$  es igual al número de cambios de signo o inferior a éste en un número par. b) El número de

raíces reales negativas de  $P(x)=0$  es igual al número de cambios de signo de  $P(-x)$  o inferior a éste en un número par.

### 5.3.2 Aproximación de raíces

Al resolver una ecuación algebraica, estamos interesados no solo en las raíces reales, sino también en las complejas. Son muy indicados los métodos generales de Newton y Muller, existiendo métodos específicos.

En el caso de **raíces múltiples**, podemos resolver la ecuación:  $Q(x) = \frac{P(x)}{m.c.d(P, P')} = 0$  que tendrá las mismas raíces que  $P(x)=0$  pero con multiplicidad 1.

NOTA:  $Q(x)=0$  es una nueva ecuación algebraica de grado menor o igual que  $P(x)=0$ . Además el  $m.c.d(P, P')$  puede ser calculado mediante el algoritmo de Euclides para polinomios.

### 5.3.3 Método de Bairstow

Consiste en buscar factores cuadráticos de  $P(x)$ , es decir, descomponer  $P(x) = (x^2 + px + q)P^*(x)$  con  $P^*$  de grado  $n-2$ .

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 = (x^2 + px + q)P^*(x) + \alpha(x + p) + \beta$$

el objetivo será buscar  $p$  y  $q$  tales que  $\alpha = \alpha(p, q) = 0$  y  $\beta = \beta(p, q) = 0$ .

Si llamo  $b_i$  a los coeficientes de  $P^*(x)$  obtengo:

$$\begin{array}{ll} a_n &= b_{n-2} & b_{n-2} &= a_n \\ a_{n-1} &= b_{n-3} + pb_{n-2} & b_{n-3} &= a_{n-1} - pb_{n-2} \\ a_{n-2} &= b_{n-4} + pb_{n-3} + qb_{n-2} & b_{n-4} &= a_{n-2} - pb_{n-3} - qb_{n-2} \\ a_{n-3} &= b_{n-5} + pb_{n-4} + qb_{n-3} & b_{n-5} &= a_{n-3} - pb_{n-4} - qb_{n-3} \\ \vdots & & \vdots & \\ a_2 &= b_0 + pb_1 + qb_2 & b_0 &= a_2 - pb_1 - qb_2 \\ a_1 &= \alpha + pb_0 + qb_1 & \alpha &= a_1 - pb_0 - qb_1 \\ a_0 &= \beta + p\alpha + qb_0 & \beta &= a_0 - p\alpha - qb_0 \end{array} \Rightarrow$$

Lo que buscamos para unos  $\alpha$  y  $\beta$  determinados es que en la iteración siguiente:

$$\left. \begin{array}{l} \alpha^* = \alpha + \Delta\alpha \approx 0 \\ \beta^* = \beta + \Delta\beta \approx 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \alpha + \frac{\partial\alpha}{\partial p}\Delta p + \frac{\partial\alpha}{\partial q}\Delta q \approx 0 \\ \beta + \frac{\partial\beta}{\partial p}\Delta p + \frac{\partial\beta}{\partial q}\Delta q \approx 0 \end{array} \right\}$$

Que habrá que resolver como sistema de 2 ecuaciones no lineales. (Generalmente por Newton para sistemas).

Bairstow simplificó los cálculos del Jacobiano del sistema:  $\left. \begin{array}{l} \alpha = \alpha(p, q) = 0 \\ \beta = \beta(p, q) = 0 \end{array} \right\}$ , es decir:

$$J = \begin{pmatrix} \frac{\partial\alpha}{\partial p} & \frac{\partial\alpha}{\partial q} \\ \frac{\partial\beta}{\partial p} & \frac{\partial\beta}{\partial q} \end{pmatrix}, \text{ mediante una segunda división sintética.}$$

Llamamos  $\frac{\partial\alpha}{\partial p} = -c_0$   $\frac{\partial\alpha}{\partial q} = -c_1$   $\frac{\partial\beta}{\partial p} = -c_{-1}$   $\frac{\partial\beta}{\partial q} = -c_0$ , pues resultan iguales.

