Métodos numéricos

Resumen práctico

Diego González 2007 diesgomo@gmail.com

1. Errores

1.1 Representación de números

• Representación de un número¹:

a se representa como $v = (-1)^s \cdot (1.m)_2 2^e$ donde:

Formato	Cantidad de bits	S	1.m	е	e_{min}	e_{max}
Simple	32	1 bit	1 + 23 bits	8 bits	-126	127
Doble	64	1 bit	1 + 52 bits	11 bits	-1022	1023

• Definición de redondeo:

El redondeo f(x) de x es α el número de punto flotante más cercano a x

• Definición de truncamiento (chopping)2:

$$\overline{x} \in FP/\overline{x} = \max_{y \in FP} \{y \le x\}$$

• Definición del épsilon de la máquina:

 $\varepsilon_{\rm m}$ es el menor númeo en punto flotante tal que $\varepsilon_{\rm m}$ +1>1

Definición de redondeo³:

$$\overline{x} \in FP/\overline{x} = \min_{y \in FP} \{y - x\}$$

• Definición de error absoluto:

$$E_x = x - \overline{x}$$

• Definición de error relativo⁴:

$$\delta_x = e_x = \frac{|E_x|}{x}$$

• Error de representación:

$$\overline{x} = x(1 + \delta_x) \quad \text{con } |\delta_x| < \varepsilon_{\text{M}}$$

 1 m es la mantisa, 1.m está en base 2 (el . es el decimal binario), y el coeficiente de m indica si está normalizado (1) ó denormalizado (0).

$$e_{\min} \le e \le e_{\max}$$

min max

 $^{\rm 2}$ Es el acto de que darse con el que tiene todos los bits de la representación correcta

 3 Dado un número x representarlo con el número de punto flotante más cercano es el acto de redondear

⁴ Si se da un error como porcentaje asumiremos que se trata de un error relativo.

El error relativo de \bar{x} es $\delta = \frac{\text{error absoluto}}{\text{valor verdadero}}$ siempre que valor verdadero $\neq 0$

1.2 Errores en la representación

• Tipos de errores:

Nombre	Descripción	Error relativo			
Cancelación catastrófica	Es la pérdida de precisión (aumento del error relativo) cuando se suma/resta	$\left \frac{\left(\overline{x} - x \right) - \left(\overline{y} - y \right)}{x - y} \right = \left \frac{x \delta_x - y \delta_y}{x - y} \right \le$ $\le \frac{x + y}{x - y} \varepsilon_M \text{si } x - y \approx 0 \text{ ocurre la}$ cancelación catastrófica			
Error de truncamiento de un cociente incremental ⁵	Es el error al dar $\Delta_h f$ como valor de $f'(x)$	$ \Delta_h f(x) = \frac{f''(\xi)h}{2}, \xi \in [x, x+h] $			
Error de truncamiento de la diferencia centrada ⁶	$\delta_h f(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$ aproxima a $f'(x)$	$\delta_h f(x) - f'(x) = \frac{f'''(\xi)h^2}{6},$ $\xi \in [x - h, x + h]$			

• Error total de aproximación de $f'(x)^7$:

$$e_{t} = e_{t} + e_{r} = \frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x)}}{h} - f'(x) \qquad \text{donde:}$$

$$e_{r} = \frac{\overline{f(x+h)} - \overline{f(x-h)}}{h} - \frac{\overline{f(x)} - f(x)}{h} = \frac{\delta_{1}f(x+h)}{h} - \frac{\delta_{f}f(x)}{h} = \frac{2\varepsilon_{M} |f(x)|}{h}$$

$$e_{t} = \frac{f''(\xi)h}{2}$$

• Cálculo del h_0 óptimo:

$$e_{\mathrm{t}} \leq 2 \frac{\left| f\left(x\right) \right| \varepsilon_{\mathrm{M}}}{h} + \frac{\left| f''(\xi) \right| h}{2} \underset{\mathrm{Derivando}}{\Longrightarrow} h_{0} = 2 \sqrt{\frac{\left| f\left(x\right) \right|}{\left| f''(\xi) \right|}} \varepsilon_{\mathrm{M}} \approx \sqrt{\varepsilon_{\mathrm{M}}}$$

- Extrapolación de Richardson8:
 - o Objetivo: Calcular $\lim_{h\to 0} \overline{f}(x,h) = f(x)$. $\overline{f}(x,h)$ estimados de f dependiendo de h
 - o Resolución: Se estima $\overline{f}(x,h) = f(x) + c_p h^p + o(h^r) \operatorname{con} r > p$ eliminando $c_p h^p$
 - Conclusión:

$$f(x) \cong \frac{f(x, \frac{h}{q}) + \overline{f}(x, \frac{h}{q}) - \overline{f}(x, h)}{q^p - 1}$$

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

⁵ Para calcular el error relativo se hace Taylor:

⁶ Para calcular el error relativo se hace Taylor.

 $^{^{7}}$ $e_{\rm t}$ = error de truncamiento. $e_{\rm r}$ = error de redondeo.

⁸ δ_h nota $\delta_h f(x)$. El proceso sistemático es escribir la igualdad en función de δ_h y dejar lo que interesa despejar.

o Teorema de Richardson:

$$f(x) \cong f(x) + \sum_{i=1}^{\infty} c_i h^{p_i} \quad \text{con } p_i < p_{i+1}, \quad i \ge 1$$
Se define
$$\begin{cases} \overline{f_1}(x,h) = \overline{f}(x,h) \\ \overline{f_{k+1}}(x,h) = \overline{f_k}(x + \frac{h}{q}) + \frac{\overline{f_k}(x,\frac{h}{q}) - \overline{f_k}(x,h), \quad q > 1}{q^{p_k} - 1} \end{cases} \Rightarrow \overline{f_n}(x,h) = \overline{f}(h,k)$$

o Simple

Este sirve para disminuir el error de truncamiento para cualquier serie (en particular, el de la diferencia centrada) en el orden de h^4 (O(h^4)).

