

Tema 1. Cálculo Numérico

Ampliación de Matemáticas

Grado en Ingeniería en Telemática
Grado en Ingeniería en Informática en Tecnologías de la Información

J.L. Bravo

Curso 2016-2017

Introducción al Cálculo Numérico

Introducción

Cálculo Numérico: describir, analizar y desarrollar algoritmos numéricos que permitan solucionar problemas matemáticos en los cuales están involucradas cantidades numéricas.

Se aplica cuando:

- El problema no posee solución analítica (como $\int_0^\pi \sqrt{1 + \cos(x)^2} dx$)
- El procedimiento para hallar la solución es excesivamente complicado
- O excesivamente costoso

Veremos cómo resolver numéricamente ecuaciones, sistemas de ecuaciones, cálculo de extremos, integrales, ...

También estudiaremos cómo interpolar datos, es decir, a partir de valores en puntos conocidos, obtener una función (simple) que tenga esos mismos valores.

Error

- **Error:** toda aproximación a de un valor real r lleva asociada un error.
 - ▶ **Error absoluto:** $E = r - a$
 - ▶ **Error relativo:** $e = \frac{E}{r}$ (interpretable en %)
- **Cifras significativas:** Consideremos un número real r . Se denomina primera cifra significativa a la primera cifra no nula, comenzando por la izquierda. La segunda cifra significativa es la cifra a la derecha de la primera y así sucesivamente.

Por ejemplo, la primera cifra significativa de 00123,45 es el 1 y está en la posición de las centenas. La segunda cifra es el 2, etc.

Error

Cifras significativas.

Decimos que una aproximación a de un valor real r tiene n **cifras significativas** si el error absoluto es 0 al menos hasta la posición de la n -ésima cifra significativa de r y el valor de la cifra del error en la posición de la $n + 1$ -ésima cifra significativa de r es menor que 5.

Si el número r se escribe en notación científica como $\pm r_1, \dots \cdot 10^p$, tiene n cifras significativas si

$$|r - a| < 5 \cdot 10^{p-n}$$

Ej: 1.234 es una aproximación con tres cifras significativas de 1.233 y de cuatro cifras significativas de 1.2339.

Ejemplos

Medimos una carretera de $r_1 = 123kms$ y nuestra medida es $a_1 = 123,6kms$.

Error absoluto: $E_1 = 123 - 123,6 = -0,6kms$.

Error relativo: $e_1 = (123 - 123,6)/123 = -0,0049$.

Cifras significativas: 2

Ejemplos

Medimos una carretera de $r_1 = 123kms$ y nuestra medida es $a_1 = 123,6kms$.

Error absoluto: $E_1 = 123 - 123,6 = -0,6kms$.

Error relativo: $e_1 = (123 - 123,6)/123 = -0,0049$.

Cifras significativas: 2

Medimos el río Amazonas ($r_2 = 6437kms$) y obtenemos $a_2 = 6436kms$.

Error absoluto: $E_2 = 6437 - 6436 = 1kms$.

Error relativo: $e_2 = 6437 - 6436 = 1,5535 \cdot 10^{-4}$.

Cifras significativas: 3

Fuentes de error

- (E1) Error humano. Son aquellos que se producen por ejemplo, por errores en operaciones, transcripción de datos, o al programar.
- (E2) Error en el modelado. Los modelos matemáticos que se utilizar para modelar el mundo físico no son siempre exactos.
- (E3) Error de medición. Debido al margen de error de los aparatos de medición.
- (E4) Error por la aritmética de coma flotante.
- (E5) Error de aproximación matemática.

Aritmética de coma flotante en Doble Precisión

Un número real en notación científica se escribe como $\pm m \cdot 10^a$, donde $1 \leq m < 10$ es la mantisa y $a \in \mathbb{Z}$ es el exponente.

En un ordenador se guarda como:

$$\pm m2^e$$

la mantisa m es un número entero (entre 0 y $1 + (1 - 2^{-52})$) y el exponente e como otro número entero (entre -1023 y 1023).

El número más grande es

$$(1 + (1 - 2^{-52})) \times 2^{1023} \approx 1.7976931348623157 \times 10^{308}$$

y el más pequeño (positivo)

$$2^{-1022} \approx 2.2250738585072014 \times 10^{-308}$$

Error de redondeo

Los **errores de coma flotante** o **errores de redondeo** se producen porque el ordenador no puede almacenar las infinitas cifras de un número real.

Cada vez que el ordenador realiza una operación en coma flotante, si el número no es exacto en el formato anterior guarda una aproximación, lo que se conoce como **error de redondeo**.

Si calculamos $1/5$, el valor que guardará es:

$$1/5 = 0.200000000000000001$$

(recuérdese que realiza los cálculos en binario y $1/5$ no tiene división exacta).

Error de aproximación matemática

Los **errores de aproximación** o **errores de truncamiento** son debido a la imposibilidad de evaluar de modo exacto muchas funciones (exponenciales, logaritmos, funciones trigonométricas, etc)

Para evaluar e^x , el ordenador sustituye la función por una aproximación suya mediante el polinomio de Taylor:

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \dots + \frac{1}{n!}x^n + \frac{1}{n!}e^\xi, \quad \xi \in (0, x).$$

Al descartar el último término se produce un error.

Propagación de errores

Al operar con dos aproximaciones que tienen un cierto error, los errores se propagan, aumentando en algunos casos (y disminuyendo en otros).

Si sumamos dos números a_1 , a_2 con errores E_1 , E_2 , entonces

$$r_1 + r_2 = a_1 + E_1 + a_2 + E_2 = (a_1 + a_2) + E_1 + E_2,$$

es decir, los errores se suman. Y si los multiplicamos:

$$r_1 r_2 = (a_1 + E_1)(a_2 + E_2) = (a_1 a_2) + (E_1 a_2 + E_2 a_1 + E_1 E_2) \approx (a_1 a_2) + (E_1 a_2 + E_2 a_1)$$

Descartando $E_1 E_2$, tenemos que el error es el resultado de multiplicar el primer error por el segundo y el segundo por el primero.

Propagación de errores

Vamos a calcular cómo se propaga el error cuando componemos con una función.

Consideremos que nuestro valor aproximado es a , el valor real r y el error E ($r = a + E$) y que f es una función analítica.

Queremos obtener el error al aproximar $f(r)$ por $f(a)$. Usando el polinomio de Taylor:

$$f(r) = f(a + E) = f(a) + Ef'(a) + \frac{E^2}{2}f''(\xi), \quad \xi \in (a, r).$$

Despreciando E^2 (suponiendo que $f'(a) \neq 0$), tenemos que:

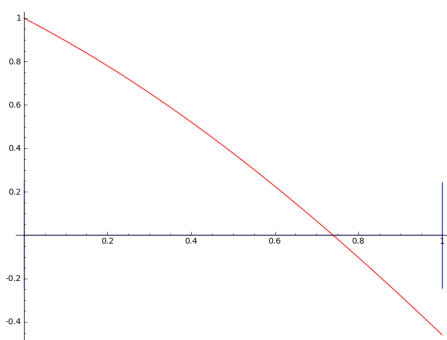
$$f(r) = f(a + E) \approx f(a) + Ef'(a).$$

Es decir, el error se multiplica por $f'(a)$.

Si $f'(a) = 0$ tendríamos que considerar el siguiente término del polinomio de Taylor.

Cálculo de los ceros de una función

Planteamiento del problema



Tenemos una función $f(x)$ **continua** en un intervalo $[a, b]$.