Obtenemos:

$$\left. \begin{aligned} \alpha^* &= \alpha + \Delta\alpha = \alpha - c_0\Delta p - c_1\Delta q = 0 \\ \beta^* &= \beta + \Delta\beta = \beta - c_{-1}\Delta p - c_0\Delta q = 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} \alpha &= c_0\Delta p + c_1\Delta q \\ \beta &= c_{-1}\Delta p + c_0\Delta q \end{aligned} \right\}$$

Sistema que al resolverlo proporciona  $\Delta p$  y  $\Delta q$ , por lo que el algoritmo queda:

Paso 1: Tomo un  $p_0$  y un  $q_0$  inicial.

Paso 2: Repito hasta criterio de convergencia.

Calculo mediante división sintética los  $b_i$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  y los  $c_i$ . (La veremos después).

Resuelvo el sistema anterior, obteniendo  $\Delta p$  y  $\Delta q$ .

Calculo  $p_{j+1} = p_j + \Delta p$  y  $q_{j+1} = q_j + \Delta q$ .

Paso 3: Resulta  $P(x) = (x^2 + px + q)P^*(x)$  y de  $x^2 + px + q = 0$  saldrán 2 raíces de la ecuación, que podrán ser reales o complejas., pudiendo deflacionarse la ecuación y continuar resolviendo  $P^*(x) = 0$ .

**Posibles criterios de parada son:**

- Estabilización de las sucesiones  $p_i$  y  $q_i$
- Que  $\alpha_i \approx 0$  y  $\beta_i \approx 0$ .

**Posibles criterios para la elección de  $p_0$  y  $q_0$ :**

Si conocemos el valor aproximado de 2 raíces  $r_1$  y  $r_2$ :  $p = -(r_1 + r_2)$   $q = r_1 r_2$

Si estamos interesados en las raíces de módulo mayor:  $p = \frac{a_{n-1}}{a_n}$ ,  $q = \frac{a_{n-2}}{a_n}$

Si estamos interesados en las raíces de menor módulo:  $p = \frac{a_1}{a_2}$ ,  $q = \frac{a_0}{a_2}$

**Obtención de los  $c_i$  ,mediante división sintética:** El cálculo se realiza mediante el esquema:

	$a_n$	$a_{n-1}$	$a_{n-2}$	$\dots$	$a_3$	$a_2$	$a_1$	$a_0$
$-p$		$-pb_{n-2}$	$-pb_{n-3}$	$\dots$	$-pb_2$	$-pb_1$	$-pb_0$	$-p\alpha$
$-q$			$-qb_{n-2}$	$\dots$	$-qb_3$	$-qb_2$	$-qb_1$	$-qb_0$
	$b_{n-2}$	$b_{n-3}$	$b_{n-4}$	$\dots$	$b_1$	$b_0$	$\alpha$	$\beta$
$-p$		$-pc_{n-2}$	$-pc_{n-3}$	$\dots$	$-pc_2$	$-pc_1$	$-pc_0$	
$-q$			$-qc_{n-2}$	$\dots$	$-qc_3$	$-qc_2$	$-qc_1$	
	$c_{n-2}$	$c_{n-3}$	$c_{n-4}$	$\dots$	$c_1$	$c_0$	$c_{-1}$	

### Deflacción y depuración

Si por cualquiera de los métodos vistos, hemos encontrado una raíz  $r$  de la ecuación algebraica, podremos dividir el polinomio inicial por  $(x-r)$ , obteniéndose otra ecuación  $P_1(x) = 0$  de un grado menor, que posee las mismas raíces excepto  $r$ , que llamaremos ecuación deflacionada de  $P(x) = 0$ .

Inconveniente: El polinomio resultante para una raíz aproximada, tendrá los coeficientes ligeramente diferentes, lo que puede afectar significativamente a las raíces.

Depuración: Una vez resuelta la ecuación secundaria  $P_1(x) = 0$  y obtenida una nueva raíz, debemos depurarla iterando en la ecuación original.