En él se aproxima
$$f'(x) - \frac{h^4}{100.120} f^{(5)}(x)$$
 como $\delta_{h/10} + \frac{\delta_{h/10} - \delta_h}{99}$

o Repetida:

$$R_{h} = f(x) + ch^{4} + c_{1}h^{6} + \dots$$

$$R_{h/10} = f'(x) + \frac{ch^{4}}{10^{4}} + \frac{c_{1}h^{6}}{10^{6}} + \dots$$

$$\Rightarrow f'(x) + kh^{6} + \dots = R_{h/10} + \frac{R_{h/10} - R_{h}}{9999}$$

• Fórmula del error:

$$f: R^{n} \to R. \ \Delta f = f(x + \Delta x) - f(x) \Rightarrow \Delta f = \frac{\partial f(x + \theta \Delta x)}{\partial x_{1}} \Delta x_{1} + \dots + \frac{\partial f(x + \theta \Delta x)}{\partial x_{n}} \Delta x_{n} \Rightarrow \Delta f = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f(x + \theta \Delta x)}{\partial x_{i}} \Delta x_{i}$$

Corolario de la fórmula del error:

$$\left| \Delta f \right| \le \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f(x + \theta \Delta x)}{\partial x_i} \right| \left| \Delta x_i \right|$$

1.3 Condiciones

• Definición de número de condición de un algoritmo⁹: Es el número de condición de un algoritmo *A* con una entrada *x* es:

$$C_A(x) = \frac{\left\|A^{-1}\left(\overline{A}(x)\right)\right\|}{\|x\|\varepsilon_M} = \frac{\left\|\delta_x\right\|}{\|x\|\varepsilon_M}$$

Definición de número de condición de un problema¹⁰:
 El número de condición de un problema *P* con una entrada *x* es:

$$C_{P(x)} = \max_{\underline{\|\delta_x\|} < \varepsilon_M} \left\{ \frac{\|P(x + \delta_x) - P(x)\| / \|P(x)\|}{\|\delta_x\| / \|x\|} \right\}$$

⁹ Es la perturbación "soportable" de la entrada

¹⁰ Mide el impacto sobre los resultados ante una perturbación en los datos de entrada

2. Sistemas de ecuaciones lineales

2.1 Descomposición LU sin intercambio de filas¹¹

• Definición de matriz *L* y de matriz *U*:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} u_{11} & \dots & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

• Descomposición LU de A¹²:

U se obtiene de la escalerización de *A*, y *L* de los cofactores obtenidos al escalerizar *A*.

• Resolución de Ax = b: Se resuelve y de $Ly = b^{13}$ y x de $Ux = y^{14}$

2.2 Descomposición LU en el caso general

• Matriz *P*:

 $Si|A| \neq 0$, entonces, existe P matriz de permutación de A tal que PA tiene descomposición LU: PA = LU.

Esto se logra poniendo ceros en todas las filas y un uno por cada fila, cuya ubicación será en la columna cuyo índice coincida con el índice de la fila origen 15 . Esto es, si se intercambian las filas i y r en la matriz original, se intercambian las filas i y r de la matriz identidad correspondiente (del mismo tamaño que la matriz original).

¹⁴ Sustitución hacia atrás:
$$x_i = \frac{d_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j}{a_{ii}}$$
 con $i = n-1,...,1$

¹⁵ Ejemplo:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 5 \end{pmatrix} \Rightarrow P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \text{ pues, } PA \text{ la matriz de filas permutadas será } PA = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

 $^{^{11}}$ En esta sección se asume A escalerizable (de rango n) no singular, asegurando la existencia de la expresión A=L U

 $^{^{12}}$ Esta descomposición es única. Los cofactores son los resultados de las divisiones de las entradas con objeto de eliminar determinado valor.

¹³ Sustitución hacia adelante: $y_i = y_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} b_j \text{ con } i = 2,...,n$

- Algoritmo para hallar la descomposición LU de *PA*¹⁶:
 - 1. Hacer de P y L la matriz identidad $n \times n$
 - 2. Para i variando entre 1 y n hacer:
 - 3. Si $a_{ii} = 0$ buscar el primer j > i tal que $a_{ij} \neq 0$. Intercambiar en P la fila i con la fila j, intercambiar en A la fila i con la fila j, intercambiar en L la fila i con la fila j, para la matriz L dejar incambiada la diagonal principal (donde la entrada es 1)
 - 4. Para j > i hasta que j = n, hacer $l_{ji} = \frac{a_{ji}}{a_{ii}}$. Cambiar la fila F_j de A por $F_j l_{ji}F_i$. Insertar en la entrada (j,i) de L el valor l_{ji}
 - 5. Tomar como nuevas matrices *A*, *P* y *L* a las obtenidas con las transformaciones anteriores.
 - 6. Volver a 2. incrementando en 1 el valor de *i*.
 - 7. Al finalizar se tiene como último valor de A a la matriz U, y las correspondientes P y L.
- Resolución de Ax = b: Se resuelve PAx = Pb, esto es LUx = Pb, esto es, Ly = Pb y luego Ux = y.