Se cumple que $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos en el intervalo.

Entonces el Teorema de Bolzano nos asegura la existencia de una raíz.

Los métodos de dos puntos tratan de reducir la anchura del intervalo manteniendo el cambio de signo.

Método de la bisección

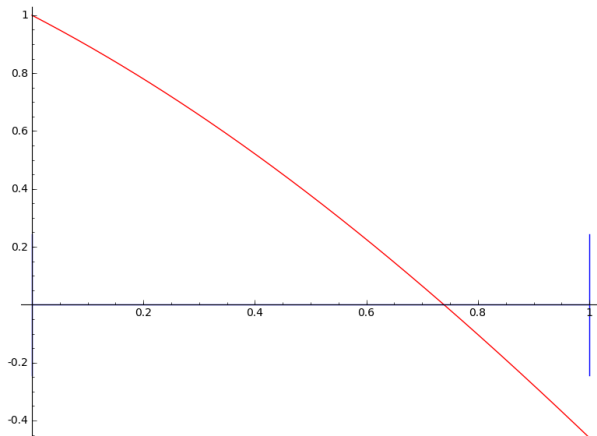
El algoritmo de la bisección es el siguiente:

- 1 Calculamos $c = \frac{a+b}{2}$, el punto medio del segmento $[a, b]$.
- 2 Calculamos $f(c)$ y lo comparamos con $f(a)$ y $f(b)$.
 - ▶ Si $f(a)$ y $f(c)$ tienen distinto signo, tomamos $[a, c]$ como nuevo segmento y volvemos al paso 1.
 - ▶ Si $f(c)$ y $f(b)$ tienen distinto signo, tomamos $[c, b]$ como nuevo segmento y volvemos al paso 1.
- 3 Repetimos el proceso tantas veces como sea necesario hasta estar en el margen de error fijado.
 - ▶ Podemos establecer un error máximo permitido (0.01, 0.005, 0.0001,...)
 - ▶ o bien una precisión de d cifras decimales (equivale a un error máximo de $0.5 \cdot 10^{-d}$).

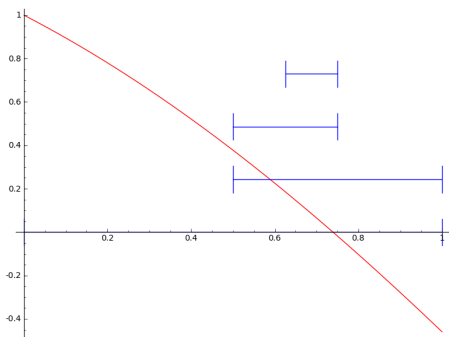
Método de la bisección

Ejemplo 1: $f(x) = -x + \cos(x)$, $[a, b] = [0, 1]$.

$f(a) = 1$, $f(b) = -0.459698$



Método de la bisección



Ejemplo 1: $f(x) = -x + \cos(x)$,
 $[a, b] = [0, 1]$.

$$f(a) = 1, f(b) = -0.459698$$

- $c=0.5$, $f(c) = 0.377582$
 $[a, b]=[0.5, 1]$.
- $c=0.75$, $f(c) = -0.018311$,
 $[a, b]=[0.5, 0.75]$.
- $c=0.625$, $f(c) = 0.185963$,
 $[a, b]=[0.625, 0.75]$.

Error del método de la bisección

- Si partimos de un intervalo $[a, b]$, el error que estamos cometiendo es $E_0 = b - a$.
- Tomamos $c = (a + b)/2$ y pasamos a uno de los intervalos $[a, c]$ ó $[c, b]$. En cualquier caso, el error es la mitad que el anterior: $E_1 = E_0/2 = \frac{b-a}{2}$.
- Si hacemos n iteraciones:

$$E_n = \frac{E_{n-1}}{2} = \frac{E_{n-2}}{2^2} = \dots = \frac{E_0}{2^n}, \quad \boxed{E_n = \frac{b-a}{2^n}}$$

De este modo, podemos calcular el número de iteraciones necesarias para conseguir cierta precisión T , imponiendo que $\frac{b-a}{2^n} \leq T$ y despejando n en función de T .

Error del método de la bisección

Ejemplo 1: Queremos estimar el valor de la raíz de $f(x)$, con un error menor que $5 \cdot 10^{-4}$. Imponemos entonces

$$\frac{b-a}{2^n} \leq 0.5 \cdot 10^{-3} \rightarrow \frac{1}{2^n} \leq 0.0005$$

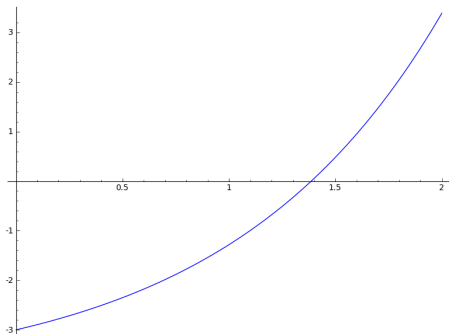
$$2^n \geq 1/0.0005 = 2000 \rightarrow n \geq 10.97 \rightarrow n = 11$$

Tenemos que hacer 11 iteraciones del algoritmo de bisección.

Otra forma de estimar el error que estamos cometiendo es ir calculando las diferencias entre los puntos medios de los intervalos: $E_0 = b - a = 1$,

$E_1 = 1/2 = 0.5$, $E_2 = 0.75 - 0.5 = 0.25$, $E_3 = 0.75 - 0.625 = 0.125, \dots$

Planteamiento del problema



Tenemos una función $f(x)$ **continua** y un punto inicial x_0 .

Queremos calcular un cero de $f(x)$ próximo a x_0 .

Los métodos de un punto tratan de obtener el cero utilizando información sobre la derivada.

Método de Newton

Partimos de una función $f(x)$ y un punto inicial x_0 .

Calculamos el siguiente punto x_1 como el punto en el que la tangente a la gráfica de $f(x)$ en el punto $(x_0, f(x_0))$ corta el eje x .

La ecuación de la tangente es:

$$y - f(x_0) = f'(x_0)(x - x_0)$$

Imponemos que corte el eje x :

$$0 - f(x_0) = f'(x_0)(x_1 - x_0)$$

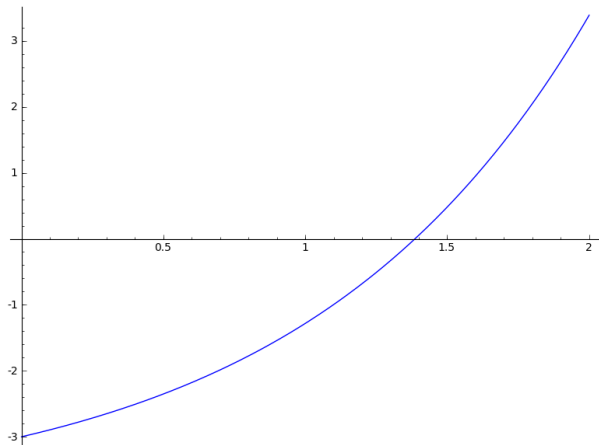
Despejando $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0)$.

Repitiendo el proceso, $x_2 = x_1 - f(x_1)/f'(x_1)$.