#### 5.3.4 Método de Laguerre

Se aplica a una ecuación algebraica de grado  $n > 2$ , con raíces diferentes obteniéndose convergencia global y cúbica.

Si son reales, convergerá solo linealmente a las raíces múltiples.

Busca una parábola con 1 solución próxima a la raíz.

$$H(x) = (n-1) [(n-1)(f'(x))^2 - nf(x)f''(x)]$$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{nf(x_i)}{f'(x_i) \pm \sqrt{H(x_i)}} \quad (\text{usando el signo de } f').$$

#### 5.4 Métodos iterativos de punto fijo, Newton y cuasi-Newton para sistemas de ecuaciones no lineales

Sea el sistema: 
$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$
 donde las  $f_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , o bien en notación compacta  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$

En principio suponemos que el número de ecuaciones es igual al número de incógnitas.

Resolverla será encontrar un vector  $x^* \in \mathbb{R}^n / f(x^*) = \Theta$ , donde  $\Theta = (0, 0, \dots, 0)^t$ .

Podemos plantear el sistema como  $\bar{x} = g(\bar{x})$ , es decir,  $x_i = g_i(x_1, \dots, x_n) \forall i \quad / \quad 1 \leq i \leq n$ . Resolverlo será ahora encontrar un punto fijo de  $g(\bar{x})$ .

##### 5.4.1 Teorema del punto fijo

Sea  $D \subset \mathbb{R}^n \quad D = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times \dots \times [a_n, b_n]$  y sea  $g$  una aplicación de  $D$  en  $\mathbb{R}^n$  que verifica:

1)  $g$  es continua en  $D$  y derivable en el interior de  $D$ .

2)  $g(D) \subset D$

3)  $\exists \quad 0 \leq k < 1$  tal que  $\|g(x) - g(y)\| \leq k\|x - y\|$  para cualesquiera vectores  $x, y$  del dominio

$D$ . ( $g$  es Lipchitziana)

Entonces existe un único  $s \in D$  tal que  $s = F(s)$ .

COROLARIO:

Sea  $D \subset \mathbb{R}^n$  y  $g: D \rightarrow \mathbb{R}^n$  que verifica:

1)  $\forall i, g_i: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , son funciones de clase 1 en  $D$ .

2)  $g(D) \subset D$

3) Existe  $k < 1$  tal que  $\forall i \quad \left| \frac{\partial g_i}{\partial x_j}(x) \right| \leq \frac{k}{n} \quad \forall x \in D$

Entonces existe un único vector  $s \in D$  tal que  $F(s) = s$ .

**Ejemplo:** Sea el sistema: 
$$\left. \begin{aligned} x &= (x^2 + y^2)/2 - 1/4 \\ y &= xy + 1/5 \end{aligned} \right\}. \text{ Entonces}$$

$$g_1 = (x^2 + y^2)/2 - 1/4, \quad g_2 = xy + 1/5 \Rightarrow \partial g_1 / \partial x = x, \quad \partial g_1 / \partial y = y, \quad \partial g_2 / \partial x = y, \quad \partial g_2 / \partial y = x$$

Veamos si se cumplen las hipótesis:

Para la 3) será necesario que  $|x| < 1/2$  y  $|y| < 1/2$ , la 2) se cumple pues las parciales son polinomios y por tanto continuas y derivables indefinidamente, por último  $F(D) \subset D \quad D = [-.5, .5] \times [-.5, .5]$  por lo que se produce la convergencia global en  $D$ , es decir para cualquier punto inicial en  $D$ , la iteración de punto fijo convergerá al único punto fijo existente en  $D$ .

**CONSTRUCCIÓN:** Dado un sistema  $f(x)=0$ , se puede poner  $x=x+f(x)$  como posible método iterativo, aunque generalmente se busca una matriz cuadrada  $M$  que acelere la convergencia del método  $x = x + M f(x)$ , lo que nos conduce al método de Newton-Raphson.