2.3 Pivoteo

• Pivoteo parcial:

Si una matriz se escaleriza hasta la fila k-1, intercambiar la fila k con la fila j ($j \ge k$) tal que $a_{jk} = \max_{i \ge k} \{|a_{ik}|\}$ produce que los multiplicadores que se calculan a continuación sean ≤ 1

Pivoteo total:

Si una matriz se escaleriza hasta la fila k-1, se halla el que tiene el valor abosluto más grande en el cuadro a_{ij} $(n \ge i, j \ge k)$, el intercambio de la fila r con la fila k y la columna s con la columna k es un mejor procedimiento, pero más costoso $O(x^3)$

- Casos en que no es necesario realizar pivoteos durante la eliminación Gaussiana:
 - o *A* es diagonal dominante: $|a_{ii}| > \sum_{i \neq i=1}^{n} |a_{ij}|$ $\forall i = 1,...,n$
 - o *A* es simétrica definida positiva: $A = A^t$, $x^t Ax > 0 \ \forall x \in \square^n \setminus \vec{0}$

2.4 Matrices esparzas

• Definición de matriz esparza¹⁷:

Son las que cumplen que:

- 1. Tienen muchos 0
- 2. Tienen una estructura apta para ser explotadas
- Definición de matriz banda¹⁸:

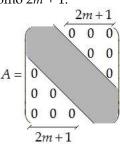
Es una $\mathcal{O}_{n\times n}/\exists m$, $m << n/\mathrm{si} |i-j| > m \Rightarrow a_{ij} = 0$

 $^{^{16}}$ Los elementos a_{ij} a los que se refiere no son los originales de A, sino los que se obtienen al ir aplicando los sucesivos pasos.

¹⁷ Las que se presentan en esta sección son ejemplos de matrices esparzas

¹⁸ Esto es, una matriz cuadrada en la que todos los elementos son cero con excepción de una banda centrada sobre la diagonal principal. Una matriz que cumple esto se llama bandeada.

- Definición de ancho de banda:
 - Se define el ancho de banda como 2m + 1.



• Utilidad de una matriz bandeada: Algoritmo de Thomas:

Descompone en *LU* utilizando la estructura de la matriz (sin hacer cálculos pero asignaciones)

• Utilidad de una matriz simétrica: Descomposición de Cholesky:

Si
$$A$$
 simétrica $\Rightarrow A = LL^t$ donde:
$$\begin{cases} l_{ki} = a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-i} l_{ij} l_{kj} & \text{para } i = 1, ..., k-1 \\ l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2} \end{cases}$$

De esta forma se obtiene fácil y rápidamente que $U = L^t$

• Definición de relleno (fill in):

Cuando en L o en U aparece un término distinto de 0 en una posición donde la matriz A vale 0

2.5 Norma de una matriz

• Definición de norma de una matriz¹⁹:

Es una función $\| \| : M_{n \times n}(\square) \rightarrow \square$ que cumple:

1.
$$||A|| \ge 0 \quad \forall A \ne 0$$
$$||A|| = 0 \Leftrightarrow A = 0$$

- 2. $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\| \quad \forall A \in M_{n \times n} (\square), \quad \alpha \in \square$
- 3. $||A+B|| \le ||A|| + ||B|| \quad \forall A, B \in M_{n \times n} (\Box)$
- 4. $||AB|| \le ||A|| ||B|| \quad \forall A, B \in \mathbf{M}_{n \times n} (\Box)$
- Definición de consistencia entre norma matricial y vectorial:

 $\| \| y \| \|_v$ son consistentes entre sí $\Leftrightarrow \forall w \in \square^n$, $\forall A \in M_{n \times n} (\square)$ se cumple que $\|Aw\|_n \leq \|A\| \|w\|_n$

• Teorema de existencia de una norma matricial consistente:

 $\forall \| \|_{v}, \exists \| \|/\| \|$ es consistente con $\| \|_{v}$

• Teorema de existencia de || || ²⁰:

Si
$$A \in M_{n \times n}(\square)$$
 y $\varepsilon \in \square^+ \Rightarrow \exists \| \|_{\varepsilon} / \|A\|_{\varepsilon} \le G(A) + \varepsilon$

 $\bullet \qquad \|A\|_{\infty} = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$

$$\bullet \qquad \|A\|_1 = \max_{1 \le j \le n} \sum |a_{ij}|$$

²⁰ G(A) es el radio espectral de A. $G(A) = \max\{|\lambda_i|, \lambda_i \text{ es el } i\text{-ésimo vap de } A\}$

¹⁹ Se definen:

2.6 Métodos iterativos de resolución

• Descripción²¹:

La idea es aproximar la solución de AX = b con $X^{(1)},...,X^{(r)},...$ converge a X Se parte de elegir $M/MX^{(k+1)} = (M-A)X^{(k)} + b$

• Definición de $e^{(k)}$:

$$e^{(k)} = X^{(k)} - X^{(\infty)}$$

• Definición de Q²²:

$$Q = M^{-1}(M - A)$$

• Condición necesaria de convergencia:

 $||Q|| < 1 \Rightarrow$ el método iterativo converge

- Condición necesaria y suficiente para la convergencia de un método iterativo: Un método iterativo converge sii G(Q) < 1
- Definición de q^{k} 23:

$$q^{k} = \frac{\left\| e^{(k+1)} \right\|}{\left\| e^{(k)} \right\|}$$

• Proposición:

$$\lim_{k \to \infty} q^k = G(Q)$$

• Definición de *E*, *D* y *F*:

Son las matrices con ceros en todas las entradas excepto las siguientes:

$$A = \begin{pmatrix} & \ddots & & & -F \\ \ddots & & \ddots & & \\ & \ddots & D & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ -E & & & \ddots & \end{pmatrix}$$