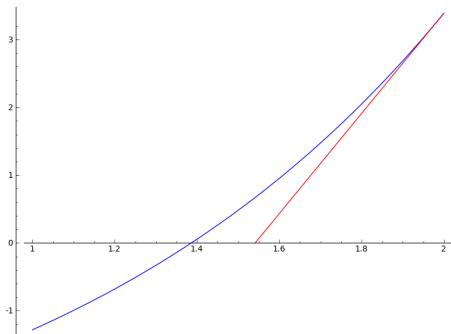
$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$$

Método de Newton: ejemplo

$$f(x) = e^x - 4, \quad x_0 = 2$$



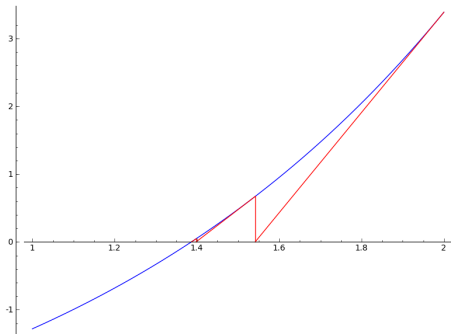
Método de Newton: ejemplo



$$f(x) = e^x - 4, x_0 = 2.$$

- $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0) = 1.54134113294645$

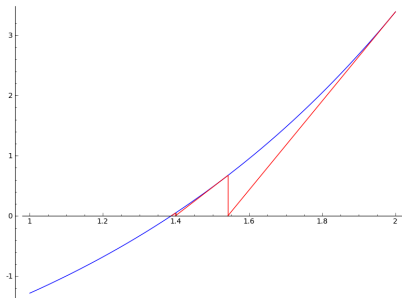
Método de Newton



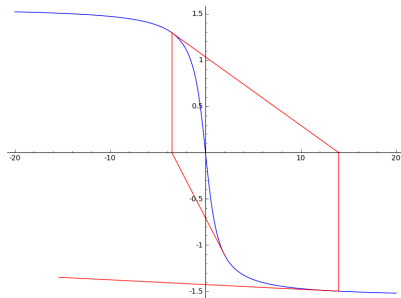
$$f(x) = e^x - 4, x_0 = 2.$$

- $x_1 = x_0 - f(x_0)/f'(x_0) = 1.54134113294645$
- $x_2 = x_1 - f(x_1)/f'(x_1) = 1.39771625526465$
- $x_3 = x_2 - f(x_2)/f'(x_2) = 1.38635934331094$
- En este caso, podemos calcular la solución exacta:
 $x_4 = \log(4) = 1.38629436111989$

Convergencia del método



Convergente



No convergente

Convergencia

Teorema

Sea $f \in \mathcal{C}^2([a, b])$ (segunda derivada continua en $[a, b]$), de la cual sabemos que posee una raíz r en $[a, b]$.

Si $f'(r) \neq 0$, entonces existe un intervalo centrado en r tal que la sucesión $\{x_n\}$ del método de Newton-Raphson converge a la raíz, siempre que el punto inicial x_0 se encuentre dentro de dicho entorno.

Proposición

Sea $f \in \mathcal{C}^2([a, b])$, con una raíz r en $[a, b]$.

Si $f'(r) > 0$, $f''(x) > 0$ (f es estrictamente creciente en r y convexa) para todo $x \in [a, b]$, entonces la sucesión $\{x_n\}$ converge a r para todo valor inicial x_0 .

Analogamente si $f'(r) < 0$ y/o $f''(x) < 0$ para todo $x \in [a, b]$ (f estrictamente decreciente y cóncava).

Error

Teorema

Denotemos como E_n el error en el paso n -ésimo del método de Newton-Raphson. Entonces existe un valor ξ_n comprendido entre x_n y r , tal que

$$E_{n+1} = \frac{|f''(\xi_n)|}{2|f'(x_n)|} E_n^2.$$

Método de la secante

Partimos de una función $f(x)$ y de dos puntos iniciales x_0, x_1 . Calculamos el siguiente punto x_2 como el punto en el que la recta (secante) determinada por los puntos $(x_0, f(x_0))$ y $(x_1, f(x_1))$ corta el eje X .

La ecuación de la secante es:

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

Imponemos que corte el eje X : $0 - f(x_0) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x_2 - x_0)$

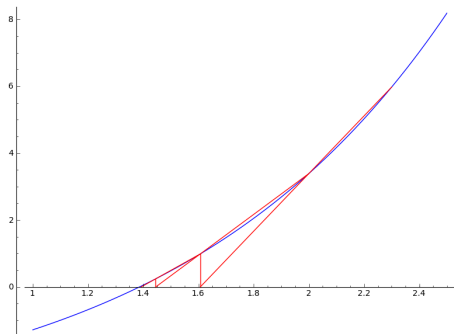
Despejando,

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

Repitiendo el proceso,

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

Método de la secante



$$f(x) = e^x - 4, \quad x_0 = 2.3, \quad x_1 = 2.$$

- $x_2 = \frac{f(x_1)x_0 - f(x_0)x_1}{f(x_1) - f(x_0)} = 1.606705$
- $x_3 = \frac{f(x_2)x_1 - f(x_1)x_2}{f(x_2) - f(x_1)} = 1.445250$
- $x_4 = \frac{f(x_3)x_2 - f(x_2)x_3}{f(x_3) - f(x_2)} = 1.392496$
- Recordemos la solución exacta:
 $\bar{x} = \log(4) = 1.38629436111989$

Método del punto fijo

El objetivo es obtener un **punto fijo** de una función $F(x)$ dada, es decir, un valor \bar{x} tal que $F(\bar{x}) = \bar{x}$.

El problema de calcular un cero de $f(x)$ se puede transformar en obtener un punto fijo de una función $F(x)$ (la transformación no es única).

Partimos de una función $F(x)$ y de un punto inicial x_0 .

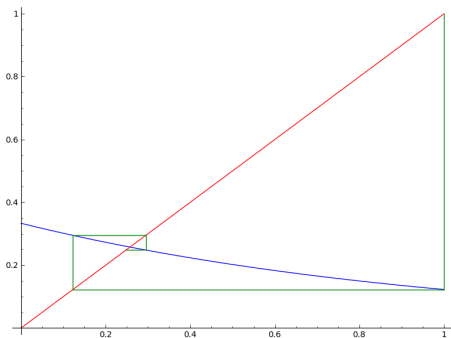
Calculamos el siguiente punto x_1 como la imagen por F de x_0 .

$$x_1 = F(x_0)$$

Repitiendo el proceso,

$$x_n = F(x_{n-1})$$

Método del punto fijo



$f(x) = -3x + e^{-x}$ $F(x) = e^{-x}/3$
(gráfica azul), $x_0 = 1$.

La gráfica roja es la identidad, el punto buscado es aquel en el que se cortan.

- $x_1 = F(x_0) = 0.122626$
- $x_2 = F(x_1) = 0.294865$
- $x_3 = F(x_2) = 0.248211$

Los segmentos verdes unen los puntos de la sucesión calculada: $(x_0, F(x_0))$ y $(F(x_0), F(x_0))$

Convergencia y error

Teorema

Supongamos que $F \in C([a, b])$.

- 1 Si $F(x) \in [a, b]$ para todo $x \in [a, b]$, entonces F tiene un punto fijo en $[a, b]$.
- 2 Si además $F'(x)$ está definida y es continua en (a, b) y $|F'(x)| < 1$ para todo $x \in (a, b)$, entonces F tiene un único punto fijo \bar{x} en $[a, b]$.