#### 5.4.2 Método de Newton-Raphson para sistemas

Consiste en tomar  $M = -[J_f(x)]^{-1}$  resultando:

$$\bar{x}_{j+1} = \bar{x}_j - [J_f(\bar{x}_j)]^{-1} f(\bar{x}_j) \quad J_f(x) = \text{Jacobiano de } f = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Para poder aplicar el método de Newton,  $J_f$  deberá ser no singular y las derivadas parciales  $\frac{\partial f_i}{\partial x_j}$  continuas.

Si  $f \in C^2$  la convergencia estará garantizada en un entorno de la solución.

#### Cálculo computacional:

Para evitar el calculo de la matriz inversa, resolvemos el sistema en  $\bar{u} = \bar{x}_{j+1} - \bar{x}_j$ :

$$\bar{u} = \bar{x}_{j+1} - \bar{x}_j = -[J_f(\bar{x}_j)]^{-1} f(\bar{x}_j) \Rightarrow J_f(\bar{x}_j)(\bar{u}) = -f(\bar{x}_j) \quad \text{y luego:} \quad \bar{x}_{j+1} = \bar{x}_j + \bar{u}$$

Ejemplo: 
$$\left. \begin{aligned} (x^2 - y^2)/2 + x + 7/8 &= 0 \\ xy + y - 1/5 &= 0 \end{aligned} \right\}$$

Calculamos el Jacobiano  $J = \begin{pmatrix} x+1 & -y \\ y & x+1 \end{pmatrix} \Rightarrow |J| = (x+1)^2 + y^2$  luego el método de Newton será convergente en un entorno de la solución excepto si ésta es  $x=-1, y=0$  (que no lo es, como se puede ver sustituyendo).

Si partimos de un valor inicial  $x_0 = y_0 = 0$ , valores que sustituimos en  $J_f(\bar{x}_j)(\bar{u}) = -f(\bar{x}_j)$  resultando:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -7/8 \\ 1/5 \end{pmatrix} \Rightarrow u_1 = -7/8, u_2 = 1/5 \Rightarrow x_1 = 0 - 7/8 = -0.875, y_1 = 0 + 1/5 = 0.2$$

$$\begin{pmatrix} 1 - 0.875 & -0.2 \\ 0.2 & 1 - 0.875 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{(-0.875)^2 + (0.2)^2}{2} \\ -(-0.875)(0.2) \end{pmatrix} \quad \text{etc} \dots$$

#### 5.4.3 Métodos cuasi-Newton

El método de Newton tiene el problema de necesitar evaluar el jacobiano en cada iteración (evaluar  $n^2$  funciones) y las funciones  $f_i$  (evaluar  $n$  funciones), por último es necesario resolver un sistema de orden  $n$  (del orden de  $n^3$  operaciones aritméticas), lo que lo hace prohibitivo excepto para valores pequeños de  $n$ . Existen métodos que pueden considerarse generalización del método de la secante a sistemas que reducen el cálculo en cada iteración, sin embargo la convergencia deja de ser cuadrática para hacerse **superlineal**.

La convergencia de un método se llama **superlineal** si  $\lim_{j \rightarrow \infty} \frac{\|\bar{x}_{j+1} - x^*\|}{\|\bar{x}_j - x^*\|} = 0$



**Método de Broyden:**

Como ejemplo veremos este método que consigue evaluar en cada iteración solamente  $n$  funciones, realizando solo del orden de  $n^2$  operaciones aritméticas.

La idea es calcular solamente la primera vez la matriz Jacobiana, sustituyendo en las restantes iteraciones la matriz  $J$  por otra  $A$ , más fácil de calcular ( $A_0 = J$ ).

Queremos que la matriz  $A_i$ , verifique  $A_i \Delta \bar{x}_i = \Delta \bar{y}_i$  y además para todo vector  $z$  perpendicular a  $\Delta \bar{x}_i$ :

$$(\Delta \bar{x}_i z = 0) \Rightarrow A_i z = A_{i-1} z$$

$$\text{Donde hemos simplificado la notación, mediante: } \Delta x_i = \bar{x}_i - \bar{x}_{i-1} \quad \bar{y}_i = f(\bar{x}_i) - f(\bar{x}_{i-1}).$$

Con esas condiciones se consigue la recurrencia:

$$A_i = A_{i-1} + \frac{\Delta \bar{y}_i - A_{i-1} \Delta \bar{x}_i (\Delta \bar{x}_i)^t}{\|\Delta \bar{x}_i\|^2} \quad \bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i - A_i^{-1} f(\bar{x}_i)$$

que evita calcular Jacobianos, pero sigue necesitando resolver el sistema:  $A_i \Delta \bar{x}_i = -f(\bar{x}_i)$ .