- Método de Jacobi:
 - o Forma matricial: $DX^{(k+1)} = (E+F)X^{(k)} + b$

o Término *i*-ésimo:
$$x_i^{(k+1)} = \frac{b - \sum_{i \neq j=1}^n a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

- Método de Gauss-Siedel²⁴:
 - o Forma matricial: $(D-E)X^{(k+1)} = FX^{(k)} + b$

o Término *i*-ésimo:
$$x_i^{(k+1)} = \frac{b - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)}}{a_{ii}}$$

 $^{^{21}}$ $X^{(\infty)}$ notará la solución del sistema

²² Observar que $e^{(k)} = M^{-1}(M-A)e^{(k)} = Q^k e^{(0)}$

 q^k mide la velocidad de convergencia

 $^{^{24}}$ A diferencia del método de Jacobi este método considera calculados los términos de un paso apra calcular otros términos en el mismo paso.

- Mejoras en la convergencia por medio de la relajación²⁵: Se considera $M = \frac{1}{w}D E$. En cada paso se obtiene $Q_w = M^{-1}(M A)$ y se halla $|Q_w \lambda Id| = p_w(x) \rightarrow G_w(Q)$.
 - Generalmente se determina empíricamente y lo que hace es, luego de calcular cada nuevo valor, se modifica por un promedio ponderado de los resultados de las iteraciones anterior y actual

 $^{^{25}}$ Si w = 1 se obtiene el método de Gauss-Siedel

3. Sistemas no lineales²⁶

3.1 Método de bipartición²⁷

• Descripción:

Dado un intervalo [a, c] se considera b como el punto medio, luego se analiza si f(a)f(b) es menor, mayor ó igual a 0. Si es igual a 0, entonces, b es raíz. Si es menor a 0, entonces, se analiza ese tramo repitiendo el procedimiento que termina cuando f(a)f(x) < h donde h es una cota preestablecida y x es uno de los bordes (resultado de la recursión). Si es mayor a 0, se analiza el tramo contiguo.

• Formalización:

Dados a_0 , b_0 el intervalo generado es $I_k = (a_k, b_k)$ con $k \in \mathbb{N}$. El punto medio buscado será dado por la sucesión $m_k = \frac{a_{k-1} + b_{k-1}}{2}$ y se define

 $(a_k, b_k) = \begin{cases} (m_k, b_{k-1}) & \text{si } f(m_k) < 0 \\ (a_{k-1}, m_k) & \text{si } f(m_k) > 0 \end{cases}$ Resolviendo la ecuación de recurrencia se tiene

que la raíz $\alpha=m_{n+1}\pm d_n$ donde $d_n=2^{-n-1}\left(b_0-a_0\right)$ y n es el paso de recursión según la tolerancia prefijada de 2^{-n-1}

- Detención del algoritmo:
 - o Por número de iteraciones: Puede calcularse a priori para

$$e_D \in (0,1]$$
 el error deseado como $n = \log_2\left(\frac{b-a}{e_D}\right)$

- o Por error relativo²⁸: $e_r = 100 \left| \frac{x_{\text{actual}} x_{\text{anterior}}}{x_{\text{actual}}} \right|$
- Limitaciones:

Detecta la existencia de una sola raíz sin indicar su multiplicidad o la existencia de otras raíces en el intervalo inicial.

3.2 Método de iteración simple de punto fijo o método iterativo general (MIG)²⁹

• Objetivo:

Obtener una nueva aproximación x_{i+1} del valor de una raíz de una función según x_i

Procedimiento:

Dada f(x) = 0 se lleva mediante transformaciones algebraicas o sumando x a ambos lados a la forma g(x) = x para hallar su punto fijo (el valor de x tal que aplicar g es como aplicar la identidad)

• Error:

$$e_r = 100 \left| \frac{x_{i+1} - x_i}{x_{i+1}} \right|$$

²⁶ El objetivo de sta sección es aproximar el valor de la raíz de una función

²⁷ Obtenido de la demostración del teorema de Bolzano-Weiestrass.

Éste es un método cerrado (usa intervalos)

²⁸ Éste es menor o igual al absoluto

²⁹ Éste y los siguientes son los métodos abiertos (usan los valores de las soluciones)

• Convergencia:

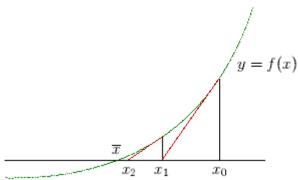
El método converge \Leftrightarrow |g'(x)| < 1 en la región de interés

• Definición de orden de convergencia³⁰:

Si $x_n \xrightarrow[n \to \infty]{} \alpha$, su orden de convergencia es $p \Leftrightarrow \lim_{n \to \infty} \frac{|x_{n+1} - \alpha|}{|x_n - \alpha|^p} = \beta \in \Box \setminus \{0\}$

3.3 Método de Newton-Raphson

• Descripción:



Este método comienza con x_0 un punto "razonablemente cerca de la raíz" y se arma la

sucesión $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ donde el error vendrádado por $\left| \frac{f(x)}{m} \right|$ donde $m = \min_{x \in [a,b]} |f'(x)|$

• Error

 $e_{r,i+1} = -\frac{f''(x_R)}{2f'(x_R)}e_{r,i}^2$ donde x_R es el valor verdadero de la raíz

Convergencia:

En general converge eficientemente aunque pueden presentarse problemas para ciertas funciones y ciertos valores iniciales, en cuyos casos la convergencia es muy lenta o directamente no converge.

