

10 Clases de Herramientas Computacionales Numéricas

H. Hernández

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad de Los Andes, Mérida 5101, Venezuela y*

L.A. Núñez

*Escuela de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, 680002, Colombia
y Departamento de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad de Los Andes, Mérida 5101, Venezuela*

Borrador Muy Preliminar

Índice

1. Clase 1: Errores en el Cómputo.	3
1.1. Vocabulario: Palabras, byte y Kilobytes,	3
1.2. Enteros y Puntos Flotantes	3
1.3. <i>Underflows y overflows</i>	5
1.4. Precisión del compilador	5
1.5. Tipos de Errores	6
1.6. Cancelación en la resta	7
1.7. Errores Multiplicativos	7
1.8. Error Total y Ejecución Optima	8
1.9. Integración numérica, sus pasos y sus errores	8
1.10. Análisis Empírico del Error	9
2. Clase 2: Ceros de una Función y Derivadas Numéricas	11
2.1. Raíces de una Función	11
2.2. Acotamiento	11
2.2.1. Bisección	11
2.2.2. Regula Falsi	11
2.3. Sustituciones sucesivas	12
2.3.1. Secante	12
2.3.2. Newton Rapson	13
2.4. Derivación Numérica	14
3. Clase 3: Integración Numérica	16
4. Clase 4: Tratamiento de Datos	20
4.1. Los Datos y las Funciones	20
4.2. Interpolación	20
5. Clase 5: Tratamiento Estadístico de Datos	23
5.1. Distribuciones, Promedios y Desviaciones.	23
5.2. Distribuciones Teóricas más populares	24
5.3. Funciones Probabilistas	25
5.4. Un Experimento Ilustrativo.	25
5.5. La Estadística y la Propagación de errores	26
5.6. La Función más Probable	28
5.7. Método de Mínimos Cuadrados	29
6. Clase 6: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias I	30
6.1. Vocabulario	30
6.2. Sistemas Dinámicos	31
6.3. Los Métodos y su Clasificación	32
6.4. El Rebusque de Taylor	33
6.5. La idea de la Integración	33

6.6. El Método de Euler y el problema de Valores Iniciales	34
6.7. El Método de Euler y el Problema de los Valores de Frontera	34
6.8. Los Métodos de Runge-Kutta	35
7. Clase 7: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias, II	38
7.1. Métodos Multipaso	38
7.2. Control del Paso	41
8. Clase 8: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias, III	43
8.1. El problema de valores de frontera.... .	43
8.2. Estrategias de Solución	43
8.3. Disparos a un intervalo	44
8.4. Disparos a medio intervalo	45
8.5. Métodos de Relajación	46
9. Clase 9: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales	49
9.1. Clasificación	49
9.2. El método de separación de variables	49
9.3. Clasificación y Computación	50
9.4. A manera de ejemplo	51
9.5. Problema de Valores iniciales con conservación de Flujo	51

1. Clase 1: Errores en el Cómputo.

1.1. Vocabulario: Palabras, byte y Kilobytes,

- Números Binarios = 0, 1 = expresados en base 2.
- 1 byte = 1B $\equiv 8Bits$ = Bits para almacenar un carácter “x” o “y”
1 Palabra = Bits requeridos para almacenar un número $\equiv 8Bits = 1B$
- 1 Kilobyte = 1KB = 2^{10} bytes = 1024 bytes
- 512 Kilobytes = $2^9 = 524,288Bits =$

1.2. Enteros y Puntos Flotantes

Los números enteros se representan

$$x_{ent} = \text{sign} \times \text{binario} \quad (1)$$

$$-2^{N-1} < x_{ent} < 2^{N-1} \quad (2)$$

$$-2147483647 \simeq -2^{31} < x_{ent} < 2^{31} \simeq 2147483647 \quad (3)$$

para sistemas con palabras de 32 bits, (4bytes)

En general los números reales o puntos flotantes, se representan en el computadores siguiendo la convención

$$x_{float} = \text{sign}(x_{float}) \times M \times 2^p \quad (4)$$

donde $\text{sign}(x_{float})$ es el signo del número x_{float} , la mantisa es M con $0 < M \leq 1$ y el entero positivo, p , el exponente. Obviamente cualquier número real puede ser expresado de esa manera. Con algunas convenciones adicionales. Signo, exponente y mantisa se expresan en números binario. Para representaciones punto flotantes con palabras de 4 bytes (32 bits) se separan: un bit para el signo, 8 bits para el exponente y los 23 bits restantes para la mantisa.

Así cualquier

$$x_{float} = \text{sign}(x_{float}) \times 2^{\frac{\ln \|x_{float}\|}{\ln 2} - \left\lceil \frac{\ln \|x_{float}\|}{\ln 2} \right\rceil} \times 2^{\left\lceil \frac{\ln \|x_{float}\|}{\ln 2} \right\rceil} \quad (5)$$

en donde, identificando

$$M = 2^{\frac{\ln \|x_{float}\|}{\ln 2} - \left\lceil \frac{\ln \|x_{float}\|}{\ln 2} \right\rceil} \quad (6)$$

$$p = \left\lceil \frac{\ln \|x_{float}\|}{\ln 2} \right\rceil \quad (7)$$

con $[x]$ la parte entera de x . Dado que p viene representado por un número binario de 8 dígitos el número entero máximo que puede representar es $2^8 = 256 \implies p \in [0, 255]$, para lo cual se establece una correspondencia a un intervalo que permita exponentes negativos. De modo que el nuevo exponente

$P = p - 127 \implies P \in [-127, 128]$. Queda entonces determinar como expresar la mantisa en números binarios, para lo cual se sigue la manera tradicional de expresar números fraccionarios

$$0,6254 = 6 \times 10^{-1} + 2 \times 10^{-2} + 5 \times 10^{-3} + 4 \times 10^{-4} \quad (8)$$

que en general una expresión B -fracción

$$x_F = \sum_{n=1}^{\infty} a_n B^{-n} \quad (9)$$

donde B es la base (diez en el caso decimal, o dos en el caso binario). Para encontrar la expresión de la mantisa en números binarios basta con encontrar el conjunto de coeficientes a_k en base $B = 2$.

Vale decir

$$0,6254 = \sum_{n=1}^{\infty} a_n 2^{-n} \quad (10)$$

$$2 \times 0,6254 = 1 + 0,2508 = a_1 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+1} 2^{-n} \implies a_1 = 1 \quad (11)$$

$$2 \times 0,2508 = 0 + 0,5016 = a_2 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+2} 2^{-n} \implies a_2 = 0 \quad (12)$$

$$2 \times 0,5016 = 1 + 0,0032 = a_3 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+3} 2^{-n} \implies a_3 = 1 \quad (13)$$

$$2 \times 0,0032 = 0 + 0,0064 = a_4 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+4} 2^{-n} \implies a_4 = 0 \quad (14)$$

$$2 \times 0,0064 = 0 + 0,0128 = a_5 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+5} 2^{-n} \implies a_5 = 0 \quad (15)$$

$$2 \times 0,0128 = 0 + 0,0256 = a_6 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+6} 2^{-n} \implies a_6 = 0 \quad (16)$$

$$2 \times 0,0256 = 0 + 0,0512 = a_7 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+7} 2^{-n} \implies a_7 = 0 \quad (17)$$

$$2 \times 0,0512 = 0 + 0,1024 = a_8 + \sum_{n=1}^{\infty} a_{n+8} 2^{-n} \implies a_8 = 0 \quad (18)$$

así, finalmente

$$0,6254 \simeq 10100000 \quad (19)$$

nótese que es una representación aproximada, limitada por el número de cifras permitidas por el tamaño de la palabra y que, tal y como ocurre en los números decimales el coeficiente de las potencias mayores va primero.

1.3. Underflows y overflows

En precisión simple se usan 4 bytes (32 bits) para representar un número, por lo tanto el máximo número real que puede ser representado es

[illegible]

equivalentemente el mínimo será $2^{-128} \equiv 2,9 \times 10^{-39}$. Si se utiliza doble precisión, dos palabras (8 bytes \equiv 64 bits) representarán cada numero. De los 64 bits, 11 representarán el exponente y los restantes 52 para la mantisa. En doble precisión

$$10^{-322} \leq \textit{doble} \leq 10^{308} \quad (21)$$

Los números menores que los mínimos (tanto en precisión simple como en doble) son considerados *underflows* mientras que cifras mayores que los mayores son *overflows*. El siguiente programa en pseudocódigos identifica estas anomalías

```
under <----- 1.0
over<----- 1.0
    mientras N< Nfinal
    haga
        under = under/2.0
        over = over*2.0
    finmientras
escriba Nfinal, under, over
```

Hay compiladores que asignan los *underflows* y *overflows* a cero y eso hay que chequearlo.

1.4. Precisión del compilador

Cuando se suman dos números de órdenes de magnitud diferentes, al igual que el caso decimal hay que igualar exponentes para luego sumar las mantisas.

$$7 + 10^{-7} = 0,7 \times 10^{-1} + 0,0000001 \times 10^{-1} \quad (22)$$

el exponente del número menor se hace cada vez mayor a costa de decrementar la mantisa y en el caso de las sumas en las máquinas las representaciones (precisión simple o doble, puede no ser suficiente)

Por ejemplo

$$10^{-7} = 0 \quad 01100000 \quad 1101 \ 0110 \ 1011 \ 1111 \ 1001 \ 010 \quad (23)$$

$$7 = 0 \quad 10000010 \quad 1110 \ 0000 \ 0000 \ 0000 \ 0000 \ 000 \quad (24)$$

la suma binaria se logra añadiendo ceros a la mantisa

$$10^{-7} = 0 \quad 01100001 \quad 0110 \ 1011 \ 0101 \ 1111 \ 1100 \ 101 \ (0) \quad (25)$$

$$= 0 \quad 01100010 \quad 0011 \ 0101 \ 1010 \ 1111 \ 1110 \ 010 \ (10) \quad (26)$$

$$= \vdots \quad (27)$$

$$= 0 \quad 10000010 \quad 0000 \ 0000 \ 0000 \ 0000 \ 0000 \ 000 \ (1101 \ 0110 \dots) \quad (28)$$

por lo cual

$$7 + 10^{-7} = 7 \quad (29)$$

La verificación de la precisión del compilador se logra sumándole a un numero otro cada vez menor y comparando la suma con el número. Cuando la suma es igual a la numero en ese momento el sumando es la precisión, por cuanto puede ser sumado sin que afecte al sumando.

$$1 + \epsilon_p = 1 \quad (30)$$

y típicamente

$$\epsilon_p \sim 10^{-7} \longleftarrow \text{Precisión simple} \quad (31)$$

$$\epsilon_p \sim 10^{-16} \longleftarrow \text{Precisión doble} \quad (32)$$

1.5. Tipos de Errores

- **Equivocaciones:** Errores tipográficos en el código o en los datos (o ambos)
- **Eventuales:** Fluctuaciones electrónicas en la circuitería (nunca ocurren)
- **Algorítmicos:** Ocurren por aproximación de las matemáticas en el algoritmo, típicamente

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \simeq \sum_{n=0}^N \frac{x^n}{n!} + O(x, N) \quad (33)$$

Obviamente que $N \rightarrow \infty \implies O(x, N) \rightarrow 0$. Por lo tanto puede modelarse como

$$\epsilon_{aprox} \simeq \frac{\alpha}{N^\beta} \quad (34)$$

- **Errores de redondeo:** Son equivalentes a los errores experimentales debido a las limitaciones del aparato de medida. En nuestro caso por las limitaciones de la representación de los números en la máquina.

$$2 \left(\frac{1}{3} \right) - \frac{2}{3} = 0,6666666 - 0,6666667 = -0,0000001 \neq 0$$

Si x es un número exacto, llamaremos x_c su representación en el computador. De esta forma

$$x = 11223344556677889900 = 1,1223344556677889900 \times 10^{19} \quad (35)$$

dado que el exponente y la mantisa se almacenan en forma separada. El exponente se almacenara con toda precisión por cuanto es un número pequeño. No así la mantisa, la cual será almacenada dependiendo del tamaño de la palabra. Aún con dos palabras se almacenará en 1.12233 y 44556677. Se pierden las cifras 8899 por incapacidad del instrumento.

Dado que la multiplicación es más costosa que la suma, el error de redondeo de modela en base al error de redondeo multiplicativo

$$\epsilon_{red} \simeq \sqrt{N} \epsilon_m \quad (36)$$

donde ϵ_m lo constituye la precisión de la máquina.

- **Error Total:** Es la suma del error de redondeo más el error de aproximación. Los errores de aproximación disminuye y los errores de redondeo aumentan. Llega un punto en el cual el error de redondeo es mayor que el algorítmico.. Ese punto se alcanza en un número de ejecuciones óptimas. El **error total**, mínimo da una idea de la eficiencia del programa que estamos utilizando.

$$\epsilon_t = \epsilon_{approx} + \epsilon_{red} = \frac{\alpha}{N^\beta} + \sqrt{N}\epsilon_m \quad (37)$$

1.6. Cancelación en la resta

Dependiendo de como se opere se pueden obtener errores mayores o menores

$$\begin{aligned} a = b - c &\longrightarrow a_c = b_c - c_c \\ &\quad a_c = b(1 + \epsilon_b) - c(1 + \epsilon_c) \\ &\quad a_c = (b - c) + b\epsilon_b - c\epsilon_c \\ &\implies \frac{a_c}{a} = 1 + \frac{b}{a}\epsilon_b - \frac{c}{a}\epsilon_c \\ &\quad \frac{a_c}{a} = (1 + \epsilon_a) = 1 + \frac{b}{a}\epsilon_b - \frac{c}{a}\epsilon_c \\ \text{si } a \ll 1 \quad b \simeq a \quad &\epsilon_a \simeq \frac{b}{a}(\epsilon_b - \epsilon_c) \end{aligned}$$

por lo cual aún en el caso de que los errores en b y c se parezcan, al estar multiplicados por un número muy grande, $\frac{b}{a}$, ya que a es muy pequeño, existirá una diferencia entre a y a_c . La idea por lo tanto es evitar las restas de dos números parecidos. El caso más patético es la ecuación de segundo grado

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad (38)$$

donde las raíces vienen dadas indistintamente por

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (39)$$

$$\tilde{x}_{1,2} = \frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}} \quad (40)$$

de forma que las raíces podrán ser calculadas en sin la amplificación por sustracción si

$$b > 0 \implies \begin{cases} x_1 = \frac{-2c}{b + \sqrt{b^2 - 4ac}} \\ x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \end{cases} \quad (41)$$

$$b < 0 \implies \begin{cases} x_2 = \frac{-2c}{b - \sqrt{b^2 - 4ac}} \\ x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \end{cases} \quad (42)$$

1.7. Errores Multiplicativos

Los errores multiplicativos ocurren en de las siguiente forma

$$\begin{aligned} a = b \times c &\longrightarrow a_c = b_c \times c_c \\ &\quad a_c = b \times c \times (1 + \epsilon_b) \times (1 + \epsilon_c) \\ &\implies \frac{a_c}{a} \simeq 1 + \epsilon_b + \epsilon_c \end{aligned}$$

y dependiendo del signo de los errores en b y c sera mayor o menor. Por lo tanto sigue un patrón aleatorio y se comportará como

$$\epsilon_{red} = \sqrt{N}\epsilon_m \quad (43)$$

1.8. Error Total y Ejecución Optima

Existe un estimado del número de pasos óptimo para el cual el error de aproximación es mínimo y el error de redondeo no ha crecido lo suficiente. Para ello

$$\frac{d \epsilon_{tot}}{d N} = \frac{d \left(\frac{\alpha}{N^\beta} + \sqrt{N}\epsilon_m \right)}{d N} = 0 \quad (44)$$

si

$$\epsilon_{aprox} \simeq \frac{1}{N^2} \implies \frac{d \epsilon_{tot}}{d N} = -2\frac{1}{N^3} + \frac{N^{3/2}}{2}\epsilon_m = 0 \implies N^{5/2} = \frac{4}{\epsilon_m} \quad (45)$$

para $\epsilon_m \simeq 10^{-7}$ en precisión simple tenemos $N \simeq 1099$ y el

$$\epsilon_{tot} = \frac{\alpha}{N^\beta} + \sqrt{N}\epsilon_m \simeq 4 \times 10^{-6} \quad (46)$$

1.9. Integración numérica, sus pasos y sus errores

Para el caso de la integración numérica, la idea es el valor más exacto de la integral con el menor número de intervalos de integración. El error algorítmico puede estimarse con el grado de aproximación en series de Taylor en un intervalo de integración multiplicado por el número de subintervalos utilizados para evaluar la integral definida en $[a, b]$. Esto es

$$I_{(x_i, x_{i+1})} = \int_{x_i}^{x_i+h} \left(f(x_i) + x f'(x_i) + \frac{1}{2} x^2 f''(x_i) + \frac{1}{3!} x^3 f'''(x_i) + \dots \right) dx \quad (47)$$

$$I_{(x_i, x_{i+1})} = h \left(\frac{1}{2} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_{i+1}) \right) + E(h^n, f^{(n)}(x_i)) \quad (48)$$

con

$$E_{(x_i, x_{i+1})} = \int_{x_i}^{x_i+h} \left(\frac{1}{2} x^2 f''(x_i) + \frac{1}{3!} x^3 f'''(x_i) + \dots \right) dx \quad (49)$$

$$E_{(a,b)} = N \int_{x_i}^{x_i+h} \left(\frac{1}{2} x^2 f''(x_i) + \frac{1}{3!} x^3 f'''(x_i) + \dots \right) dx \quad (50)$$

De tal forma que dependiendo del método utilizado, tendremos que los términos que lideran las series de los errores algorítmicos serán

$$E_t = \frac{(b-a)^3}{N^2} f^{(2)} \quad (51)$$

$$E_s = \frac{(b-a)^5}{N^5} f^{(5)} \quad (52)$$

para los métodos de trapecios y Simpson, respectivamente.