Pero el algoritmo permite una nueva mejora, que evite resolver el sistema en cada iteración, sustituyéndolo por multiplicaciones de matrices, que consiste en un cálculo iterativo de la matriz inversa de las  $A_i$ :

$$A_i^{-1} = A_{i-1}^{-1} + \frac{(\Delta \bar{x}_i - A_{i-1}^{-1} \Delta \bar{y}_i)(\Delta \bar{x}_i)^t A_{i-1}^{-1}}{(\Delta \bar{x}_i)^t A_{i-1}^{-1} \Delta \bar{y}_i}$$

**Algoritmo de Broyden:**

1) Dado un vector  $\bar{x}_0$  inicial, se calcula por Newton  $x_1$ ,  $A_0 = J(x_0)$ , en caso de ser complicado se puede aproximar mediante derivación numérica:

$$\left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right)_{x_0} \approx \frac{f_i(x_0 + h\bar{e}_j) - f_i(x_0 - h\bar{e}_j)}{2h} \quad (h \approx 0, h > 0) \quad \bar{e}_j = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$$

para calcular  $A_0^{-1}$ , es necesario la inversión (solo esta vez) de  $A_0$ , calculando  $\bar{x}_1 = \bar{x}_0 - A_0^{-1} f(\bar{x}_0)$

2) Se calculan las sucesivas inversas y vectores mediante:

$$A_i^{-1} = A_{i-1}^{-1} + \frac{(\Delta \bar{x}_i - A_{i-1}^{-1} \Delta \bar{y}_i)(\Delta \bar{x}_i)^t A_{i-1}^{-1}}{(\Delta \bar{x}_i)^t A_{i-1}^{-1} \Delta \bar{y}_i} \quad \bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i - A_i^{-1} f(\bar{x}_i)$$

hasta que se cumpla algún criterio de parada.

**5.4.4 Métodos de descenso**

En realidad son métodos de optimización que se emplean aquí para resolver sistemas.

La ventaja de los métodos Newton y cuasi-Newton es su velocidad de convergencia, una vez que conocemos una aproximación de la solución, su desventaja es que usualmente solo se produce la convergencia en las proximidades de la solución. Los métodos que veremos ahora son globales, pero su convergencia solo es lineal. Resultan útiles para obtener buenos puntos de inicio para los métodos anteriores.

la función  $G(x) = \sum_i [f_i(\bar{x})]^2$  tendrá su mínimo  $G(x) = 0$  precisamente en la solución del sistema. Un problema que se puede presentar es que se quede en un mínimo local, diferente del mínimo global buscado. Realmente es un método de optimización, que estamos usando para la resolución de sistemas no lineales.

El esquema de estos métodos es partir un vector inicial  $x_0$ , calcular la dirección en que la función  $G$  disminuye más rápidamente, calculando posteriormente el módulo del vector que conviene desplazarse en esa dirección.

La dirección de crecimiento más rápido de  $G$  es la de su vector gradiente  $(\nabla G(\bar{x}))$ , por lo que la dirección de decrecimiento más rápido es  $-\nabla G(\bar{x}) = ((\frac{\partial G}{\partial x_1})_{\bar{x}}, (\frac{\partial G}{\partial x_2})_{\bar{x}}, \dots, (\frac{\partial G}{\partial x_n})_{\bar{x}})^t$

Por tanto el nuevo vector  $\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i - \alpha \nabla G(\bar{x}_i)$ , y el problema será ahora encontrar la constante  $\alpha$  tal que reduzca lo máximo posible  $g(\bar{x}_{i+1})$ .