Convergencia y error

Teorema

Supongamos que $F \in C([a, b])$ verifica:

- 1 $F(x) \in [a, b]$ para todo $x \in [a, b]$.
- 2 $F'(x)$ está definida y es continua en (a, b) y $|F'(x)| \leq K < 1$ para todo $x \in (a, b)$.
- 3 $x_1 \in [a, b]$.

Sea $E_n = |\bar{x} - x_n|$, donde \bar{x} es el único punto fijo de F y x_n está definido recursivamente por $x_n = F(x_{n-1})$. Entonces

$$E_{n+1} \leq K^n \frac{|x_1 - x_0|}{1 - K}.$$

Convergencia y error

Comparemos estos tres ejemplos de problemas de punto fijo.

❶ $F(x) = \cos(x)$, $x_0 = 1$

$$|F'(x)| = |-\sin(x)| < 1, x \in (0, 1) \Rightarrow \text{El método SI converge}$$

❷ $F(x) = x^3 - 1$, $x_0 = 1$

$$|F'(x)| = |3x^2|, \text{ que no está acotado por } 1 \text{ en } (0, 1), \text{ pues } F'(1) = 3$$

\Rightarrow El método no converge

❸ $F(x) = (1 + x)^{1/3}$, $x_0 = 1$

$$|F'(x)| = |1/3(1 + x)^{-2/3}| < 1/3 \text{ en } (0, 1), \text{ (pues es decreciente)} \Rightarrow \text{El método SI converge}$$

Resolución de sistemas de ecuaciones

Planteamiento del problema

Sea un sistema de ecuaciones lineales

$$a_{11}x_1 + \dots + a_{1n}x_n = b_1,$$

$$a_{21}x_1 + \dots + a_{2n}x_n = b_2,$$

...

$$a_{n1}x_1 + \dots + a_{nn}x_n = b_n,$$

- $a_{11}, \dots, a_{nn}, b_1, \dots, b_n$ son los coeficientes del sistema, conocidos.
- Matriz del sistema: $\mathbf{A} = (a_{ij}) \in M_{m \times n}$
- Vector de términos independientes: $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$
- Vector de variables: $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$

Planteamiento del problema

Este tipo de sistemas aparecen en multitud de aplicaciones como:

- Procesamiento de señales
- Simulación
- Análisis y procesamiento de datos espaciales

En la asignatura de Álgebra, hemos estudiado cómo resolverlos mediante métodos directos:

- Regla de Cramer
- Método de Gauss

Sin embargo, los métodos directos producen inconvenientes cuando se aplican a sistemas de grandes dimensiones, pues requieren muchas operaciones y son sensibles a errores de redondeo.

Los métodos iterativos están especialmente indicados en la resolución de este tipo de sistemas, o en aquellos en las que las matrices son dispersas (poseen muchos ceros).

Resolución de sistemas de ecuaciones lineales

En este tema, estudiaremos cómo resolver sistemas de ecuaciones lineales mediante:

- 1 Nuevos métodos directos:
 - 1 Método de Gauss con pivoteo parcial
- 2 Métodos iterativos:
 - 1 Método de Jacobi
 - 2 Método de Gauss-Seidel

Métodos directos: Gauss con pivoteo parcial

El método de Gauss consiste en transformar el sistema en uno equivalente, de modo que la matriz del sistema sea triangular superior: es decir, que

$$a_{ij} = 0, \quad i > j$$

[**A**|**b**]. Si $a_{11} \neq 0$, la primera fila pivote es la F_1 . Las modificaciones en la matriz ampliada son:

$$F_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} F_1, \quad F_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}} F_1, \quad \dots$$

Después, hacemos lo mismo con la fila siguiente, hasta lograr la matriz triangular superior. Este proceso se denomina **eliminación gaussiana**.

Ejemplo Gauss

Ejemplo 1:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 & | & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & | & 2 \\ 5 & 0 & 3 & 0 & | & 3 \\ 0 & 6 & 0 & 4 & | & 4 \end{pmatrix} \xrightarrow{F_3 - 5F_1} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 & | & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & | & 2 \\ 0 & 0 & -12 & 0 & | & -2 \\ 0 & 6 & 0 & 4 & | & 4 \end{pmatrix}$$
$$\xrightarrow{F_4 - 3F_2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 0 & | & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & | & 2 \\ 0 & 0 & -12 & 0 & | & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & | & -2 \end{pmatrix}$$

Ejemplo Gauss

Una vez que tenemos el sistema con matriz triangular superior:

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & -12 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & -8 & -2 \end{array} \right)$$

Basta resolverlo de “abajo hacia arriba”: **sustitución regresiva**

$$-8x_4 = -2 \rightarrow x_4 = 1/4$$

$$-12x_3 = -2 \rightarrow x_3 = 1/6$$

$$2x_2 + 4x_4 = 2 \rightarrow x_2 = 1/2(2 - 4 \cdot 1/4) = 1/2$$

$$x_1 = 1 - 3x_3 = 1/2$$

Ejemplo pivoteo parcial

El **pivoteo parcial** consiste en aplicar este método eligiendo la fila pivote como aquella cuyo elemento pivote sea el de mayor valor absoluto de su columna. Una vez elegida, se intercambian las filas como sea necesario.

Ejemplo 2:

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & 3 & | & 1 \\ 1 & 2 & 0 & | & 2 \\ 2 & 0 & 4 & | & 4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 1 & 2 & 0 & | & 2 \\ 1 & 3 & 3 & | & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 0 & 2 & -2 & | & 0 \\ 0 & 3 & 1 & | & -1 \end{pmatrix}$$
$$\rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 0 & 3 & 1 & | & -1 \\ 0 & 2 & -2 & | & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & 4 & | & 4 \\ 0 & 3 & 1 & | & -1 \\ 0 & 0 & -8/3 & | & 2/3 \end{pmatrix}$$

Métodos Iterativos

Los métodos directos que hemos estudiado tienen inconvenientes si se aplican a sistemas de ecuaciones de grandes dimensiones, porque requieren muchas operaciones y son sensibles a errores de redondeo.

Los métodos iterativos están especialmente indicados en la resolución de este tipo de sistemas, o en aquellos en los que las matrices son dispersas (poseen muchos ceros).

Consisten en definir una sucesión de puntos $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots$ que converjan a la sucesión del sistema. Se basan en la versión para variables n -dimensionales del método del punto fijo. Para ello utilizamos que $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\mathbf{M} - \mathbf{N})\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{Mx} = \mathbf{Nx} + \mathbf{b}$$

Método de Jacobi

El **método de iteración de Jacobi** consiste en definir

$$\mathbf{M} = \mathbf{D}, \quad \mathbf{N} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})$$

donde

- **D** es la matriz diagonal con la misma diagonal que **A**
- **L** es la matriz tal que $l_{ij} = a_{ij}$ si $i < j$ y $l_{ij} = 0$ en caso contrario.
- **U** es la matriz tal que $u_{ij} = a_{ij}$ si $i > j$ y $u_{ij} = 0$ en caso contrario.

con lo cual $\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$, y el sistema $\mathbf{M}\mathbf{x} = \mathbf{N}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ es equivalente a resolver $\mathbf{D}\mathbf{x} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} + \mathbf{b}$

Así, la sucesión se construye partiendo de un valor inicial \mathbf{x}_0 y definiendo

$$\mathbf{D}\mathbf{x}_{k+1} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}_k + \mathbf{b}, \quad k \geq 0$$

Ejemplo de Métodos iterativos

Ejemplo 4: Dado el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} 2x - y &= 9 \\ x + 6y - 2z &= 15 \\ 4x - 3y + 8z &= 1 \end{aligned}, \text{ con } \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 1 & 6 & -2 \\ 4 & -3 & 8 \end{pmatrix}$$

tenemos:

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 4 & -3 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Partimos de un valor inicial

$$\mathbf{x}_0 = (0, 0, 0)$$

Ejemplo de Métodos iterativos

El método de Jacobi consiste en definir

$$\mathbf{D}\mathbf{x}_{k+1} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}_k + \mathbf{b}, \quad k \geq 0$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 6 & 0 \\ 0 & 0 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \\ z_{k+1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -2 \\ 4 & -3 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \\ z_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 9 \\ 15 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} 2x_{k+1} &= y_k + 9 \\ 6y_{k+1} &= -x_k + 2z_k + 15 \\ 8z_{k+1} &= -4x_k + 3y_k + 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Partiendo de } \mathbf{x}_0 = (0, 0, 0), \quad 2x_1 &= y_0 + 9 = 9 \\ 6y_1 &= -x_0 + 2z_0 + 15 = 15 \\ 8z_1 &= -4x_0 + 3y_0 + 1 = 1 \end{aligned}$$

Ejemplo de Métodos iterativos

Para el método de Jacobi, tenemos:

- $\mathbf{x}_0 = (0, 0, 0)$
- $\mathbf{x}_1 = (4.5, 2.5, 0.125)$
- $\mathbf{x}_2 = (5.75, 1.7916667, -1.1875)$
- $\mathbf{x}_3 = (5.3958333, 1.14583333, -2.078125)$
- $\mathbf{x}_4 = (5.07291667, 0.90798611, -2.14322917)$

Nótese que, en este caso, el sistema es resoluble, y la solución real es $(5, 1, -2)$, hacia la cual converge la sucesión creada por el método.

Método de Gauss-Seidel

El método de iteración de **Gauss-Seidel** consiste en definir

$$\mathbf{M} = \mathbf{D} + \mathbf{L}, \quad \mathbf{N} = -\mathbf{U}$$

con lo cual el sistema $\mathbf{M}\mathbf{x} = \mathbf{N}\mathbf{x} + \mathbf{b}$ es equivalente a resolver

$$(\mathbf{D} + \mathbf{L})\mathbf{x} = -\mathbf{U}\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

Así, la sucesión se construye partiendo de un valor inicial \mathbf{x}_0 y definiendo

$$(\mathbf{D} + \mathbf{L})\mathbf{x}_{k+1} = -\mathbf{U}\mathbf{x}_k + \mathbf{b}, \quad k \geq 0$$

Ejemplo de Métodos iterativos

El método de Gauss-Seidel consiste en definir

$$(\mathbf{D} + \mathbf{L})\mathbf{x}_{k+1} = -\mathbf{U}\mathbf{x}_k + \mathbf{b}, \quad k \geq 0$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 0 \\ 4 & -3 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{k+1} \\ y_{k+1} \\ z_{k+1} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_k \\ y_k \\ z_k \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 9 \\ 15 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Por tanto,

$$\begin{aligned} 2x_{k+1} &= y_k + 9 \\ x_{k+1} + 6y_{k+1} &= 2z_k + 15 \\ 4x_{k+1} - 3y_{k+1} + 8z_{k+1} &= 1 \end{aligned}$$

Partiendo de $\mathbf{x}_0 = (0, 0, 0)$,

$$\begin{aligned} 2x_1 &= y_0 + 9 \\ 6y_1 &= -x_1 + 2z_0 + 15 \\ 8z_1 &= -4x_1 + 3y_1 + 1 \end{aligned}$$

Ejemplo de Métodos iterativos

Para el método de Gauss-Seidel, tenemos:

- $\mathbf{x}_0 = (0, 0, 0)$
- $\mathbf{x}_1 = (4.5, 1.75, -1.46875)$
- $\mathbf{x}_2 = (5.375, 1.11458333, -2.14453125)$
- $\mathbf{x}_3 = (5.05729167, 0.94227430, -2.05029297)$
- $\mathbf{x}_4 = (4.97113715, 0.98804615, -1.99005127)$

Convergencia de los métodos iterativos

Decimos que una matriz $\mathbf{A} = (a_{ij})$ es diagonalmente dominante si

$$|a_{kk}| > \sum_{j=1, j \neq k}^n |a_{kj}|, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Teorema

Dado el sistema $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$:

- Si \mathbf{A} es diagonalmente dominante, o
- si \mathbf{A}^T es diagonalmente dominante, o
- si \mathbf{A} es simétrica y definida positiva

entonces existe una única solución del sistema y los métodos iterativos producen una sucesión de vectores que converge a dicha solución.

Normas de vectores y matrices

Dado un vector $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n)$, se definen las siguientes normas:

- 1 Norma euclídea: $\|\mathbf{v}\|_2 = \sqrt{v_1^2 + \dots + v_n^2}$.
- 2 Norma infinito: $\|\mathbf{v}\|_\infty = \sup\{|v_1|, \dots, |v_n|\}$
- 3 Norma uno: $\|\mathbf{v}\|_1 = |v_1| + \dots + |v_n|$.

Para calcular la distancia entre dos puntos A, B , utilizamos $\|B - A\|$.

Por ejemplo, La distancia de $A = (0, 0)$ a $B = (1, 1)$:

- Con la norma euclídea es $\sqrt{2}$ (distancia en línea recta).
- Con la norma infinito es 1 (la mayor de las distancias coordenada a coordenada).
- Con la norma uno es 2 (distancia “Manhattan” es decir, moviéndose sólo en horizontal y vertical).

Error relativo

Fijemos una de las normas anteriores y sea \mathbf{u} un vector de \mathbb{R}^n y \mathbf{v} una aproximación. Se denomina **error relativo** (con la norma fijada) a

$$\frac{\|\mathbf{u} - \mathbf{v}\|}{\|\mathbf{u}\|}.$$

Ejemplo:

Con la norma uno, si el valor real es $(1, 2, 3)$ y medimos $(1.1, 1.8, 3.1)$, el error relativo es

$$\frac{\|(1, 2, 3) - (1.1, 1.8, 3.1)\|_1}{\|(1, 2, 3)\|_1} = \frac{0.1 + 0.2 + 0.1}{1 + 2 + 3} = 0.03333.$$

Condicionamiento

Supongamos el sistema de ecuaciones lineales con la siguiente matriz ampliada:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 400 & -201 & 100 \\ -800 & 401 & -200 \end{array} \right)$$

cuya solución es $(0.25, 0)$. Si modificamos ligeramente los términos independientes:

$$\left(\begin{array}{cc|c} 400 & -201 & 101 \\ -800 & 401 & -198 \end{array} \right)$$

la solución varía enormemente: $(-1.7575, -4.0)$

El condicionamiento de esta matriz es $k(A) = 2503$

Condicionamiento

El condicionamiento de un sistema se estudia mediante el **número de condición**.
Fijada una norma,

$$k(A) = \sup\{\|Ax\| : \|x\| = 1\} \sup\{\|A^{-1}x\| : \|x\| = 1\}.$$

Cuanto mayor sea el número de condición de la matriz de un sistema, peor será el condicionamiento del sistema. Teniendo en cuenta que $k(A) \geq 1$, cuanto más cercano sea dicho valor a 1, mejor estará condicionado.

Teorema

Fijemos una norma y supongamos que $\bar{\mathbf{b}}$ es una aproximación del vector \mathbf{b} .

Denotemos e_b el error relativo de aproximar \mathbf{b} por $\bar{\mathbf{b}}$ y denotemos e_x el error relativo de aproximar \mathbf{x} por $\bar{\mathbf{x}}$, solución del sistema $\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{b}}$.

Entonces

$$e_b/k(\mathbf{A}) \leq e_x \leq k(\mathbf{A})e_b.$$

Sistemas no lineales

Supongamos ahora que queremos resolver un sistema de ecuaciones

$$f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0,$$

$$f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0,$$

...

$$f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0,$$

Denotamos $F = (f_1, f_2, \dots, f_n)$.

Queremos aplicar el método de Newton a estos sistemas. Para ello partimos de un vector \mathbf{x}_0 y tomamos

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{J}^{-1}(\mathbf{x}_n)F(\mathbf{x}_n)$$

donde \mathbf{J} es la matriz Jacobiana de F . La ecuación equivale al sistema lineal:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}_n)(\mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{x}_n) = -F(\mathbf{x}_n)$$

Ejemplo de sistemas no lineales

Consideremos el sistema de ecuaciones:

$$x^3 - y^2 = 0,$$

$$x^2 + 2y^2 - 1 = 0$$

Calculamos la matriz Jacobiana:

$$\begin{pmatrix} 3x^2 & -2y \\ 2x & 4y \end{pmatrix}$$

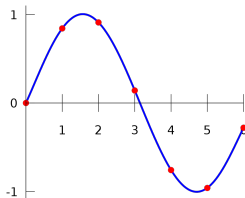
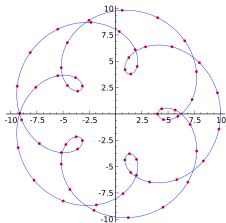
Tomamos $x_0 = (1, 1)$. Calculamos $x_d = x_1 - x_0$ como la solución del sistema

$$\begin{pmatrix} 3 & -2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} x_d = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix}$$

Resolviendo, $x_d = (-1/4, -3/8)$, por lo que $x_1 = x_0 + x_d = (3/4, 5/8)$.

Repitiendo el proceso, ahora con x_1 , obtenemos $x_2 = (2/3, 43/80)$.

Planteamiento del problema



La **interpolación** consiste en construir una función (o una curva) que pase por una serie de puntos prefijados.

- **Interpolación polinomial:** el conjunto de datos observados se interpola mediante el polinomio de menor grado que pase por todos los puntos.
- **Interpolación a trozos (splines)** cada par de puntos consecutivos se interpola mediante un polinomio.

Planteamiento del problema

Dados los puntos $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, existe un único polinomio de grado $\leq n$, $P_n(x)$ tal que

$$P_n(x_k) = y_k, \quad k = 0, 1, \dots, n$$

al cual llamamos **polinomio interpolador de los puntos**.

Para calcularlo, definimos $P_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$, e imponemos $P_n(x_k) = y_k, k = 0, 1, \dots, n$.

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

Este es un sistema de $n + 1$ ecuaciones con $n + 1$ incógnitas. Se prueba que el determinante es no nulo. Por tanto, el polinomio interpolador es único.

Ejemplo 1

Consideremos los puntos:

$$(0, 4), (1, 3), (2, 1), (3, 4)$$

Tenemos que resolver el sistema:

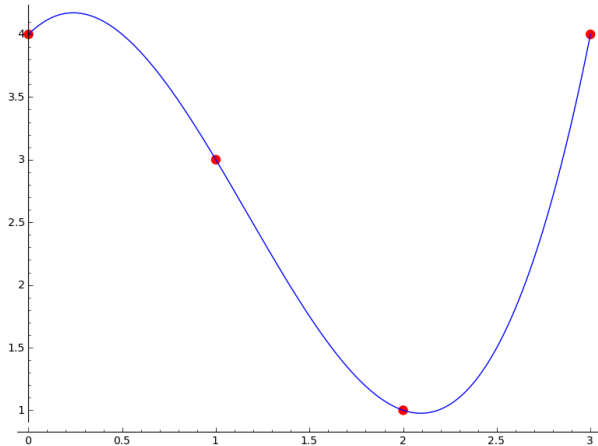
$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 3 & 9 & 27 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 3 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Resolvemos y obtenemos

$$P(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 = 4.0 + 1.5x - 3.5x^2 + x^3.$$

Ejemplo 1

Si dibujamos el polinomio interpolador y los puntos:



Polinomio Interpolador de una curva

Si tomamos (x_k, y_k) , pertenecientes a la gráfica de una función f , $y_k = f(x_k)$.

Teorema

Dada $f \in \mathcal{C}^{n+1}([x_0, x_n])$, si $P(x)$ es el polinomio interpolador de $(x_k, f(x_k))$, $k = 0, \dots, n$, entonces existe $\xi \in [x_0, x_n]$ tal que

$$f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n)$$

$f \in \mathcal{C}^{n+1}([x_0, x_n])$ quiere decir que la función f es $n + 1$ veces derivable en $[x_0, x_n]$, y que dicha derivada $n + 1$ es continua en $[x_0, x_n]$.

Veremos dos métodos para calcular el polinomio interpolador, además de la resolución del sistema de ecuaciones lineales.

- 1 Método de Lagrange
- 2 Método de Newton

1. Polinomios de Lagrange

Dados $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, se definen los **polinomios de Lagrange** como

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

$L_i(x)$ es el polinomio interpolador de $(x_i, 1)$ y $(x_j, 0)$, para $j \neq i$.

El polinomio interpolador de (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , \dots , (x_n, y_n) es

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i L_i(x)$$

1. Polinomios de Lagrange

Consideremos los puntos:

$$(0, 4), (1, 3), (2, 1), (3, 4)$$

Tenemos:

$$L_0(x) = -\frac{(x-1)(x-2)(x-3)}{6}, \quad L_1(x) = \frac{x(x-2)(x-3)}{2}$$

$$L_2(x) = -\frac{x(x-1)(x-3)}{2}, \quad L_3(x) = \frac{x(x-1)(x-2)}{6}$$

Y

$$P_3(x) = 4 * L_0(x) + 3 * L_1(x) + 1 * L_2(x) + 4 * L_3(x).$$

2. Interpolación de Newton

Dada una función $f(x)$, se definen las **diferencias divididas** de $f(x)$ como

$$f[x_k] = f(x_k), \quad f[x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_k] - f[x_{k-1}]}{x_k - x_{k-1}},$$
$$f[x_{k-r}, \dots, x_k] = \frac{f[x_{k-r+1}, \dots, x_k] - f[x_{k-r}, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_{k-r}}.$$

El polinomio interpolador de los puntos (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , \dots , (x_n, y_n) , puede escribirse usando las diferencias divididas como

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

2. Interpolación de Newton

Ejemplo 3:

$$(0, 4), (1, 3), (2, 1), (3, 4)$$

Creamos la tabla de diferencias divididas:

x	$f[]$	$f[,]$	$f[, ,]$	$f[, , ,]$
0	4			
1	3	-1		
2	1	-2	$-1/2$	
3	4	3	$5/2$	1

2. Interpolación de Newton

Ejemplo 3:

$$(0, 4), (1, 3), (2, 1), (3, 4)$$

Creamos la tabla de diferencias divididas:

x	$f[]$	$f[,]$	$f[, ,]$	$f[, , ,]$
0	4			
1	3	-1		
2	1	-2	$-1/2$	
3	4	3	$5/2$	1

2. Interpolación de Newton

Ejemplo 3:

$$(0, 4), (1, 3), (2, 1), (3, 4)$$

Creamos la tabla de diferencias divididas:

x	$f[]$	$f[,]$	$f[, ,]$	$f[, , ,]$
0	4			
1	3	-1		
2	1	-2	$-1/2$	
3	4	3	$5/2$	1

2. Interpolación de Newton

Ejemplo 3:

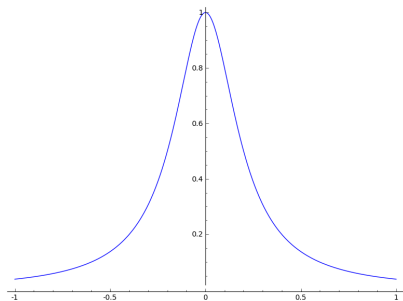
x	f[]	f[,]	f[, ,]	f[, , ,]
0	4			
1	3	-1	-1/2	
2	1	-2	5/2	1
3	4	3		

$$P(x) = 4 - x - (1/2)x(x - 1) + x(x - 1)(x - 2).$$

Efecto de Runge-Kutta

El ajuste de una curva mediante polinomios de interpolación de grado alto, esto es, para un conjunto numeroso de datos, suele resultar poco satisfactoria, pues produce oscilaciones en los extremos que llevan a graves errores (efecto Runge-Kutta). Tomemos

$$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}, \quad x \in [-1, 1]$$



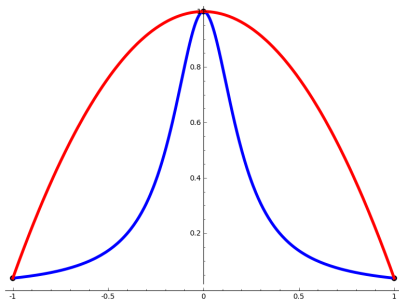
Efecto de Runge-Kutta

$f(x) = \frac{1}{1 + 25x^2}$ es la curva azul.
Tomamos los puntos

$$(-1, 0.0385), (0, 1), (1, 0.0385)$$

y calculamos el polinomio interpolador
de los mismos.

$$P_2(x) = -0.9615x^2 + 1 \text{ (gráfica roja)}$$



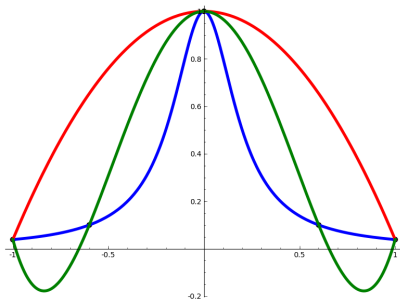
Efecto de Runge-Kutta

Tomamos más puntos para interpolar.
Añadimos

$$(-0.6, 0.1), (0.6, 0.1)$$

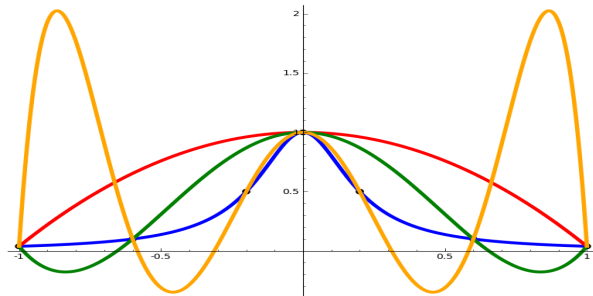
El polinomio interpolador es de grado 4:

$$P_4(x) = 2.4038x^4 - 3.3654x^2 + 1(\text{verde})$$



Efecto de Runge-Kutta

Tomando más puntos para interpolar, el polinomio de grado 6 se representa en la gráfica naranja. Como vemos, aparecen fluctuaciones en los extremos que hacen que el ajuste no sea adecuado, pues se producen muchos errores.



Interpolación polinomial a trozos: splines

La interpolación polinomial a trozos consiste en construir un polinomio de grado 1, 2 o 3 para cada par de nodos consecutivos (x_k, y_k) y (x_{k+1}, y_{k+1}) . La curva definida mediante estos “trozos” se denomina **spline**. Estudiaremos:

- 1 Interpolación lineal a trozos: splines lineales
- 2 Interpolación cúbica a trozos: splines cúbicos

Splines lineales

Consisten simplemente en unir los nodos o puntos mediante segmentos. Así, dado el par de nodos $(x_k, y_k), (x_{k+1}, y_{k+1})$, definimos el segmento que los une:

$$S_k(x) = y_k + \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k}(x - x_k), \quad x \in [x_k, x_{k+1}]$$

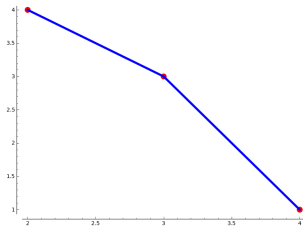
con lo que el spline lineal de los puntos $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$ es la función definida a trozos:

$$S(x) = S_k(x), \quad x \in [x_k, x_{k+1}], \quad k = 0, \dots, n-1$$

Splines lineales

Ejemplo 4 Queremos interpolar los puntos $(2, 4)$, $(3, 3)$, $(4, 1)$. Tomamos el spline lineal:

$$s(x) = \begin{cases} -x + 6 & \text{si } x \in (2, 3) \\ -2x + 9 & \text{si } x \in (3, 4) \end{cases}$$



Splines cúbicos

En el caso de que busquemos una curva más suave, se impone que el spline, además de pasar por los nodos, posea primera derivada continua (no tenga “esquinas”) y segunda derivada continua, (el radio de curvatura está definido en cada punto). Se define la curva en $[x_0, x_n]$ a trozos

$$S(x) = S_k(x), x \in [x_{k-1}, x_k], k = 1, \dots, n$$

donde $S_k(x) = a_k x^3 + b_k x^2 + c_k x + d_k$, $k = 1, \dots, n$ Imponiendo

- 1 $S_k(x_{k-1}) = y_k$, $k = 1, \dots, n$
- 2 $S_k(x_k) = y_k$, $k = 1, \dots, n$
- 3 $S_k(x_{k+1}) = S_{k+1}(x_{k+1})$, $k = 1, \dots, n - 1$
- 4 $S'_k(x_{k+1}) = S'_{k+1}(x_{k+1})$, $k = 1, \dots, n - 1$
- 5 $S''_k(x_{k+1}) = S''_{k+1}(x_{k+1})$, $k = 1, \dots, n - 1$

Splines cúbicos

Para encontrar una solución del sistema, formado por $4n - 2$ ecuaciones y $4n - 4$ incógnitas, debemos imponer dos restricciones más. Según la forma de imponerlas, podemos definir distintos tipos de splines.

- 1 Spline cúbico natural: este spline cúbico es el que minimiza la energía de tensión.

$$S''(x_0) = 0, \quad S''(x_n) = 0.$$

- 2 Spline periódico:

$$S'(x_0) = S'(x_n), \quad S''(x_0) = S''(x_n)$$

- 3 Spline cúbico sujeto (el que menos oscila)

$$S'(x_0) = d_0, \quad S'(x_n) = d_n$$

Splines cúbicos

Ejemplo 5 Spline cúbico natural que interpola $(0, 4)$, $(1, 3)$, $(2, 1)$.

