

Métodos Numéricos

M.C. Luis Alejandro Benavides Vázquez

Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Autónoma de Nuevo León

luisbv.89@gmail.com

Verano 2016

¿Qué es un método numérico?

Un método numérico es un procedimiento mediante el cual se obtiene, casi siempre de manera aproximada, la solución de ciertos problemas realizando cálculos puramente aritméticos y lógicos (operaciones aritméticas elementales, cálculo de funciones, consulta de una tabla de valores, etc.).

¿Qué es un procedimiento?

El procedimiento consiste de una lista finita de instrucciones precisas que especifican una secuencia de operaciones algebraicas y lógicas (algoritmo), que producen o bien una aproximación de la solución del problema (solución numérica) o bien un mensaje.

La eficiencia en el cálculo de dicha aproximación depende, en parte, de la facilidad de implementación del algoritmo y de las características especiales y limitaciones de los instrumentos de cálculo (los computadores). En general, al emplear estos instrumentos de cálculo se introducen errores llamados de redondeo.

Los errores numéricos se pueden clasificar como

- **Errores de truncamiento:** resultan del empleo de aproximaciones con cálculos exactos.
- **Errores de redondeo:** por utilizar números que tienen un límite de cifras significativas.
- **Error verdadero** = $E_v = \text{valor verdadero} - \text{valor aproximado}$
- **Error relativo fraccional verdadero** = $\frac{\text{error verdadero}}{\text{valor verdadero}}$
- El **error relativo porcentual verdadero** se define como

$$E_r = \frac{\text{error verdadero}}{\text{valor verdadero}} \times 100\%$$
- El **error aproximado** se utiliza cuando no se conoce el valor verdadero. Se define por $E_a = \frac{\text{error aprox.}}{\text{valor aprox.}} \times 100\%$.
- El error en los métodos iterativos con las aproximaciones actual y anterior. $E_i = \frac{\text{aprox. actual} - \text{aprox. anterior}}{\text{aprox. actual}} \times 100\%$

Contenido

- 1 Introducción
- 2 Soluciones de ecuaciones de una variable
 - Métodos cerrados
 - Métodos abiertos
- 3 Sistemas de ecuaciones lineales
 - Eliminación Gaussiana
 - Método de Jacobi
 - Método de Gauss-Seidel
- 4 Sistemas de ecuaciones no lineales
 - Interacción de punto fijo
- 5 Diferenciación e integración numérica
 - Diferenciación numérica
- 6 Interpolación lineal y polinomial
- 7 Regresión lineal y no lineal con mínimos cuadrados
- 8 Solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales

El método de bisección

Se basa en el teorema del valor intermedio, se conoce con el nombre de método de bisección o de búsqueda binaria. Supongamos que f es una función continua definida en el intervalo $[x_1, x_2]$ con $f(x_1)$ y $f(x_2)$ de signos diferentes.

Sea p el punto medio de $[x_1, x_2]$, es decir,

$$p = a + \frac{b - a}{2} = \frac{a + b}{2}$$

Para obtener una solución $f(x) = 0$ (raíz) dada la función f continua en el intervalo $[x_1, x_2]$, donde $f(x_1)$ y $f(x_2)$ tienen signos opuestos.

Algoritmo de bisección

```
 $i = 1;$   
 $f_1 = f(x_1);$   
mientras  $i \leq N_0$  hacer  
|    $x_p = (x_1 + x_2)/2;$   
|    $f_p = f(x_p);$   
|   si  $f_p = 0$  o  $(x_2 - x_1)/2 < TOL$  entonces  
|   |   raíz =  $x_p;$   
|   |   parar;  
|   fin  
|   si  $f_1 \cdot f_p > 0$  entonces  
|   |    $x_1 = x_p;$   
|   en otro caso  
|   |    $x_2 = x_p;$   
|   fin  
|    $i = i + 1;$   
fin
```

Desventajas método de bisección

Al dividir el intervalo de x_1 a x_2 en mitades iguales, no se toman en consideración las magnitudes de $f(x_1)$ y $f(x_2)$. Por ejemplo, si $f(x_1)$ está mucho más cercana a cero que $f(x_2)$, es lógico que la raíz se encuentre más cerca de x_1 que de x_2 . Un método alternativo que aprovecha esta visualización gráfica consiste en unir $f(x_1)$ y $f(x_2)$ con una línea recta.

El método de la falsa posición

El método de la falsa posición (o método de regla falsa) utiliza intervalos y esta basado en una idea para aproximarse en forma más eficiente a la raíz. Este método aprovecha la idea de unir dos puntos con una línea recta. La intersección de esta línea con el eje x proporciona una mejor estimación de la raíz. Reemplaza la curva por una línea recta da una posición falsa de la raíz. No es un método muy recomendado.