Aquí surgen diversos métodos, pues la obtención del  $\alpha$  que hace mínimo a  $G(\bar{x}_i - \alpha \nabla G(\bar{x}_i))$  es muy costoso pero tiene la ventaja de que el siguiente gradiente es perpendicular (**método del gradiente conjugado**), dar un valor arbitrario pequeño y constante a  $\alpha$ , es el otro extremo. Otro método intermedio puede ser dar 3 valores arbitrarios no negativos a  $\alpha$ , evaluando para ellos  $G(\bar{x}_i - \alpha \nabla G(\bar{x}_i))$ , con lo que se obtiene una aproximación parabólica del comportamiento de  $G$  en esa dirección, estimando el  $\alpha$  que produce el mínimo de la parábola. Pueden sugerirse otras técnicas que constituyen las llamadas métodos del gradiente o del descenso más rápido.

## 6 OPTIMIZACIÓN NUMÉRICA

### 6.1 Optimización no restringida en una y varias variables

Consiste en hallar máximos y/o mínimos de funciones. Aquí solo estudiaremos la optimización sin restricciones de una función real de  $n$  variables.

#### Propiedades:

- 1) El máximo de una función  $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$  es el mínimo de la función  $y = -f(\bar{x})$
- 2) La condición necesaria de óptimo (máximo o mínimo) en una variable es que  $f'(x) = 0$ .
- 3) Una condición suficiente para que  $x^*$  sea mínimo en una variable es que  $f'(x^*) = 0, f''(x^*) > 0$ , o bien,  $f'(x^*) = f''(x^*) = \dots = f^{(k-1)}(x^*) = 0, f^{(k)}(x^*) > 0$  ( $k=\text{par}$ )

NOTA: Una función puede tener mínimo y no cumplir la condición en las derivadas (Ej.  $f(x) = |x|$ )

- 4) La condición necesaria para que  $\bar{x}^*$  sea óptimo en varias variables es que el gradiente sea 0 ( $(\nabla f)_{\bar{x}^*} = 0$ ). Es decir  $\forall i, (\frac{\partial f}{\partial x_i})_{\bar{x}^*} = 0$

- 5) La condición suficiente para que  $x^*$  sea un mínimo estricto de  $f(\bar{x})$  es que el gradiente en dicho punto valga 0 y que la matriz Hessiana en dicho punto sea definida positiva.

NOTA: La matriz Hessiana es  $H(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_n}(x) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 x_2}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 x_n}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_1}(x) & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n x_2}(x) & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(x) \end{pmatrix}$

Un primer método de cálculo será plantear las  $n$  ecuaciones de la condición suficiente:  $\forall i \quad \partial f / \partial x_i = 0$ , resolviendo el sistema por cualquier método para sistemas no lineales y posteriormente sustituir en la matriz Hessiana, para comprobar si realmente hemos obtenido el mínimo (o máximo) deseado.

## 6.2 Métodos de descenso (gradiente), Newton y cuasi-Newton

Ya se ha indicado que encontrar el óptimo de una función de varias variables puede transformarse en encontrar la solución de un sistema de  $n$  ecuaciones. Resolver el sistema por Newton o cuasi-Newton es un método usual de optimización numérica.

Consisten por tanto en resolver  $f'(x) = 0$  (una variable) o bien el sistema  $\nabla f(x) = 0, \Rightarrow \forall i \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$ , comprobando después si el punto obtenido cumple las condiciones suficientes de máximo o mínimo.

En una variable el método de obtención del óptimo por Newton quedará:  $x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$ , mientras el de la secante (cuasinewton):  $x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f''(x_k) - f''(x_{k-1})}$

En varias variables nos remitiremos al sistema no lineal:  $\forall i g_i(\bar{x}) = \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0$ , que resolveremos mediante el método de Newton o cuasinewton, comprobando si la solución  $\bar{x}^*$ , es el óptimo buscado en el Hessiano ( $H(\bar{x}^*)$ ).