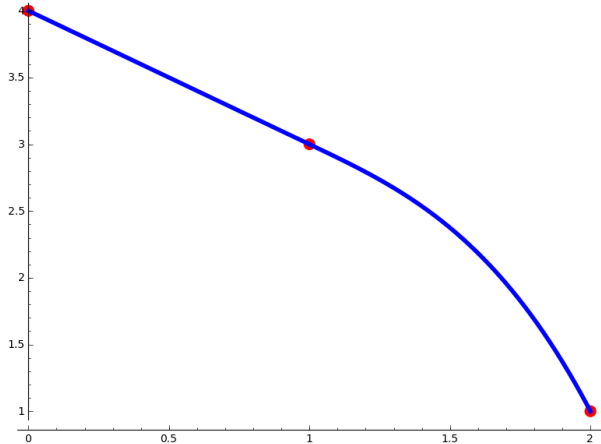
Tenemos el sistema

$$\begin{array}{l}
 S_1(0) = 4 \rightarrow \\
 S_1(1) = 3 \rightarrow \\
 S_2(1) = 3 \rightarrow \\
 S_2(2) = 1 \rightarrow \\
 S_1'(1) = S_2'(1) \rightarrow \\
 S_1''(1) = S_2''(1) \rightarrow \\
 S_1''(0) = 0 \rightarrow \\
 S_2''(2) = 0 \rightarrow
 \end{array}
 \begin{pmatrix}
 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 4 & 8 \\
 0 & 1 & 2 & 3 & 0 & -1 & -2 & -3 \\
 0 & 0 & 2 & 6 & 0 & 0 & -2 & -6 \\
 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 12
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 d_1 \\
 c_1 \\
 b_1 \\
 a_1 \\
 d_2 \\
 c_2 \\
 b_2 \\
 a_2
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 4 \\
 3 \\
 3 \\
 1 \\
 0 \\
 0 \\
 0 \\
 0
 \end{pmatrix}$$

$$S_1(x) = 4 - x, \quad S_2(x) = 5 - 4x + 3x^2 - x^3.$$

Splines cúbicos

Ejemplo 5



Ajuste por mínimos cuadrados

Se utiliza en alguno de los siguientes casos:

- Incluso aunque exista una función que interpola, puede ser difícil encontrarla
- Es deseable que el error en los datos afecte poco a la curva
- Queremos un modelo sencillo para la función
- No es esencial que tome los valores exactos

Tenemos unos puntos (x_i, y_i) , $0 \leq i \leq n$ y queremos aproximarlos por una función $f(x, a_1, \dots, a_m)$, dependiente de unos parámetros a_1, \dots, a_m . Buscamos los valores de a_1, \dots, a_m que minimicen

$$d(a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=0}^n (y_i - f(x_i, a_1, \dots, a_m))^2.$$

Ejemplos

Regresión lineal

La función modelo es $y = ax + b$. Si tenemos datos $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$, tendremos que minimizar

$$d(a, b) = \sum_{i=0}^n (y_n - (ax_n + b))^2$$

Regresión cuadrática

La función modelo es $y = ax^2 + bx + c$. Si tenemos datos $(x_0, y_0), \dots, (x_n, y_n)$, tendremos que minimizar

$$d(a, b, c) = \sum_{i=0}^n (y_n - (ax_n^2 + bx_n + c))^2$$

Planteamiento del problema

- Queremos calcular el valor de

$$\int_a^b f(x) dx$$

pero no existe una expresión analítica de la integral.

- ▶ Por ejemplo, la capacidad calórica de un sólido es $\int_0^x \frac{t^3}{e^t - 1} dt$

- Disponemos de los valores

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n)), \quad x_0, \dots, x_n \in [a, b]$$

- La **integración numérica** es una herramienta que permite obtener valores aproximados de integrales definidas mediante los valores de la función en un conjunto de puntos.

Fórmulas de Cuadratura

Denominamos **fórmula de cuadratura** a una expresión del tipo

$$Q[f] = \int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n \omega_i f(x_i)$$

- x_0, x_1, \dots, x_n son los **nodos de cuadratura**, que son puntos de $[a, b]$.
- Generalmente, $x_0 = a$, $x_n = b$
- Los nodos suelen estar equiespaciados
- $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ son los **pesos**.

El **error de truncamiento** de la fórmula es

$$E[f] = \int_a^b f(x) dx - Q[f]$$

Grado de Precisión de una Fórmula de Cuadratura

El **grado de precisión** de la fórmula de cuadratura es el mayor número natural n de modo que $E[P] = 0$ para cualquier polinomio P de grado $\leq n$.

Las fórmulas de cuadratura de Newton-Cotes consisten en

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b P_n(x) dx$$

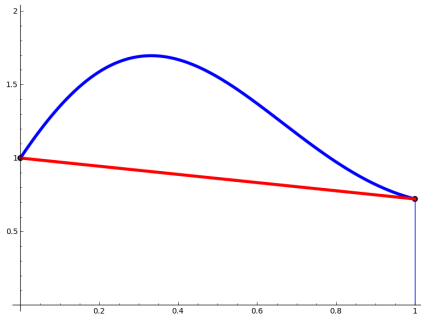
donde P_n es el polinomio interpolador de los puntos

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))$$

El grado de precisión coincide con el grado del polinomio interpolador, n , si n es impar y el grado de precisión es $n + 1$ si n es par.

1. Regla del Trapecio

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(a) + f(b)), \quad \text{error} = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$$



$$x_0 = a, x_1 = b, h = b - a$$

Aproximamos el área bajo la curva f mediante el área bajo la recta que interpola $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$ (área del trapecio)

1. Regla del Trapecio

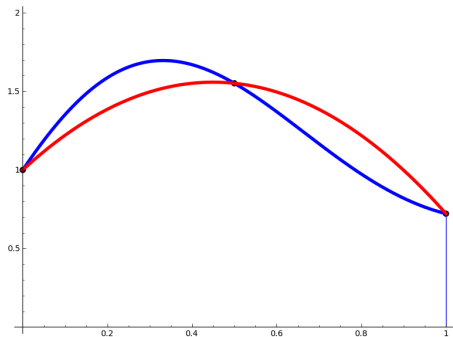
La recta que interpola a $(a, f(a))$ y $(b, f(b))$ es:

$$P_1(x) = f(b) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b \left(f(b) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \right) dx \\ &= f(b) [x]_a^b + \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \left[\frac{x^2}{2} - ax \right]_a^b \\ &= \frac{(b - a)}{2} (f(a) + f(b)) = \frac{h}{2} (f(a) + f(b)) \end{aligned}$$

2. Regla de Simpson

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f(a) + 4f(x_1) + f(b)), \quad \text{error} = -\frac{(b-a)^5}{720}f^{(4)}(\xi)$$



$$x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}, x_2 = b$$

$$h = (b-a)/2$$

Aproximamos el área bajo la curva f mediante el área bajo el polinomio interpolador de

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2))$$

Reglas Compuestas

Otra forma de aproximar el valor de

$$\int_a^b f(x) dx$$

conociendo

$$(x_0, f(x_0)), (x_1, f(x_1)), \dots, (x_n, f(x_n))$$

es dividir el intervalo $[a, b]$ en subintervalos y aplicar una regla simple en cada uno de ellos:

- 1 Si aplicamos la regla del trapecio simple en cada subintervalo, tenemos la regla del trapecio compuesta.
- 2 Si aplicamos la regla de Simpson en cada subintervalo, tendremos la regla de Simpson compuesta.