Para estimar el error total de cada uno de estos métodos procedemos de la siguiente forma. El error total será

$$\epsilon_{tot} = \epsilon_{red} + \epsilon_{aprox} = \epsilon_{red} + \frac{E_{t,s}}{f} = \sqrt{N}\epsilon_m + \frac{\left(\frac{(b-a)^3}{N^2}f^{(2)}, \frac{(b-a)^5}{N^5}f^{(5)}\right)}{f} \quad (53)$$

dependiendo del método seleccionado.

Si suponemos que buscamos el paso característico, h , para el cual los errores de redondeo y algorítmico son comparables, esto es

$$\epsilon_{red} \approx \epsilon_{aprox} \Rightarrow \sqrt{N}\epsilon_m \approx \begin{cases} \frac{(b-a)^3 f^{(2)}}{N^2 f} & \text{Trapeacios} \\ \frac{(b-a)^5 f^{(5)}}{N^5 f} & \text{Simpson} \end{cases} \quad (54)$$

además establecemos escalas típicas para el intervalo las funciones y las derivadas de tal forma que

$$b - a = 1 \Rightarrow h = \frac{1}{N}; \quad \text{y} \quad \frac{f^{(n)}}{f} \simeq 1 \quad (55)$$

tendremos

$$N = \frac{1}{h} \approx \begin{cases} \frac{1}{(\epsilon_m)^{2/5}} = \begin{cases} 631 & \text{Precisión Simple} \\ 10^6 & \text{Precisión Doble} \end{cases} \\ \frac{1}{(\epsilon_m)^{2/9}} = \begin{cases} 36 & \text{Precisión Simple} \\ 2154 & \text{Precisión Doble} \end{cases} \end{cases} \quad (56)$$

y los errores de redondeo pueden ser estimados en

$$\epsilon_{red} \approx \sqrt{N}\epsilon_m = \begin{cases} \begin{cases} 3 \times 10^{-6} & \text{Precisión Simple} \\ 10^{-12} & \text{Precisión Doble} \end{cases} \\ \begin{cases} 3 \times 10^{-7} & \text{Precisión Simple} \\ 10^{-14} & \text{Precisión Doble} \end{cases} \end{cases} \quad (57)$$

para los cuales hemos utilizados los valores típicos de precisión de la máquina

$$\epsilon_m = \begin{cases} 10^{-7} & \text{Precisión Simple} \\ 10^{-15} & \text{Precisión Doble} \end{cases} \quad (58)$$

Del análisis anterior se desprende que:

- El método de Simpson es superior en precisión al método de integración por trapeacios, lográndose resultados cercanos a la precisión de la máquina.
- La integración numérica con una tolerancia de error razonable se logra con un número característico de intervalos del orden de $N \approx 1000$ lo cual esta muy lejos de hacer $N \rightsquigarrow \infty$

1.10. Análisis Empírico del Error

Supongamos que la respuesta exacta para nuestro problema es \mathcal{R} mientras que la respuesta aproximada después de N iteraciones es $R(N)$. Entonces la idea es comparar nuestra respuesta en N

iteraciones con la respuesta en $2N$. Cuando se alcanza el valor asintótico y el error de redondeo no es dominante tendremos

$$R(N) \simeq \mathcal{R} + \frac{\alpha}{N^\beta} \quad (59)$$

$$R(N) - R(2N) \simeq \frac{\alpha}{N^\beta} \quad (60)$$

donde es claro que representará una línea recta en un gráfico $\log_{10}(R(N) - R(2N))$ vs $\log_{10}(N)$. Si N no es suficientemente grande para obtener un valor asintótico, no habrá recta. Luego al crecer N se obtiene la recta y cuando ella cambia de pendiente, se obtiene el número óptimo de iteraciones. y como el logaritmo es en base 10 se obtiene el número de cifras significativas

2. Clase 2: Ceros de una Función y Derivadas Numéricas

2.1. Raíces de una Función

Encontrar las raíces o los ceros, x_r , de una ecuación, $f(x_r) = 0$, para funciones monovaluadas es una las operaciones numéricas básicas. No es así para el caso de funciones multivaluadas, $f(\tilde{\mathbf{x}}_r) = 0$, y mucho menos en el caso multidimensional, $\tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{x}}_r) = \mathbf{0}$. Todos los métodos que consideraremos serán iterativo. Estudiaremos dos categorías de métodos para encontrar raíces de funciones monovaluadas: los de acotamiento de la raíz, y los de sustituciones sucesivas. Estos métodos son validos para cualquier ecuación $f(x_r) = 0$, donde $f(x_r)$ es una función no lineal continua en el intervalo en el cual está definida. Existen otros métodos para encontrar raíces de $f(x_r) = 0$ donde $f(x_r)$ es un polinomio. Esos serán considerados más adelante.

2.2. Acotamiento

Dada una función que cambia de signo en un intervalo, ella debe tener al menos una raíz en éste y se encuentra acotándola reduciendo el intervalo con algún tipo de criterio

2.2.1. Bisección

Es el método más intuitivo y elemental. El intervalo se acota mediante corriendo uno de los extremos a la mitad del intervalo. Vale decir:

$$f(x) \text{ continua con } x \in [a_0, b_0] \quad \wedge \quad f(a_0)f(b_0) \leq 0$$

```
n ← 0
Mientras tolerancia < ||f(an) - f(bn)|| haga
  m ← (a0+b0)/2
  Si f(a0)f(m) ≤ 0
    Entonces
      an+1 ← an;    bn+1 ← m
  si no
    bn+1 ← bn;    an+1 ← m
  n ← n + 1
finmientras
raíz ← an
```

2.2.2. Regula Falsi

El intervalo se acota corriendo uno de los extremos al punto de intersección de una recta construida a partir de los dos extremos del intervalo anterior. Para funciones que son suaves alrededor de las raíces estos métodos convergen mucho más rápido que el método de bisección. Trataremos algunas variantes de estos métodos.

El método de *Regula Falsi* (posición falsa) se basa en encontrar un punto que acotando la raíz avance más rápido que el punto medio. Si

$$f(x) \text{ continua con } x \in [a_0, b_0] \quad \wedge \quad f(a_0)f(b_0) \leq 0$$

este punto se define a partir de un promedio ponderado

$$w_{n+1} = \frac{(f(b_n)a_n + f(a_n)b_n)}{(f(b_n) - f(a_n))}$$

Entonces, una variante de

```

n ← 0;      F ← f(a0);      G ← f(b0);      w0 ← a0
Mientras tolerancia < ||f(an) - f(bn)||      haga
    wn+1 ←  $\frac{(Ga_n + Fb_n)}{(G - F)}$ 
    Si f(an)f(wn+1) ≤ 0
        Entonces
            an+1 ← an;      bn+1 ← wn+1;      G ← f(wn+1)
            Si f(wn)f(wn+1) > 0      Entonces      F ← F/2
        si no
            F ← f(wn+1);      an+1 ← wn+1;      bn+1 ← bn
            Si f(wn)f(wn+1) > 0      Entonces      G ← G/2
    n ← n + 1
finmientras
raíz ← an

```

2.3. Sustituciones sucesivas

Se fundamenta en aproximar la solución de la ecuación $f(x) = 0$ a partir de reescribirla como $x = F(x)$ y una propuesta de solución $x = x_0$ la cual debe estar cerca de la solución verdadera para que converja. A partir de esa propuesta se generan un conjunto de iteraciones

$$\text{si } x_s \text{ es solución} \Rightarrow f(x_s) = 0 \Leftrightarrow x_s = F(x_s) \implies x_{n+1} = F(x_n)$$

2.3.1. Secante

Dado dos puntos x_0 y x_{-1}

```

n ← 0
xn ← x0
xn-1 ← x-1
Mientras f(xn) > tolerancia haga
    xn+1 ←  $\frac{(f(x_n)x_{n-1} - f(x_{n-1})x_n)}{(f(x_n) - f(x_{n-1}))}$ 
    n ← n + 1
finmientras
raíz ← xn

```

Es claro que el punto

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

corresponde al punto de corte con el eje x de la recta secante que pasa por los puntos $(f(x_n), x_n)$ y $(f(x_{n-1}), x_{n-1})$.

2.3.2. Newton Rapson

Este método es el más versátil y conocido. De hecho es el único método razonable para resolver sistemas de ecuaciones no lineales del tipo $\tilde{\mathbf{f}}(\tilde{\mathbf{x}}_r) = \mathbf{0}$. Trataremos ahora únicamente en caso unidimensional

Dado un punto inicial x_0 y la función y su derivada en ese punto

```

n ← 0
xn ← x0
Mientras f(xn) > tolerancia haga
    xn+1 ← xn -  $\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ 
    n ← n + 1
finmientras
raiz ← xn

```

Es claro que el entorno de la solución

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

se puede entender mediante una expansión a primer orden en series de Taylor

$$\text{si } f(x + \delta) = 0 \approx f(x) + f'(x)\delta \Rightarrow \delta \approx -\frac{f(x)}{f'(x)}$$

y su poder radica en que su convergencia cuadrática. La cual puede ser intuída. de esta forma. Si x_s es solución de $f(x) = 0$ se cumple que

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \Rightarrow -x_s + x_{n+1} = -x_s + x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \Rightarrow \quad (61)$$

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (62)$$

dado que

$$f(x + \delta) = f(x) + f'(x)\delta + \frac{f''(x)}{2}\delta^2 + \dots \quad (63)$$

$$f'(x + \delta) = f'(x) + f''(x)\delta + \frac{f'''(x)}{2}\delta^2 + \dots \quad (64)$$

se tiene

$$\epsilon_{n+1} = -\epsilon_n^2 \frac{f''(x_n)}{2f'(x_n)} \quad (65)$$

En el método de Newton-Rapson uno puede verse tentado a sustituir

$$\frac{1}{f'(x)} \sim \frac{x_n - x_{n-1}}{(f(x_n) - f(x_{n-1}))} \quad (66)$$

pero esto degrada la convergencia (requiere una evaluación adicional para la función) y aumenta el error de redondeo. En general la convergencia local (cuando la propuesta inicial de x_0 está cercana a la solución x_s) de este método es bueno, no así la global (si esa propuesta está lejos de la solución). En este caso se combina con el método de bisección para logra un híbrido eficiente.

2.4. Derivación Numérica

Normalmente, se dispone de una tabla de datos experimentales de la forma

$$\begin{array}{cc} x & f(x) \\ \vdots & \vdots \\ x_{i-1} & f(x_{i-1}) \\ x_i & f(x_i) \\ x_{i+1} & f(x_{i+1}) \\ \vdots & \vdots \end{array}$$

y se desea calcular la derivada de esta función.

Como siempre, por definición

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

ahora bien, uno también puede pensar $f'(x)$ en términos de

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

y también

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f\left(x + \frac{h}{2}\right) - f\left(x - \frac{h}{2}\right)}{h} \equiv \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\delta f(x)}{h}$$

donde $\Delta f(x)$, $\nabla f(x)$, $\delta f(x)$ se conocen como diferencias finitas

$$f'(x) \simeq \begin{cases} \nabla f(x) \rightarrow \text{diferencia atrasada} \\ \delta f(x) \rightarrow \text{diferencia centrada} \\ \Delta f(x) \rightarrow \text{diferencia adelantada} \end{cases}$$

y $\Delta(\bullet)$, $\nabla(\bullet)$, $\delta(\bullet)$ actúan como operadores diferenciales lineales sobre la función $f(x)$.

En términos de una serie de Taylor se puede observar que

$$\begin{aligned} f(x-h) &= f(x) - h f'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) - \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \dots \\ f(x-h/2) &= f(x) - \frac{h}{2} f'(x) + \frac{h^2}{2! \cdot 2^2} f''(x) - \frac{h^3}{3! \cdot 2^3} f'''(x) + \dots \\ f(x+h/2) &= f(x) + \frac{h}{2} f'(x) + \frac{h^2}{2! \cdot 2^2} f''(x) + \frac{h^3}{3! \cdot 2^3} f'''(x) + \dots \\ f(x+h) &= f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \dots \end{aligned}$$

por lo cual

$$\begin{aligned}\bar{f}'_b(x) &\simeq \frac{\nabla f(x)}{h} = f'(x) \overbrace{-\frac{h}{2!}f''(x) + \frac{h^2}{3!}f'''(x) + \dots} \\ \bar{f}'_c(x) &\simeq \frac{\delta f(x)}{h} = f'(x) \overbrace{+\frac{h^2}{3! \cdot 2^2}f'''(x) + \dots} \\ \bar{f}'_f(x) &\simeq \frac{\triangle f(x)}{h} = f'(x) \overbrace{+\frac{h}{2!}f''(x) + \frac{h^2}{3!}f'''(x) + \dots}\end{aligned}$$

Finalmente, para obtener derivadas de orden superior pensamos en término de operadores

$E(\star)$	$E f = f(x+h)$	desplazamiento
$\triangle(\star)$	$\triangle f = f(x+h) - f(x)$	diferencia adelantada
$D(\star)$	$D f = f'(x)$	diferenciación
$\delta(\star)$	$\delta f = f\left(x+\frac{h}{2}\right) - f\left(x-\frac{h}{2}\right)$	diferencia centrada
$\mu(\star)$	$\mu f = \frac{1}{2}\left(f\left(x+\frac{h}{2}\right) - f\left(x-\frac{h}{2}\right)\right)$	promedio
$\nabla(\star)$	$\nabla f = f(x) - f(x-h)$	diferencia retrasada

son operadores que funcionan sobre secuencias

$$\triangle f = f(x+h) - f(x)$$

$$\begin{aligned}\triangle f_n &= f_{n+1} - f_n = E f_n - f_n \\ \triangle f_{n-1} &= f_n - f_{n-1}\end{aligned}$$

por lo tanto

$$\triangle^2 f_n = \triangle (f_{n+1} - f_n) = f_{n+2} - 2f_{n+1} + f_n = E^2 f - 2E f_n + f_n$$

en general

$$\triangle^k = (E - 1)^k \quad \longleftrightarrow \quad E^k = (1 + \triangle)^k$$

por otro lado la serie de Taylor puede ser re-escrita como

$$\begin{aligned}f(x+h) &= f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \dots \\ E f &= \left(1 + hD + \frac{(hD)^2}{2!} + \frac{(hD)^3}{3!} + \dots\right) f(x) \\ E f &= e^{hD} f(x)\end{aligned}$$

finalmente podemos expresar las relaciones entre los distintos operadores como

	E	Δ	δ	∇	D
E	E	$1 + \Delta$	$1 + \frac{\delta^2}{2} + \delta \sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4}}$	$\frac{1}{1-\nabla}$	e^{hD}
Δ	$E - 1$	Δ	$\delta \sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4} + \frac{\delta^2}{2}}$	$\frac{\nabla}{1-\nabla}$	$e^{hD} - 1$
δ	$E^{1/2} - E^{-1/2}$	$\frac{\Delta}{\sqrt{1+\Delta}}$	δ	$\frac{\nabla}{\sqrt{1-\nabla}}$	$2 \sinh\left(\frac{hD}{2}\right)$
∇	$1 - E^{-1}$	$\frac{\Delta}{1+\Delta}$	$\delta \sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4} - \frac{\delta^2}{2}}$	∇	$1 - e^{hD}$
D	$\frac{1}{h} \ln E$	$\frac{\ln(1+\Delta)}{h}$	$\frac{2 \sinh^{-1}(\frac{\delta}{2})}{h}$	$\frac{\ln(\frac{1}{1-\nabla})}{h}$	D
μ	$\frac{E^{1/2} - E^{-1/2}}{2}$	$\frac{(1+\frac{\Delta}{2})}{\sqrt{1+\Delta}}$	$\sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4}}$	$\frac{(1-\frac{\nabla}{2})}{\sqrt{1-\nabla}}$	$\cosh\left(\frac{hD}{2}\right)$

3. Clase 3: Integración Numérica

“...deriva el que sabe, integra el que puede ...”