### Método de Brent

Existen métodos específicos de minimización: (ya hemos transformado cualquier problema de maximización en otro de minimización)

En el caso de una función de una variable, existe equivalente al método de bracketing, pues si  $a < b < c$  y  $f(a) > f(b) < f(c)$ , sabemos que en  $(a, c)$ , existirá un máximo si  $f(x)$  es continua. (Análogo para máximo si  $f(a) < f(b) > f(c)$ ).

Podremos hallar un punto intermedio en  $(a, c)$  y quedarnos con la terna donde se sigan cumpliendo las desigualdades anteriores. Existen diferentes métodos de obtención del punto intermedio, el más empleado es el método de Brent, que se basa en interpolación cuadrática:

$$x = b - \frac{(b-a)^2[f(b) - f(c)] - (b-c)^2[f(b) - f(a)]}{2((b-a)[f(b) - f(c)] - (b-c)[f(b) - f(a)])}$$

La fórmula falla si  $f(a)=f(b)=f(c)$ . Pueden existir problemas cuando queramos tener precisiones próximas al épsilon de la máquina.

### 6.2.1 Método del gradiente

Ya lo hemos visto aplicado a la resolución de un sistema no lineal. Al igual que se indicó allí es método es de convergencia global, pero lineal (lento) y podrá llevarnos a mínimos locales, en lugar del mínimo global buscado.

Se intenta minimizar  $f(\bar{x})$ , para ello partimos de un punto inicial  $\bar{x}_0$  y se calcula en cada iteración la dirección de mayor descenso  $-(\nabla f)_{\bar{x}_i}$ , entonces el nuevo punto  $\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i - \alpha(\nabla f)_{\bar{x}_i}$ .

El problema como ya indicamos es ahora el obtener un valor apropiado de  $\alpha$ . Aquí vamos a indicar una de las posibles técnicas.

#### Algoritmo del descenso:

Paso 1: Tomar vector inicial  $\bar{x}_0$  y condiciones de parada TOL y  $n$ .

Paso 2: Repetir hasta criterio de parada los pasos 3 a 14.

Paso 3: Calcular  $f_1 = f(\bar{x}_i)$ ,  $z = (\nabla f(\bar{x}))_{\bar{x}_i}$ ,  $z_0 = \|z\|_2$

Paso 4: Si  $z_0 = 0$  entonces  $\bar{x}_i$  es el mínimo (puede ser local). Terminar.

Paso 5: Tomo  $z = \frac{z}{z_0}$ ,  $\alpha_1 = 0$ ,  $\alpha_3 = 1$ ,  $f_3 = f(\bar{x} + \alpha_3 z)$

Paso 6: Mientras que  $f_3 \geq f_1$  hacer los pasos 7 y 8:

Paso 7:  $\alpha_3 = \frac{\alpha_3}{2}$   $f_3 = f(\bar{x} + \alpha_3 z)$

Paso 8: Si  $\alpha_3 < TOL/2$ , entonces  $\bar{x}_i$  puede ser un mínimo. Terminar.

Paso 9: Hacer  $\alpha_2 = \frac{\alpha_3}{2}$ ,  $f_2 = f(\bar{x} + \alpha_2 z)$

Paso 10:  $A = \frac{f_2 - f_1}{\alpha_2 - \alpha_1}$   $B = \frac{f_3 - f_2}{\alpha_3 - \alpha_2}$   $C = \frac{B - A}{\alpha_3 - \alpha_1}$

Paso 11: Tomo  $\alpha_0 = \frac{\alpha_1 + \alpha_3 - \frac{A}{C}}{2}$   $f_0 = f(\bar{x} + \alpha_0 z)$

Paso 12: Tomo como  $\alpha \in \{\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\}$ , que haga mínimo el valor de  $\{f_0, f_1, f_2, f_3\}$  y llamo  $f$  a ese mínimo.

Paso 13: Hago  $\bar{x}_{i+1} = \bar{x}_i + \alpha z$

Paso 14: Si  $|f - f_1| < TOL$  entonces  $\bar{x}_{i+1}$  es la solución. Terminar.

Paso 15: Incrementar contador de iteraciones, si excede el número máximo terminar. Indicar que el algoritmo termina sin éxito.