• Método de Newton-Raphson para varias variables³¹:

Se considera el sistema $\begin{cases} J_f\left(x_i\right)\delta_i = -f\left(x_i\right) \\ x_{i+1} = x_i + \delta_i \end{cases}$ de donde se despeja δ_i de la primera

ecuación y se utiliza en la segunda para obtener x_{i+1} y de esta forma los puntos de la sucesión (por lo que en cada paso debe resolverse ese sistema)

3.4 Método de la secante

• Descripción³²:

Dados x_0 y x_1 se calcula $f(x_1)$ y $f(x_0)$ para aproximar la sucesión.

$$x_{n+2} = x_{n+1} - f(x_{n+1}) \frac{x_{n+1} - x_n}{f(x_{n+1}) - f(x_n)}$$

• Velocidad de convergencia:

 $\sqrt[\frac{1}{2}(1+\sqrt{5})]{\frac{f''(x_R)}{2f'(x_R)}} \text{ donde } x_R \text{ es el valor verdade rode la raíz}$

³⁰ En el MIG, p es el orden de la primera derivada no nula de g en α ; y $\beta = \frac{1}{p!} \left| \frac{d^p}{dx^p} g(\alpha) \right|$

³¹ En este aso no convergirá para matrices singulares (con determinante nulo)

³² Igual al método de Newton-Raphson considerando cuerdas en lugar de derivadas

3.5 Métodos de aceleración y optimización de la convergencia

• Método de Steffensen aplicado a Newton-Raphson de varias variables: Consiste en aproximar las derivadas parciales como:

$$\frac{\partial}{\partial x_{j}}f_{i}(x_{k}) \Box \frac{f_{i}(x_{k} + h_{j}e_{j}) - f_{i}(x_{k})}{h_{j}} \text{ donde } e_{j} \in \mathsf{M}_{n \times 1} \text{ tiene todas sus entradas nulas}$$

excepto en el lugar j que tiene un 1. Este método considera $h_i = f_i(x_k)$

• Extrapolación de Aitken:

Sirve para acelerar la convergencia de un método cuando $\delta_i = \frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i-1} - x_{i-2}} \Rightarrow$

La extrapolación obtenida será
$$x_{i+1} = x_i - \frac{\left(x_i - x_{i-1}\right)^2}{x_i - 2x_{i-1} + x_{i-2}}$$

• Método de regula falsi:

Método luneal cuya utilidad es la de fenerar un intervalo pequeño que contiene la raíz y luego aplicar otro método para hallarla. Este método considera

$$y_{n+1} = \frac{b_n - a_n}{f(b_n) - f(a_n)} \text{ y luego } f(y_{n+1}) f(a_n) \text{ es} \begin{cases} <0 \Rightarrow \begin{cases} a_{n+1} = a_n \\ b_{n+1} = y_{n+1} \end{cases} \\ >0 \Rightarrow \begin{cases} a_{n+1} = a_n \\ b_{n+1} = b_n \end{cases} \end{cases}$$

4. Ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO)

4.1 Problema de las EDO

• Sistema de ecuaciones a resolver numéricamente:

$$\begin{cases} y' = f(x, y(x)) \\ y(a) = c \end{cases}, \quad x \in [a, b]$$

• Sucesión de la partición:

$$x_n = x_0 + nh$$
 donde
$$\begin{cases} x_0 = a \\ h = \frac{|b - a|}{N} \end{cases}$$
 para cierto $N \in \square$

• Generación de la sucesión solución:

$$y_n/y_n \cong y(x_n)$$

• Notación de solución exacta:

Dado
$$\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_0) = c \end{cases}$$
 se nota su solución exacta como $y(x,x_0,c)$

• Definición de error local:

$$\varepsilon_L = y_{n+1} - y(x_{n+1}, x_n, y_n)$$

Definición de error global:

$$E_{n+1} = y_{n+1} - y(x_{n+1}, x_0, c)$$

• Definición de error local de truncamiento:

$$\tilde{y}(x)$$
 solución de $\begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_n) = y_n \end{cases}$ en $[x_n, x_{n+1}] \Rightarrow \varepsilon_T(h) = \tilde{y}(x_{n+1}) - y_{n+1}$

• Definición de consistencia y orden de consistencia:

Un método es consistente $\Leftrightarrow \frac{1}{h} \max \left| \varepsilon_T(h) \right| \xrightarrow[h \to 0]{} 0$ y su orden es el del infinitésimo $\varepsilon_T(h)$

• Definición de estabilidad de un método:

Un método es estable $\Leftrightarrow \exists \alpha / |\overline{E_n}| \le \alpha \quad \forall n \ge 0$

• Definición del problema test:

$$\begin{cases} y' = qy \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

• Definición de región de estabilidad:

Son los puntos del plano complejo $z = hq/y_n$ aplicado al problema test están acotados

4.2 Método de Euler hacia adelante

• Recurrencia del método³³:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) \\ y_0 = c \end{cases}$$

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y_n)h + \frac{f'(x_n, y_n)h^3}{3!}$$

³³ Una forma de mejorar la aproximación es usar la recurrencia

Error local de truncamiento³⁴:

$$\left| \varepsilon_{T} \left(h \right) \right| \leq \frac{h^{2} \left\| \widetilde{y} \right\|_{\infty, [a,b]}}{2}$$

Error de redondeo:

$$\varepsilon_{R}(h) \leq \varepsilon_{M} \|\tilde{y}\|_{\infty,[a,b]}$$

• Error global³⁵:

Error global³⁵:
$$\left| \frac{\partial}{\partial y} f(x,y) \right| \le L, \quad \varepsilon_n \le \varepsilon \Rightarrow \begin{cases} E_n \le \varepsilon \frac{e^{hnl} - 1}{e^{hl} - 1} \\ L \ne 0, \quad |Lh| \square 1 \Rightarrow E_n \le \frac{\varepsilon}{h} \frac{e^{nhL} - 1}{L} \\ L = 0 \Rightarrow E_n \le n\varepsilon \end{cases}$$