Una solución se da cuando $f(x) = 0$ dada la función continua f en el intervalo $[x_1, x_2]$ donde $f(x_1)$ y $f(x_2)$ tienen signos opuestos.

Algoritmo de la falsa posición

```
i = 1;  
f1 = f(x1);  
f2 = f(x2);  
mientras i ≤ N0 hacer  
    |  $x_r = x_2 - \frac{f_2 \cdot (x_1 - x_2)}{(f_1 - f_2)};$   
    | si |xr - x1| < TOL entonces  
    | | raíz = xr;  
    | | parar;  
    | fin  
    | fr = f(xr);  
    | si fr · f2 > 0 entonces  
    | | x2 = xr;  
    | | f2 = fr;  
    | en otro caso  
    | | x1 = xr;  
    | | f1 = fr;  
    | fin  
    | i = i + 1;  
fin
```

Método iteración de punto fijo (sustituciones sucesivas)

Un punto fijo de una función $g(x)$ es un número α para el cual $g(\alpha) = \alpha$. Si tenemos una ecuación de la forma normal $f(x) = 0$. Para utilizar el método de punto fijo se expresa como $x = g(x)$.

Ejemplo: $\cos(x) - x = 0$, $\ln(x) = \frac{1}{x}$.

Convergencia de la iteración de un punto fijo

Si una función $g(x)$ cumple con los siguientes requisitos:

- $g(x)$ es continua con derivada continua.
- $g(x)$ está definida en el intervalo $[a, b]$ para todo $x \in [a, b]$.
- $M_1 = \max_{x \in [a, b]} |g'(x)| < 1$.

Entonces:

- La ecuación $x = g(x)$ tiene una solución única α en el intervalo $[a, b]$.
- La iteración de un punto fijo $x_{j+1} = g(x)$ converge a la solución α para cualquier valor $x_0 \in (a, b)$.
- La velocidad de convergencia aumenta con la disminución de $|g'(x)|$.

Algoritmo de punto fijo

```
 $i = 0;$   
mientras  $i \leq N_0$  hacer  
   $x_i = g(x_0);$   
  si  $|x - x_0| < TOL$  entonces  
    raíz:  $x;$   
    parar;  
  fin  
   $x_0 = x;$   
   $i = i + 1;$   
fin
```

Método de la secante

Para encontrar una solución para $f(x) = 0$ dadas las aproximaciones iniciales x_0 y x_1 .

$i = 2$;

$q_0 = f(x_0)$;

$q_1 = f(x_1)$;

mientras $i \leq N_0$ **hacer**

$x = x_1 - q_1(x_1 - x_0)/(x_1 - x_0)$;

si $|x - x_1| < TOL$ **entonces**

raíz: $= x$;

fin

$x_0 = x_1$;

$q_0 = q_1$;

$x_1 = x$;

$q_1 = f(x)$;

fin

El método de Newton-Raphson

El método de Newton (o método de Newton-Raphson) es una de las técnicas numéricas para resolver un problema de búsqueda de raíces $f(x) = 0$ más usadas por su rapidez.

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \text{ para } i \geq 0.$$

Para obtener una solución $f(x) = 0$ dada la función diferenciable f y una aproximación inicial x_0 .

Desventajas:

Se debe proponer un valor suficientemente cercano a la raíz para converger. En la vida real resulta un tanto impracticable ya que existen funciones complejas lo que dificultará obtener la derivada. Si existe más de una raíz no converge ya que $f'(x) = 0$, provocando una división entre cero.

Algoritmo de Newton-Rapshon

```
 $i = 0;$   
mientras  $i \leq N_0$  hacer  
|    $x_{i+1} = x_i - f(x_i)/f'(x_i);$   
|   si  $|x_{i+1} - x_i| < TOL$  entonces  
|   |   raíz:  $x_{i+1};$   
|   |   parar;  
|   fin  
|    $i = i + 1;$   
fin
```


El método de Newton-Raphson mejorado

La ecuación cambia para calcular la raíz se agrega la segunda derivada $f''(x)$:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)f'(x_i)}{[f'(x_i)]^2 - f(x_i)f''(x_i)} \text{ para } i \geq 0.$$

Problemas

El balance de masa de un contaminante en un lago bien mezclado se expresa como:

$$V \frac{dc}{dt} = W - Qc - kV\sqrt{c}$$

Dados los valores de parámetros $V = 1 \times 10^6 \text{ m}^3$, $Q = 1 \times 10^5 \text{ m}^3/\text{año}$ y $W = 1 \times 10^6 \text{ g/año}$, y $k = 0.25 \text{ m}^{0.5}/\text{año}$, use el método de Newton-Raphson para resolver la concentración en estado estable. Emplee el valor inicial de $c = 4 \text{ g/m}^3$. Realice cinco iteraciones.

Ejemplos

Del problema anterior, la raíz puede localizarse con iteración del punto fijo como:

$$c = \left(\frac{W - Qc}{kV} \right)^2$$

o bien como

$$c = \frac{W - kV\sqrt{c}}{Q}$$

De las siguientes solo una convergerá para valores iniciales de $2 < c < 6$.
Seleccione la que sea correcta y realice cinco iteraciones.

Ejemplos

Suponga que se está diseñado un tanque esférico de almacenamiento de agua para un poblado pequeño de un país en desarrollo. El volumen del líquido que puede contener se calcula con:

$$V = \pi h^2 \frac{[3R - h]}{3}$$

donde $V = \text{volumen [pie}^3\text{]}$, $h = \text{profundidad del agua en el tanque [pies]}$, y $R = \text{radio del tanque [pies]}$.

Si $R = 3 \text{ m}$, ¿a qué profundidad debe llenarse el tanque de modo que contenga 30 m^3 ? Realice cinco iteraciones del método Newton-Rapshon para determinar la respuesta.

Sistemas de ecuaciones lineales

Ecuación (E_1):

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

Sistemas de Ecuaciones (forma general):

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{12}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n2}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

Sistemas de ecuaciones lineales

Sistemas de Ecuaciones (matriz):

$$Ax = b$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Sistemas de Ecuaciones (matriz aumentada)

$$\left[\begin{array}{ccccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array} \right]$$

Solución de ecuaciones lineales

Métodos Directos:

- Eliminación de Gauss o Gauss Jordan.
 - Pivoteo.
 - Sin Pivoteo.
 - Sustitución hacia atrás.

Métodos Iterativos:

- Jacobi.
- Gauss-Seidel.

Eliminación de Gaussiana

Un conjunto de n ecuaciones con n incógnitas se reduce a un sistema triangular equivalente (iguales valores de la solución).

$$\begin{array}{ccccccc}
 a_{11}x_1 & +a_{12}x_1 & +a_{13}x_1 & +a_{14}x_1 & +\dots & +a_{1n} & = b_1 \\
 & +a_{22}^1x_1 & +a_{23}^1x_1 & +a_{24}^1x_1 & +\dots & +a_{2n}^1 & = b_2^1 \\
 & & +a_{33}^2x_1 & +a_{34}^2x_1 & +\dots & +a_{3n}^2 & = b_1^2 \\
 & & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 & & & & a_{(n-1)(n-1)}^{n-2}x_{n-1} & +a_{(n-1)n}^{n-2} & = b_{n-1}^{n-2} \\
 & & & & & +a_{nn}^{n-1} & = c_n^{n-1}
 \end{array}$$

Eliminación de Gaussiana

Eliminación Gaussiana (sin pivoteo):

$$a_{ij}^1 = a_{ij} - \frac{a_{ik}}{a_{kk}}(a_{kj})$$

donde a_{ij}^1 es el elemento de la matriz reducida, a_{ij} es el elemento de la matriz original, k es el elemento pivote.

$$\begin{cases} k \leq j \leq n, \text{ donde } n = \text{columnas}, \\ k + 1 \leq i \leq m, \text{ donde } m = \text{renglones}. \end{cases}$$

Eliminación gausiana (sustitución hacia atrás):

- Variable final: $x_m \frac{a_{mn}}{a_{mm}}$
- $x_i = \frac{a_{in} - \sum_{j=i+1}^m a_{ij}x_j}{a_{ii}}$, para $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$.

Método de Jacobi

$$\begin{aligned}A\bar{x} &= \bar{b} \\(D + C)\bar{x} &= \bar{b} \\D\bar{x} + C\bar{x} &= \bar{b} \\\bar{x}_{i+1} &= \frac{\bar{b} - C\bar{x}}{D}\end{aligned}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{array} \right.$$

Algoritmo de Jacobi

- ❶ Despejamos x_1 de la primera ecuación, x_2 de la segunda, etc.

$$x_1 = \frac{b_1 - [a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n]}{a_{11}}$$
$$x_2 = \frac{b_2 - [a_{21}x_1 + \dots + a_{2n}x_n]}{a_{22}}$$

- ❷ Como vector solución inicial se emplea el vector cero $x^{(0)}$.
- ❸ El cálculo de $x^{(1)}$ se obtiene reemplazando $x^{(0)}$ en cada una de las ecuaciones.
- ❹ Para calcular $x^{(2)}$ se sustituye $x^{(1)}$ en cada una de las ecuaciones, y así sucesivamente, hasta que el error sea menor al deseado.

Criterio de Convergencia:

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$$

Gauss-Seidel

Es el método iterativo más utilizado. Dado un conjunto de n ecuaciones con los elementos de la diagonal diferentes de cero, entonces se tiene:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \dots - a_{1n}x_n}{a_{11}}, \\
 x_2 &= \frac{b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \dots - a_{2n}x_n}{a_{22}}, \\
 x_3 &= \frac{b_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2 - \dots - a_{3n}x_n}{a_{33}}, \\
 &\vdots = \vdots, \\
 x_n &= \frac{b_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \dots - a_{nn-1}x_{n-1}}{a_{nn}}.
 \end{aligned}$$

Nota importante: Este método converge si el coeficiente de la diagonal principal en valor absoluto es mayor que la suma de los coeficientes restantes en la ecuación.

Convergencia Gauss-Seidel

$$\xi_{a,i} = \left| \frac{x_{i,j} - x_{i,j-1}}{x_{i,j}} \right| \cdot 100\% < \xi_s$$

Se empieza a solucionar tomando las variables x_i con un valor inicial de cero. Se sustituyen estos en la ecuación de x_1 . Luego el valor calculado x_1 se sustituye en la ecuación x_2 para encontrar su nuevo valor. Este proceso se repite hasta llegar a calcular x_n

Sistemas de ecuaciones no lineales

Sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0, \\ &\vdots, \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0. \end{aligned}$$

Forma matricial:

$$\begin{aligned} F(\bar{x}) &= 0, \\ \bar{x} &= [x_1, x_2, \dots, x_n]. \end{aligned}$$

Interacción de punto fijo

Punto fijo una ecuación:

$$\begin{aligned} f(x) &= 0, \\ x_{i+1} &= g(x_i), \end{aligned}$$

Criterio de Convergencia:

$$|g'(x)| < 1.$$

Punto fijo un sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} f(x) &= 0, \\ x_{i+1} &= g(x_i), \end{aligned}$$

Criterio de Convergencia:

$$\left| \frac{\partial g_i'(\bar{x})}{\partial (x)_j} \right| < \frac{k}{n} \text{ donde } k < 1.$$

Ejercicios

El siguiente problema presenta un sistemas de ecuaciones generado por un circuito eléctrico con una sola fuente de voltaje y cinco resistores.

$R_1 = 450$ ohm, $R_2 = 350$ ohm, $R_3 = 520$ ohm, $R_4 = 100$ ohm, $R_5 = 1000$ ohm y $V_1 = 10$ V.

$$V_1 + R_2(i_1 - i_2) + R_4(i_1 - i_3) = 0,$$

$$R_1 i_2 + R_3(i_2 - i_3) + R_2(i_2 - i_1) = 0,$$

$$R_3(i_3 - i_2) + R_5 i_3 + R_4(i_3 - i_1) = 0.$$

Calcule las corrientes de la malla mediante el Método de Gauss-Seidel usando los valores de resistencia y voltaje dados.

Diferenciación e integración numérica

El objetivo de esta sección es usar algoritmos de métodos numéricos, para calcular derivadas e integrales de funciones difíciles de evaluar analíticamente, e incluso, hay algunas en las que “no existe” su integral como es el caso de e^{-x^2} y $\frac{\text{sen}x}{x}$.

Diferenciación numérica

La derivación numérica es una técnica de análisis numérico para calcular una aproximación a la derivada de una función en un punto utilizando los valores y propiedades de la misma.

Por definición la derivada de una función $f(x)$ es:

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

Las aproximaciones numéricas que podemos hacer (para $h \neq 0$) serán:

Diferencias hacia adelante:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Diferencias hacia atrás:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 + h)}{h}.$$

La aproximación de la derivada por este método entrega resultados aceptables con un determinado error. Para minimizar los errores se estima que el promedio de ambas entrega la mejor aproximación numérica al problema dado:

Diferencias centrales:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h},$$
$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}.$$

Métodos de Newton-Cotes

Las fórmulas de Newton-Cotes son los tipos de integración numérica más comunes. Se basan en la estrategia de reemplazar una función complicada o datos tabulados por un polinomio de aproximación que es fácil de integrar:

$$I = \int_a^b f(x)dx \cong \int_a^b f_n(x)dx$$

donde $f_n(x)$ es un polinomio de la forma

$f_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$, n es el grado del polinomio.

Existen formas cerradas y abiertas de las fórmulas de Newton-Cotes. Las formas cerradas son aquellas donde se conocen los datos al inicio y al final de los límites de integración. Las fórmulas abiertas tienen límites de integración que se extienden más allá del intervalo de los datos.

La regla del trapecio

La regla del trapecio es la primera de las fórmulas cerradas de integración de Newton-Cotes.

$$I = (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

El error de truncamiento de la regla del trapecio es

$$E_t = -\frac{(b - a)^3}{12} \bar{f}''$$

donde \bar{f}'' es el valor promedio de la segunda derivada.

Existen n segmentos del mismo ancho, $h = \frac{b-a}{n}$. Si a y b se designan como x_0 y x_n , respectivamente, la integral completa se representará como:

$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \dots \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx$$

Sustituyendo la regla del trapecio en cada integral se obtiene

$$I = h \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \dots + h \frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

Agrupando se obtiene

$$I = \frac{h}{2} [f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)]$$

Otra forma de expresar la expresión anterior es

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n}$$

El error de truncamiento de la regla del trapecio es

$$E_a = \frac{(b-a)^3}{12n^2} \bar{f}''$$

Reglas de Simpson

Otra forma de obtener una estimación más exacta de una integral consiste en usar polinomios de grado superior para unir los puntos.

Por ejemplo, si hay otro punto a la mitad entre $f(a)$ y $f(b)$, los tres puntos se pueden unir con una parábola. Si hay dos puntos igualmente espaciados entre $f(a)$ y $f(b)$, los cuatro puntos se pueden unir mediante un polinomio de tercer grado.

Regla de Simpson 1/3

Esta regla consiste en tomar el área bajo una parábola que une dos puntos.

$$I = (b - a) \frac{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)}{6}$$

$$I = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)]$$

donde $h = \frac{b-a}{2}$

Error de truncamiento $E_t = -\frac{(b-a)^5}{2880} \bar{f}^{(4)}$

La regla de Simpson se mejora al dividir el intervalo de integración en varios segmentos de un mismo tamaño.

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 4 \sum_{i \in \text{impares}}^{n-1} f(x_i) + 2 \sum_{j \in \text{pares}}^{n-2} f(x_j) + f(x_n)}{3n}$$

donde n debe ser siempre par, entonces $h = \frac{b-a}{n}$.

El error de truncamiento es

$$E_a = -\frac{(b-a)^5}{180n^4} \bar{f}^{(4)}$$

Regla de Simpson 3/8

Tercera fórmula de integración cerrada de Newton-Cotes. Es posible ajustar un polinomio de Lagrange de tercer grado a cuatro puntos e integrarlo.

$$I \cong \frac{3h}{8} [f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)]$$

donde $h = \frac{b-a}{3}$.

Se expresa también como

$$I \cong (b-a) \frac{f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)}{8}$$

El error de truncamiento es

$$E_t = -\frac{(b-a)^5}{6480} \bar{f}^{(4)}$$

La regla de Simpson 3/8 se mejora al dividir el intervalo de integración en varios segmentos de un mismo tamaño.

$$I = \frac{3h}{8}[f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + 2f(x_3) + \dots + 3f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

donde n debe ser impar y siempre multiplicar por 2 los subíndices que sean múltiplos de 3 excepto los extremos.

Integración con segmentos desiguales

Un método consiste en aplicar la regla del trapecio a cada segmento y sumar los resultados:

$$I = h_1 \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h_2 \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \dots + h_n \frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

donde h_i = el ancho del segmento i .

Nota: Podemos hacer lo mismo con las reglas de Simpson

Interpolación

Con frecuencia se encontrará con que tiene que estimar valores intermedios entre datos definidos por puntos.

Los métodos se basan en la suposición de que en la vecindad del valor x , la función $f(x)$ se puede aproximar a un polinomio $P(x)$ y por lo tanto el valor encontrado de $P(x)$ será un valor aproximado al valor verdadero de la función.

El método más conocido que se usa es la interpolación polinomial.

Interpolación lineal

Es la forma más simple consiste en unir dos puntos con una línea recta.

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

Interpolación cuadrática

Si se tienen tres puntos como datos, éstos pueden ajustarse en un polinomio de segundo grado. La forma conveniente para ello es

$$f_2(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1)$$

donde

$$b_0 = f(x_0)$$

$$b_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

$$b_2 = \frac{\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}$$

Forma general de los polinomios de interpolación de Newton

El análisis anterior puede generalizarse para ajustar un polinomio de n -ésimo grado a $n + 1$ datos. El polinomio es

$$f_n(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + \dots + b_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})$$

donde

$$b_0 = f(x_0)$$

$$b_1 = f[x_1, x_0]$$

$$b_2 = f[x_2, x_1, x_0]$$

$$\vdots$$

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

donde las evaluaciones de la función colocadas entre paréntesis son diferencias divididas finitas.

La primer diferencia dividida finita se expresa como

$$f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}$$

La segunda diferencia dividida finita es

$$f[x_i, x_j, x_k] = \frac{f[x_i, x_j] - f[x_j, x_k]}{x_i - x_k}$$

La n -ésima diferencia dividida finita es

$$f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1, x_0] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, \dots, x_1] - f[x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_0]}{x_n - x_0}$$

Interpolación de Newton para datos igualmente espaciados

$$h = x_{i+1} - x_i$$

$$k = \frac{x - x_0}{h}$$

$$f_n(x) = f(x_0) + k \frac{\Delta f}{1!} + k(k-1) \frac{\Delta^2 f}{2!} + \dots + k(k-1)(k-2) \dots (k-n+1) \frac{\Delta^n f}{n!}$$

Polinomio de interpolación de Lagrange

$$f_n(x) = b_0(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)$$

$$f_n(x) = \sum_{i=0}^n L_i(x) f(x_i)$$

$$L_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Segundo grado:

$$f_2(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2)$$

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

$$L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} \cdot \frac{x - x_2}{x_1 - x_2}$$

$$L_2(x) = \frac{x - x_0}{x_2 - x_0} \cdot \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}$$

Regresión por mínimos cuadrados

Encontrar un modelo que ajuste los datos tabulados

Media Muestral

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$$

$$\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$

Varianza

$$s^2 = \frac{1}{1-n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

Desviación estándar

$$s = \sqrt{\frac{1}{1-n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

Regresión lineal

Un ejemplo de aproximación por mínimos cuadrados es ajustar una línea recta a un conjunto de observaciones definidas por puntos:

$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$.

La expresión para la línea recta es

$$y = a_0 + a_1x + e$$

donde a_0 y a_1 son coeficientes que representan la intersección con el eje y y la pendiente, respectivamente, e es el error o diferencia, entre el modelo y las observaciones.

La estrategia consiste en **minimizar la suma de los cuadrados de los residuos** entre la y medida y la y calculada con el modelo lineal

$$S_r = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2$$

Objetivo: Minimizar el error

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = (-2) \sum (y_i - a_0 - a_1 x_i) = 0$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = (-2) \sum (y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i = 0$$

Si observamos que $\sum a_0 = na_0$, expresamos un conjunto de dos ecuaciones lineales simultáneas con dos incógnitas, llamadas ecuaciones normales:

$$\begin{aligned} na_0 + \left(\sum x_i\right)a_1 &= \sum y_i \\ \left(\sum x_i\right)a_0 + \left(\sum x_i^2\right)a_1 &= \sum x_i y_i \end{aligned}$$

Resolviendo en forma simultánea

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \\ a_0 &= \bar{y} - a_1 \bar{x} \end{aligned}$$

donde \bar{y} y \bar{x} son las medias de y y x , respectivamente.

Una “desviación estándar” para la línea de regresión se determina como

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}}$$

donde a $S_{y/x}$ se le llama error estándar del estimado. Cuantifica la dispersión alrededor de la línea de regresión.

Sea S_t la magnitud del error residual asociado con la variable dependiente antes de la regresión ($\sum(y_i - \bar{y})^2$), y S_r la suma de los cuadrados de los residuos alrededor de la línea de regresión ($\sum(y_i - y_{\text{mod}})^2$).

Coeficiente de determinación.

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t}$$

r es conocido como el coeficiente de correlación. En un ajuste perfecto, $S_r = 0$ y $r = r^2 = 1$, significa que la línea explica el 100% de la variabilidad de los datos.

Regresión No Lineal

Linealización: Es la transformación (utilizando álgebra) de los datos tabulados de tal forma que sean compatibles con una recta.

Modelo Exponencial

$$\begin{aligned}
 y &= ae^{bx}, \\
 \ln y &= \ln a + bx, \\
 v &= \ln y, \\
 u &= x, \\
 a_0 &= \ln a, \\
 a_1 &= b, \\
 v &= a_0 + a_1 u.
 \end{aligned}$$

Modelo de Saturación

$$\begin{aligned}
 y &= \frac{a}{b+x}, \\
 \frac{1}{y} &= \frac{b+x}{a} = \frac{b}{a} + \frac{1}{a}x, \\
 v &= \frac{1}{y}, \\
 u &= x, \\
 a_0 &= \frac{b}{a}, \\
 a_1 &= \frac{1}{a}.
 \end{aligned}$$

Regresión polinomial

De forma general se puede resolver para un polinomio de m -ésimo grado,

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m + e$$

en el que se tienen $m+1$ ecuaciones lineales simultáneas.

$$\begin{aligned} a_0n + a_1 \sum x_1 + a_2 \sum x_1^2 + \dots + a_m \sum x_1^m &= \sum y_i \\ a_0 \sum x_1 + a_1 \sum x_1^2 + a_2 \sum x_1^3 + \dots + a_m \sum x_1^{m+1} &= \sum x_1 y_i \\ &\vdots \\ a_0 \sum x_1^m + a_1 \sum x_1^{m+1} + a_2 \sum x_1^2 + \dots + a_m \sum x_1^{2m} &= \sum x_1^m y_i \end{aligned}$$

El error estándar se formula como

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}}$$

Regresión polinomio segundo grado

Ejemplo: Suponga que ajustamos un polinomio de segundo grado

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + e$$

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2)^2$$

Ecuaciones normales

$$\begin{aligned} (n)a_0 + \left(\sum x_i\right)a_1 + \left(\sum x_i^2\right)a_2 &= \sum y_i, \\ \left(\sum x_i\right)a_0 + \left(\sum x_i^2\right)a_1 + \left(\sum x_i^3\right)a_2 &= \sum x_i y_i, \\ \left(\sum x_i^2\right)a_0 + \left(\sum x_i^3\right)a_1 + \left(\sum x_i^4\right)a_2 &= \sum x_i^2 y_i. \end{aligned}$$

donde todas las sumatorias van desde $i = 1$ hasta n .

Regresión lineal múltiple

En el caso que de m dimensiones tenemos:

$$y = a_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_mx_m + e$$

Ecuaciones

$$a_0n + a_1 \sum x_1 + a_2 \sum x_2 + \dots + a_m \sum x_m = \sum y_i$$

$$a_0 \sum x_1 + a_1 \sum x_1^2 + a_2 \sum x_2 \cdot x_1 + \dots + a_m \sum x_m \cdot x_1 = \sum x_1 y_i$$

$$\vdots$$

$$a_0 \sum x_m + a_1 \sum x_1 \cdot x_m + a_2 \sum x_2 \cdot x_m + \dots + a_m \sum x_m^2 = \sum x_m y_i$$

donde el error estándar se formula como

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}},$$

y el coeficiente de determinación se calcula como

Los ingenieros ambientales que estudian los efectos de la lluvia ácida deben determinar el valor del producto iónico del agua k_w como función de la temperatura. Los coeficientes científicos sugieren la ecuación siguiente para modelar dicha relación

$$-\log_{10} k_w = \frac{a}{t_a} + b \log_{10} T_a + c T_a + d \quad (1)$$

donde T_a es la temperatura absoluta (K), y a , b , c , y d son parámetros. emplee los siguientes datos y la regresión:

Regresión lineal múltiple

Es más sencillo resolver las ecuaciones normales si se expresa en notación matricial. El modelo en términos de las observaciones puede escribirse en notación matricial como $y = X\beta + \varepsilon$, donde

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nk} \end{bmatrix},$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} \quad y \quad \varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}.$$

El estimador de mínimos cuadrados de β es: $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T y$

Ecuaciones diferenciales ordinarias

Se llama ecuación diferencial aquella ecuación que contiene una variable dependiente y sus derivadas con respecto a una o más variables independientes.

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

A partir de una condición inicial se calcula la función $y = f(x)$ con $x = x_0 + h$. El método de un paso de forma general es:

$$\begin{aligned} \text{Nuevo valor} &= \text{valor anterior} + \text{pendiente} \times \text{tamaño de paso} \\ y_{i+1} &= y_i + \phi h \end{aligned}$$

Método de Taylor

Serie de Taylor

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

Truncando en el 2do término

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \text{Error}$$

$$h = x_{i+1} - x_i$$

$$\phi = f'(x_i)$$

$$y_{i+1} = y_i + \phi h$$

Ejemplo

$$\frac{dy}{dx} = y^2 \cos(5x) + y \sin(x); x = 0; y = 1$$

Método de Euler

$$\begin{aligned}y_{i+1} &= y_i + \phi h \\ \phi &= f(x_i, y_i) \\ h &= x_{i+1} - x_i\end{aligned}$$

Ejemplo: Resolver desde $t = 0$ hasta $t = 0.3$ con $h = 0.1$

$$\frac{dy}{dt} = y \sin^3(t); \text{ con } y(0) = 1.$$

Método de Euler Modificado

Es un método que mejora la aproximación a la pendiente. Implica el cálculo de dos derivadas del intervalo, en el punto inicial y otra en el punto final.

Ecuación predictiva

$$y_{i+1} = y_i + f(x_i, y_i)h$$

Ecuación correctiva

$$y_{i+1} = y_i + \frac{[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]h}{2}$$

Ejemplo: Resolver desde $t = 0$ hasta $t = 0.3$ con $h = 0.1$

$$\frac{dy}{dx} = y \sin^3(t); \text{ con } y(0) = 1.$$

Método de Runge-Kutta

Logran exactitud del procedimiento de la serie de Taylor sin necesitar del cálculo de la derivada de orden superior.

$$y_{i+1} = y_i + \phi(x_i, y_i, h)h$$

donde $\phi(x_i, y_i, h)h$ es la **función de incremento** descrita como

$$\phi = a_1 k_1 + a_2 k_2 + \dots + a_n k_n$$

donde las a son constantes y las k son

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + p_1 h, y_i + q_{11} k_1 h)$$

$$k_3 = f(x_i + p_2 h, y_i + q_{21} k_1 h + q_{22} k_2 h)$$

$$\vdots$$

$$k_n = f(x_i + p_{n-1} h, y_i + q_{n-1,1} k_1 h + q_{n-1,2} k_2 h + \dots + q_{n-1,n-1} k_{n-1} h)$$

donde las p y las q son constantes.

Método de Runge-Kutta

*Segundo orden

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(k_0 + k_1)$$

donde

$$k_0 = f(x_i, y_i)$$

$$k_1 = f(x_i + h, y_i + hk_0)$$

*tercer orden

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3)$$

donde

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f(x_i + h, y_i - hk_1 + 2hk_2)$$

*cuarto orden

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

donde

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3)$$

Ejemplos

Resolver

$$\frac{dy}{dx} = -2y + 4e^{-x}; \quad y(0) = 2,$$

de $x = 0$ a $x = 1$ con $h = 0.2$ mediante R-K de 4° orden.

Sistemas de ecuaciones diferenciales (1er orden)

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ \frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) \\ &\vdots \\ \frac{dy_n}{dx} &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n)\end{aligned}$$

Se deben conocer n condiciones iniciales y definir el paso de integración h .

Runge-Kutta 2do Grado

$$\begin{aligned}y_{j,i+1} &= y_{j,i} + \left(\frac{1}{3}k_{1,j} + \frac{2}{3}k_{2,j}\right)h \\ k_{1,j} &= f_j(x_i, y_{1,i}, y_{2,i}, \dots, y_{n,i}) \\ k_{2,j} &= f_j\left(x_i + \frac{3}{4}h, y_{1,i} + \frac{3}{4}hk_{1,1}, y_{2,i} + \frac{3}{4}hk_{1,2}, \dots, y_{n,i} + \frac{3}{4}hk_{1,j}\right)\end{aligned}$$

Un reactor por lotes no isotérmico está descrito por las siguientes ecuaciones:

$$\begin{aligned}\frac{dc}{dt} &= -e^{\frac{-10}{T+273}} \cdot c \\ \frac{dT}{dt} &= 1000e^{\frac{-16}{T+273}} \cdot c - 10(T - 20)\end{aligned}$$

Donde c es la concentración del reactivo y T es la temperatura del reactor, inicialmente está a 15°C y tiene $c = 1$ mol/L de reactante. Encuentre la c y la T como función del tiempo.

Estado de orden superior

$$\frac{d^3 y}{dx^3} - 3 \frac{d^2 y}{dx^2} - y \frac{dy}{dx} = 0$$

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 1, \quad y''(0) = -1.$$

$$z_1 = y; \quad f_1 = \frac{dz_1}{dx} = z_2$$

$$\frac{d}{dx} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{dz_1}{dx} \right) \right] - 3 \frac{d}{dx} \left(\frac{dz_1}{dx} \right) - z_1 \frac{dz_1}{dx} = 0$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{dz_2}{dx} \right) - 3 \frac{dz_2}{dx} - z_1 z_2 = 0; \quad f_2 = \frac{dz_2}{dx} = z_3$$

$$\frac{dz_3}{dx} - 3z_3 - z_1 z_2 = 0; \quad f_3 = \frac{dz_3}{dx} = 3z_3 + z_1 z_2$$

Condiciones iniciales

$$z_1(0) = 0, \quad z_2(0) = 1, \quad z_3(0) = -1$$

Método de diferencias finitas

- Es el método más común para resolver EDO's con condiciones de frontera.
- Se utilizan las diferencias finitas en lugar de las derivadas (discretización de la ecuación diferencial)
- Se construye una retícula (nodos) donde se ubican los puntos de la función de estudio.

Ejemplo

$$8\frac{d^2y}{dx^2} + 16\frac{dy}{dx} - 4y = 20, y(0) = 5, y(20) = 2$$

Dividir en 10 nodos $h = \Delta x = 2, h = \frac{x_n - x_0}{2}$

Diferencias finitas

$$\begin{aligned}\frac{d^2y}{dx^2} &= \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \\ \frac{dy}{dx} &= \frac{y_{i+1} - y_i}{2h}\end{aligned}$$