En infinidad de problemas en ciencias e ingenierías se requiere resolver

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (67)$$

numéricamente. La solución de este problema es mucho más sencilla que la analítica, y pasa por la conceptualización de la definición de la integral Riemman

$$I = \int_a^b f(x) dx = \lim_{h \rightarrow 0} \left[h \sum_{i=1}^{(b-a)/h} f(x_i) \right] \quad (68)$$

En general, la idea es aproximar la integral por el área bajo la curva medida en cuadrículas (por ello toma el nombre de cuadratura) y la expresión general será

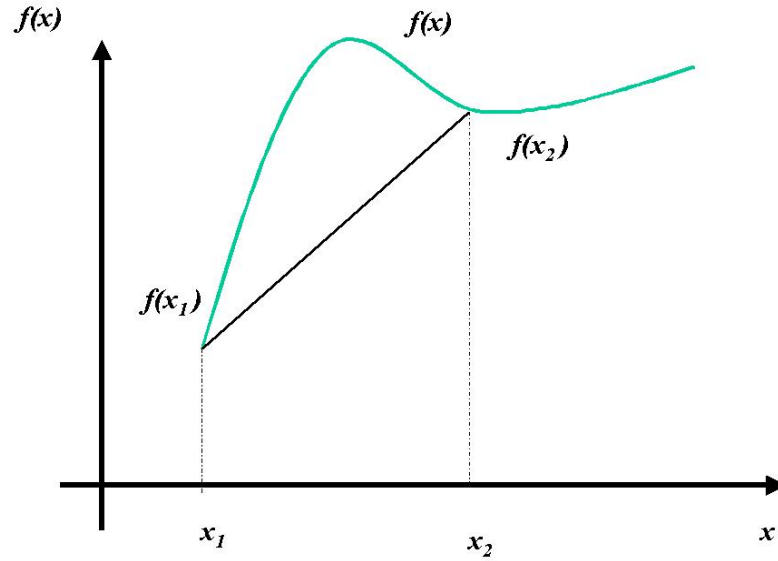
$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N f(x_i) w_i \quad (69)$$

donde w_i son los pesos asociados al método y las $f(x_i)$ son las funciones evaluadas en el punto x_i . La aplicación más obvia de este esquema es el esquema (cerrado) de Newton-Cotes para funciones razonablemente bien comportadas. Los puntos, x_i , en el intervalo se encuentran igualmente espaciados (i.e. $x_{i+1} = x_i + h = x_0 + (i+1)h$, con $h = \text{const}$). Así, si expandimos el integrando en series de potencias nos queda

$$I = \int_{x_i}^{x_i+h} \left(f(x_i) + x f'(x_i) + \frac{1}{2} x^2 f''(x_i) + \frac{1}{3!} x^3 f'''(x_i) + \dots \right) dx \quad (70)$$

conservando los dos primeros términos (aproximando la función con una recta) se tiene

$$I_{(x_i, x_{i+1})} = \int_{x_i}^{x_i+h} (f(x_i) + x f'(x_i) + O(x^2)) dx \approx h \left(\frac{1}{2} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_{i+1}) \right) \quad (71)$$



que constituye la integración por trapecios. Integrando en todo el intervalo se obtiene

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2}f(x_1) + hf(x_2) + \cdots + hf(x_i) + \cdots + \frac{h}{2}f(x_N) \quad (72)$$

En donde es claro que los pesos w_i son

$$w_i = \left\{ \frac{h}{2}, h, \cdots, h, \frac{h}{2} \right\} \quad (73)$$

Extendiendo la aproximación, ahora hasta conservar el término cuadrático, se obtiene

$$I_{(x_i, x_{i+2})} = \int_{x_i}^{x_{i+2}} \left(f(x_i) + x f'(x_i) + \frac{1}{2} x^2 f''(x_i) + O(x^3) \right) dx \quad (74)$$

$$\approx h \left(\frac{1}{3} f(x_{i-1}) + \frac{4}{3} f(x_i) + \frac{1}{3} f(x_{i+1}) \right) \quad (75)$$

lo que es equivalente a aproximar la función $f(x)$ en el intervalo (x_i, x_{i+2}) por parábolas. Nótese que se integra en dobles intervalos, o lo que es lo mismo, el número total de intervalos debe ser par. Igual que en el caso anterior, en todo el intervalo la integral queda

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (76)$$

$$\approx \frac{h}{3}f(x_1) + \frac{4h}{3}f(x_2) + \frac{2h}{3}f(x_3) + \frac{4h}{3}f(x_4) + \cdots + \frac{4h}{3}f(x_{N-1}) + \frac{h}{3}f(x_N) \quad (77)$$

por lo cual los pesos pueden identificarse como

$$w_i = \left\{ \frac{h}{3}, \frac{4h}{3}, \frac{2h}{3}, \frac{4h}{3}, \dots, \frac{4h}{3}, \frac{h}{2} \right\} \quad (78)$$

Un resumen de los métodos y sus órdenes es

Método	Orden	Pesos
Trapezoides	1	$(h/2, h/2)$
Simpson	2	$(h/3, 4h/3, h/3)$
3/8	3	$(3h/8, 9h/8, 9h/8, 3h/8)$
Milne	4	$(14h/45, 64h/45, 24h/45, 64h/45, 14h/45)$

En general uno lo que ha hecho es aproximar $f(x)$ en el intervalo (x_i, x_{i+1}) por una recta (regla de trapezoides), $f(x)$ en el intervalo (x_i, x_{i+2}) por una parábola, $f(x)$ en el intervalo (x_i, x_{i+3}) por un polinomio de tercer grado.... Es claro que podemos pensar

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \equiv \int_{\alpha}^{\beta} W(x)F(x) dx \approx \sum_{i=1}^N F(x_i) w_i \quad (79)$$

como una expresión en la cual aproximamos la función $f(x)$ en el intervalo $[a, b]$ por un polinomio de grado $2N - 1$. Más aún, uno pudiera generalizar el planteamiento a aproximar la función en una base cualquiera de polinomios $|\phi_i\rangle$ ortogonales:

$$f(x) = \sum_{i=1}^N c_i |\phi_i\rangle \quad (80)$$

con un producto interno definido por

$$\int_{\gamma}^{\zeta} \phi_l(x)w(x)\phi_m(x)dx = \langle \phi_l | \phi_m \rangle = \mathcal{N}_l \delta_{lm} \quad (81)$$

De esta forma se seleccionan los x_i para que sean las raíces de los polinomios ortogonales, y los pesos

$$\phi_l(x_i) = 0 \quad (82)$$

$$w_i = \frac{-a_N \mathcal{N}_N}{\phi'_N(x_i) \phi_{N+1}(x_i)} \quad (83)$$

con $n = 1, 2, \dots, N$ y $a_N = \frac{A_{N+1}}{A_N}$ donde A_N es el coeficiente del término x^N en $\phi_N(x)$. Con esta selección de pesos, w_i , y abscisas, x_i , se minimiza el error. En general el error ΔI viene acotado

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) dx \equiv \int_{\alpha}^{\beta} W(x)F(x) dx = \sum_{i=1}^N F(x_i) w_i + \Delta I \quad (84)$$

$$\Delta I = \frac{\mathcal{N}_N}{A_N (2N)!} f^{(2N)}(x_0) \quad (85)$$

Los pesos y las abscisas vienen tabulados (ver Abramowitz, M. y Stegun, I. (1964), *Handbook of Mathematical Functions*, (Dover; New York)).

Un resumen de los tipos de integrales, pesos y abscisas sera dada por las siguiente tabla de fórmulas.

Integral	Nombre	Pesos	Abscisas
$\int_{-1}^1 f(x)dx$	Gauss	$w_i = \frac{2}{P'_N(x_i)P_{N+1}(x_i)}$	$P_N(x_i) = 0$
$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx$	Gauss-Chebyshev	$w_i = \frac{\pi}{N}$	$x_i = \cos \frac{(2i-1)\pi}{2N}$
$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x)dx$	Gauss-Hermitte	$w_i = \frac{2^{N-1}N!\sqrt{\pi}}{N^2 H_{N-1}^2(x_i)}$	$H_N(x_i) = 0$
$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x)dx$	Gauss-Laguerre	$w_i = \frac{(N!)^2 x_i}{(N+1)^2 L_{N+1}^2(x_i)}$	$L_N(x_i) = 0$

queda por tratar algunas transformaciones de coordenadas y re-escalamiento para llevar

$$[a, b] \longrightarrow (\alpha, \beta) \quad (86)$$

$$(x_i, w_i) \longrightarrow (y_i, \varpi_i) \quad (87)$$

Así

$$[a, b] \longrightarrow (-1, 1) \quad (88)$$

$$(x_i, w_i) \longrightarrow \left(\frac{b+a}{2} + y_i \frac{b-a}{2}, \frac{2}{b-a} w_i \right) \quad (89)$$

Integración por el Método de Monte Carlo La técnica básica de la integración por el método de Monte Carlo es trivial y basada en la fuerza bruta de cómputo fundamentándose en el teorema del valor medio para las integrales

$$I = \int_a^b dx f(x) = (b-a) \langle f \rangle \simeq (b-a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (90)$$

de donde son claros los N pesos constantes $w_i = \frac{(b-a)}{N}$ y los x_i son seleccionados aleatoriamente. Siempre se puede hacer un cambio de variables para transformar el intervalo (a, b) en uno más simple $(0, 1)$

$$x \longrightarrow \frac{x-a}{b-a} \quad (91)$$

de tal forma que

$$I = \int_{-1}^1 dx f(x) = \langle f \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (92)$$

4. Clase 4: Tratamiento de Datos

4.1. Los Datos y las Funciones

Dada una tabla de datos (teóricos o experimentales), digamos la sección transversal de dispersión en función de la energía de incidencia de la partícula. Normalmente la situación que encontramos es, normalmente, unos valores medidos experimentalmente y otros obtenidos de la descripción teórica del fenómeno

$E(MeV)$	0	25	50	75	100	125	150	175	200
$\sigma_{ex}(mb)$	10,60	16,00	45,00	83,50	52,80	19,90	10,80	8,25	4,70
$\sigma_{te}(mb)$	9,34	17,90	41,50	85,50	51,50	21,50	10,80	6,29	4,09

En principio tenemos dos posibles visiones del problema. Una consiste en determinar los valores intermedios de la sección transversal experimental para dos energías medidas. La segunda visión del problema sería: sí, se considera correcta la descripción teórica del fenómeno, como ajustar algunos de los parámetros allí presentes para apegar su descripción lo más posible a las mediciones experimentales y así obtener alguna información adicional.

La primera visión técnicamente debe considerarse como un problema de interpolación: dados dos puntos $(x_1, f(x_1))$ y $(x_2, f(x_2))$ encontrar los valores de la función $f(x_n)$ para construir los puntos $(\frac{x}{n}, f(\frac{x}{n}))$ con $x_n = \frac{x}{n}$

La segunda, corresponde al problema de ajuste de una curva (función) a conjunto de datos experimentales. Esta última visión del problema admite dos enfoques. Uno global, en el cual una única función (como correspondería teóricamente) describe el fenómeno y los errores son de la medición. Más aún del ajuste de una única función uno obtiene una información adicional. Por ejemplo, la función de Breit-Wigner

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{(E - E_r)^2 + \frac{\gamma^2}{4}} \quad (93)$$

describe (teóricamente) la sección transversal y las constantes E_r, σ_0 y γ deberán ser determinadas del ajuste y corresponden a propiedades más complicadas del experimento.

El otro enfoque, (teóricamente) más modesto y menos frecuente es aquel que impone el mejor ajuste local y a partir de allí se construye una función a partir de los datos experimentales.

Así, interpolación y ajuste de curvas son dos herramientas orientadas a tratar las tablas de números como funciones analíticas. La Interpolación se invoca para inferir información local de un conjunto de datos incompletos, mientras que el ajuste de curvas pretende darnos una idea del comportamiento global de la función

4.2. Interpolación

Lo primero que se nos ocurre cuando abordamos el problema de una tabla de datos

x	x_1	x_2	\cdots	x_i	x_{i+1}	\cdots	x_n
$f(x)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	\cdots	$f(x_i)$	$f(x_{i+1})$	\cdots	$f(x_n)$

es trazar una línea recta entre los puntos $(x_i, f(x_i) \equiv f_i)$ y $(x_{i+1}, f(x_{i+1}) \equiv f_{i+1})$. Vale decir,

$$f(x) = f_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} (f_{i+1} - f_i) + \Delta f(x) \quad x \in [x_i, x_{i+1}] \quad (94)$$

o equivalentemente

$$f(x) = \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} f_i + \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i} f_{i+1} + \Delta f(x) \quad x \in [x_i, x_{i+1}] \quad (95)$$

con

$$P_k^{(1)}(x) = \frac{x - x_m}{x_k - x_m} \quad \wedge \quad m \neq k \quad (96)$$

y donde el error viene acotado por el segundo término en la expansión en Taylor

$$\|\Delta f(x)\| \sim \frac{\max[\|f''(x)\|]}{8} (x_{i+1} - x_i)^2 \quad (97)$$

De igual forma, uno puede pensar que localmente la función que describe los datos puede corresponder a un polinomio de bajo grado, digamos $(n - 1)$. Así

$$f_i(x) = \sum_{j=0}^{n-1} a_j x^j \quad (98)$$

por lo cual existirán varios conjuntos para distintas regiones de la tabla de datos. En todos los casos esos polinomios “tocarán” los n puntos contenidos en la tabla de datos. Uno puede verse tentado a describir toda la tabla de datos con un único conjunto $\{a_0, a_1, \dots, a_{n-1}\}$, pero eso lo haremos cuando exista una muy buena razón para intuir ese comportamiento de los datos. De esta forma si generalizamos la expresión (95) tendremos que

$$f(x) = \underbrace{\sum_{k=1}^{n+1} P_k^{(n)}(x) f_k}_{\text{polinomio de orden } n} + \Delta f(x) \quad x \in [x_i, x_{i+1}] \quad (99)$$

y ahora los multiplicadores de Lagrange, vienen dados por

$$P_k^{(n)}(x) = \prod_{m \neq k}^{n+1} \frac{x - x_m}{x_k - x_m} \quad (100)$$

El error estará representado por

$$\Delta f(x) = \frac{f^{(n+1)}(a)}{(n+1)!} (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{n+1}) \quad a \in [x_i, x_{i+1}] \quad (101)$$

$$\|\Delta f(x)\| \leq \frac{\max[f^{(n+1)}(a)]}{4(n+1)} h^{n+1} \quad (102)$$

Tradicionalmente los coeficientes f_k se generan mediante una tabla de *diferencias divididas* mediante el siguiente algoritmo

```

Para k=0,...n haga
  Para i=0,...n-k, haga
    Calcule
       $f[x_i \cdots x_{i+k}] = \frac{f[x_i \cdots x_{i+k}] - f[x_i \cdots x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$ 
    Fin HagaPara i
  Fin HagaPara k

```

y la tabla generada para $n = 4$ es

x_i	$f[\] \equiv f(\)$	$f[\ ,\]$	$f[\ ,\ ,\]$	$f[\ ,\ ,\ ,\]$	$f[\ ,\ ,\ ,\ ,\]$
x_0	$f[x_0]$				
		$f[x_0, x_1]$			
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$		
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
		$f[x_2, x_3]$		$f[x_1, x_2, x_3, x_4]$	
x_3	$f[x_3]$		$f[x_2, x_3, x_4]$		
		$f[x_3, x_4]$			
x_4	$f[x_4]$				

y el error estará por el orden de

$$\Delta f(x) \approx \frac{\|f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] - f[x_0, x_1, x_2, x_3]\| + \|f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4] - f[x_1, x_2, x_3, x_4]\|}{2}$$

Supongamos como ejemplo (ya perdido en la historia) como lo es aproximar el valor de la función coseno conocidos cuatro valores de la función para ángulos medidos en radianes

θ_i	$\cos \theta_i$	$\cos[\ ,\]$	$\cos[\ ,\ ,\]$	$\cos[\ ,\ ,\ ,\]$	$\cos[\ ,\ ,\ ,\ ,\]$
0,0	1,0000000				
		$-0,09966715$			
0,2	0,98006657		$-0,4921125$		
		$-0,24730090$		$0,0371062$	
0,3	0,95533648		$-0,4772700$		$0,0396700$
		$-0,34275490$		$0,0609082$	
0,4	0,92106099		$-0,4529067$		
		$-0,47862690$			
0,6	0,82533561				

Si utilizamos tres puntos de interpolación tendremos un polinomio cuadrático en θ de la forma

$$\cos \theta \cong p^{(2)}(\theta) = \cos \theta_0 + (\theta - \theta_0) \cos[\theta_0, \theta_1] + (\theta - \theta_0)(\theta - \theta_1) \cos[\theta_0, \theta_1, \theta_2]$$

y así

$$\begin{aligned} \cos(0,25) &\simeq 0,98006657 + (0,05)(-0,24730090) + (0,05)(-0,05)(-0,4772700) \\ \cos(0,25) &\simeq 0,9688947 \end{aligned}$$

5. Clase 5: Tratamiento Estadístico de Datos

5.1. Distribuciones, Promedios y Desviaciones.

Las limitaciones impuestas por la realidad obligan a un conjunto de errores en la medición de cantidades. Estas limitaciones son compartidas tanto por el aparato de medida como por el objeto de medición y, muchas veces, las limitaciones son inherentes a la teoría que estamos utilizando para poder medir. Por ello la descripción estadística de los datos experimentales se hace necesaria. En estos casos la disparidad de una misma medición nos lleva a reflexionar sobre cual será el valor *real* de esa medición y, de igual forma, cual será el valor más probable de ese valor. Esto nos obliga a adscribir ese valor a una distribución estadística. Veamos algunos elementos quizá conocidos por Uds en esta descripción de los datos:

El Promedio o valor esperado $\bar{\mu}$ de ocurrencia de una medida x_i en N ensayos es

$$\bar{\mu} = \langle x \rangle = \bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$$

y μ , también promedio, si $N \rightarrow \infty$ i.e.

$$\mu = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \rightarrow \mu = \int_a^b dx \, x p(x) \quad \text{con} \quad \int_a^b dx \, p(x) = 1$$

donde $p(x)$ es la **distribución** continua de ocurrencia asociada a la medida x .

Por lo tanto, otras cantidades relacionadas con esta distribución emergen: la **mediana**

$$\mu_{\frac{1}{2}} \Rightarrow p(x > \mu_{\frac{1}{2}}) = p(x < \mu_{\frac{1}{2}})$$

el **modo o valor más probable**

$$\mu_{\text{máx}} \Rightarrow p(x = \mu_{\text{máx}}) \geq p(x \neq \mu_{\text{máx}})$$

la **desviación media absoluta**

$$\text{ADev}(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \|x_i - \mu\|$$

y la **variancia**, $\text{Var}(x_1, \dots, x_N)$, o **desviación cuadrática media**, σ , de un valor del promedio

$$\sigma^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Var}(x_1, \dots, x_N) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2 \rightarrow \sigma^2 = \int_a^b dx \, (x - \mu)^2 p(x)$$

Existe una sutileza adicional que corrige la variancia si el promedio μ de la variable se desconoce a priori y se calcula de la data experimental. En ese caso la desviación cuadrática media se calcula como

$$s = \sqrt{\frac{N}{N-1} \text{Var}(x_1, \dots, x_N)} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \mu)^2}{N-1}}$$

La variancia en cualquiera de sus formas, claramente se asocia con el error en una medida. De hecho, el **error probable** e de una medida se define si

$$\int_{\mu-e}^{\mu+e} dx p(x) = \frac{1}{2}$$

En general todas estas cantidades están asociadas a los **momentos de una distribución**

$$\mu_r = \int_a^b dx (x - \mu)^r p(x) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} r = 0 \Rightarrow \text{condición de normalización} \\ r = 1 \Rightarrow \text{promedio} \\ r = 2 \Rightarrow \text{variancia} \\ r = 3 \Rightarrow \text{simetría} \\ r = 4 \Rightarrow \text{exceso o } kurtosis \\ \vdots \end{cases}$$

Los momentos de menor orden ($r = 1$ y $r = 2$) son más robustos que los de mayor orden. Más aún, la desviación absoluta es más robusta que el promedio y si acaso se utilizan los momentos de orden superior deben ser considerados mucho cuidado. El concepto de *robustez* tiene que ver con la insensibilidad de la definición a diferentes tipos de datos. En otras palabras que siempre se comporta igual. La simetría ($r = 3$), como su nombre lo indica muestra cuán simétrica es una distribución. el exceso o *kurtosis* indica cuán plana (alrededor del promedio) es la distribución.

5.2. Distribuciones Teóricas más populares

Es claro que requerimos asociar una distribución $p(x)$ a un conjunto de medidas para poder obtener una cantidad adicional de información. Existen varias opciones de distribución asociadas con comportamientos particulares de los datos a los cuales se les asocia.

La **distribución binomial o de Bernoulli** $P_B(N, n, p)$ describe la ocurrencia de n eventos independientes con probabilidad individual p en N ensayos

$$P_B(N, n, p) = \binom{N}{n} p^n (1-p)^{N-n} \equiv \frac{N!}{(N-n)!n!} p^n (1-p)^{N-n}$$

con las consecuentes cantidades más robustas y utilizadas

$$P_B(N, n, p) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \mu_B = Np & \text{Promedio} \\ \sigma_B = \sqrt{Np(1-p)} & \text{Desviación Cuadrática} \end{cases}$$

La **distribución de Poisson**

$$P_P(n, \mu) = \frac{\mu^n}{n!} e^{-\mu} \quad \text{con } \mu \equiv N p$$

$$P_P(n, \mu) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{p \rightarrow 0} P_B(N, n, p)$$

describe experimentos en los cuales existe un número elevado de ensayos con probabilidades pequeñas de ocurrencia de eventos. Los curiosos valores para el promedio y la variancia son

$$P_P(n, \mu) \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \mu_P = \mu_B = Np & \text{Promedio} \\ \sigma_P = \sqrt{\mu_B} = Np & \text{Desviación Cuadrática} \end{cases}$$

Esta distribución está caracterizada por un único parámetro μ constante. Es asimétrica para valores de $\mu \ll 1$ y se aproxima a la **distribución normal o Gaussiana** para $\mu \gg 1$

La **distribución normal o Gaussiana** describe situaciones en las cuales la probabilidad individual de p ocurrencia se mantiene constante independientemente del número de ensayos N que se planteen. Viene descrita por

$$P_G(x, \mu, \sigma) = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{p \neq 0} P_B(N, n, p) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$

La razón de la popularidad de esta distribución se apoya en el Teorema Central del Límite o también de Convergencia Normal, que afirma que cualquier distribución converge asintóticamente a la distribución Normal para N suficientemente grandes.

$$P_G(n, \mu, \sigma) \Rightarrow \begin{cases} \mu_G = \mu_B = Np & \text{Promedio} \\ \sigma_G = \sqrt{Np(1-p)} & \text{Desviación Cuadrática} \end{cases}$$

Para finalizar mencionamos de pasada la **distribución Lorentziana**

$$P_L(x, \mu, \sigma) = \frac{1}{\pi} \frac{\sigma}{(x - \mu)^2 + \sigma^2}$$

la cual se encuentra en varios fenómenos físicos como lo son la disipación de potencia en función de la frecuencia a través de una resistencia de un circuito RLC o su equivalente mecánico. También describe la forma natural de una línea de emisión cuando un sistema cuántico decae de un estado excitado a otro de menor energía. Esta forma natural de la línea descrita por esta distribución se expresa en que el “ancho” de la distribución a media altura es igual a dos desviaciones estándares.

5.3. Funciones Probabilistas

A partir de las distribuciones teóricas se pueden definir un conjunto de funciones probabilistas del tipo

$$\left. \begin{aligned} P(x) &= \int_{-\infty}^x p(t) dt \\ Q(x) &= \int_x^{\infty} p(t) dt \\ A(x) &= \int_{-x}^x p(t) dt \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} P(x) + Q(x) = 1 \\ P(-x) = Q(x) \\ A(x) = 2P(x) - 1 \end{cases}$$

algunas de las cuales, para el caso particular de la distribución normal, se convierten en funciones conocidas

$$A(\sqrt{2}x) = 2P(\sqrt{2}x) - 1 = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\sqrt{2}x} \exp\left(-\frac{t^2}{2}\right) dt \equiv \text{erf}(x)$$

5.4. Un Experimento Ilustrativo.

Considere un conjunto de mediciones tendientes a determinar el largo de la cuerdas en una hipotética ciudad. La siguiente tabla representa 25 medidas en metros

Med. #	Largo	Med #	Largo	Med #	Largo
1	50.6	2	50.3	3	50.6
4	47.7	5	50.7	6	49.4
7	50.6	8	50.7	9	48.7
10	50.7	11	50.5	12	49.3
13	50.5	14	48.9	15	50.2
16	49.2	17	51.0	18	48.3
19	50.7	20	49.9	21	51.2
22	48.7	23	48.6	24	49.1
24	51.6				
$\mu = 49,9$			$\sigma = 1,0$		

Para ajustar estos datos a una distribución teórica construimos un histograma de tal forma que las columnas indiquen el número de ocurrencia de una determinada medida a intervalos de 1 m. Así para

$$47 \leq l < 48 \Rightarrow n = 1$$

$$48 \leq l < 49 \Rightarrow n = 5$$

$$49 \leq l < 50 \Rightarrow n = 5$$

$$50 \leq l < 51 \Rightarrow n = 11$$

$$48 \leq l < 49 \Rightarrow n = 3$$

Dependiendo de nuestra capacidad de medida podemos tener varias tablas como ésta o por el contrario, otra con muchas más medidas. En el caso de que tengamos varias (digamos 25) tablas con 25 medidas tendremos que seleccionar la distribución teórica a la cual ajustar nuestro conjunto de medidas. En este caso construimos 25 histogramas siguiendo el esquema arriba indicado. Cada columna tendrá una distribución de alturas con una dispersión relacionada con la distribución seleccionada. Si el rango de error de la altura alcanza la distribución teórica tendremos un criterio para aceptarla o descartarla.

En el caso de que nuestro aparato de medida pueda tomar muchas medidas en un mismo experimento (digamos 2500 medidas) entonces podremos suponer (siguiendo el Teorema de Convergencia Normal) que este conjunto de medidas sigue una distribución normal o Gaussiana. En ese caso podremos hacer algunas inferencias a partir de los datos que hemos obtenidos. Por ejemplo:

$$A(\sigma) = \int_{\mu-\sigma}^{\mu+\sigma} P_G(t, \mu, \sigma) dt = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{\mu-\sigma}^{\mu+\sigma} e^{-\frac{(t-\mu)^2}{2\sigma^2}} dt = 0,68$$

con lo cual estamos diciendo que si hacemos 100 medidas del largo de la cuadra, obtendremos 68 veces valores del largo entre 48.9m y 50.9m.

5.5. La Estadística y la Propagación de errores

La incidencia de los errores experimentales (bien sea de medida o errores aleatorios) en una cantidad función de una variable independiente se puede expresar como

$$y = f(x) \Rightarrow y \pm \Delta y = f(x \pm \Delta x) = f(x) + (\pm \Delta x) \frac{df}{dx} + \dots \Rightarrow \Delta y \approx \frac{df}{dx} \Delta x$$

y equivalentemente para una función de varias variables a través de un diferencial total

$$y = f(u, v, w, \dots) \Rightarrow \Delta y \approx \frac{\partial f}{\partial u} \Delta u + \frac{\partial f}{\partial v} \Delta v + \frac{\partial f}{\partial w} \Delta w$$

y es común asociar $\Delta u_i = (u_i - \langle u \rangle) \equiv (u_i - \mu_u)$ por lo cual

$$\Delta y_i = (y_i - \mu_y) = \left\{ \frac{\partial f}{\partial u} (u_i - \mu_u) + \frac{\partial f}{\partial v} (v_i - \mu_v) + \frac{\partial f}{\partial w} (w_i - \mu_w) \right\}$$

por lo cual

$$\begin{aligned} \sigma_y^2 &\equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \mu_y)^2 \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{\partial f}{\partial u} (u_i - \mu_u) + \frac{\partial f}{\partial v} (v_i - \mu_v) + \frac{\partial f}{\partial w} (w_i - \mu_w) \right\}^2 \end{aligned}$$

por lo cual

$$\begin{aligned} \sigma_y^2 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left\{ \left[\frac{\partial f}{\partial u} (u_i - \mu_u) \right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial v} (v_i - \mu_v) \right]^2 + \left[\frac{\partial f}{\partial w} (w_i - \mu_w) \right]^2 + \right. \\ &\quad + 2 \frac{\partial f}{\partial u} (u_i - \mu_u) \frac{\partial f}{\partial v} (v_i - \mu_v) + 2 \frac{\partial f}{\partial u} (u_i - \mu_u) \frac{\partial f}{\partial w} (w_i - \mu_w) \\ &\quad \left. + 2 \frac{\partial f}{\partial v} (v_i - \mu_v) \frac{\partial f}{\partial w} (w_i - \mu_w) \right\} \\ \sigma_y^2 &= \left(\frac{\partial f}{\partial u} \right)^2 \sigma_u^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial v} \right)^2 \sigma_v^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial w} \right)^2 \sigma_w^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial f}{\partial v} \sigma_{uv}^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial f}{\partial w} \sigma_{uw}^2 + 2 \frac{\partial f}{\partial v} \frac{\partial f}{\partial w} \sigma_{vw}^2 \end{aligned}$$

donde hemos extendido la definición de variancia a *covariancia*.

$$\sigma_{uv}^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_i - \mu_u) (v_i - \mu_v)$$

Si u y v no están correlacionadas, i.e. si la probabilidad de obtener un valor u_i es totalmente independiente de obtener un valor v_i o, más directamente en término de errores, si el error en la media de u no incide en la medida de v entonces $\sigma_{uv}^2 = 0$

Supongamos los siguientes ejemplos

$$y = au \pm bv \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial u} = a \\ \frac{\partial f}{\partial v} = b \end{array} \right\} \Rightarrow \sigma_y^2 = a^2 \sigma_u^2 + b^2 \sigma_v^2 \pm 2ab \sigma_{uv}^2$$

$$y = auv \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial u} = av \\ \frac{\partial f}{\partial v} = au \end{array} \right\} \Rightarrow \sigma_y^2 = (av)^2 \sigma_u^2 + (au)^2 \sigma_v^2 + 2a^2 uv \sigma_{uv}^2 = y^2 \left(\frac{\sigma_u^2}{u^2} + \frac{\sigma_v^2}{v^2} + 2 \frac{\sigma_{uv}^2}{uv} \right)$$

$$y = a \frac{u}{v} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial u} = \frac{a}{v} \\ \frac{\partial f}{\partial v} = -a \frac{u}{v^2} \end{array} \right\} \Rightarrow \sigma_y^2 = \left(\frac{a}{v} \right)^2 \sigma_u^2 + \left(\frac{au}{v^2} \right)^2 \sigma_v^2 - 2 \frac{a^2 u}{v^3} \sigma_{uv}^2 = y^2 \left(\frac{\sigma_u^2}{u^2} + \frac{\sigma_v^2}{v^2} - 2 \frac{\sigma_{uv}^2}{uv} \right)$$

5.6. La Función más Probable

Supongamos el caso del decaimiento espontáneo en el cual partimos con un número N_0 de partículas en $t = 0$ y al cabo de un Δt , ΔN partículas han decaído

$$\Delta N = -\frac{1}{\tau}N(t)\Delta t \Rightarrow \frac{\Delta N}{\Delta t} = -\frac{1}{\tau}N(t) \Rightarrow N(t) = N_0 \underbrace{e^{-t/\tau}}_{\tau p(t)}$$

es decir, hemos reinterpretado la ecuación del decaimiento espontáneo como una ecuación probabilista en la cual $p(t) = \frac{1}{\tau}e^{-t/\tau}$ es la probabilidad de observar una partícula decayendo en el tiempo t . Si medimos en distintos tiempos: t_1, t_2, t_3, \dots y queremos determinar la mejor función $\mathcal{L}(\tau)$ que se describe el proceso de decaimiento tendremos

$$\mathcal{L}(\tau) = \prod_{i=1}^N p(t_i) = \prod_{i=1}^N \exp\left(-\frac{t_i}{\tau} - \ln \tau\right) = \exp\left(-\frac{1}{\tau} \left[\sum_{i=1}^N t_i\right] - N \ln \tau\right)$$

donde τ todavía es desconocida, pero

$$\frac{d\mathcal{L}(\tau)}{d\tau} = \left(\frac{1}{\tau^2} \left[\sum_{i=1}^N t_i\right] - \frac{N}{\tau}\right) \mathcal{L}(\tau) = 0 \Rightarrow \bar{\tau} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N t_i$$

es el valor de $\tau = \bar{\tau}$ que maximiza la función $\mathcal{L}(\tau)$. Si queremos determinar el grado de incertidumbre asociado con el parámetro $\bar{\tau} \equiv \mu_\tau$ es claro que

$$\mathcal{L}(\tau) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\sigma_\tau \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\tau - \mu_\tau)^2}{2\sigma_\tau^2}} \Rightarrow 0 = \frac{d \ln(\mathcal{L}(\tau))}{d\tau} = -\frac{\tau - \mu_\tau}{\sigma_\tau^2} \Rightarrow \sigma_\tau = \left[\frac{1}{\tau - \mu_\tau} \frac{d \ln(\mathcal{L}(\tau))}{d\tau} \right]^{-1/2}$$

Ahora bien si

$$\mathcal{L}(\tau) = \exp\left(-\frac{1}{\tau} \left[\sum_{i=1}^N t_i\right] - N \ln \tau\right) \Rightarrow \sigma_\tau = \frac{\tau}{\sqrt{N}}$$

Más aún, para cada punto de la medida podemos suponer una distribución de tal forma que en cada punto inciden errores

$$p(x_i)dx_i = \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x_i - \mu)^2}{2\sigma_i^2}} dx_i \Rightarrow \mathcal{L}(\mu) = \left(\prod_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\frac{(x_i - \mu)}{\sigma_i}\right]^2\right)$$

con el máximo que implica el mejor valor de $\bar{\mu}$ que

$$0 = \frac{d \ln(\mathcal{L}(\mu))}{d\mu} \Rightarrow \frac{d \left(\frac{(x_i - \mu)}{\sigma_i}\right)^2}{d\mu} = 0 \Rightarrow \bar{\mu} = \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2}\right)^{-1} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} x_i$$

Obviamente si la incertidumbre, σ_i , en cada uno de los puntos es la misma se obtiene la expresión tradicional del promedio. Adicionalmente, la incertidumbre en el valor de ese promedio $\bar{\mu}$ será

$$\begin{aligned}\sigma_\mu^2 &= \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i \left(\frac{\partial \mu}{\partial x_i} \right)^2 \right] = \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \left\{ \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \right)^{-1} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} x_i \right\} \right)^2 \right] \\ &= \sum_{i=1}^N \left[\sigma_i \left(\left[\sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} \right]^{-1} \frac{1}{\sigma_i^2} \right)^2 \right] = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2}\end{aligned}$$

siempre y cuando se ignoren las correlaciones entre los errores de las diferentes medidas

5.7. Método de Mínimos Cuadrados

En general, una función que describa los datos experimentales tiene la forma de

$$y = f(x; a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$$

donde los parámetros $a_1, a_2, a_3, \dots, a_n$ deben tomar los valores óptimos para que $f(x; a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$ la mejor función que permita la descripción de los datos experimentales. Si y_i son los valores experimentales en $x = x_i$ podemos suponer que podrán ser asociados a una distribución normal de la forma

$$p(t) dx = \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y_i - f_i)^2}{2\sigma_i^2}} dx \quad \text{con} \quad f_i = f(x_i; a_1, a_2, a_3, \dots, a_n)$$

por lo cual

$$\mathcal{L}(a_1, a_2, a_3, \dots, a_n) = \prod_{i=1}^N \left\{ \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y_i - f_i)^2}{2\sigma_i^2}} \right\} = \left(\prod_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i \sqrt{2\pi}} \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left[\frac{(y_i - f_i)}{\sigma_i} \right]^2 \right)$$

siguiendo con el proceso arriba mencionado tenemos n ecuaciones con n incógnitas

$$\frac{\partial \left(\sum_{i=1}^N \left[\frac{(y_i - f_i)}{\sigma_i} \right]^2 \right)}{\partial a_k} \equiv \frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} = -2 \sum_{i=1}^N \left[\frac{(y_i - f_i)}{\sigma_i} \right] \frac{\partial f_i}{\partial a_k} = 0 \quad \text{con} \quad k = 1, 2, 3, \dots, n$$

6. Clase 6: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias I

6.1. Vocabulario

Ecuación diferencial

$$\frac{dy(t)}{dt} = F(y(t), t)$$

donde $y(t)$ es la **función incógnita o variable dependiente** y t es la **variable independiente**

El **orden** de una ecuación diferencial se refiere al grado de la derivada

$$\frac{dy(t)}{dt} + g_0(t)y(t) = f(t) \quad \text{primer orden}$$

$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} + \tilde{g}_1(t)\frac{dy(t)}{dt} + \tilde{g}_0(t)y(t) = \tilde{f}(t) \quad \text{segundo orden}$$

\vdots

$$\frac{d^n y(t)}{dt^n} + \tilde{g}_{n-1}(t)\frac{d^{n-1}y(t)}{dt^{n-1}} + \cdots + \tilde{g}_1(t)\frac{dy(t)}{dt} + \tilde{g}_0(t)y(t) = \tilde{f}(y(t), t) \quad n\text{-ésimo orden}$$

mientras que el calificativo de **lineal o no-lineal** tiene que ver con el exponente (o el tipo de función) que presenten la función y sus derivadas y o los productos mixtos

$$\left(\frac{dy(t)}{dt}\right)^q + g_0(t)y^p(t) = f(t) \quad \text{no lineal primer orden}$$

$$\frac{d^2y(t)}{dt^2} + \tilde{g}_1(t)\left(\frac{dy(t)}{dt}\right)^q + \tilde{g}_{10}(t)\left(\frac{dy(t)}{dt}\right)^m y^n(t) + \tilde{g}_0(t)y^p(t) = \tilde{f}(t) \quad \text{no lineal segundo orden}$$

Si $f(t) = 0$ la ecuación diferencial se dice **homogénea** y si $f(t) \neq 0$ será **inhomogénea**.

La ecuación del péndulo físico amortiguado y forzado, una vez adimensionalizada con $\sqrt{l/g}$ como unidad de tiempo, vale decir $t \rightarrow \tau = t/\sqrt{l/g}$, puede ser escrita como

$$\frac{d^2\theta(\tau)}{d\tau^2} + \frac{k}{m}\frac{d\theta(\tau)}{d\tau} + \sin\theta(\tau) = \frac{A}{ml}\cos\omega_0\theta(\tau) \quad \text{no lineal segundo orden, inhomogénea}$$

$$\frac{d^2\theta(t)}{dt^2} + \frac{k}{m}\frac{d\theta(\tau)}{d\tau} + \theta(\tau) = \frac{A}{ml}\cos\omega_0\theta(\tau) \quad \begin{array}{l} \text{lineal segundo orden inhomogénea} \\ \text{sí } \theta(\tau) \approx \sin\theta(\tau) \end{array},$$

Las ecuaciones diferenciales pueden ser **ordinarias** si existe una sola variable independiente o **parcial** cuando son varias variables independientes

$$p \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + q \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + r \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + s \frac{\partial \phi}{\partial x} + t \frac{\partial \phi}{\partial y} + u \phi + v = 0$$

$$\text{lineales} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} p = p(x, y) \\ q = q(x, y) \\ r = r(x, y) \\ s = s(x, y) \\ t = t(x, y) \\ u = u(x, y) \\ v = v(x, y) \end{cases}$$

$$\text{no lineales} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} p = p(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ q = q(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ r = r(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ s = s(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ t = t(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ u = u(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ v = v(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \text{Elípticas} &\Rightarrow q^2 < 4pr \\ \text{Parabólicas} &\Rightarrow q^2 = 4pr \\ \text{Hiperbólicas} &\Rightarrow q^2 > 4pr \end{aligned}$$

Los casos típico de ecuaciones lineales en derivadas parciales son los siguientes:

$$\nabla^2 \phi(x, y) = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \rho(x, y) \quad \text{Ecuación de Poisson} \quad \text{Elíptica}$$

$$\frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} \quad \text{Ecuación del Calor} \quad \text{Parabólica}$$

$$\frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial t^2} \quad \text{Ecuación de Onda} \quad \text{Hiperbólica}$$

Adicionalmente, están los **problemas de valores iniciales** y los **problemas de frontera**.

Valores iniciales

$$\frac{d^2 y(t)}{dt^2} + \tilde{g}_1(t) \frac{dy(t)}{dt} + \tilde{g}_0(t) y(t) = \tilde{f}(t) \quad \begin{cases} y(t=0) = y(0) = y_0 \\ \frac{dy(t=0)}{dt} = \dot{y}(0) = \dot{y}_0 \end{cases}$$

Valores de Frontera

$$\frac{d^2 y(t)}{dt^2} + \tilde{g}_1(t) \frac{dy(t)}{dt} + \tilde{g}_0(t) y(t) = \tilde{f}(t) \quad \begin{cases} y(a) = y_a; & y(b) = y_b & \text{Dirichlet} \\ \dot{y}(a) = \dot{y}_a; & y(b) = y_b & \text{Cauchy} \\ y(a) = y_a; & \dot{y}(b) = \dot{y}_b & \text{Cauchy} \\ \dot{y}(a) = \dot{y}_a; & \dot{y}(b) = \dot{y}_b & \text{Neuman} \end{cases}$$

6.2. Sistemas Dinámicos

Dada una ecuación diferencial de segundo orden de la forma

$$\frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F \left(\frac{dx(t)}{dt}, x(t), t \right)$$

siempre se puede convertir en un sistema de ecuaciones lineales al extender el espacio de variables de la forma

$$\left. \begin{array}{l} \frac{d x(t)}{dt} \stackrel{\text{def}}{=} p(t) \\ x(t) \stackrel{\text{def}}{=} q(t) \end{array} \right\} \Rightarrow \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = F \left(\frac{d x(t)}{dt}, x(t), t \right) \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{d q(t)}{dt} = p(t) \\ \frac{d p(t)}{dt} = F(p(t), q(t), t) \end{array} \right.$$

la cual puede ser re-arreglada en forma vectorial

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(t) \\ F(p(t), q(t), t) \end{pmatrix} \Leftrightarrow \frac{d \mathbf{Q}(t)}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}(t), t)$$

Así dado un conjunto de potenciales elásticos y las fuerzas que de ellos derivan,

$$V(x) = \begin{cases} kx & \leftarrow p = 1 \\ \frac{1}{2}kx^2 & \leftarrow p = 2 \\ \frac{1}{3}kx^3 & \leftarrow p = 3 \\ \vdots \\ \frac{1}{p}k \|x\|^p \end{cases} \Rightarrow F_k(x) = -\frac{d V(x)}{dx} \Rightarrow F_k(x) = \begin{cases} -k \frac{x}{\|x\|} \\ -kx \\ -kx^2 \\ \vdots \\ -k \|x\|^{p-1} \frac{x}{\|x\|} \end{cases}$$

el sistema dinámico correspondiente a la ecuación de Newton correspondiente será

$$\frac{d \mathbf{Q}(t)}{dt} = \mathbf{F}(\mathbf{Q}(t), t) \Rightarrow \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p(t) \\ \frac{1}{m} [F_{ext}(x(t), t)] - k \|x(t)\|^{p-1} \frac{x(t)}{\|x(t)\|} \end{pmatrix}$$

6.3. Los Métodos y su Clasificación

Dada una ecuación diferencial de primer orden, $\frac{dy(x)}{dx} = y'(x) = f(y(x), x)$, con y_k el valor de la función obtenida con el método, con $y_k \neq y(x_k)$, donde $x_k = x_0 + kh$ y h el paso. Diremos que un método es de **paso único** si la determinación de y_{k+1} sólo involucra un único valor de y_k y **múltiple paso** si para calcularlo se utilizan varios valores $y_k, y_{k-1}, \dots, y_{k-p}$. Por otra parte se denomina un método **explícito** si para determinar y_{k+1} se utilizan valores anteriores $y_k, y_{k-1}, \dots, y_{k-p}$ y **implícito** si se utilizan una función del mismo valor y_{k+1} . Así

$$y_{k+1} = y_{k-1} + 2h f(x_k, y_k)$$

representa un método **explícito de paso único** mientras que

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})]$$

será **implícito de múltiples pasos**.

6.4. El Rebusque de Taylor

Tal y como hemos dicho arriba, dada una ecuación diferencial, su solución a través de un método de paso único puede ser escrita como

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{k+1} = y_k + \varphi(x_k, y_k, h) \quad \text{con} \quad h = x_{i+1} - x_i;$$

Lo primero que se puede hacer es expandir por Taylor alrededor del punto $x = x_k$

$$y(x) = y(x_k) + (x - x_k) y'(x_k) + \frac{1}{2!} (x - x_k)^2 y''(x_k) + \cdots + \frac{1}{n!} (x - x_k)^n y^{(n)}(x_k) + \cdots$$

e identificamos

$$\begin{aligned} y(x_k) &\rightarrow y_k y'(x) = f(y(x), x) \\ y'(x_k) &\rightarrow f(y_k, x_k) \\ y''(x_k) &\rightarrow f'(y_k, x_k) = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=x_k, y=y_k} + \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x=x_k, y=y_k} y'_k \\ y'''(x_k) &\rightarrow f''(y_k, x_k) = \partial_x f' + \partial_y f' y'_k = \partial_{xx} f + (\partial_{xy} f) y'_k + [\partial_{yx} f + (\partial_{yy} f) y'_k] y'_k + \partial_y f y''_k \\ &\vdots \end{aligned}$$

por lo que reconstruimos la serie de Taylor hasta el orden que podamos o requiramos

$$y_{n+1} = y_n + h f(y_k, x_k) + \frac{1}{2!} h^2 f'(y_k, x_k) + \frac{1}{3!} h^3 f''(y_k, x_k) + \cdots + \frac{1}{n!} h^n f^{(n-1)}(y_k, x_k) + \cdots$$

quedando acotado el error por

$$\varepsilon_{red} = \frac{1}{(n+1)!} h^{n+1} f^{(n)}(y(\xi), x(\xi))$$

6.5. La idea de la Integración

La idea de integrar una ecuación diferencial ordinaria puede ilustrarse, formalmente de la siguiente forma

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} d\xi f(\xi, y(\xi))$$

entonces el método se centra en como se aproxima la función dentro de la integral

Euler

$$f(x_k, y_k)$$

Se aproxima la función con en el punto anterior

$$\Rightarrow y_{k+1} = y_k + h f(x_k, y_k)$$

Euler Mejorado o Heuns

$$\frac{1}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})]$$

Se aproxima la función mediante un promedio en los extremos

$$\Rightarrow y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_{k+1})]$$

$$\Rightarrow y_{k+1} = y_k + \frac{h}{2} [f(x_k, y_k) + f(x_{k+1}, y_k + h f(x_k, y_k))]$$

con $h = x_{i+1} - x_i$ el paso de integración. Nótese además que hemos utilizado Euler otra vez para expresar $y_{k+1} = y_{k+1}(y_k, x_k)$

El Método de Euler constituye una expansión por Taylor hasta primer orden por lo que el error es claramente de segundo orden por cuanto si comparamos con la expansión en series de Taylor correspondiente tendremos

$$y_{k+1} = y_k + h \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x=x_k} + \frac{h^2}{2!} \left. \frac{d^2y}{dx^2} \right|_{x=x_k} + \dots$$

$$\|\varepsilon_{tot}\| \propto \frac{h^2}{2!} \left. \frac{d^2y}{dx^2} \right|_{x=x_k}$$

6.6. El Método de Euler y el problema de Valores Iniciales

Este método si bien no se utiliza en la práctica en su forma estándar para ecuaciones diferenciales ordinarias, si ilustra el proceso de discretización de una ecuación diferencial y su solución mediante métodos numéricos.

Para resolver la ecuación de un oscilador armónico libre que parte del reposo, i.e.

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \omega_0^2\phi(t) = 0 \quad \text{con: } \omega_0^2 = \frac{k}{m}; \quad \phi(t_0) = 1; \quad \text{y} \quad \left. \frac{d\phi(t)}{dt} \right|_{t=t_0} = 0$$

en la cual $\phi(t)$ representa la posición de un cuerpo de masa m unido a un resorte de constante elástica k .

Discretizando mediante diferencia centrada

$$h = t_{i+1} - t_i; \quad \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} \approx \frac{1}{h^2} [\phi(t_{i+1}) - 2\phi(t_i) + \phi(t_{i-1})] \equiv \frac{1}{h^2} [\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}]$$

con lo cual la ecuación del oscilador libre queda como

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} + \omega_0^2\phi(t) = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_{i+1} - (2 - h^2\omega_0^2)\phi_i + \phi_{i-1} = 0$$

esta última ecuación es la versión en **diferencias finitas** de la ecuación diferencial y es claro que se convierte en una ecuación algebraica. Finalmente, los dos valores iniciales para la iteración ϕ_0 y ϕ_1 surgen de las condiciones iniciales

$$\phi_0 \equiv \phi(t = t_0) = 1$$

$$\left. \frac{d\phi(t)}{dt} \right|_{t=t_0} = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_1 \approx \phi_0$$

6.7. El Método de Euler y el Problema de los Valores de Frontera

Con la misma metodología podemos abordar el problema de valores de frontera para la ecuación que representa la variación de la presión $\phi(x)$ a lo largo de un tubo de longitud l

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \kappa^2\phi(x) = 0 \quad \text{con} \quad \phi_0 = \phi(x=0) = p \quad \text{y} \quad \phi_N = \phi(x=l) = p$$

esta vez discretizamos respecto a la variable espacial

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + \kappa^2\phi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_{i+1} - (2 - h^2\kappa^2)\phi_i + \phi_{i-1} = 0 \quad \text{con} \quad h = x_{i+1} - x_i$$

y armamos un sistema de ecuaciones algebraicas que debemos resolver, ahora no de forma iterativa, i.e.

$$\begin{aligned}
\phi_2 - (2 - h^2 \kappa^2) \phi_1 + p &= 0 \\
\phi_3 - (2 - h^2 \kappa^2) \phi_2 + \phi_1 &= 0 \\
\phi_4 - (2 - h^2 \kappa^2) \phi_3 + \phi_2 &= 0 \\
&\vdots = 0 \\
\phi_{N-1} - (2 - h^2 \kappa^2) \phi_{N-2} + \phi_{N-3} &= 0 \\
p - (2 - h^2 \kappa^2) \phi_{N-1} + \phi_{N-2} &= 0
\end{aligned}$$

que se convierte en notación matricial en

$$\begin{pmatrix} (2 - h^2 \kappa^2) & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 2 - h^2 \kappa^2 & 1 & \ddots & 0 \\ \vdots & 1 & \ddots & 1 & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & (2 - h^2 \kappa^2) & 1 \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & (2 - h^2 \kappa^2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \vdots \\ \phi_{N-2} \\ \phi_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -p \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -p \end{pmatrix}$$

al resolver el sistema tendremos el valor de la función en todas las posiciones:

$$\phi_0 = p; \phi_1 = \phi(x = h); \phi_2 = \phi(x = 2h); \cdots \cdots; \phi_{N-1} = \phi(x = (N - 1) h); \phi_N = p$$

6.8. Los Métodos de Runge-Kutta

Es el conjunto de métodos más populares y de mayor uso. La idea del método de Runge-Kutta es producir resultados equivalentes a desarrollos en Taylor de orden superior a Euler en métodos de un único paso por lo tanto

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{k+1} = y_k + \int_{x_k}^{x_{k+1}} d\xi f(\xi, y(\xi))$$

y se aproxima la función con un promedio ponderado.

$$f(\xi, y(\xi)) \approx [\alpha f(y_k, x_k) + \beta f(y_k + \delta f(y_k, x_k) h_k, x_k + \gamma h_k)] \quad \text{con} \quad h_k = x_{k+1} - x_k$$

donde α, β, γ y δ son los pesos estadísticos a ser determinados. Por lo tanto

$$y_{k+1} = y_k + [\alpha f(y_k, x_k) + \beta f(y_k + \delta f(y_k, x_k) h_k, x_k + \gamma h_k)] h_k$$

Expandiendo por Taylor de dos variables

$$g(x + \lambda, y + \mu) = g(x, y) + [\lambda \partial_x g + \mu \partial_y g] + \frac{1}{2!} [\lambda^2 \partial_x^2 g + 2\lambda\mu \partial_{xy} g + \mu^2 \partial_y^2 g] + \cdots$$

tendremos

$$\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k + [\alpha + \beta] f_k h_k + \beta [\gamma \partial_x f_k + \delta f_k \partial_y f_k] h_k^2 + \\
&+ \beta \left[\frac{\gamma^2}{2} \partial_x^2 f_k + 2\gamma\delta f_k \partial_{xy} f_k + \frac{\delta^2}{2} f_k^2 \partial_y^2 f_k \right] h_k^3 + \cdots
\end{aligned}$$

con $f_k = f(y_k, x_k)$ y como se ve claramente, queda libertad para escoger

Euler Mejorado o Heuns $\alpha = \beta = \frac{1}{2}; \quad \gamma = \delta = 1$

$$y_{k+1} = y_k + f_k h_k + \frac{1}{2} [\partial_x f_k + f_k \partial_y f_k] h_k^2$$

Euler Modificado $\alpha = 0; \quad \beta = 1; \quad \gamma = \delta = \frac{1}{2}$

$$y_{k+1} = y_k + f_k h_k + \left[\frac{1}{2} \partial_x f_k + \frac{1}{2} f_k \partial_y f_k \right] h_k^2$$

Runge-Kutta de cuarto orden aproxima la función $f(\xi, y(\xi))$ en cuatro puntos intermedios en el intervalo $x_k < x < x_{k+1}$ por lo cual

$$y_{k+1} = y_k + [\alpha \kappa_1 + \beta \kappa_2 + \gamma \kappa_3 + \delta \kappa_4] h_k$$

podemos plantearnos varias formas de hacerlo

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h_k}{6} [\kappa_1 + 2\kappa_2 + 2\kappa_3 + \kappa_4]$$

donde

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= f(x_k, y_k) \\ \kappa_2 &= f\left(x_k + \frac{1}{2}h_k, y_k + \frac{1}{2}\kappa_1\right) \\ \kappa_3 &= f\left(x_k + \frac{1}{2}h_k, y_k + \frac{1}{2}\kappa_2\right) \\ \kappa_4 &= f(x_k + h_k, y_k + \kappa_3) \end{aligned}$$

o también

$$y_{k+1} = y_k + \frac{h_k}{8} [\kappa_1 + 3\kappa_2 + 3\kappa_3 + \kappa_4]$$

donde

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= f(x_k, y_k) \\ \kappa_2 &= f\left(x_k + \frac{1}{3}h_k, y_k + \frac{1}{3}\kappa_1\right) \\ \kappa_3 &= f\left(x_k + \frac{1}{3}h_k, y_k + \frac{1}{3}\kappa_2\right) \\ \kappa_4 &= f(x_k + h_k, y_k + \kappa_3) \end{aligned}$$

Más aún el método de **Fehlberg de 4/5 orden** se puede escribir como

$$y_{k+1} = y_k + h_k [C_1\kappa_1 + C_2\kappa_2 + C_3\kappa_3 + C_4\kappa_4 + C_5\kappa_5 + C_6\kappa_6] + O(h^6)$$

$$\begin{aligned}
\kappa_1 &= f(x_k, y_k) \\
\kappa_2 &= f(x_k + a_2 h_k, y_k + b_{21} \kappa_1) \\
\kappa_3 &= f(x_k + a_3 h_k, y_k + b_{31} \kappa_1 + b_{32} \kappa_2) \\
\kappa_4 &= f(x_k + a_4 h_k, y_k + b_{41} \kappa_1 + b_{42} \kappa_2 + b_{43} \kappa_3) \\
&\vdots \\
\kappa_6 &= f(x_k + a_6 h_k, y_k + b_{61} \kappa_1 + b_{62} \kappa_2 + b_{63} \kappa_3 + b_{64} \kappa_4 + b_{65} \kappa_5)
\end{aligned}$$

la cual puede ser redefinida y truncada para obtener

$$\tilde{y}_{k+1} = y_k + h_k \left[\tilde{C}_1 \kappa_1 + \tilde{C}_2 \kappa_2 + \tilde{C}_3 \kappa_3 + \tilde{C}_4 \kappa_4 + \tilde{C}_5 \kappa_5 \right] + O(h^5)$$

7. Clase 7: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias, II

7.1. Métodos Multipaso

Los métodos multipaso se basan en encontrar el valor y_{n+k} como una función de k valores precedentes: $y_{n+k-1}, y_{n+k-2}, y_{n+k-3}, \dots, y_n$. Para $k = 1$, retomamos los métodos de paso único del tipo Euler o Runge-Kutta. Será *explícito* (*abierto*) si el valor y_{n+k} puede ser calculado directamente o *implícito* (*abierto*) si la fórmula contiene el valor y_{n+k} deseado.

Otra vez la idea está en aproximar el argumento de la integración formal

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y_{i+1} = y_i + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} d\xi f(\xi, y(\xi))$$

nótese en este caso que el punto $i + 1$ recibe la contribución de k puntos anteriores. El integrando $f(\xi, y(\xi))$ lo aproximaremos con un polinomio de interpolación de Newton de orden n . Tal que

$$f(\xi, y(\xi)) \rightarrow f(\xi) = p_n(\xi) + R_n(\xi)$$

con $p_n(\xi)$ el polinomio de interpolación y $R_n(\xi)$ el residuo. Donde

$$p_n(x) = f[x_n] + (x - x_n) f[x_n, x_{n-1}] + (x - x_n)(x - x_{n-1}) f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}] + \dots \\ + (x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) \dots (x - x_1) f[x_n, x_{n-1}, x_{n-2}, x_{n-3}, \dots, x_0]$$

$$R_n(x) = (x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) \dots (x - x_0) \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!} \quad \text{con } x_0 < \zeta < x_n$$

haciendo $p_n(x) \equiv f(x_n + \alpha h)$ con α cero o negativo de tal modo que en términos del operador diferencias atrasada $\nabla f(x) = f(x) - f(x - h)$ siendo h el incremento

$$f(x_n + \alpha h) = f_n + \alpha \nabla f_n + \frac{\alpha(\alpha+1)}{2!} \nabla^2 f_n + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{3!} \nabla^3 f_n + \\ + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2) \dots (\alpha+r-1)}{r!} \nabla^r f_n$$

donde hemos denotado $f_n \equiv f(x_n, y(x_n))$, $\nabla^m f_n \equiv \nabla^m f|_{x=x_n}$, y $\alpha = (x - x_i)/h$. Por lo tanto

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_{i-k}}^{x_{i+1}} d\xi f(\xi, y(\xi)) \\ = y_i + h \int_{-k}^1 d\alpha f(x_n + \alpha h) \\ y_{i+1} = y_i + h \left[\alpha f_i + \frac{\alpha^2}{2} \nabla f_i + \alpha^2 \left(\frac{\alpha}{3} + \frac{1}{2} \right) \frac{\nabla^2 f_i}{2!} + \alpha^2 \left(\frac{\alpha^2}{4} + \alpha + 1 \right) \frac{\nabla^3 f_i}{3!} + \right. \\ \left. + \alpha^2 \left(\frac{\alpha^3}{5} + \frac{3\alpha^2}{2} + \frac{11\alpha}{3} + 3 \right) \frac{\nabla^4 f_i}{4!} + \dots \right]_{-k}^1$$

por razones de conveniencia que son evidentes al hacer el desarrollo, se toman las fórmulas para $k = r$ y k impar y obtendremos

$$\begin{aligned}
\left. \begin{array}{l} k=0 \\ r=3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[f_i + \frac{1}{2} \nabla f_i + \frac{5}{12} \nabla^2 f_i + \frac{3}{8} \nabla^3 f_i \right] \\ R = \frac{251}{720} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
\left. \begin{array}{l} k=1 \\ r=1 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h [2f_i + 0 \nabla f_i] \\ R = \frac{1}{3} h^3 f^{(2)}(\zeta) \end{array} \right. \\
\left. \begin{array}{l} k=3 \\ r=3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[4f_i - 4 \nabla f_i + \frac{3}{8} \nabla^2 f_i + 0 \nabla^3 f_i \right] \\ R = \frac{14}{45} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
\left. \begin{array}{l} k=5 \\ r=5 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[6f_i - 12 \nabla f_i + 15 \nabla^2 f_i - 9 \nabla^3 f_i + \frac{33}{10} \nabla^4 f_i \right] \\ R = \frac{41}{140} h^7 f^{(6)}(\zeta) \end{array} \right.
\end{aligned}$$

y al expresar las diferencias atrasadas las fórmulas explícitas (abierta) quedan expresadas como

$$\begin{aligned}
\left. \begin{array}{l} k=0 \\ r=3 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}] & R \sim O(h^5) \\
\left. \begin{array}{l} k=1 \\ r=1 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + 2hf_i & R \sim O(h^3) \\
\left. \begin{array}{l} k=3 \\ r=3 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + \frac{4h}{3} [2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}] & R \sim O(h^5) \\
\left. \begin{array}{l} k=5 \\ r=5 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + \frac{3h}{10} [11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2} - 14f_{i-3} + 11f_{i-4}] & R \sim O(h^7)
\end{aligned}$$

Si siguiendo el mis procedimiento se pueden escribir las fórmulas implícitas (cerradas) para las mismas “curiosas” situaciones. Para este caso la conveniencia se obtienes para k impar y $r = k + 2$

$$\begin{aligned}
\left. \begin{array}{l} k=0 \\ r=3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_i + h \left[f_{i+1} - \frac{1}{2} \nabla f_{i+1} - \frac{1}{12} \nabla^2 f_{i+1} - \frac{1}{24} \nabla^3 f_{i+1} \right] \\ R = \frac{-19}{720} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
\left. \begin{array}{l} k=1 \\ r=3 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_{i-1} + h \left[2f_{i+1} - 2 \nabla f_i - \frac{1}{3} \nabla^2 f_{i+1} - 0 \nabla^3 f_{i+1} \right] \\ R = \frac{-1}{90} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right. \\
\left. \begin{array}{l} k=3 \\ r=5 \end{array} \right\} &\Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} y_{i+1} = y_{i-3} + h \left[4f_{i+1} - 8 \nabla f_i - \frac{20}{3} \nabla^2 f_{i+1} - \frac{8}{3} \nabla^3 f_{i+1} + \frac{14}{45} \nabla^4 f_{i+1} \right] \\ R = \frac{-8}{945} h^5 f^{(4)}(\zeta) \end{array} \right.
\end{aligned}$$

desarrollando las diferencias atrasadas, tendremos

$$\begin{aligned}
\left. \begin{array}{l} k=0 \\ r=3 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_{i-1} - 5f_{i-2} + 9f_{i-3}] & R \sim O(h^5) \\
\left. \begin{array}{l} k=1 \\ r=3 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [f_{i+1} + f_i + f_{i-1}] & R \sim O(h^5) \\
\left. \begin{array}{l} k=3 \\ r=5 \end{array} \right\} & y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} [7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3}] & R \sim O(h^7)
\end{aligned}$$

Se debe puntualizar lo siguiente respecto a las fórmulas explícitas e implícitas de los métodos multipaso antes mencionados

- Los métodos multipasos, normalmente, requieren menos evaluaciones de las funciones que los métodos monopaso para un mismo nivel de precisión.
- Los métodos multipaso requieren de un método monopaso que le permita determinar los y_{n+k-1} , y_{n+k-2} , y_{n+k-3} puntos iniciales.
- Las fórmulas explícitas son, normalmente, menos precisas que las implícitas. La razón se fundamenta en que, mientras las explícitas extrapolan la solución al punto y_{i+1} , las implícitas la interpolan, por cuanto la toman en cuenta en el momento de calcularla.
- Las fórmulas explícitas e implícitas deben ser consideradas como complementarias, por cuanto las explícitas pueden *predecir* el valor de y_{i+1} necesario para la $f_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1})$ del cálculo de y_{i+1}^* en la fórmula implícita.

Existen varias combinaciones *predictor-corrector*, entre ellas mencionamos:

Milne de cuarto orden

- Predictor

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{4h}{3} [2f_i - f_{i-1} + 2f_{i-2}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_{i-1} + \frac{h}{3} [f_{i+1} - 4f_i + f_{i-1}]$$

Milne de sexto orden

- Predictor

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3h}{10} [11f_i - 14f_{i-1} + 26f_{i-2} - 14f_{i-3} + 11f_{i-4}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} [7f_{i+1} + 32f_i + 12f_{i-1} + 32f_{i-2} + 7f_{i-3}]$$

Adams Modificado o Adams Moulton

- Predictor

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}]$$

El método de extrapolación multipaso más exitoso (conjuntamente con los métodos de paso único del tipo **Runge-Kutta**) es el de extrapolación racional de **Bulirsch-Stoer** en el cual se define un paso superior de H y una serie de subpaso $h_\eta = H/\eta$ con el aumento del número de subpasos, en algún momento siguiendo algún criterio de convergencia se hace una extrapolación (racional) que representa el límite $\eta \rightarrow \infty$.

El método de Bulirsch-Stoer tiene una estrategia diferente al los anteriores y posee, como motor de aproximación el método del punto medio modificado o salto de rana (*leap frog*). Este esquema se utiliza con frecuencia en discretizaciones de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales y se basa en aproximar la derivada por el valor el promedio en los dos extremos:

$$y'(x) = f(y(x), x) \Rightarrow y'(x_n) = f(y(x_n), x_n) = \frac{y(x_n) - y(x_{n-1}))}{2h}$$

por lo tanto

$$\begin{aligned} z_0 &\equiv y(x) \\ z_1 &= z_0 + hf(x, z_0) \\ &\vdots \\ z_{n+1} &= z_{n-1} - 2hf(x + nh, z_n) \end{aligned}$$

para finalmente calcular

$$y(x + H) \approx y_n \equiv \frac{1}{2} [z_n + z_{n-1} + hf(x + H, z_n)]$$

Nótese que si reacomodamos

$$y(x + H) \approx \frac{4y_n - y_{n/2}}{3}$$

obtendremos un método de cuarto orden que requiere menos evaluaciones de $f(y(x_n), x_n)$ por paso h

7.2. Control del Paso

En General para métodos de 4^{to} orden. Tal y como se mencionó en el caso de la integración numérica, el primer criterio que surge es dividir el paso h en la mitad, calcular todo de nuevo y comparar los resultados a ver si está dentro de los límites de tolerancia que nos hemos impuesto

$$\begin{aligned} \left\| \frac{y_h - y_{h/2}}{y_h} \right\| &\equiv \Delta(y_h, y_{h/2}) < \varepsilon_{\text{máx}} \Rightarrow \\ \frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_{h/2})} &\approx \left(\frac{h_0}{h_t} \right)^5 \Rightarrow h_0 = h_t \left(\frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_{h/2})} \right)^{1/5} \end{aligned}$$

donde hemos denotado h_0 como el paso ideal. Esta relación es general para cualquier método de 4 orden de paso único, multipaso, implícito o explícito.

Más aún, la práctica ha indicado que

$$h_0 = \begin{cases} \mathcal{M}h_t \left(\frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_h^*)} \right)^{0,20} \equiv \mathcal{M}h_t \left(\frac{\Delta_0}{\Delta_h} \right)^{0,20} & \Delta_0 \geq \Delta_1 \\ \mathcal{M}h_t \left(\frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, y_h^*)} \right)^{0,25} \equiv \mathcal{M}h_t \left(\frac{\Delta_0}{\Delta_h} \right)^{0,25} & \Delta_0 < \Delta_1 \end{cases}$$

donde $0 < \mathcal{M} < 1$ un factor de seguridad

Para métodos Runge-Kutta. es importante mencionar que se utilizan mayoritariamente métodos hasta cuarto orden porque de mayor orden (M , por ejemplo) involucran más de M evaluaciones (y menos $M - 2$) de la derivada. Por ello para este tipo de métodos se descubrió que considerando el mismo número de puntos para la evaluación intermedia se pueden generar métodos de distinto orden, y para colmo de suerte el menor orden de esta situación se expresa para métodos de 4 y 5 orden. En particular Runge-Kutta de 5 orden se puede escribir como:

$$y_{k+1} = y_k + h_k [C_1\kappa_1 + C_2\kappa_2 + C_3\kappa_3 + C_4\kappa_4 + C_5\kappa_5 + C_6\kappa_6] + O(h^6)$$

$$\begin{aligned}\kappa_1 &= f(x_k, y_k) \\ \kappa_2 &= f(x_k + a_2h_k, y_k + b_{21}\kappa_1) \\ \kappa_3 &= f(x_k + a_3h_k, y_k + b_{31}\kappa_1 + b_{32}\kappa_2) \\ \kappa_4 &= f(x_k + a_4h_k, y_k + b_{41}\kappa_1 + b_{42}\kappa_2 + b_{43}\kappa_3) \\ &\vdots \\ \kappa_6 &= f(x_k + a_6h_k, y_k + b_{61}\kappa_1 + b_{62}\kappa_2 + b_{63}\kappa_3 + b_{64}\kappa_4 + b_{65}\kappa_5)\end{aligned}$$

y con los mismos puntos (¡ las mismas evaluaciones !) se puede reescribir para 4 orden como:

$$\tilde{y}_{k+1} = y_k + h_k [\tilde{C}_1\kappa_1 + \tilde{C}_2\kappa_2 + \tilde{C}_3\kappa_3 + \tilde{C}_4\kappa_4 + \tilde{C}_5\kappa_5] + O(h^5)$$

por lo tanto el error se puede estimar

$$\Delta(y_{k+1}, \tilde{y}_{k+1}) = \sum_{i=1}^6 (C_i - \tilde{C}_i) \kappa_i$$

y el control del paso se utiliza exactamente igual

$$h_0 = h_t \left(\frac{\varepsilon_{\text{máx}}}{\Delta(y_h, \tilde{y}_h)} \right)^{0,20}$$

Para métodos multipasos y predictor corrector la situación puede tener un refinamiento adicional antes de proceder a modificar el paso h . El esquema sería para un método predictor corrector del tipo Adams Modificado o Adams Moulton, donde el

- Predictor

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}]$$

- Corrector

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} [9f_{i+1} + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}]$$

se realiza una serie de iteraciones dentro de la fórmula de corrector, i.e.

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} \left[9f \left(x_{i+1}, y_{i+1} \right) + 19f(x_i, y_i) - 5f(x_{i-1}, y_{i-1}) + f(x_{i-2}, y_{i-2}) \right]$$

8. Clase 8: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias, III

8.1. El problema de valores de frontera....

Se requiere resolver un sistema de N ecuaciones diferenciales ordinarias, acopladas y de primer orden, las cuales satisfacen n_a condiciones en el punto inicial, x_a , del intervalo de integración y las restantes $n_b = N - n_a$ condiciones son satisfechas en x_b , el otro extremo del intervalo. Esto es

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = g_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} B_{aj}(x_a, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0 & \begin{cases} i = 1, 2, 3, \dots, N \\ j = 1, 2, 3, \dots, n_a \end{cases} \\ B_{bk}(x_b, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0 & k = 1, 2, 3, \dots, n_b \end{cases}$$

Recordamos que esta afirmación también compete a una ecuación diferencial de orden N , por cuanto son equivalentes.

Hay dos situaciones que pueden ser resueltas expresándolas como un problema de valores de contorno. Una de ellas es aquella en la cual existen M parámetros en el sistema de ecuaciones diferenciales. Este es *el problema de autovalores* para una ecuación diferencial....

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = g_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M) \quad \text{con} \quad i = 1, 2, 3, \dots, N$$

En este caso definimos

$$y_{N+\alpha} \equiv \lambda_\alpha \quad \wedge \quad \frac{dy_{N+\alpha}(x)}{dx} = 0 \quad \text{con} \quad \alpha = 1, 2, \dots, M$$

y resolvemos el sistema de dimensión $N + M$.

La segunda situación es aquella en la cual uno de los extremos de integración no fue especificado y se requiere que el sistema de ecuaciones diferenciales satisfaga $N + 1$ condiciones de frontera. En ese caso, añadimos una función incógnita adicional,

$$y_{N+1} \equiv x_b - x_a \quad \text{con} \quad \frac{dy_{N+1}(x)}{dx} = 0$$

y hacemos un cambio de variable

$$x - x_a \rightarrow t \quad \text{con} \quad t \in [0, 1]$$

8.2. Estrategias de Solución

Existen dos estrategias de solución numérica al problema de valores de frontera y cada una de ellas tiene algunas variantes: los Métodos de Disparo (*shooting*) y los Métodos de Relajación.

La familia de métodos de disparo se fundamentan en:

- la elección de todas las condiciones sobre la frontera inicial, unas dadas por el problema y las restantes son provistas con algún tipo de intuición
- la integración de la ecuación diferencial como si fuera un problema de valores iniciales y
- el ajuste con las condiciones sobre la otra frontera con las condiciones dadas en el problema,

- en base a ese ajuste se corrigen las condiciones iniciales intuídas por algún mecanismo iterativo. Existe una variante sobre esta estrategia como lo es la integración desde ambas fronteras hasta un punto intermedio del intervalo

Los Métodos de Relajación se basan en discretizar el intervalo y en reemplazar la ecuación diferencial resolver con su representación en diferencias finitas. Una intuición inicial sobre el valor de la función en cada uno de los puntos de la malla es corregida iterativamente para que se adapte a las condiciones de borde.

Cada uno de los métodos de adapta mejor a situaciones particulares. Los primeros son recomendados siempre como primera opción para cualquier tipo de función incógnita.. Los segundos, a pesar de lucir muy complicados y costosos se adaptan sorprendentemente bien para situaciones en las cuales se tienen funciones suaves, bien comportadas y no oscilantes. De hecho, para este tipo de funciones los métodos de relajación son más eficientes que los de disparo. Sin embargo cuando no se pueda intuir el comportamiento de la función se recomienda probar con algún esquema de solución tipo disparo y luego se procede a optimizar mediante esquemas de relajación.

8.3. Disparos a un intervalo

El algoritmo que se mencionó anteriormente para implantar el método típico de disparo recuerda (y es) el método de Newton-Rapson para resolver un sistema de ecuaciones algebraicas. Buscamos n_b funciones de n_b variables que integran el sistema de ecuaciones diferenciales entre x_a y x_b . Formalicemos un poco el algoritmo para resolver

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = g_i(x, y_1, y_2, \dots, y_N) \quad \text{con} \quad \begin{cases} B_{aj}(x_a, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0 \\ B_{bk}(x_b, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0 \end{cases} \quad \text{para} \quad \begin{cases} i = 1, 2, 3, \dots, N \\ j = 1, 2, 3, \dots, n_a \\ k = 1, 2, 3, \dots, n_b \end{cases}$$

para $x \in [x_a, x_b]$

Se procede así

- Se proveen ***todas*** las condiciones (iniciales) en x_a . Esto es

$$B_{aj}(x_a, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0 \quad \Rightarrow \quad y_i(x_a) = y_i(x_a, V_1, V_2, \dots, V_{n_b}) \quad \text{con} \quad i = 1, 2, 3, \dots, N$$

Donde \mathbf{V} es un vector de dimensión n_b correspondiente a las condiciones iniciales faltantes en x_a . Entonces dado un vector de condiciones iniciales faltantes se obtiene (a través de un conjunto de relaciones algebraicas provistas por $B_{aj}(x_a, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0$) el vector de condiciones iniciales $\mathbf{y}|_{x=x_a}$

- Se integra el sistema de ecuaciones diferenciales como si fuera un problema de valores iniciales
- Se compara el valor de la función al final de la integración, $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{y}|_{x=x_b}$, con las condiciones $B_{bk}(x_b, y_1, y_2, \dots, y_N) = 0$. Es decir se construye un vector diferencia

$$F_k = B_{bk}(x_b, \tilde{y}_1, \tilde{y}_2, \dots, \tilde{y}_N)$$

- Se corrige con algún mecanismo iterativo las condiciones iniciales intuídas. Así,

$$\mathbf{V}^{\text{próximo}} = \mathbf{V}^{\text{anterior}} + \delta \mathbf{V} \quad \Rightarrow \quad y_i^{\text{próximo}}(x_a) = y_i(x_a, \mathbf{V}^{\text{anterior}} + \delta \mathbf{V})$$

y para encontrar el valor de $\delta \mathbf{V}$ procedemos notamos que en el caso del algoritmo de Newton Rapson para encontrar β raíces α_η que anulen el sistema de ecuaciones algebraico

$$P_l(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_\beta) = 0 \quad \text{con} \quad l = 1, 2, 3, \dots, \beta$$

Taylor viene al rescate proveyendo

$$P_l(\alpha^{\text{anterior}} + \delta \alpha) = P_l(\alpha^{\text{anterior}}) + \sum_{m=1}^{\beta} \frac{\partial P_l}{\partial \alpha_m} \delta \alpha_m + O(\delta \alpha^2) \quad \text{con} \quad l = 1, 2, 3, \dots, \beta$$

$$\mathbf{P}(\alpha^{\text{anterior}} + \delta \alpha) = \mathbf{P}(\alpha^{\text{anterior}}) + \mathbf{J} \bullet \delta \alpha + O(\delta \alpha^2) \Rightarrow \mathbf{P}(\alpha^{\text{anterior}}) = -\mathbf{J} \bullet \delta \alpha$$

con $\mathbf{J} \longleftrightarrow J_{lm} = \frac{\partial P_l}{\partial \alpha_m}$, y para lo cual hemos despreciado $O(\delta \alpha^2)$ e impuesto (hasta el grado de precisión deseado) $\mathbf{P}(\alpha^{\text{anterior}} + \delta \alpha) = 0$. Por lo tanto, tendremos un sistema de ecuaciones algebraico que con β incógnitas $\delta \alpha_l$ las cuales se despejan mediante técnicas matriciales y se procede iterativamente según el esquema $\alpha^{\text{próximo}} = \alpha^{\text{anterior}} + \delta \alpha$ hasta lograr alguna convergencia.

Hacemos entonces el paralelo con la presentación anterior, de tal forma que

$$F_k = B_{bk}(x_b, \tilde{\mathbf{y}}) \Rightarrow \mathbf{F}(x_b, E[\mathbf{V}^{\text{anterior}}]) = -\mathbf{J} \bullet \delta \mathbf{V}$$

$$\mathbf{J} \longleftrightarrow J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \approx \frac{F_i(x_b, E[\mathbf{V}^{\text{anterior}} + \Delta \mathbf{V}]) - F_i(x_b, E[\mathbf{V}^{\text{anterior}}])}{\Delta \mathbf{V}}$$

Donde $E[\bullet]$ indica la ecuación diferencial (representada por un operador de evolución) que propaga los valores iniciales $\mathbf{V}^{\text{anterior}}$ a la solución de la ecuación diferencial $\tilde{\mathbf{y}}$, en x_b .

- **Disgresión del método de Newton Rapson multidimensional...**

No hay un método eficaz para encontrar raíces simultáneas de más de una ecuación no lineal. De hecho el único método medianamente efectivo es el de Newton-Rapson y aún así no converge sin una intuición inicial muy eficaz de la raíz.

8.4. Disparos a medio intervalo

Otra de las estrategias que puede ser implantada como variante de los métodos de disparo es disparar simultáneamente hacia un punto medio desde los extremos del intervalo de integración, vale decir a un punto x_m entre x_a y x_b . Por lo cual

$$\left[\begin{array}{cc} n_a & \text{condiciones de borde} \\ n_b & \text{condiciones libres} \end{array} \Rightarrow \mathbf{V}_{n_b} \quad [x_a \rightarrow x_m \leftarrow x_b] \quad \begin{array}{cc} n_a & \text{condiciones libres} \Rightarrow \mathbf{V}_{n_a} \\ n_b & \text{condiciones de borde} \end{array} \right]$$

entonces

$$\left. \begin{aligned} B_{aj}(x_a, \mathbf{y}) = 0 &\Rightarrow y_i(x_a) = y_i(x_a, \mathbf{V}_{n_b}) \\ B_{bk}(x_b, \mathbf{y}) = 0 &\Rightarrow y_i(x_b) = y_i(x_b, \mathbf{V}_{n_a}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow y_i(x_m, E[\mathbf{V}_{n_b}]) = y_i(x_m, E[\mathbf{V}_{n_a}])$$

o lo que es lo mismo

$$y_i(x_m, E[\mathbf{V}_{n_b}]) = y_i(x_m, E[\mathbf{V}_{n_a}]) \Leftrightarrow \mathbf{F}(x_a, E[\mathbf{V}_{n_b}]) = \mathbf{F}(x_b, E[\mathbf{V}_{n_a}])$$

8.5. Métodos de Relajación

Trataremos de mostrar, a través de un ejemplo la utilización de los métodos de relajación. En general las ecuaciones que más necesitamos resolver son de segundo grado. Partiremos de un tipo muy particular pero los métodos no ser restringen a ella. Tendremos, entonces que

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + g(x)\phi(x) = 0$$

en un intervalo $[x_0, x_n]$ y sujetas a dos condiciones de borde $\phi(x_0) = \alpha_0 \wedge \phi(x_N) = \alpha_N$. Estas ecuaciones se traducen a diferencias finitas, en algunas de sus variantes, como...

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + g(x)\phi(x) = 0 \rightarrow \frac{1}{h^2} \{ \phi(x_{k+1}) - 2\phi(x_k) + \phi(x_{k-1}) \} + g(x_k)\phi(x_k) = 0$$

en la cual hemos supuesto un paso $h = x_k - x_{k-1}$, constante (eso se puede remediar con un paso variable controlado con algún criterio). Pero, si los intervalos no son igualmente espaciados podría pensarse en cosas como éstas

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} \rightarrow \frac{1}{h_{k+1}h_k(h_{k+1} + h_k)} \{ h_k\phi(x_{k+1}) - (h_{k+1} + h_k)\phi(x_k) + h_{k+1}\phi(x_{k-1}) \}$$

sin embargo, nos mantendremos en un paso h constante. Así, podemos, armar el siguiente sistema...

$$\begin{aligned} \phi(x_0) &= \alpha_0 \\ \{ \phi(x_{k+1}) - 2\phi(x_k) + \phi(x_{k-1}) \} + h^2 g(x_k)\phi(x_k) &= 0 \quad k = 1, 2, \dots, (N-1) \\ \phi(x_N) &= \alpha_N \end{aligned}$$

que no es otra cosa que una relación $\mathbf{A} \bullet \mathbf{Y} = \mathbf{b}$ donde

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & \eta_1 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & \eta_2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & -1 & \eta_{N-1} & -1 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{Y} = \begin{pmatrix} \phi(x_0) \\ \phi(x_1) \\ \phi(x_2) \\ \vdots \\ \phi(x_{N-1}) \\ \phi(x_N) \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_N \end{pmatrix}$$

con $\eta_k = (2 - h^2 g(x_k))$

Hay más de una forma de resolver este problema de forma eficiente. Mostraremos varias de ellas y todas están fundamentadas en iteraciones. Conceptualmente si planteamos un problema pedagógico (inútil) dividiendo en cuatro puntos el intervalo de integración podemos resumir el sistema en

$$\left. \begin{aligned} A_{11} Y_1 + A_{12} Y_2 + A_{13} Y_3 + A_{14} Y_4 &= b_1 \\ A_{21} Y_1 + A_{22} Y_2 + A_{23} Y_3 + A_{24} Y_4 &= b_2 \\ A_{31} Y_1 + A_{32} Y_2 + A_{33} Y_3 + A_{34} Y_4 &= b_3 \\ A_{41} Y_1 + A_{42} Y_2 + A_{43} Y_3 + A_{44} Y_4 &= b_4 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \sum_{k=1}^4 A_{jk} Y_k = b_j \quad j = 1 \cdots 4$$

más aún se puede despear y armar una iteración con \mathbf{Y} de la forma

$$\begin{aligned} Y_1^{(i+1)} &= \frac{1}{A_{11}} \left\{ b_1 - A_{12} Y_2^{(i)} - A_{13} Y_3^{(i)} - A_{14} Y_4^{(i)} \right\} \\ Y_2^{(i+1)} &= \frac{1}{A_{21}} \left\{ b_2 - A_{22} Y_2^{(i)} - A_{23} Y_3^{(i)} - A_{24} Y_4^{(i)} \right\} \\ Y_3^{(i+1)} &= \frac{1}{A_{33}} \left\{ b_3 - A_{32} Y_2^{(i)} - A_{33} Y_3^{(i)} - A_{34} Y_4^{(i)} \right\} \\ Y_4^{(i+1)} &= \frac{1}{A_{44}} \left\{ b_4 - A_{42} Y_2^{(i)} - A_{43} Y_3^{(i)} - A_{44} Y_4^{(i)} \right\} \end{aligned}$$

o más conciso y general, conocido como el método de Jacobi

$$Y_j^{(i+1)} = \frac{1}{A_{jj}} \left\{ b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} Y_k^{(i)} - \sum_{k=j+1}^N A_{jk} Y_k^{(i)} \right\}$$

Aquí el libre albedrío y la creatividad se impone. Podemos mencionar algunas estrategias intuitivas para controlar el paso y evaluar la convergencia. Entre ellas

$$\begin{aligned} |Y_j^{(i+1)} - Y_j^{(i)}| &\leq \epsilon \\ \sqrt{(Y_j^{(i+1)})^2 - (Y_j^{(i)})^2} &\leq \epsilon \\ \max |Y_j^{(i+1)} - Y_j^{(i)}| &\leq \epsilon \end{aligned}$$

Además del método de Jacobi varias estrategias se han planteado para hacer más eficiente la iteración. Mencionamos, Gauss-Seidel

$$Y_j^{(i+1)} = \frac{1}{A_{jj}} \left\{ b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} Y_k^{(i+1)} - \sum_{k=j+1}^N A_{jk} Y_k^{(i)} \right\}$$

más aún, podemos controlar la convergencia con un parámetro artificial ϖ de tal modo que

$$Y_j^{(i+1)} = \frac{\varpi}{A_{jj}} \left\{ b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} Y_k^{(i+1)} - \sum_{k=j+1}^N A_{jk} Y_k^{(i)} \right\}$$

de tal modo que

$$\begin{aligned}\varpi < 1 &\Rightarrow \text{subrelajaci3n} \\ \varpi = 1 &\Rightarrow \text{Gauss} - \text{Seidel} \\ \varpi > 1 &\Rightarrow \text{sobrerelajaci3n}\end{aligned}$$

en particular se recomienda , $1 < \varpi < 2$

De aqu3 podemos despejar un criterio de error para garantizar la convergencia restando $.Y_j^{(i)}$ a ambos miembros

$$\varepsilon_j^{(i+1)} \approx \Delta Y_j^{(i+1)} = Y_j^{(i+1)} - Y_j^{(i)} = \frac{1}{A_{jj}} \left\{ b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} Y_k^{(i+1)} - \sum_{k=j}^N A_{jk} Y_k^{(i)} \right\}$$

9. Clase 9: Ecuaciones Diferenciales en Derivadas Parciales

9.1. Clasificación

Tal y como mencionamos con anterioridad, las ecuaciones diferenciales, de segundo orden en derivadas parciales del tipo

$$p \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + q \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} + r \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + s \frac{\partial \phi}{\partial x} + t \frac{\partial \phi}{\partial y} + u \phi + v = 0$$

pueden clasificarse en

$$\begin{array}{ll} \text{Elípticas} & \Rightarrow q^2 < 4pr \\ \text{Parabólicas} & \Rightarrow q^2 = 4pr \\ \text{Hiperbólicas} & \Rightarrow q^2 > 4pr \end{array}$$

y también en

$$\text{lineales si } \left\{ \begin{array}{l} p = p(x, y) \\ q = q(x, y) \\ r = r(x, y) \\ s = s(x, y) \\ t = t(x, y) \\ u = u(x, y) \\ v = v(x, y) \end{array} \right. \quad \text{o no lineales si } \left\{ \begin{array}{l} p = p(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ q = q(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ r = r(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ s = s(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ t = t(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ u = u(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \\ v = v(x, y, \partial_x \phi, \partial_y \phi, \partial_{xy} \phi, \partial_y^2 \phi, \partial_x^2 \phi) \end{array} \right.$$

Los casos prototípicos de ecuaciones lineales en derivadas parciales son los siguientes:

$$\nabla^2 \phi(x, y) = \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial y^2} = \rho(x, y) \quad \left\{ \begin{array}{ll} \text{Ecuación de Poisson} & \rho(x, y) \neq 0 \\ \text{Ecuación de Laplace} & \rho(x, y) = 0 \end{array} \right. \quad \text{Elíptica}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D} \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \right) = \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} \quad \text{Ecuación del Calor} \quad \text{Parabólica}$$

$$\frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial t^2} \quad \text{Ecuación de Onda} \quad \text{Hiperbólica}$$

9.2. El método de separación de variables

Dada una ecuación diferencial, digamos de Laplace

$$\nabla^2 \phi(x, y) = \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial y^2} = \phi_{xx} + \phi_{yy} = 0$$

el método estándar desde los tiempos de d'Alembert, D. Bernoulli y Euler es suponer una solución del tipo $\phi(x, y) = X(x)Y(y)$ esto conlleva

$$\phi_{xx} + \phi_{yy} = 0 \quad \Rightarrow X_{xx}Y + XY_{yy} = 0 \quad \Rightarrow \frac{X_{xx}}{X} = \lambda = -\frac{Y_{yy}}{Y} \quad \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \lambda > 0 \\ \lambda = 0 \\ \lambda < 0 \end{array} \right.$$

por lo cual

$$\begin{aligned}\lambda > 0 &\Rightarrow \begin{cases} X(x) = C_1 \sinh \sqrt{-\lambda}x + C_2 \cosh \sqrt{-\lambda}x \\ Y(y) = \tilde{C}_1 \sin \sqrt{\lambda}y + \tilde{C}_2 \cos \sqrt{\lambda}y \end{cases} \\ \lambda = 0 &\Rightarrow \begin{cases} X(x) = C_1 x + C_2 \\ Y(y) = \tilde{C}_1 y + \tilde{C}_2 \end{cases} \\ \lambda < 0 &\Rightarrow \begin{cases} X(x) = C_1 \sin \sqrt{-\lambda}x + C_2 \cos \sqrt{-\lambda}x \\ Y(y) = \tilde{C}_1 \sinh \sqrt{\lambda}y + \tilde{C}_2 \cosh \sqrt{\lambda}y \end{cases}\end{aligned}$$

ahora bien la suposición $\phi(x, y) = X(x)Y(y)$ limita el espacio de soluciones y no necesariamente representa la forma general de la solución.

9.3. Clasificación y Computación

Si bien la clasificación arriba expuesta es heredada del terreno analítico, desde el punto de vista computacional se establecen diferencias cualitativas entre dos grupos: las ecuaciones Parabólicas e Hiperbólicas, por un lado y las ecuaciones Elípticas por otro.

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D} \frac{\partial \phi(x,t)}{\partial x} \right) = \frac{\partial \phi(x,t)}{\partial t} \\ \text{Parabólica} \\ \frac{\partial^2 \phi(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \phi(x,t)}{\partial t^2} \\ \text{Hiperbólica} \end{array} \right\} \quad \text{vs} \quad \left\{ \begin{array}{l} \nabla^2 \phi(x, y) = \frac{\partial^2 \phi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x,y)}{\partial y^2} = \rho(x, y) \\ \text{Elíptica} \end{array} \right.$$

En el primer caso, las ecuaciones describen la evolución de la función $\phi(x, t)$ y por lo tanto se mezclan los problemas de valores de frontera con los de valores iniciales mientras que en el segundo la solución, $\phi(x, y)$, es puramente estática (problema de valores de frontera)

La *estabilidad* de los algoritmos que involucran la solución de las ecuaciones parabólicas e hiperbólicas es preocupación principal en el primer caso, mientras que la *eficiencia computacional* en el manejo de memoria (carga o tamaño del problema), conjuntamente con la capacidad de almacenamiento, son los problemas centrales en la implantación de métodos para atacar problemas de ecuaciones elípticas. Este tipo de problema se transforma normalmente en la solución de grandes problemas de solución se sistemas algebraicos de ecuaciones, los cuales involucran significativos problemas matriciales.

Existen toda una fauna de métodos para resolver este tipo de problemas. Entre ellos podemos mencionar

- *Diferencias Finitas*. Aquellos que hemos de tratar con algún detalle
- *Elementos Finitos*. Útiles en mecánica de sólidos y problemas de ingeniería estructural donde la geometría es altamente irregular. En estos métodos el espacio es dividido en sectores (elementos) y en ellos la solución es aproximada por funciones elementales caracterizadas por pocos parámetros.
- *Métodos Espectrales*. Eficaces cuando la geometría es simple y convergen rápidamente.

9.4. A manera de ejemplo

Consideraremos para comenzar la solución del problema de valores de contorno basado en el método de diferencias finitas. Así la solución a la ecuación de Poisson

$$\frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(x, y)}{\partial y^2} = -\rho(x, y) \quad \text{con } \phi(x = \pm \mathcal{L}, y) = \phi(x, y = \pm \mathcal{L}) = \phi_0$$

representa el potencial electrostático, $\phi(x, y)$, generado por una distribución longitudinal infinita de carga $\rho(x, y)$. Geométricamente el problema está dado por un hilo cargado alineado con el eje z que genera un potencial sobre una geometría rectangular de lado $2\mathcal{L}$. Por simplicidad hemos supondremos, adicionalmente $\phi_0 = 0$. Las condiciones de Frontera categorizan este problema como de tipo Dirichlet (los valores de la función están dados sobre la frontera). De igual modo pudieron haber sido provistos los valores de las derivadas $\partial_x \phi(x, y)|_{x=\pm \mathcal{L}} = A_0$; $\partial_y \phi(x, y)|_{y=\pm \mathcal{L}} = B_0$ (Problema de Neuman) o un problema mixto.

La versión de diferencias finitas del problema anterior es

$$\frac{\phi_{i+1, j} - 2\phi_{i, j} + \phi_{i-1, j}}{(\Delta x)^2} + \frac{\phi_{i, j+1} - 2\phi_{i, j} + \phi_{i, j-1}}{(\Delta y)^2} = -\rho_{i, j} \quad \text{donde } \begin{cases} \phi_{i, j} \equiv \phi(x_i, y_j) \\ \rho_{i, j} \equiv \rho(x_i, y_j) \\ \Delta x \equiv x_{i+1} - x_i \\ \Delta y \equiv y_{j+1} - y_j \end{cases}$$

más aún, si $\Delta x = \Delta y = h$ entonces

$$\phi_{i+1, j} + \phi_{i-1, j} + \phi_{i, j+1} - 4\phi_{i, j} + \phi_{i, j-1} = -h^2 \rho_{i, j}$$

por lo cual, siguiendo el esquema Jacobi para los métodos de relajación

$$\phi_{i, j}^{(n+1)} = \frac{1}{4} \left\{ \phi_{i+1, j}^{(n)} + \phi_{i-1, j}^{(n)} + \phi_{i, j+1}^{(n)} + \phi_{i, j-1}^{(n)} + h^2 \rho_{i, j} \right\}$$

o equivalentemente Gauss Seidel

$$\phi_{i, j}^{(n+1)} = \phi_{i, j}^{(n)} - \frac{\varpi}{4} \left\{ \phi_{i+1, j}^{(n)} + \phi_{i-1, j}^{(n+1)} - \phi_{i, j}^{(n)} + \phi_{i, j+1}^{(n)} + \phi_{i, j-1}^{(n+1)} + h^2 \rho_{i, j} \right\}$$

para $\varpi < 1$ subrelajación, $\varpi = 1$ Gauss-Seidel o $\varpi > 1$ sobrerrelajación

9.5. Problema de Valores iniciales con conservación de Flujo

Un conjunto numeroso de problemas de valores iniciales puede plantearse en término de ecuaciones del tipo

$$\frac{\partial \Phi}{\partial t} = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x}$$

donde Φ y \mathbf{F} son vectores. Por su parte \mathbf{F} puede depender de Φ , de sus derivadas o de ambas.

Así, la ecuación (hiperbólica) de onda

$$\frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \phi(x, t)}{\partial x^2} \Rightarrow \begin{cases} \frac{\partial \chi}{\partial t} = v \frac{\partial \psi}{\partial x} \\ \frac{\partial \psi}{\partial t} = v \frac{\partial \chi}{\partial x} \end{cases} \quad \text{con } \begin{cases} \chi \equiv v \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \\ \psi \equiv v \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} \end{cases}$$

y la ecuación (parabólica) de difusión

$$\frac{\partial \phi(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D} \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x} \right) \Rightarrow F = \mathcal{D} \frac{\partial \phi(x, t)}{\partial x}$$