Región de estabilidad:

$$z \in \square/\|1+z\| \le 1$$

4.3 Método del trapecio

Recurrencia del método³⁶:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}h(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})) \\ y_0 = c \end{cases}$$

• Región de estabilidad:

$$z \in \Box / \operatorname{Re} z < 0$$

4.4 Método de Euler hacia atrás

Recurrencia del método³⁷:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1}) \\ y_0 = c \end{cases}$$

Sobre las ecuaciones no lineales:

Cuando no es posible hallar y_{n+1} explícitamente puede comenzarse aplicando el método de Euler hacia adelante: $y_{n+1}^{(0)} = y_n + hf(x_n, y_n)$ y luego hallar el punto fijo con el método de Euler hacia atrás: $y_{n+1}^{(k+1)} = y_n + hf\left(x_{n+1}, y_{n+1}^{(k)}\right)$

Región de estabilidad:

$$z \in \Box/1 \le \|1 - z\|$$

35 Así,
$$E_{n+1}(h) \le c_1 h + \frac{c_2}{h}$$
 con
$$\begin{cases} c_1 = \frac{1}{2} c \|\tilde{y}\|_{\infty,[a,b]} \\ c_2 = \varepsilon_M c \|\tilde{y}\|_{\infty,[a,b]} \end{cases} \Rightarrow h_{\text{optimo}} = \sqrt{\frac{c_2}{c_1}}$$

 $^{\|\}tilde{y}\|_{\infty,[a,b]}$ nota el máximo de la derivada en [a,b]

 $^{^{36}}$ En el caso en que y_{n+1} no puede despejarse puede usarse el MIG, una iteración de punto fijo.

³⁷ Se estima la derivada en el punto de llegada en lugar de el de salida.

4.5 Método del punto medio

• Recurrencia del método:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_{n-1} + 2hf(x_n, y_n) \\ y_0 = c \\ y_1 = d \end{cases}$$

• Región de estabilidad:

$$ai \in \square/a \in (-1,1)$$

4.6 Métodos de Runge-Kutta

• Recurrencia de los métodos³⁸:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + hf(\xi_n, y(\xi_n)) & \text{con } \xi_n = x_n + h\theta_n \\ y_0 = c \end{cases}$$

Recurrencia equivalente genérica³⁹:

$$\begin{cases} y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{v} w_i k_i & \text{con } k_i = hf\left(x_n + c_i h, y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j\right) \text{ donde } w_i, c_i, a_{ij} \text{ son arbitrarios} \\ y_0 = c \end{cases}$$

• Método de Runge-Kutta de segundo orden:

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_{n+1}, y_n + k_1) \\ y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2) \\ y_0 = c \end{cases}$$

• Método de Runge-Kutta de cuarto orden:

$$\begin{cases} k_1 = hf(x_n, y_n) \\ k_2 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2) \\ k_4 = hf(x_{n+1}, y_n + k_3) \\ y_{n+1} = y_n - \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 3k_3 + k_4) \\ y_0 = c \end{cases}$$

³⁸ Considerando $\theta = \frac{1}{2}$ se obtiene el paso $\frac{1}{2}h$ y con él la aproximación de Runge-Kutta resultado del método explícito de un paso: $y_{n+1} = y_n + hf\left(x_n + \frac{1}{2}h, \ y_n + \frac{1}{2}hf\left(x_n, y_n\right)\right)$

³⁹ Ejemplos:

5. Mínimos cuadrados

5.1 Problema de mínimos cuadrados (PMC)40

• Descripción del problema:

Se intenta aproximar el par (t_j, b_j) de forma polinomial $f(t_j) = \sum_{i=0}^{n} x_i t_j^i \quad \forall j = 1, ..., m$.

Para ello se define
$$A = \begin{pmatrix} t_1^n & t_1^{n-1} & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_m^n & t_m^{n-1} & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

Y se intentará minimizar los residuos

PMC:

 $\min_{x \in \mathbb{D}^m} \|b - Ax\| \operatorname{con} A \in \mathsf{M}_{m \times n}, \ m \square n, \ b \in \mathbb{D}^m$

• Sistema de ecuaciones normales⁴¹:

 $A \in \mathbb{M}_{m \times n}$, $m \cap n$, $b \in \square^m$, $S = [A^{(1)}, ..., A^{(n)}]$, $x \in \square^n$ solución del PMC,

y = Ax proyección ortogonal de b en $S \Rightarrow A^t Ax = A^t b$

Solución al problema de mínimos cuadrados:

$$x = \left(A^t A\right)^{-1} A^t b$$

• Unicidad de las soluciones:

rango $(A^t A)$ = $n \Rightarrow$ La solución es única $< n \Rightarrow$ Hay más de una solución

5.2 Descomposición QR

• Definición de *Q* y *R*⁴²:

 $Q \in \mathsf{M}_{m \times m}$ ortogonal, $y \ R \in \mathsf{M}_{m \times n}$: $R = \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix} \operatorname{con} R_1 \in \mathsf{M}_{n \times n}$ triangular $y \ 0 \in \mathsf{M}_{(m-n) \times n}$

• Existencia de la descomposición *QR*:

Si $A \in M$ $_{m \times n}$ con $m \square n \Rightarrow \exists Q, R/A = QR$

• Aplicación de la descomposición *QR* al PMC:

 $\min_{x \in \mathbb{D}^m} ||Ax - b|| = \min_{x \in \mathbb{D}^m} ||Rx - Q^t b|| = \min_{x \in \mathbb{D}^m} ||R_1 x - d_1|| \quad \text{con } d = Q^t b = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} \mathbf{y} \quad \begin{cases} d_1 \in \mathbb{D}^n \\ d_2 \in \mathbb{D}^{m-n} \end{cases} \Rightarrow R_1 x = d_1$

S subespacio vectorial de \square^n , $b \in \square^m$ y $P_S(b)$ una proyección ortogonal sobre $S \Rightarrow$

$$\Rightarrow \begin{cases} \exists ! y = P_{s}(b)/(b-y) \in S^{\perp} \\ y = P_{s}(b)/\|b-y\| = \min_{s \in S} \|b-s\| \end{cases}$$

⁴⁰ En los siguientes métodos de existir más de una solución se elije la de norma mínima

⁴¹ Surge de aplicar al PMC el siguiente teorema:

⁴² En Matlab x = A\b da la solución de mínimos cuadrados calculada con descomposición QR

5.3 Método de la descomposición en valores singulares (SVD)

• Teorema de SVD⁴³:

$$A \in \mathsf{M}_{\mathsf{m} \times \mathsf{n}} (\square), \, \mathsf{rango} A = r \Rightarrow \exists \, \mathsf{una} \, \mathsf{descomposición} \, \mathsf{de} \, A \, \mathsf{de} \, \mathsf{la} \, \mathsf{forma} \, A = U \Sigma V^t$$

$$\{ U \in \mathsf{M}_{\mathsf{m} \times \mathsf{m}} (\square) \, \mathsf{ortogonal} \}$$

$$\{ \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \mathsf{con} \, \Sigma_r = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & \sigma_r \end{pmatrix} \in \mathsf{M}_{\mathsf{r} \times \mathsf{r}} (\square) \, \mathsf{con} \, \sigma_i \geq \sigma_j \geq 0 \, \, \forall i < j \}$$

$$\{ V \, \mathsf{ortogonal} \, \}$$

• Teorema de solución al PMC44:

La solución viene dada por
$$\overset{\bullet}{x} = V \begin{pmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} U^t b$$

5.4 Mínimos cuadrados no lineales y método de Gauss-Newton

• Problema objetivo:

Si se intentara ajusta
$$(t_i, y_i)$$
 a una función $f(x, t)$, lo que se deberá hallar es
$$\min_{x \in \mathbb{D}^n} \sum_{i=1}^m r_i^2(x) \operatorname{con} r_i(x) = y_i - f(x, t_i)$$

• Método de Gauss-Newton⁴⁵:

En el k-ésimo paso se tiene el punto x_k y se aproxima r(x) como $\tilde{r}_k(x) = r(x_k) + J_r(x_k)(x - x_k)$. Para hallar x_{k+1} se procede como:

1. Se resuelve el PMC:
$$\min_{\rho \in \mathbb{I}^n} ||r(x_k) + J_r(x_k)\rho||$$

- 2. Se considera $x_{k+1} = x_k + \rho$ y se retorna a 1. de no cumplirse la condición de parada
- Unicidad de la solución del método de Gauss-Newton:

Si rango
$$J_r(x_k)$$
 = n se tiene una única solución dada por
$$\rho = -\left(J_r^t(x_k)J_r(x_k)\right)^{-1}J_r^t(x_k)r(x_k)$$
 < n se considera $\hat{\rho}$ dada por la SVD de $J_r(x_k)$

45 Las posibles condiciones de parada son $\begin{cases} k > Iter \\ \|r(x_k)\| < \varepsilon_1 \\ \|x_k - x_{k+1}\| < \varepsilon \end{cases}$

⁴³ Los σ_i son conocidos como valores singulares

⁴⁴ En las hipótesis del teorema de SVD

6. Interpolación

6.1 Problema de la interpolación

• Objetivo:

Dados $\{(x_i, y_i), i = 0, ..., n/f(x_i) = y_i\}$ encontrar $P_n(x)/P_n(x_i) = y_i \quad \forall i = 0, ..., n$

• Matriz de Vermonde⁴⁶::

$$X\alpha = \begin{pmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \dots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = y$$

• Error al interpolar:

Si
$$x \in [a,b] \Rightarrow E(x) = f(x) - P_n(x) \le \frac{\left\| f^{(n+1)} \right\|_{[a,b]} (b-a)^{n+1}}{(n+1)!}$$

• Fenómeno de Rounge:

A medida que se agregan más puntos el error no está acotado porque $\|f^{(n+1)}\|_{[a,b]}$ crece más rápidamente que (n+1)!

6.2 Interpolación de Lagrange

• Polinomio interpolante:

Se pedirá que los coeficientes de los polinomios cimplan que

$$l_{j}(x_{i}) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ 1 & \text{si } i = j \end{cases} \Rightarrow P_{n}(x) = \sum_{j=0}^{n} y_{j} l_{j}(x)$$

• Coeficientes del polinomio interpolante:

$$l_{j}(x) = \frac{\prod_{j \neq i=0}^{n} (x - x_{i})}{\prod_{j \neq i=0}^{n} (x_{j} - x_{i})}$$

• Desventaja:

Cada vez que se agrega un nuevo punto es necesario recalcular todos los coeficientes del polinomio interpolante

6.3 Interpolación de Newton

• Ventaja:

No necesita recalcular todos los coeficientes del polinomio interpolante cuando se agrega el *k*-ésimo punto

• Polinomio interpolante:

$$\begin{cases} P_{k}(x) = P_{k-1}(x) + q_{k}(x) & \forall i = 0, ..., k \\ P_{k}(x_{i}) = f(x_{i}) & \forall k = 0, ..., n \end{cases} \operatorname{con} q_{k}(x) = a_{k} \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_{i})$$

$$\operatorname{con} a_{k} = \frac{f(x_{k}) - P_{k-1}(x_{k})}{\prod_{i=0}^{k-1} (x_{k} - x_{i})}$$

⁴⁶ Se obtiene expresando matricialmente el problema de la interpolación

• Notación recursiva:

Se define
$$a_k = f[x_0,...,x_k]$$
, por lo que se tiene

$$P_{n}(x) = f[x_{0}] + (x - x_{0}) f[x_{0}, x_{1}] + ... + (x - x_{0}) ... (x - x_{n-1}) f[x_{0}, ..., x_{n}] =$$

$$= \sum_{i=0}^{n} \left(\left(\prod_{j=0}^{i-1} (x - x_{i}) \right) f[x_{0}, ..., x_{i}] \right) \quad \text{donde } f[x_{i}, ..., x_{k}] = \frac{f[x_{i+1}, ..., x_{k}] - f[x_{i}, ..., x_{k1}]}{x_{k} - x_{i}}$$

6.4 Interpolación de Hermite

• Objetivo:

Encontrar
$$P(x) / P(x_i) = f(x_i)$$

 $P'(x_i) = f'(x_i)$ con $f(x_i)$, $f'(x_i)$ datos dados

• Polinomio de Hermite:

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i h_i(x) + \sum_{i=0}^{n} y_i' \overline{h_i}(x)$$
 donde:

$$\begin{cases} h_i\left(x_j\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } i \neq j \\ 0 & \text{si } i = j \end{cases}; & \frac{\partial}{\partial x} h_i\left(x_j\right) = 0 \quad \forall j = 0, ..., n \\ \overline{h_i}\left(x_j\right) = 0 \quad \forall j = 0, ..., n ; & \frac{\partial}{\partial x} \overline{h_i}\left(x_j\right) = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \end{cases}$$

• Coeficientes del polinomio interpolante usando los coeficientes del polinomio interpolante resultado de la interpolación de Lagrange:

$$h_i(x) = (1 - 2l_i'(x)(x - x_i))l_i^2(x)$$

$$\overline{h_i}(x) = (x - x_i)^2 l_i^2(x)$$

6.5 Interpolación a trozos⁴⁷

• Interpolación lineal a trozos:

Utiliza las cuerdas entre los puntos dados:

$$L(x) = y_i \, \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + y_{i+1} \, \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} \, , \ \ x \in \left[x_i \, , x_{i+1}\right]$$

• Error

$$|f(x)-L(x)| \le ||f''||_{\infty} \frac{h^2}{8}$$

• Planteo

Hallar
$$S_i(x)$$
 en $[x_i, x_{i+1}] / S_i(x_i) = y_i$ $S_i(x_{i+1}) = y_{i+1}$
 $S_i'(x_i) = m_i$ $S_i'(x_{i+1}) = m_{i+1}$

• Forma de la solución:

$$S_{i}(x) = y_{i}L_{i}^{(0)}(x) + y_{i+1}L_{i}^{(1)}(x) + m_{i}L_{i}^{(2)}(x) + m_{i+1}L_{i}^{(3)}(x)$$

• Interpolación Hermite cúbico⁴⁸:

$$m_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}}; \qquad m_0 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}; \qquad m_n = \frac{y_n - y_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}$$

⁴⁷ Estos estiman entre un par de puntos una función interpolante. De esta forma no se tiene un solo polinomio que interpola todos los puntos, sino, uno por cada par de puntos del conjunto.

⁴⁸ Los siguientes métodos de interpolación estiman los $m_i = y_i' = f'(x_i)$ en caso de que estos no sean dados

• Interpolación de spline cúbico⁴⁹:

$$m_0 = \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}$$
; $m_n = \frac{y_n - y_{n-1}}{x_n - x_{n-1}}$. Los m_i deben despejarse del sistema generado por

los
$$i = 1,..., n-1$$
 y compuestos por las ecuaciones $\frac{1}{2}m_{i-1} + 2m_i + \frac{1}{2}m_{i+1} = 3\left(\frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}\right)$

6.6 Curvas de Béizer

• Definición del Polinomio de Béizer:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n p_i B_i^n(x)$$
 donde los $B_i^n(x)$ es el n - i -ésimo polinomio de Berstein y cada p_i es un punto (llamado de control) dado

• Definición iterativa del polinomio de Berstein⁵⁰:

$$B_{i}^{n}(x) = \frac{(b-x)^{n-1}(x-a)^{i}}{(b-a)^{n}} \frac{n!}{i!(n-i)!}$$

• Definición del Polinomio de Béizer vectorial (paramétrico):

$$\overline{P_n}(t) = \sum_{i=0}^n \overline{p_i} B_i^n(t)$$
 donde los $B_i^n(t)$ es el *n-i*-ésimo polinomio de Berstein y cada

 $\overrightarrow{p_i}$ es un conjunto de puntos (llamados de control) dados.

$$\begin{cases} B_{-1}^{n}(x) = B_{n+1}^{n}(x) = 0\\ B_{1}^{1}(x) = 1\\ B_{i}^{n}(x) = \frac{(b-x)B_{i}^{n-1}(x) + (x-a)B_{i-1}^{n-1}(x)}{b-a} \end{cases}$$

⁴⁹ Este método impone que la derivada segunda sea continua: $S''_{i-1}(x_i) = S''_i(x_i)$

⁵⁰ Definición recursiva del polinomio de Berstein: