

Universidad Nacional de Santiago del Estero

Facultad de Agronomía y Agroindustrias

Departamento Físico-Matemático

CALCULO NUMERICO

**Curso práctico con aplicaciones
a la Ingeniería en Alimentos**

Dra. Lucrecia Lucía Chaillou

2008

Chaillou, Lucrecia Lucía

Cálculo Numérico : curso práctico con aplicaciones a la Ingeniería en Alimentos.
1a ed. - Santiago del Estero : Lucrecia, 2008.
CD-ROM.

ISBN 978-987-1375-44-8

1. Cálculos. I. Título
CDD 512

Título: Cálculo Numérico: curso práctico con aplicaciones a la Ingeniería en Alimentos

Autor: Chaillou, Lucrecia Lucía

1ª EDICIÓN

ISBN: 978-987-1375-44-8

Queda hecho el depósito que establece la Ley 11.723

.LIBRO DE EDICIÓN ARGENTINA


Lucrecia
Editorial

No se permite la reproducción parcial o total, el almacenamiento, el alquiler, la transmisión o la transformación de este libro, en cualquier forma o por cualquier medio, sea electrónico o mecánico, mediante fotocopias, digitalización u otros métodos, sin el permiso previo y escrito del autor. Su infracción está penado por las leyes 11.723 y 25.446.

*A mis adorados Abuelos y Padres
con todo mi amor, respeto y admiración*

Prólogo

Los métodos numéricos constituyen una herramienta muy valiosa para la resolución de problemas prácticos de Ingeniería, por ello el objetivo de este libro es presentarlos de manera práctica y sintética.

Los distintos capítulos se diseñaron de acuerdo con las exigencias requeridas para la enseñanza de cálculo numérico, asignatura de 3° año de la carrera de Ingeniería en Alimentos, desde el punto de vista práctico, considerando que los temas desarrollados servirán como base para estudios más profundos.

Los temas tratados incluyen aspectos teóricos y prácticos sobre modelos y algoritmos; aproximaciones y errores; solución numérica de ecuaciones; sistemas de ecuaciones lineales; aproximación polinomial y funcional; simulación; series de Fourier; transformada de Laplace y ecuaciones diferenciales. Se presentan gráficos aclaratorios, algoritmos de cada método numérico, así como también ejercicios resueltos y propuestos aplicados a la Ingeniería de Alimentos.

Dra. Lucrecia Lucía Chaillou

Cátedra de Cálculo Numérico

Facultad de Agronomía y Agroindustrias

Universidad Nacional de Santiago del Estero

Índice

	Pág.
Dedicatoria	2
Prólogo	3
Índice	4-6
Capítulo 1: METODOS NUMERICOS, MODELOS Y ALGORITMOS	7-14
1.1. METODOS NUMÉRICOS	7
1.2. MODELOS MATEMÁTICOS	8
1.2.1. Clasificación de modelos matemáticos	9
1.3. ALGORITMOS	10
1.4. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE UN PROBLEMA REAL	12
EJERCICIOS PROPUESTOS	14
Capítulo 2: APROXIMACIONES Y ERRORES	15-20
2.1. CIFRAS SIGNIFICATIVAS	15
2.2. EXACTITUD Y PRECISIÓN	16
2.3. ERRORES	16-19
2.3.1. Error absoluto y relativo	16
2.3.2. Errores en la resolución numérica	16
2.3.2.1. Error de truncamiento	17
2.3.2.2. Error de redondeo	17
2.3.2.3. Otros tipos de error	19
EJERCICIOS PROPUESTOS	19
Capítulo 3: SOLUCION NUMERICA DE ECUACIONES	21-40
3.1. METODO GRAFICO	21
3.2. METODOS NUMERICOS DE CALCULO DE UNA RAZ	22-35
3.2.1. Métodos cerrados	22-26
3.2.1.1. Método de la Bisección	22
3.2.1.2. Método de la Falsa Posición o Regula Falsi	24
3.2.2. Métodos abiertos	26-35
3.2.2.1. Método de Aproximaciones sucesivas	26
3.2.2.2. Método de Newton-Raphson o de la Tangente	29
3.2.2.3. Método de Newton de segundo orden	31
3.2.2.4. Método de Von Mises	32
3.2.2.5. Método de la secante	34
3.3. RAÍCES DE POLINOMIOS	35-39
3.3.1. Teoremas fundamentales de la Teoría de ecuaciones algebraicas	35
3.3.2. División sintética	36
3.3.3. Regla de los signos de Descartes	37
3.3.4. Raíces racionales	37
3.3.5. Raíces irracionales	37
3.3.5.1. Método de Newton-Raphson	38
EJERCICIOS PROPUESTOS	39
Capítulo 4: SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES	41-55
4.1. CONCEPTOS PREVIOS	41-42
4.2. MÉTODOS DE RESOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES	42-54
4.2.1. Métodos directos	42-48
4.2.1.1. Método de eliminación de Gauss	42
4.2.1.2. Método de Gauss - Jordan	46
4.2.1.3. Partición de matrices	47
4.2.2. Métodos iterativos	48
4.2.2.1. Método de Jacobi	49
4.2.2.2. Método de Gauss–Seidel	52

4.2.2.3. Método de Relajación	54
EJERCICIOS PROPUESTOS	55
Capítulo 5: APROXIMACION POLINOMIAL Y FUNCIONAL	56-80
5.1. APROXIMACIÓN POLINOMIAL	56-71
5.1.1. Diferencias finitas	56
5.1.2. Diferencias divididas	58
5.1.3. Interpolación con incrementos constantes. Interpolación de Newton	59
5.1.4. Interpolación con incrementos variables. Interpolación de Lagrange	61
5.1.5. Interpolación inversa	63
5.1.6. Derivación numérica	63
5.1.7. Integración numérica	66-71
5.1.7.1. Regla trapecial	67
5.1.7.2. Regla de Simpson 1/3	69
5.1.7.3. Regla de Simpson 3/8	69
5.2. APROXIMACIÓN FUNCIONAL	71-77
5.2.1. Regresión lineal	71
5.2.2. Linealización de relaciones no lineales	73
5.2.3. Regresión polinomial	74
5.2.4. Regresión lineal múltiple	75
EJERCICIOS PROPUESTOS	77
Capítulo 6: SIMULACION	81-93
6.1. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN	81
6.1.1. Métodos de Montecarlo	82-89
6.1.1.1. Generación de números aleatorios	82
6.1.1.2. Generación de Números pseudo aleatorios	83
6.1.1.2.1. Método de los cuadrados centrales	83
6.1.1.2.2. Método de los productos centrales	83
6.1.1.2.3. Métodos congruenciales	83
6.1.1.3. Aplicaciones de los métodos de Montecarlo	85
6.1.1.3.1. Paseo aleatorio	85
6.1.1.3.2. Integración por simulación	87
6.1.1.3.2. Línea de espera	88
6.2. Modelos Demográficos y de la Cinética Química	89-93
6.2.1. Modelo demográfico	89
6.2.2. Modelos de la cinética química	90
6.2.2.1. Método diferencial	91
6.2.2.2. Método integral	92
6.2.2.3. Dinámica de sistemas cinetoquímicos	92
EJERCICIOS PROPUESTOS	93
Capítulo 7: SERIES DE FOURIER	94-104
7.1. CONSIDERACIONES PREVIAS	94-97
7.1.1. Funciones periódicas	94
7.1.2. Series trigonométricas	95
7.1.3. Funciones seccionalmente continuas	95
7.1.4. Funciones pares e impares	96
7.2. DESARROLLO EN SERIE DE FOURIER	97-101
7.2.1. Cálculo de los coeficientes de Fourier	98
7.2.2. Expresión de la serie de Fourier para funciones de período arbitrario	99
7.2.3. Forma exponencial de la serie de Fourier	100
7.2.4. Consideraciones simplificadoras	100
7.2.5. Espectro de frecuencias	101
7.3. INTEGRALES DE FOURIER	102
EJERCICIOS PROPUESTOS	103
Capítulo 8: TRANSFORMADA DE LAPLACE	105-111
8.1. DEFINICIÓN DE TRASFORMADA DE LAPLACE	105

8.2. PROPIEDADES IMPORTANTES DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE	106
8.2.1. Transformada de Laplace de operaciones	106
8.3. MÉTODOS PARA CALCULAR TRANSFORMADAS DE LAPLACE	107
8.4. VENTAJAS DEL MÉTODO DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE	107
8.5. TRANSFORMADA DE LAPLACE DE ALGUNAS FUNCIONES IMPORTANTES	108
8.6. TRANSFORMADA INVERSA DE LAPLACE	109
8.7. INTEGRAL DE CONVOLUCION	109
EJERCICIOS PROPUESTOS	110
Capítulo 9: ECUACIONES DIFERENCIALES	112-131
9.1. CONCEPTOS PREVIOS	112-113
9.2. ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS	113-125
9.2.1. Solución analítica	114
9.2.1.1. Solución por el método del operador diferencial	114
9.2.2. Solución por métodos numéricos	116
9.2.2.1. Métodos de un paso	116
9.2.2.1.1. Método de la Serie de Taylor	116
9.2.2.1.2. Método de Euler	117
9.2.2.1.3 Métodos de Runge-Kutta	119
9.2.2.1.4 Métodos de Heun	123
9.2.2.2. Métodos de pasos múltiples	125
9.3. ECUACIÓN DIFERENCIAL LINEAL DE SEGUNDO ORDEN	125-129
9.3.1. Métodos de resolución	125
9.3.1.1. Método del operador diferencial	125
9.3.1. 1.1. Solución complementaria	126
9.3.1.1.1.1. Caso sobre-amortiguado	126
9.3.1.1.1.2. Caso crítico	127
9.3.1.1.1.3. Caso oscilatorio amortiguado	128
9.3.1.1.2. Solución particular	128
9.1.1.3. Solución general	129
9.3.1.2. Método de los coeficientes indeterminados	129
9.4. ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES	131-132
9.4.1. Ecuaciones elípticas	132
9.4.2. Ecuación Parabólica	132
9.4.3. Ecuación Hiperbólica	132
EJERCICIOS PROPUESTOS	132
BIBLIOGRAFÍA CONSULTADA	134

Capítulo 1

METODOS NUMERICOS, MODELOS Y ALGORITMOS

La resolución de problemas de Ingeniería está asociada, por lo general, a resultados numéricos puesto que se requieren respuestas prácticas. Muchos de estos problemas sólo se pueden resolver de forma aproximada, por ello es importante el estudio de una rama de las Matemáticas denominada Análisis Numérico, esta rama involucra el estudio de Métodos Numéricos. Su desarrollo estuvo y está notablemente influenciado y determinado por las computadoras digitales que permiten realizar los cálculos de manera veloz, confiable y flexible.

1.1. METODOS NUMÉRICOS

Se pueden definir a los **métodos numéricos** como las técnicas mediante las cuales es posible formular problemas de manera que **puedan resolverse utilizando operaciones aritméticas**, ó también como el grupo de conocimientos matemáticos relacionados con el **diseño y análisis de algoritmos** necesarios para resolver problemas de ciencia e ingeniería. Estos métodos se caracterizan porque: permiten dar más importancia a la formulación e interpretación de la solución, los cálculos involucrados están relacionados con cantidades discretas, permiten obtener resultados aproximados y ayudan a identificar, cuantificar y minimizar los errores.

Existen varios motivos por los cuales deben estudiarse estos métodos:

1. Son herramientas poderosas para la solución de problemas. Permiten manejar sistemas de ecuaciones grandes, no linealidades y geometrías complicadas.
2. Su teoría es la base de programas de métodos numéricos.
3. Su conocimiento permite diseñar programas propios.
4. Son un vehículo eficiente para aprender a servirse de las computadoras personales.
5. Son un medio para reforzar la comprensión de las matemáticas.

Estos métodos permiten:

- ✓ Encontrar las raíces de ecuaciones lineales y no lineales
- ✓ Resolver grandes sistemas de ecuaciones algebraicas lineales
- ✓ Encontrar aproximaciones de funciones

- ✓ Realizar interpolaciones para encontrar valores intermedios en tablas de datos
- ✓ Aproximar derivadas de cualquier orden
- ✓ Integrar cualquier función
- ✓ Resolver problemas de valor inicial y de frontera
- ✓ Obtener soluciones numéricas para ecuaciones diferenciales parciales
- ✓ Realizar ajustamiento de curvas a datos

1.2. MODELOS MATEMÁTICOS

El mundo real es naturalmente complejo y en muchas ocasiones los problemas a resolver resultan difíciles de sintetizar. Para identificar sus aspectos esenciales y expresarlos en términos precisos se debe realizar un proceso de abstracción. Esa abstracción del problema del mundo real simplificando su expresión se denomina modelización. La modelización es una de las áreas más atractivas de la ingeniería y las ciencias aplicadas. De hecho, los ingenieros necesitan construir modelos para resolver problemas de la vida real.

El objetivo de un modelo consiste en reproducir la realidad de la forma más fiel posible, tratando de entender cómo se comporta el mundo real y obteniendo las respuestas que pueden esperarse de determinadas acciones. Su selección es una etapa crucial para obtener una solución satisfactoria a un problema real. Las estructuras matemáticas asociadas no son arbitrarias, sino una consecuencia de la realidad misma.

Un **modelo mental** puede definirse como una representación de la realidad en la que se consideran los aspectos más relevantes, es decir el modelo representa una parte de la realidad.

Un **modelo matemático** es una formulación o ecuación que expresa las características fundamentales de un sistema o proceso físico en términos matemáticos. Los modelos pueden estar constituidos por simples ecuaciones algebraicas hasta grandes y complicados sistemas de ecuaciones diferenciales. Sus características son:

1. Describe un sistema o proceso natural en términos matemáticos.
2. Representa una idealización y una simplificación de la realidad.
3. Conduce a resultados predecibles y, en consecuencia, puede utilizarse para propósitos de predicción.

La generación de un modelo matemático involucra dos etapas fundamentales, la de conceptualización y la de formulación. En la primera se debe caracterizar el contexto del problema real, definir claramente el propósito y los límites del modelo, identificar y establecer relaciones

entre las variables; en la segunda etapa se deben determinar las ecuaciones asociadas al modelo y seleccionar y estimar los parámetros del modelo.

El objetivo del modelo es aplicarlo para obtener alguna información del problema o fenómeno que se estudia. Frecuentemente sufre modificaciones y a veces es descartado y aunque contenga errores, puede poner en evidencia componentes esenciales de una realidad compleja.

1.2.1. Clasificación de modelos matemáticos

Los modelos matemáticos pueden clasificarse en función del tratamiento de la incertidumbre; del origen de la información; de su campo de aplicación, etc.

a) En función del tratamiento de la incertidumbre

Determinístico: se conoce de manera puntual la forma del resultado ya que no hay incertidumbre. Además, los datos utilizados para alimentar el modelo son completamente conocidos y determinados.

Estocástico: probabilístico, no se conoce el resultado esperado, sino su probabilidad y existe por lo tanto incertidumbre.

b) En función del origen de la información utilizada para construirlos

Modelos heurísticos: del griego *euriskein*, hallar, inventar. Son los que están basados en las explicaciones sobre las causas o mecanismos naturales que dan lugar al fenómeno estudiado.

Modelos empíricos: del griego *empeiricos* (experiencia, experimento) Son los que utilizan las observaciones directas o los resultados de experimentos del fenómeno estudiado.

c) En función de su campo de aplicación

Modelos conceptuales: son los que reproducen mediante fórmulas y algoritmos matemáticos más o menos complejos los procesos físicos que se producen en la naturaleza.

Modelo matemático de optimización: los modelos matemáticos de optimización son ampliamente utilizados en diversas ramas de la ingeniería para resolver problemas que por su naturaleza son indeterminados, es decir presentan más de una solución posible.

d) En función del factor tiempo

Modelos estáticos: son independientes del tiempo, consideran situaciones estacionarias.

Modelos dinámicos: son los que describen el comportamiento del sistema en estudio en función del tiempo.

1.3. ALGORITMOS

Un **algoritmo** puede definirse como una secuencia lógica de pasos necesarios para la ejecución de una tarea específica, tal como la solución de un problema, ó también como una secuencia de instrucciones para alcanzar un resultado deseado en un tiempo finito.

Un buen algoritmo se caracteriza por: terminar luego de una cantidad finita de pasos, ser lo más general y preciso posible, ser determinístico, no dejar nada al azar y permitir obtener resultados independientes de quien lo está utilizando.

Para generar un algoritmo se debe seguir una serie de pasos:

1. Determinar el objetivo de la tarea
2. Identificar los datos de entrada y de salida
3. Determinar el proceso involucrado
4. Identificar las variables internas
5. Dividir el proceso en acciones elementales
6. Determinar la secuencia de estas acciones
7. Incorporar estructuras de control

Por lo general, el objetivo del algoritmo será el de implementar un procedimiento numérico para resolver un problema o para aproximar una solución del problema. Consta de un principio; de una serie de pasos en los que se deben definir los valores iniciales de las variables del problema, operar con estos valores hasta llegar a un resultado, proporcionar un resultado y de un final.

Un algoritmo se puede representar mediante un **pseudocódigo** que especifica los datos de entrada, la forma de los resultados deseados y los pasos involucrados ó bien mediante un **diagrama de flujo** que es una representación visual o gráfica del algoritmo que emplea una serie de bloques y flechas. Cada bloque representa una operación particular o un paso en el algoritmo. Las flechas indican la secuencia en que se implementan las operaciones.

Los símbolos que se utilizan en diagramas de flujo se representan en la Figura 1.1.

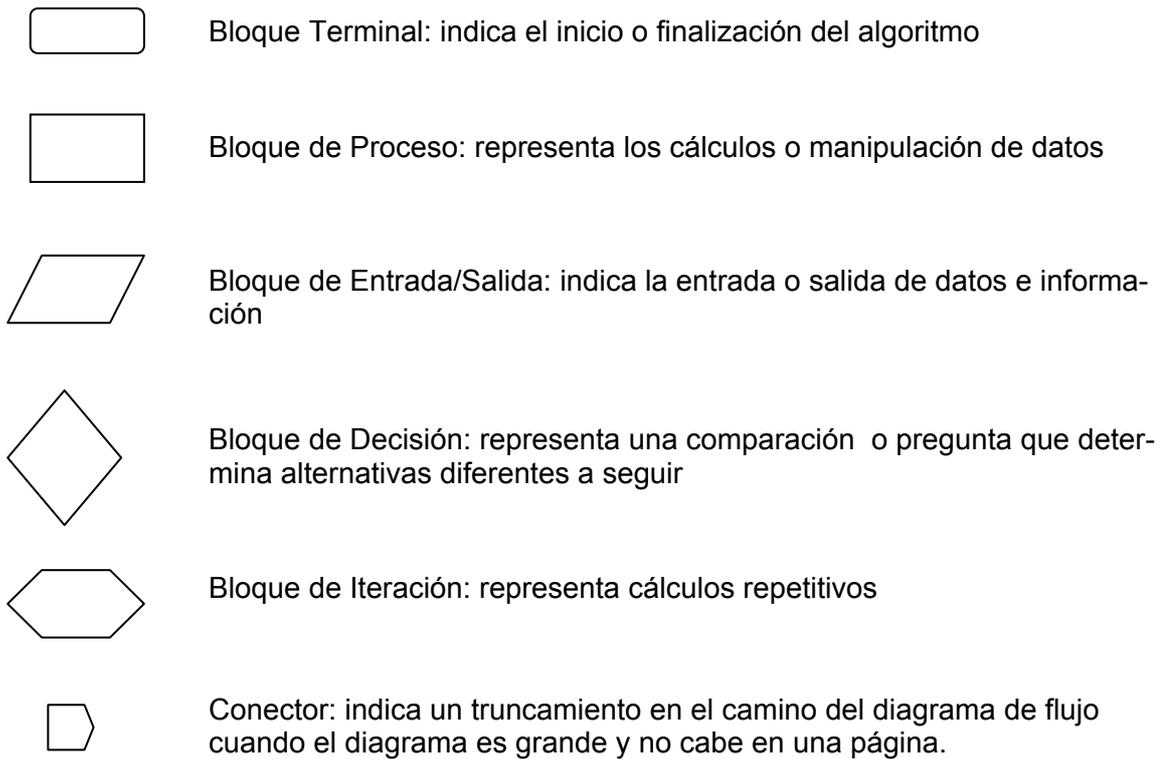


Figura 1.1. Símbolos que se utilizan en diagramas de flujo

- Por ejemplo, si se deseara escribir el algoritmo para la solución de un problema simple tal como, dados dos números x_1 y x_2 , escribir el mayor de ellos, se presentan a continuación el pseudocódigo y el diagrama de flujo (Figura 1.2) correspondientes:

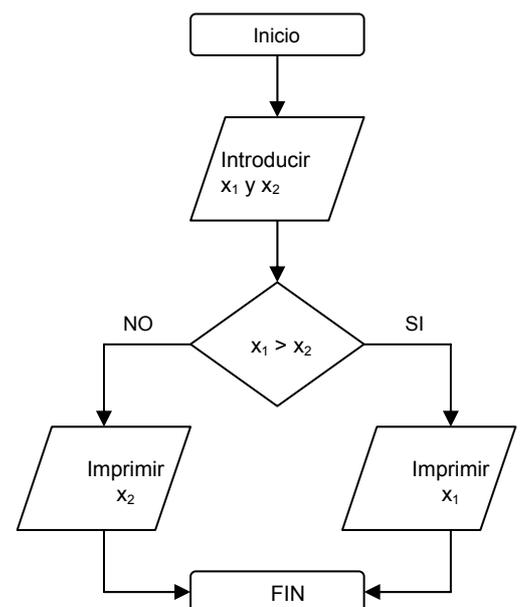
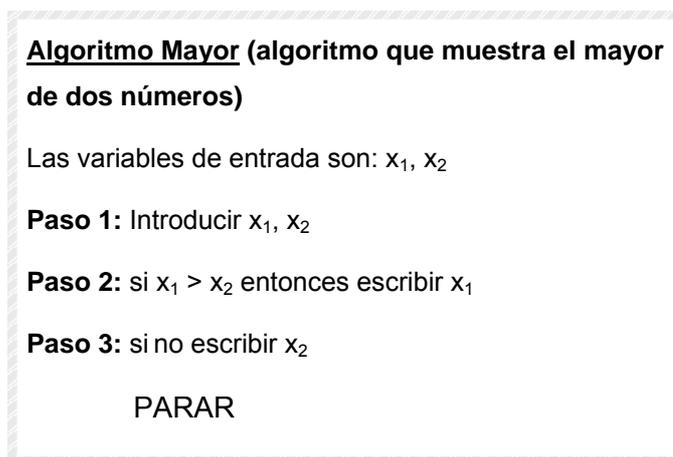


Figura 1.2. Diagrama de flujo del algoritmo Mayor

1.4. RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE UN PROBLEMA REAL

Consideremos el problema físico de una encomienda que se deja caer desde un globo aerostático. Se desea determinar la velocidad de caída luego de 12 segundos si la masa del cuerpo es 70 kg y que el coeficiente de roce es 0,27 kg/m.

En la Figura 1.3 puede observarse un esquema de la situación planteada.

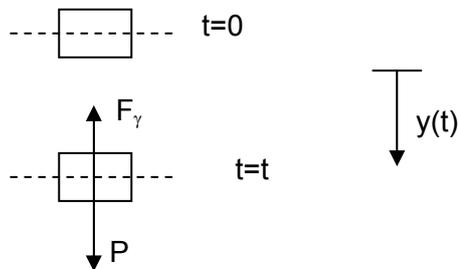


Figura 1.3. Representación de las fuerzas que actúan sobre un cuerpo en caída libre.

El modelo físico que lo rige está dado por la segunda Ley de Newton. Su expresión matemática es

$$F = M a \quad (1.1)$$

Este modelo es una idealización y simplificación de la realidad, no incluye los efectos de la relatividad, donde F corresponde a la fuerza neta que actúa sobre el cuerpo, M es la masa del objeto y a su aceleración.

Para un cuerpo que cae dentro del perímetro de la Tierra, la fuerza neta está formada por dos fuerzas opuestas: la atracción hacia abajo debida a la gravedad P y la fuerza hacia arriba debida a la resistencia del aire F_γ , si consideramos el sistema de referencia positivo hacia abajo, esta última tendrá signo negativo. La resistencia ofrecida por el aire puede expresarse de varias maneras, una aproximación sencilla es suponer que:

$$F_\gamma = \gamma v \quad (1.2)$$

Además la aceleración puede expresarse como la razón de cambio de la velocidad con respecto al tiempo (dv/dt), por lo tanto la ecuación (1.1) puede escribirse como

$$M \frac{dv}{dt} = Mg - \gamma v \quad (1.3)$$

Si se divide por M a ambos miembros para normalizarla se llega a la ecuación

$$\frac{dv}{dt} = g - \frac{\gamma}{M} v \quad (1.4)$$

La ecuación (1.4) es un modelo matemático y es una ecuación diferencial puesto que está escrita en términos de la razón de cambio diferencial (dv/dt). Para resolverla pueden utilizarse dos métodos: el analítico que aplica las reglas del cálculo diferencial o bien el método numérico.

a) Solución analítica

La solución analítica exacta de la ecuación (1.4) es:

$$v(t) = \frac{gM}{\gamma} \left(1 - e^{-\frac{\gamma}{M}t} \right) \quad (1.5)$$

Al sustituir los valores de los parámetros en la ecuación (1.5) se obtiene

$$v(t) = \frac{9,8(\text{m/s}^2)70(\text{kg})}{0,27(\text{kg/m})} \left(1 - e^{-\frac{0,27}{70}t} \right)$$

b) Solución numérica

Como se mencionó anteriormente, los métodos numéricos permiten reformular el problema para que se pueda resolver mediante simples operaciones aritméticas. Entonces se aproxima la razón de cambio de la velocidad con respecto al tiempo por:

$$\frac{dv}{dt} \approx \frac{\Delta v}{\Delta t} = \frac{v(t_{i+1}) - v(t_i)}{t_{i+1} - t_i} \quad (1.6)$$

Reemplazando en (1.4)

$$\frac{v(t_{i+1}) - v(t_i)}{t_{i+1} - t_i} = g - \frac{\gamma}{M} v(t_i) \quad (1.7)$$

Esta ecuación puede reordenarse para obtener la velocidad en el instante t_{i+1}

$$v(t_{i+1}) = v(t_i) + \left[g - \frac{\gamma}{M} v(t_i) \right] (t_{i+1} - t_i) \quad (1.8)$$

De manera que la ecuación diferencial se transforma en una ecuación algebraica, en la que se puede calcular $v(t_{i+1})$ si se da un valor inicial a $v(t_i)$, y donde $\left[g - \frac{\gamma}{M} v(t_i) \right]$ es la pendiente de la recta descrita por esta ecuación, es decir:

$$\left(\begin{array}{c} \text{Valor de } v \\ \text{nuevo} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \text{Valor de } v \\ \text{anterior} \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \text{Valor de la} \\ \text{pendiente} \end{array} \right) \times \left(\begin{array}{c} \text{Incremento de} \\ \text{tiempo} \end{array} \right)$$

Como en el instante inicial la velocidad del cuerpo es 0, se toma éste para calcular la velocidad en $t=2$ s y así sucesivamente. En la Tabla 1.4 se muestran los valores de velocidad obtenidos para la solución analítica y la solución numérica.

Tabla 1.4. Solución analítica y numérica al problema de un cuerpo que cae

t (s)	Solución analítica	Solución numérica
	v (m/s)	
0	0	0
2	19,5246	19,6000
4	38,8991	39,0488
6	58,1248	58,3476
8	77,2027	77,4975
10	96,1341	96,4996
12	114,9199	115,3552

Puede observarse que por un método numérico la solución se aproxima bastante bien a solución exacta. Para minimizar las diferencias se puede utilizar un menor intervalo de cálculo, por ejemplo intervalos de 1 s. Con la ayuda de una computadora digital se puede efectuar un gran número de cálculos en pocos segundos y modelar con exactitud la velocidad de un cuerpo que cae sin tener que resolver la ecuación diferencial.

EJERCICIOS PROPUESTOS

1.1. Ejemplifique el proceso de generación de un modelo matemático, a partir de un fenómeno o problema del mundo real. Detalle los aspectos involucrados en la conceptualización y la formulación del mismo.

1.2. Responda verdadero o falso:

- Un algoritmo debe ser finito y preciso
- Los métodos numéricos son aquellos en los que se reformula un problema matemático para que pueda resolverse mediante operaciones aritméticas.
- Un modelo matemático nunca puede ser modificado

1.3. Enuncie las características relevantes del Cálculo Numérico e indique por lo menos cinco problemas matemáticos que surgen en Ingeniería y pueden resolverse por Métodos Numéricos.

1.4. Calcule analítica y numéricamente la velocidad de caída, a los 20 s, de un cuerpo de 50 kg que se deja caer desde un aeroplano, considerando que la fuerza de roce es γv^2 ($\gamma=0,27$ kg/m). Grafique ambas soluciones.

1.5. Escriba el algoritmo y el diagrama de flujo correspondiente al problema de la multiplicación de dos números.

Capítulo 2

APROXIMACIONES Y ERRORES

El análisis del error en un resultado numérico es esencial en cualquier cálculo hecho a mano o con una computadora. Los datos de entrada rara vez son exactos puesto que se basan en ensayos experimentales o bien son estimados y los métodos numéricos introducen errores de varios tipos, por ello brindan resultados aproximados. En la práctica profesional, los errores son costosos y en algunos casos letales. Además como los resultados de los métodos numéricos son aproximaciones, es necesario tener en claro los conceptos de cifras significativas, exactitud y precisión.

2.1. CIFRAS SIGNIFICATIVAS

La confiabilidad de un valor numérico está dada por sus **cifras significativas** que se definen como el número de dígitos, más un dígito estimado que se pueda usar con confianza. Por ejemplo, si se leen 25 ml en una bureta, que está graduada en 0,1 ml, se puede decir que el nivel del líquido es mayor que 25,1 y menor que 25,2 ml como puede observarse en la Figura 2.1. Hasta puede estimarse con una aproximación de $\pm 0,05$ ml, por lo tanto el volumen vertido es 25,15 ml que tiene 4 cifras significativas. Los primeros tres dígitos son seguros y el último es una estimación.

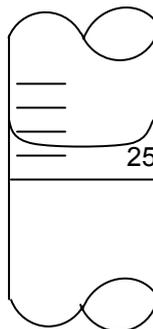


Figura 2.1. Representación de la sección de una bureta

Un cero puede ser significativo o no, dependiendo de su posición en un número dado. Los ceros que solamente sitúan la cifra decimal no son significativos, si se escribiera 25,15 ml como 0,02515 l, el número de cifras significativas sigue siendo el mismo. Los ceros al final de un número pueden ser significativos o no. Si se dice que un tanque de agua se encuentra a 10,0 m de altura, significa que la altura se conoce hasta las décimas de metro. Si esa misma altura se da como

1000 cm la expresión es confusa y para mantener el criterio de cifras significativas se utiliza la notación científica $1,0 \times 10^3$.

2.2. EXACTITUD Y PRECISIÓN

La **precisión** se refiere al número de cifras significativas que representan una cantidad ó a la extensión en las lecturas repetidas de un instrumento que mide alguna propiedad física.

La **exactitud** se refiere a la aproximación de un número o de una medida al valor verdadero que se supone representa.

2.3. ERRORES

2.3.1. Error absoluto y relativo

El error se aplica para indicar la inexactitud y la imprecisión de las mediciones.

El error numérico es igual a la diferencia entre el valor verdadero y el aproximado:

$$E_v = \text{valor verdadero} - \text{valor aproximado} \quad (2.1)$$

El error relativo fraccional resulta de normalizar el error respecto al valor verdadero:

$$\text{Error relativo fraccional} = \frac{\text{error}}{\text{valor verdadero}} \quad (2.2)$$

Si se expresa en porcentaje:

$$E_v = \frac{\text{error verdadero}}{\text{valor verdadero}} \times 100 \quad (2.3)$$

El error relativo porcentual de aproximación está dado por:

$$E_a = \frac{\text{aproximación actual} - \text{aproximación previa}}{\text{aproximación actual}} \times 100 \quad (2.4)$$

Por lo general se toma el valor absoluto del error.

De acuerdo con Scarborough, se tiene la seguridad de que el resultado es correcto en al menos n cifras significativas si se cumple el siguiente criterio:

$$\epsilon_s = (0,5 \times 10^{2-n})\% \quad (2.5)$$

donde ϵ_s es la tolerancia prefijada.

2.3.2. Errores en la resolución numérica

Las soluciones que resultan de la aplicación de los métodos numéricos son aproximadas debido a que existen incertidumbres en los datos, puesto que éstos son empíricos; en el modelo ya que es una idealización y simplificación de la realidad y en la resolución numérica debido a errores de truncamiento y de redondeo.

2.3.2.1. Error de truncamiento

Estos errores resultan al usar una aproximación en lugar de un procedimiento matemático exacto y dependen del método numérico empleado.

La serie de Taylor (2.6) puede utilizarse para predecir el valor de la función en x_{i+1} en términos de la función y de sus derivadas en la vecindad de un punto x_i .

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x_{i+1} - x_i)^n + R_n \quad (2.6)$$

El término residual considera todos los términos desde $n+1$ hasta el infinito.

$$R_n = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x_{i+1} - x_i)^{n+1}, \text{ con } (x_{i+1} - x_i) = h \text{ (paso)} \quad (2.7)$$

Si se considera el primer término de la serie, la aproximación es de orden cero; con dos términos la aproximación es de 1º orden, tres términos corresponden a 2º orden y así sucesivamente. Cuanto mayor sea el número de términos incluidos, menor será el error de truncamiento.

2.3.2.2. Error de redondeo

Estos errores resultan de representar en forma aproximada números exactos, dependen de la computadora o de quien realice los cálculos. Si se realizan las operaciones algebraicas a mano se deben tener en cuenta las reglas de redondeo.

Reglas de redondeo

1. Se conservan las cifras significativas y el resto se descarta. El último dígito que se conserva se aumenta en 1 si el primer dígito descartado es mayor que 5. De otra manera se deja igual. Si el primer dígito descartado es 5 o es 5 seguido de ceros, entonces el último dígito retenido se incrementa en 1 solo si es impar.
2. En la suma y la resta el redondeo se lleva a cabo de manera que el último dígito retenido en la respuesta corresponda al último dígito más significativo de los números que están sumando o restando. Un dígito en la columna de las centésimas es más significativo que en las milésimas.

3. Para la multiplicación y la división el redondeo es tal que la cantidad de cifras del resultado es igual al número más pequeño de cifras significativas que contienen las cantidades en operación.
4. En el caso de operaciones combinadas se ejecutan las operaciones entre paréntesis y el resultado se redondea antes de proceder con la otra operación.

Si los cálculos se realizan utilizando una computadora se debe considerar que la mayoría de ellas guardan un número finito de cifras significativas durante un cálculo y resultan críticos en dos casos:

1. Ciertos métodos requieren cantidades extremadamente grandes para obtener una respuesta, además los cálculos dependen entre sí, por lo tanto los cálculos posteriores son dependientes de los anteriores y por lo tanto el efecto de acumulación en el transcurso de una gran cantidad de cálculos resulta significativo.
2. Si se realizan operaciones algebraicas con números muy pequeños y muy grandes al mismo tiempo.

Además la mayoría de las computadoras representan a los números como números de punto flotante. La representación de punto flotante de un número está dada por la siguiente expresión:

$$\text{fl}(x) = \varepsilon 0.a_1 a_2 a_3 \cdots a_p B^b \quad (2.8)$$

Donde:

ε : es el signo del número, puede ser positivo o negativo

$a_1 a_2 a_3 \dots a_p$: es la parte fraccionaria significativa

B: es la base, puede ser 2, 10 ó 16

b: es el exponente entero, las computadoras de 12 dígitos tiene un valor de b de ± 999

p: es el número de dígitos significativos (precisión)

Por ejemplo, si se quiere representar el número 24,12 como un número de punto flotante con B=10 y p=4, este será:

$$\text{fl}(x) = +.2412 \times 10^2$$

Si la computadora admite solo p cifras significativas el redondeo se hace al número más próximo. Dado el número:

$$x = \varepsilon 0.a_1 a_2 a_3 \cdots a_p a_{p+1} a_{p+2} \cdots 10^b$$

El redondeo para este número utilizando el punto flotante $\text{fl}(x)$ es:

$$fl(x) = \varepsilon 0.a_1 a_2 a_3 \dots a_p 10^b \quad \text{si } a_{p+1} < 5$$

$$fl(x) = \varepsilon 0.a_1 a_2 a_3 \dots (a_p + 1) 10^b \quad \text{si } a_{p+1} \geq 5$$

Las cotas del error de redondeo serán:

a) Error absoluto $E_a = fl(x) - x$ con su valor absoluto $|E_a| \leq 0.5 \cdot 10^{b-p}$

b) Error relativo $E_r = \frac{E_a}{x}$ con su valor absoluto $|E_r| \leq 0.5 \cdot 10^{-p}$

2.3.2.3. Otros tipos de error

Errores por equivocación

Son errores por torpeza o por equivocación, son debidos por lo general a errores humanos. Las equivocaciones ocurren en cualquier etapa del proceso de modelado matemático y pueden contribuir con las otras componentes del error.

Errores de formulación

Estos errores degeneran en un modelo matemático incompleto y si se está usando un modelo deficiente, ningún método numérico generará resultados adecuados.

Incertidumbre en los datos

Algunas veces se introducen errores en un análisis debido a la incertidumbre de los datos físicos sobre los que se basa el modelo. Son errores que muestran inexactitud e imprecisión.

EJERCICIOS PROPUESTOS

2.1. Suponga que debe cuantificar la cantidad de β -caroteno en lechuga y experimentalmente se determinó que el valor es 0,042 mg/100g. Si el valor verdadero es 0,048 mg/100g, indique el error verdadero y el error relativo porcentual.

2.2. Estime el valor de $e^{0.5}$ utilizando la expansión en serie de Mac Laurin, calculando los errores relativos porcentuales real y aproximado (considere que el valor real de $e^{0.5}$ es 1,648721271 después del agregado de cada término hasta que el valor absoluto del error aproximado sea menor que el criterio establecido por la fórmula de Scarborough para 3 cifras significativas.

2.3. En la tabla que sigue se muestran las velocidades de formación del compuesto C, mediante una reacción enzimática, a partir de los reactivos A y B. Se indican las velocidades de formación con 3, 4, 5 y 6 cifras significativas. Calcule los errores relativos porcentuales para un tiempo $t = 12s$, considerando que el valor real con 10 cifras significativas es 4984,921508 $\mu g/s$.

Tiempo (s)	Velocidad de formación ($\mu\text{g/s}$)			
	Cifras significativas			
	3	4	5	6
4	3200	3200	3200,4	3200,46
8	4489	4489	4489,3	44892,41
12	4980	4984	4984,8	4984,91

2.4. Aplique las reglas de redondeo a:

- 5,6723 a 3 cifras significativas
- 10,406 a 4 cifras significativas
- 7,3500 a 2 cifras significativas

2.5. Evalúe:

$$2,2 - 1,768 \text{ y } 0,0642 \times 4,80$$

2.6. Utilice términos en la Serie de Taylor de cero a cuarto orden para aproximar la función $f(x) = -0,2x^4 - 0,35x^3 - 0,5x^2 - 0,45x + 1,8$ para $x = 2$ y calcule el error de truncamiento en cada caso. Considere $h=1$.

2.7. Represente las siguientes cantidades como números de punto flotante. Considerando base 10 y 4 dígitos significativos.

- 28,31; b) -0,00144; c) 38000

Capítulo 3

SOLUCION NUMERICA DE ECUACIONES

Uno de los problemas más antiguos y básicos del cálculo numérico es el problema de búsqueda de la solución de una ecuación, es decir encontrar los valores de la variable x que satisfacen la ecuación $f(x)=0$, para una función f dada. Las ecuaciones pueden ser algebraicas (la función f es un polinomio), por ejemplo: $x^2+5x-4=0$ o bien trascendentes puesto que están constituidas por funciones trascendentes tales como funciones exponenciales, trigonométricas, logarítmicas, etc., por ejemplo: $e^{-x} - x$; $\sin x$; $\ln x^2 - 1$. Solamente en casos muy simples, de ecuaciones algebraicas, existen fórmulas que permiten resolverlas en términos de sus coeficientes, para el resto de las ecuaciones se utilizan métodos aproximados que permiten mejorar la solución por simple repetición del mismo método hasta adquirir el grado de aproximación requerido. Estos métodos son apropiados para realizarlos utilizando computadoras puesto que comprenden la repetición de un proceso, es decir **iteración**. A continuación se describen métodos numéricos que permiten calcular las raíces de ecuaciones algebraicas y trascendentes.

3.1. METODO GRAFICO

Este es un método muy simple, consiste en calcular valores de la variable dependiente para distintos valores de la variable independiente. A continuación se grafican en un sistema de ejes coordenados cartesianos y se observa el punto de intersección de la función con el eje de las abscisas. Este punto proporciona una primera aproximación a la raíz de la ecuación.

- Por ejemplo, si se desea determinar, aplicando el método gráfico, los valores aproximados de las raíces de $x^2-6x+1=0$. Para ello se calcula el valor de la función en el intervalo $[-2,8]$ y se representan los valores en un sistema de ejes cartesianos (Figura 3.1).

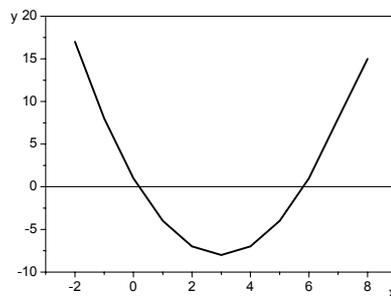


Figura 3.1. Gráfico del polinomio x^2-6x+1

Se observa en el gráfico que las raíces aproximadas son 0 y 6.

3.2. METODOS NUMERICOS DE CÁLCULO DE UNA RAIZ

Los métodos de cómputo de una raíz real de una ecuación involucra dos pasos, en primer lugar la determinación del intervalo de búsqueda, es decir el intervalo al que la raíz pertenece, siempre que la ecuación esté vinculada a un sistema físico y en segundo lugar la selección y aplicación de un método numérico apropiado para determinar la raíz con la exactitud adecuada.

Estos métodos se clasifican en dos categorías: métodos abiertos y métodos cerrados. Los métodos cerrados, tales como el método de la bisección y el de la falsa posición, son aquellos que usan intervalos, se caracterizan por ser siempre convergentes pero la velocidad de convergencia es lenta. Los métodos abiertos, método de aproximaciones sucesivas, de Newton-Raphson, de Newton de 2º orden, de Von Mises, de la secante, requieren información únicamente de un punto, o de dos pero que no necesariamente encierran a la raíz. La convergencia es más rápida pero algunas veces divergen.

3.2.1. Métodos cerrados

3.2.1.1. Método de la Bisección

El método de la bisección, conocido también como de corte binario, de partición en dos intervalos iguales, de búsqueda binaria o de Bolzano se basa en el Teorema del Valor Intermedio y en el teorema de Bolzano.

Teorema del valor intermedio: Si $f \in [a,b]$ y k es un número cualquiera comprendido entre $f(a)$ y $f(b)$ entonces existe un c en el intervalo (a,b) tal que $f(c)=k$.

Teorema de Bolzano: sea f una función continua en el intervalo $[a,b]$, con $f(a)f(b)<0$ entonces existe al menos un punto $c \in [a,b]$ tal que $f(c)=0$

Si se tiene una función $f(x)$ continua en el intervalo $[x_L, x_U]$, con $f(x_L)$ y $f(x_U)$ de signos opuestos, por el teorema anterior, existe un valor x^* incluido en el intervalo (x_L, x_U) tal que $f(x^*)=0$. El método requiere de dividir el intervalo a la mitad y localizar la mitad que contiene a la raíz. El proceso se repite y su aproximación mejora a medida que los subintervalos se dividen en intervalos más y más pequeños. La primera aproximación a la raíz, se determina como $x_M = \frac{(x_L + x_U)}{2}$,

ver Figura 3.2.

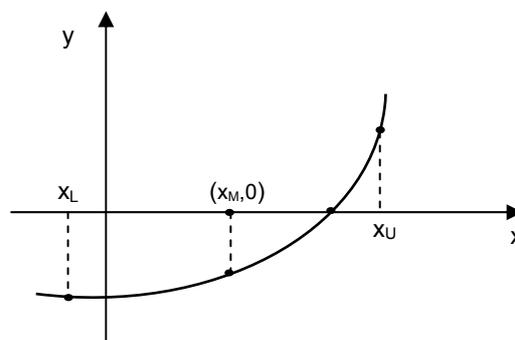


Figura 3.2. Esquema del método de la Bisección

Para determinar en que subintervalo está la raíz debe considerarse lo siguiente:

- Si $f(x_M) = 0$, entonces la raíz es igual a x_M .
- Si $f(x_L) \cdot f(x_M) < 0$, la raíz se encuentra en el primer subintervalo (x_L, x_M)
- Si $f(x_L) \cdot f(x_M) > 0$, la raíz se encuentra en el segundo subintervalo (x_M, x_U) .

Se calcula una nueva aproximación a la raíz en el nuevo subintervalo y se continúa con las iteraciones hasta la cota de error fijada de antemano.

Las ventajas y desventajas del método se detallan a continuación:

Ventajas

- ✓ Es siempre convergente

Desventajas

- Converge muy lentamente
- Si existe más de una raíz en el intervalo, el método permite encontrar sólo una de ellas

A continuación se presenta un algoritmo de este método iterativo.

Algoritmo para el método de Bisección

Permite encontrar una solución a la ecuación $f(x)=0$, dada la función continua f en el intervalo $[x_L, x_U]$.

Considerando la siguiente notación:

x_L : límite inferior del intervalo considerado

x_U : límite superior del intervalo considerado

x_M : raíz aproximada

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Tomar $i = 1$

Paso 2: Mientras $i \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Tomar $x_M = x_L + \frac{(x_L + x_U)}{2}$

Paso 4: Si $\frac{x_L + x_U}{2} < E$ ó $f(x_M)=0$, SALIDA x_M

PARAR

Paso 5: Tomar $i = i+1$

Paso 6: Si $f(x_L) \cdot f(x_M) > 0$, tomar $x_L = x_M$,

si no tomar $x_U = x_M$

Paso 7: SALIDA ('Procedimiento completado sin éxito después de N ' iteraciones)

PARAR

- Por ejemplo, si se desea determinar, aplicando el método de la bisección, una de las raíces de la ecuación $x^3+x^2-3x-3=0$, considerando que la función cambia de signo en el intervalo (1,2).

La estimación inicial de la raíz se sitúa en el punto medio de este intervalo:

$$x_M = \frac{(x_L + x_U)}{2} = \frac{1+2}{2} = 1,5$$

Ahora se calcula $f(x_L)$. $f(x_M)$:

$f(1) \cdot f(1,5) = (-4) \cdot (-1,875) = 7,5 > 0$ no hay cambio de signo entre a y x_1 , entonces la raíz se encuentra en el intervalo (1,5, 2).

La aproximación a la raíz en la segunda iteración se calcula como $x_M = \frac{1,5+2}{2} = 1,75$

y $f(1,5) \cdot f(1,75) = -1,70312 < 0$, por lo tanto la raíz está en (1,5, 1,75), entonces la tercera iteración es:

$$x_M = \frac{1,5+1,75}{2} = 1,625$$

y así sucesivamente, en la sexta iteración se llega a un valor de $x_6=1,734$ bastante próximo al valor verdadero de la raíz 1,7321

3.2.1.2. Método de la Falsa Posición o Regula Falsi

Este método es similar al de la bisección salvo que la siguiente iteración se toma en la intersección de una recta entre el par de valores x y el eje de las abscisas en lugar de tomar el punto medio. El reemplazo de la curva por una línea recta da una "posición falsa" de la raíz, de aquí el nombre de método de la regla falsa.

Para aplicarlo se eligen los extremos x_L y x_U del intervalo entre los que se encuentra la raíz, verificando que se cumpla que $f(x_L) \cdot f(x_U) < 0$. Si se observa la Figura 3.3, por semejanza de triángulos, puede escribirse la siguiente igualdad:

$$\frac{f(x_L)}{x_M - x_L} = \frac{f(x_U)}{x_M - x_U} \quad (3.1)$$

Y despejando de la expresión (3.1) el valor de x_M , que es una aproximación de la raíz, se obtiene la siguiente fórmula de iteración o recurrencia:

$$x_M = x_U - f(x_U) \frac{x_U - x_L}{f(x_U) - f(x_L)} \quad (3.2)$$

El valor de x_M , calculado con la ecuación (3.2), reemplaza a uno de los dos valores, x_L o x_U que produzca un valor de la función que tenga el mismo signo de $f(x_M)$. De esta manera los valores x_L y x_U siempre encierran a la raíz.

- Si $f(x_M)=0$ el proceso termina.
- Si $f(x_M)$ tiene el mismo signo de $f(x_L)$, el próximo paso es elegir $x_L = x_M$ y $x_U = x_U$.
- Si $f(x_M)$ tiene el mismo signo de $f(x_U)$ el próximo paso es elegir $x_L = x_L$ y $x_U = x_M$.

El proceso se repite en la misma forma hasta llegar a la cota de error.

En la Figura 3.3 se presenta un esquema del método.

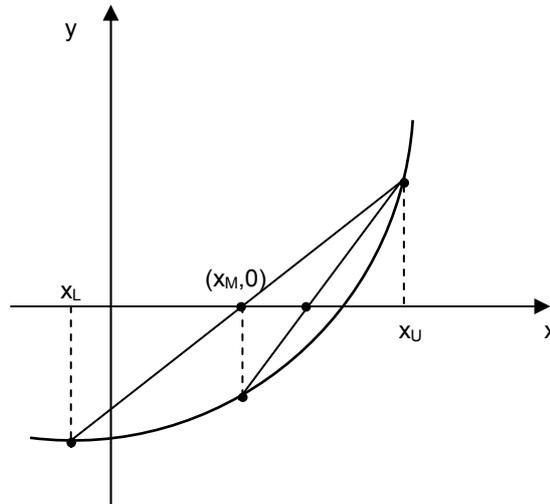


Figura 3.3. Esquema del método de la Falsa Posición

Un algoritmo para este método iterativo es el que sigue.

Algoritmo para el método de la Falsa Posición

Permite encontrar una solución a la ecuación $f(x)=0$, dada la función continua f en el intervalo $[x_L, x_U]$, considerando la siguiente notación:

x_L : límite inferior del intervalo considerado

x_U : límite superior del intervalo considerado

x_M : raíz aproximada

$f(x_L)$: valor de la función en x_L

$f(x_U)$: valor de la función en x_U

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Tomar $i = 1$

Paso 2: Mientras $i \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Tomar $x_M = x_U - f(x_U) \frac{x_U - x_L}{f(x_U) - f(x_L)}$

Paso 4: Si $f(x_U) \frac{x_U - x_L}{f(x_U) - f(x_L)} < E$ ó $f(x_M)=0$, SALIDA x_M

PARAR

Paso 5: Tomar $i = i+1$

Paso 6: Si $f(x_L) \cdot f(x_M) > 0$, tomar $x_L = x_M$,
si no tomar $x_U = x_M$

Paso 7: SALIDA ('Procedimiento completado sin éxito después de N ' iteraciones)

PARAR

- Por ejemplo, si se desea determinar, aplicando el método de la falsa posición, una de las raíces de la ecuación planteada en el ítem 3.2.1.1, considerando que la función cambia de signo en el intervalo (1,2).

Se iniciarán los cálculos con los valores iniciales $x_L = 1$ y $x_U = 2$

Primera iteración:

$$x_L = 1, f(x_L) = -4$$

$$x_U = 2, f(x_U) = 3$$

$$x_M = 2 - 3 \frac{(2-1)}{3-(-4)} = 1,57142$$

Segunda iteración:

Como $f(x_M) = -1,36449$ tiene el mismo signo que $f(x_L)$, x_M se convierte en el límite superior de la siguiente iteración, $x_U = 1,57142$

$$x_L = 1, f(x_L) = -4$$

$$x_U = 1,57142, f(x_U) = -1,36449$$

$$x_M = 1,57142 - 1,36449 \frac{(1,57142-1)}{-1,36449-(-4)} = 1,70540$$

Se procede de esta manera hasta que en la quinta iteración el valor de x_M es 1,73194 muy próximo al valor verdadero 1,7321

Las ventajas y desventajas del método son:

Ventajas

- ✓ Es siempre convergente
- ✓ Converge más rápidamente que el método de la bisección

Desventajas

- Si existe más de una raíz en el intervalo, el método permite encontrar sólo una de ellas

3.2.2. Métodos abiertos

3.2.2.1. Método de Aproximaciones sucesivas

El método de aproximaciones sucesivas o iteración de punto fijo es una forma muy útil y simple de encontrar la raíz de una ecuación de la forma $f(x)=0$. Para ello se reordena la ecuación de manera que x sea igual a $g(x)$. Esta transformación se puede llevar a cabo mediante operaciones algebraicas o simplemente agregando x en ambos miembros de la ecuación original. A una solución de esta ecuación se le llama un punto fijo de la función g . Sin embargo, es muy importante la selección de la función $g(x)$, ya que no siempre converge con cualquier forma elegida de $g(x)$.

En síntesis, sea:

$$f(x)=0 \quad (3.3)$$

una ecuación algebraica o trascendente y $x = x^*$ una raíz de ella o sea un valor de x tal que la verifique idénticamente, es decir: $f(x^*)=0$. Sumando x a ambos miembros de (3.3) se tiene $f(x) + x = x$ y llamando $g(x)= x + f(x)$ se tiene que:

$$x = g(x) \quad (3.4)$$

El método de aproximaciones sucesivas consiste en sustituir x_0 , un valor aproximado de la raíz x^* en el segundo miembro de la ecuación (3.4), con lo que se obtiene: $x_1=g(x_0)$

Procediendo reiteradamente de esta manera, la i -ésima aproximación o i -ésima iteración es: $x_{i+1}=g(x_i)$ (3.5)

Un algoritmo para este método iterativo es el que sigue.

Algoritmo para el método de Iteración de Punto Fijo

Permite encontrar una solución a la ecuación $x=g(x)$, dada una aproximación inicial x_0 .

Considerando la siguiente notación:

x_0 : aproximación inicial a la raíz

x : aproximación a la raíz

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Tomar $i = 1$

Paso 2: Mientras $i \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Tomar $x= g(x_0)$

Paso 4: Si $|x - x_0| < E$, SALIDA x

PARAR

Paso 5: Tomar $i = i+1$

Paso 6: Tomar $x_0=x$

Paso 7: SALIDA ('Procedimiento completado sin éxito después de N ' iteraciones)

PARAR

Si a medida que n crece, x_{i+1} tiende a x^* se dice que el método converge, en caso contrario diverge. Si el método converge, la diferencia entre dos iteraciones sucesivas será más pequeña a medida que i aumenta, lo que proporciona un criterio de terminación de aplicación del método. Se acepta el siguiente teorema sin demostración:

Teorema: El método de aproximaciones sucesivas converge si existe un número fijo m tal que: $|f'(x)| \leq m < 1$.

Un planteamiento gráfico diferente es el de separar la ecuación $x = g(x)$ en dos partes, como $y_1 = x$ (recta a 45°) y $y_2 = g(x)$, éstas se pueden graficar por separado. Los valores de x correspondientes a las intersecciones de estas funciones representan las raíces de $f(x) = 0$. En la Figura 3.4 se muestra la convergencia (a) y (b) ya que verifican el teorema de la convergencia y la divergencia (c) y (d) en el método de Aproximaciones sucesivas.

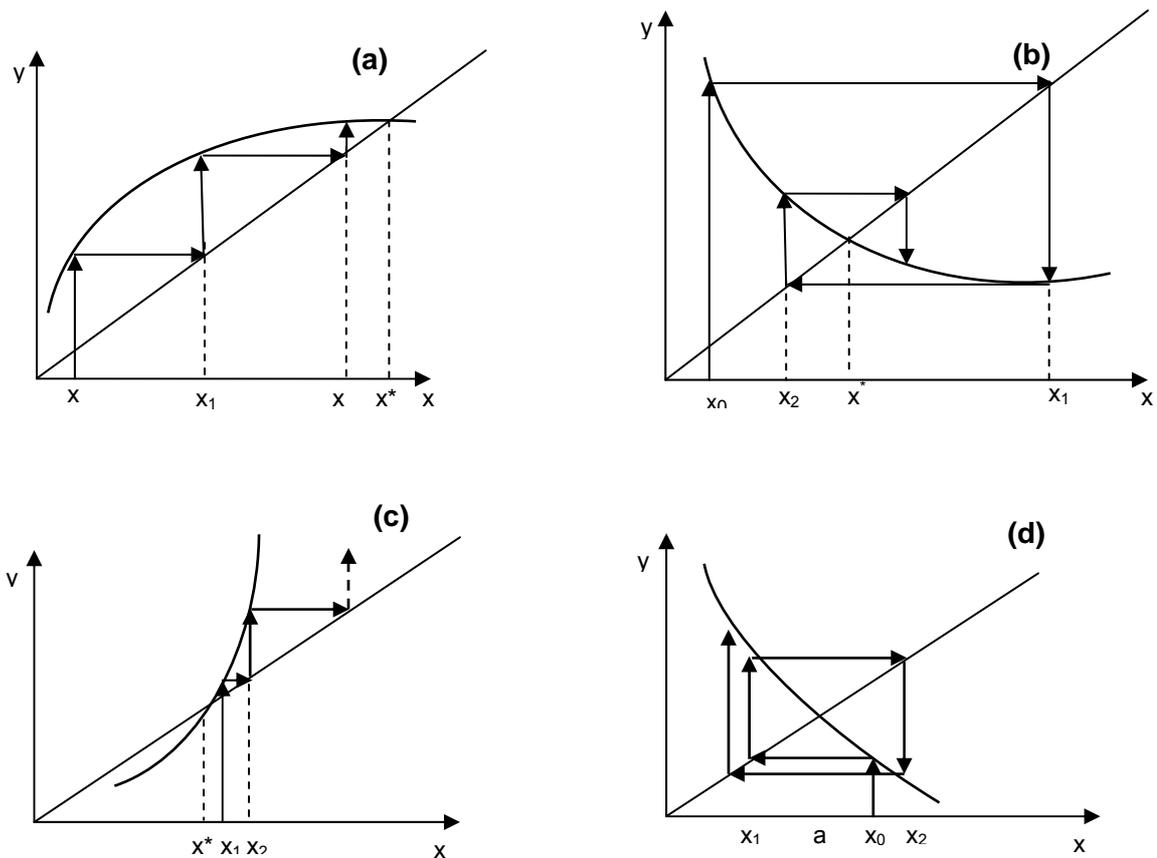


Figura 3.4. Convergencia y divergencia del Método de Iteración de Punto Fijo

- Por ejemplo, si se desea determinar, aplicando el método de aproximaciones sucesivas, una de las raíces de la ecuación $x^2 - 4x + 2 = 0$, existen muchas formas de cambiar la ecuación a la forma $x = g(x)$.

Si se despeja x de la ecuación se tiene: $x = \frac{x^2 + 2}{4}$, por lo tanto la ecuación de recurrencia

o iteración es $x_{i+1} = \frac{(x_i)^2 + 2}{4}$

En la tabla siguiente se muestran los valores obtenidos, se comienza con una aproximación $x_0=1$. El valor real de la raíz (0.586) se alcanza luego de cinco iteraciones.

x_i	x_{i+1}
1	0,75
0,75	0,641
0,641	0,603
0,603	0,591
0,591	0,587
0,587	0,586

Las ventajas y desventajas del método son:

Ventajas

- ✓ Es simple
- ✓ Es flexible

Desventajas

- No siempre es convergente, depende de la forma de la función $g(x)$

3.2.2.2. Método de Newton-Raphson o de la Tangente

En este método si el valor inicial de la raíz es x_i , se puede extender una tangente desde el punto $(x_i, f(x_i))$. El punto donde esta tangente corta al eje x representa una aproximación mejorada de la raíz.

Existen por lo menos tres maneras usuales de introducir el método de Newton – Raphson puesto que se puede derivar a partir de un método gráfico ó a partir de la de iteración de punto fijo ó bien utilizando la serie de Taylor. El desarrollo a partir de esta serie es el siguiente:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(\xi)}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 \quad (3.6)$$

donde ξ se encuentra en alguna parte del intervalo x_i y x_{i+1} . Truncando la serie de Taylor después de la primera derivada, se obtiene:

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) \quad (3.7)$$

donde $f'(x_i)$ es además de la derivada primera, la pendiente de la recta descripta.

En la intersección con el eje x , $f(x_{i+1})$ debe ser igual a cero, o sea:

$$0 \cong f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) \quad (3.8)$$

Resolviendo para x_{i+1} :

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (3.9)$$

La fórmula (3.9) se denomina Fórmula de Newton – Raphson.

Este método definido por el denominador $f'(x_i)$ hace que geoméricamente se pase de una aproximación a la siguiente por la tangente a la curva $y = f(x)$ trazada en el punto correspondiente a la aproximación presente, esto puede observarse en la Figura 3.5.

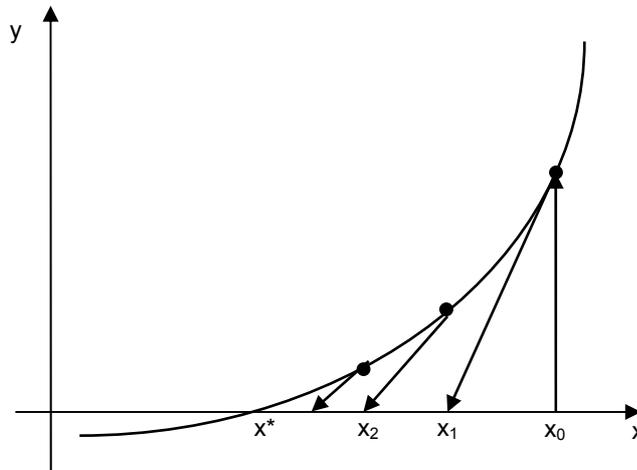


Figura 3.5. Método de Newton-Raphson

Un algoritmo para este método iterativo es el que sigue.

Algoritmo para el método de Newton-Raphson

Permite encontrar una solución a la ecuación $f(x)=0$, dada una aproximación inicial x_0 .

Considerando la siguiente notación:

x_0 : aproximación inicial a la raíz

x : aproximación a la raíz

$f(x)$: función en estudio

$f'(x)$: derivada de la función

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Tomar $i = 1$

Paso 2: Mientras $i \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Tomar $x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

Paso 4: Si $|x - x_0| < E$, SALIDA x

PARAR

Paso 5: Tomar $i = i+1$

Paso 6: Tomar $x_0 = x$

Paso 7: SALIDA ('Procedimiento completado sin éxito después de N iteraciones)

PARAR

- Por ejemplo, si se desea determinar, aplicando el método Newton-Raphson, una de las raíces de la ecuación $x^2 - 4x + 2=0$, se calcula la derivada primera de la función dada.

Como $f(x_i) = x^2 - 4x + 2$, su derivada primera es: $f'(x_i) = 2x - 4$. Por lo tanto la fórmula de recurrencia es:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} = x_i - \frac{x_i^2 - 4x + 2}{2x_i - 4}$$

En la tabla siguiente se muestran los valores obtenidos, se comienza con una aproximación $x_0=1$. El valor real de la raíz (0.586) se alcanza luego de dos iteraciones.

x_i	x_{i+1}
1	0,5
0,5	0,583
0,583	0,586

Las ventajas y desventajas del método son:

Ventajas

- ✓ Converge más rápido que cualquiera de los métodos analizados hasta ahora.

Desventajas

- No siempre es convergente, depende de la naturaleza de la función
- No es conveniente en el caso de raíces múltiples
- Puede alejarse del área de interés si la pendiente es cercana a cero

3.2.2.3. Método de Newton de segundo orden

Si en lugar de considerar los dos primeros términos de la serie de Taylor se consideran los tres primeros términos (3.6), se representa con Δx_i a la diferencia entre x_{i+1} y x_i y se iguala a cero, se tiene:

$$f(x_i) + \Delta x_i f'(x_i) + \frac{(\Delta x_i)^2}{2} f''(x_i) = 0 \quad (3.10)$$

y sustituyendo Δx_i por $-\frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$ (a partir de la fórmula de Newton-Raphson) queda:

$$f(x_i) + \Delta x_i \left[f'(x_i) - \frac{1}{2} \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} f''(x_i) \right] = 0 \quad (3.11)$$

Despejando Δx_i se obtiene:

$$\Delta x_i = - \frac{f(x_i)}{f'(x_i) - \frac{f(x_i)}{2f'(x_i)} f''(x_i)} \quad (3.12)$$

De la ecuación (3.12) se puede despejar el valor de x_{i+1} :

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i) - \frac{f(x_i)}{2f'(x_i)} f''(x_i)} \quad (3.13)$$

Este método considera un mayor número de términos de la serie por lo tanto converge más rápidamente que el método de Newton-Raphson.

Un algoritmo para este método iterativo es el que sigue.

Algoritmo para el método de Newton de segundo orden

Permite encontrar una solución a la ecuación $f(x)=0$, dada una aproximación inicial x_0 .

Considerando la siguiente notación:

x_0 : aproximación inicial a la raíz

x : aproximación a la raíz

$f(x)$: función en estudio

$f'(x)$: derivada primera de la función

$f''(x)$: derivada segunda de la función

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Tomar $i = 1$

Paso 2: Mientras $i \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Tomar $x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0) - \frac{f(x_0)}{2f'(x_0)} f''(x_0)}$

Paso 4: Si $|x - x_0| < E$, SALIDA x

PARAR

Paso 5: Tomar $i = i+1$

Paso 6: Tomar $x_0 = x$

Paso 7: SALIDA ('Procedimiento completado sin éxito después de N ' iteraciones)

PARAR

3.2.2.4. Método de Von Mises

El método de Newton-Raphson puede ser problemático si se está en puntos alejados de las raíces y cercanos a puntos donde el valor de $f'(x_i)$ sea próximo a cero. Para ello von Mises sugirió utilizar Newton-Raphson (fórmula 3.9) sustituyendo el denominador $f'(x_i)$ por $f'(x_0)$, es decir obtener geoméricamente las siguientes aproximaciones por medio de paralelas a la primera tangente. La ecuación de recurrencia es:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_0)} \quad (3.14)$$

En la Figura 3.6 se muestra un esquema de la aplicación del Método de von Mises.

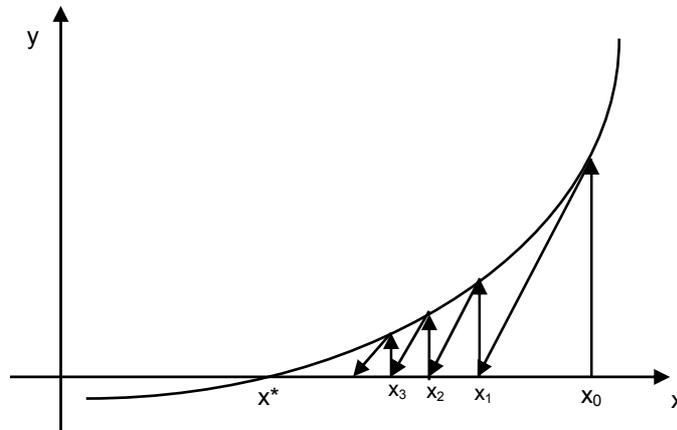


Figura 3.6. Método de von Mises

Un algoritmo para este método iterativo es el que sigue.

Algoritmo para el método de Von Mises

Permite encontrar una solución a la ecuación $f(x)=0$, dada una aproximación inicial x_0 .

Considerando la siguiente notación:

x_0 : aproximación inicial a la raíz

x : aproximación a la raíz

$f(x)$: función en estudio

$f'(x_0)$: valor de la derivada de la función para el valor inicial de aproximación x_0

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Tomar $i = 1$

Paso 2: Mientras $i \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Tomar $x = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

Paso 4: Si $|x - x_0| < E$, SALIDA x

PARAR

Paso 5: Tomar $i = i+1$

Paso 6: Tomar $x_0 = x$

Paso 7: SALIDA ('Procedimiento completado sin éxito después de N' iteraciones)

PARAR

3.2.2.5. Método de la secante

Surge como una variación del método de Newton-Raphson, en lugar de tomar la tangente se toma la secante. De manera que la derivada se aproxima por una diferencia dividida, es decir:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i} \quad (3.15)$$

Esto puede sustituirse en la fórmula (3.9), de manera que se llega a:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_{i-1} - x_i)}{f(x_{i-1}) - f(x_i)} \quad (3.16)$$

La ecuación (3.16) es la fórmula para el método de la secante. El método requiere de dos valores iniciales pero como no se requiere que $f(x)$ cambie de signo en el intervalo considerado, no se lo incluye dentro de los métodos que utilizan intervalos.

Un algoritmo para este método iterativo es el que sigue.

Algoritmo para el método de la Secante

Permite encontrar una solución a la ecuación $f(x)=0$, dadas dos aproximación inicial x_0 y x_1 .

Considerando la siguiente notación:

x_0 : aproximación inicial a la raíz

x_1 : aproximación inicial a la raíz

x : aproximación a la raíz

$f(x)$: función en estudio

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Tomar $i = 2$

Paso 2: Mientras $i \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Tomar $x = x_1 - \frac{f(x_1)(x_0 - x_1)}{f(x_0) - f(x_1)}$

Paso 4: Si $|x - x_0| < E$, SALIDA x

PARAR

Paso 5: Tomar $i = i+1$

Paso 6: Tomar $x_0 = x_1$;

$x_1 = x$

Paso 7: SALIDA ('Procedimiento completado sin éxito después de N ' iteraciones)

PARAR

En la Figura 3.7 se muestra un esquema del método.

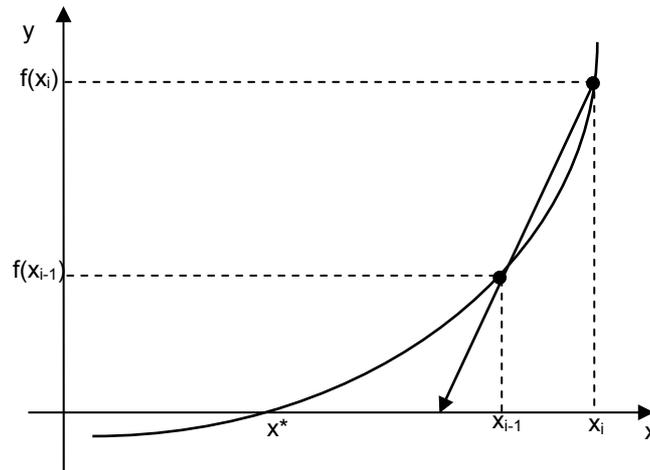


Figura 3.7. Método de la Secante

3.3. RAÍCES DE POLINOMIOS

Los polinomios son funciones de relevancia en modelos de ciencia e ingeniería, a continuación se detallan teoremas y reglas necesarias para el cálculo de sus raíces.

3.3.1. Teoremas fundamentales de la Teoría de ecuaciones algebraicas.

El teorema fundamental del Algebra indica:

Teorema Fundamental del Algebra: Toda ecuación algebraica de grado n admite n raíces reales o complejas.

A continuación se enuncian y demuestran algunos teoremas de interés para encontrar las raíces de polinomios.

Teorema del residuo: el residuo que resulta de dividir el polinomio $P(x)$ entre el binomio $(x - a)$, es igual al valor del polinomio cuando $x = a$.

Demostración:

Sea $Q(x)$ el cociente y R el residuo que resulta de dividir $P(x)$ entre $x - a$, por definición de división de un polinomio entre un binomio se tiene:

$$P(x) = (x - a) Q(x) + R$$

y si: $x = a$, $P(a) = (a - a) Q(a) + R \Rightarrow P(a) = R$ con lo que queda demostrado el teorema.

Teorema recíproco: el valor del polinomio $P(x)$ para $x = a$, es igual al residuo que resulta de dividir $P(x)$ entre $x - a$.

Teorema del factor: si $x = a$ es una raíz de la ecuación $P(x) = 0$, entonces $x - a$ es un factor del polinomio $P(x)$.

$$P(x) = (x - a) Q(x) + R$$

y si: $x = a, P(a) = (a-a) Q(a) + R \Rightarrow P(a) = R$

Como $P(a) = 0$ puesto que a es una raíz de $P(x) = 0$, el resto R es igual a cero por lo tanto puede afirmarse que $(x - a)$ es un factor de $P(x)$.

3.3.2. División sintética

La división de un polinomio $P(x)$ entre $(x-a)$ puede expresarse como:

$$P(x) = (x - a) Q(x) + R \quad (3.17)$$

donde $Q(x)$ es el cociente y R el resto o residuo.

Si se considera que

$Q(x) = A_0 x^{n-1} + A_1 x^{n-2} + A_2 x^{n-3} + \dots + A_{n-2} x + A_{n-1}$ es el cociente y R el residuo o resto que resulta de dividir el polinomio: $P_n(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-1} x + a_n$ entre el binomio $(x - a)$, entonces puede expresarse como:

$$a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_{n-1} x + a_n = A_0 x^n + (A_1 - a A_0) x^{n-1} + (A_2 - a A_1) x^{n-2} + \dots + (A_{n-1} - a A_{n-2}) x + (R - a A_{n-1})$$

Como los polinomios de ambos miembros son iguales los coeficientes de las mismas potencias de x en ambos polinomios deben ser iguales entre sí, luego:

$$\begin{aligned} a_0 &= A_0 \\ a_1 &= A_1 - a A_0 \\ &\dots \\ a_{n-1} &= A_{n-1} - a A_{n-2} \\ a_n &= R - a A_{n-1} \end{aligned}$$

de donde se obtiene:

$$\begin{aligned} A_0 &= a_0 \\ A_1 &= a_1 + a A_0 \\ &\dots \\ A_{n-1} &= a_{n-1} + a A_{n-2} \\ R &= a_n + a A_{n-1} \end{aligned}$$

Estos son los coeficientes del polinomio, cociente y residuo buscados, los cálculos se pueden arreglar de la siguiente forma:



Este es un esquema de la división sintética, se debe ordenar el polinomio $P(x)$ en potencias decrecientes de x , insertando un 0 para todos los términos con coeficientes nulos. Si $P(x)$ es de grado n , entonces el cociente $Q(x)$ es de grado $n-1$.

3.3.3. Regla de los signos de Descartes

El número de raíces reales positivas en la ecuación algebraica de coeficiente reales $P(x) = 0$, es igual al número de cambios de signo en el polinomio $P(x)$ o es menor que este número en un número par. El número de raíces negativas es igual al número de cambios de signo en el polinomio $P(-x)$ o es menor que este número en un número par.

3.3.4. Raíces racionales

Para determinar las raíces racionales de una ecuación algebraica de coeficientes enteros o reales si se elimina la parte decimal multiplicándose por un número lo suficientemente grande pueden establecerse los siguientes pasos:

1. Escribir la ecuación en orden descendente de potencias de x .
2. Separar todas las raíces nulas.
3. Determinar los números máximos de raíces positivas y negativas por la regla de los signos de Descartes.
4. Establecer las posibles raíces racionales.
5. Probar que una de estas es raíz, aplicando el teorema recíproco del factor.
6. Separar la raíz determinada y estudiar la ecuación reducida obtenida, de manera de eliminar de la lista original de posibles raíces racionales las que ya no pueden ser.

3.3.5. Raíces irracionales

Si una ecuación algebraica posee raíces irracionales, en primer lugar se deben aplicar los procedimientos descritos anteriormente para encontrar y separar las raíces racionales, de forma que se tenga una ecuación reducida que posea solamente raíces irracionales. Si esta ecuación es de primer o segundo grado, sus raíces se obtienen por medio de fórmulas, para grados superiores al segundo se pueden aplicar los métodos detallados anteriormente.

3.3.5.1. Método de Newton-Raphson

Como la función considerada es un polinomio, se puede escribir la fórmula (3.9) como:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{P(x_i)}{P'(x_i)} \quad (3.18)$$

El polinomio $P(x)$ puede expresarse como la ecuación (3.17), si se toma $x = x_i$, se tiene que:

$$P(x_i) = R \quad (3.19)$$

El denominador de la ecuación (3.18) puede obtenerse derivando la expresión (3.17) con respecto a x :

$$P'(x) = (x-x_i)Q'(x) + Q(x) \quad (3.20)$$

Y haciendo $x=x_i$, se llega a que:

$$P'(x_i) = Q(x_i) \quad (3.21)$$

Y de acuerdo con el teorema recíproco al del residuo $Q(x)$ puede determinarse como el residuo R' que resulta de dividir $Q(x)$ entre $(x-x_i)$ puesto que:

$$Q(x) = (x-x_i)S(x) + R' \quad (3.22)$$

Si se toma $x=x_i$, resulta:

$$P'(x_i) = Q(x_i) = R' \quad (3.23)$$

Sustituyendo en (3.18) se obtiene la expresión de Newton-Raphson para resolver una ecuación algebraica:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{R}{R'} \quad (3.24)$$

Realizando consideraciones similares se llega a la fórmula de recurrencia de Newton de segundo orden para una ecuación algebraica:

$$\frac{1}{\Delta x_i} = -\frac{P'(x_i)}{P(x_i)} + \frac{1}{2} \frac{P''(x_i)}{P'(x_i)} = \frac{R''}{R'} - \frac{R'}{R} \quad (3.25)$$

- Por ejemplo, si se desea determinar, aplicando el método Newton-Raphson, una de las raíces irracionales de la ecuación $x^3 + 2x^2 - 3x - 3 = 0$, (se sabe que una de las raíces es 1.4605), se comienza con $x=2$:

	1	2	-3	-3
2		2	8	10
	1	4	5	7
2		2	12	
	1	6	17	

Entonces se aplica la fórmula (3.24) para obtener una mejor aproximación de la raíz:

$$x_1 = 2 - \frac{7}{17} = 1.5882$$

	1	2	-3	-3
1,5882		1,5882	5,6988	4,2862
	1	3,5882	2,6988	1,2862
1,5882		1,5882	8,2211	
	1	5,1764	10,9198	

$$x_2 = 1,5882 - \frac{1,2862}{10,9198} = 1,4704$$

Se realiza la división sintética para este valor y así sucesivamente hasta llegar al valor buscado.

EJERCICIOS PROPUESTOS

3.1. Calcule la raíz cuadrada negativa de 0.8 utilizando el método de aproximaciones sucesivas.

3.2. Evalúe, aplicando Iteración de Punto Fijo, el factor de fricción f en una tubería por la que circula un fluido con flujo turbulento. Este factor está dado por la ecuación:

$$\frac{1}{\sqrt{f}} = 1,14 - 2 \log \left[\frac{e}{D} + \frac{9,35}{Re \sqrt{f}} \right].$$

Considere que el diámetro $D = 0,2$ m; el espesor $e = 0,0035$ m y el número de Reynolds, $Re = 3 \times 10^4$.

3.3. Resuelva la ecuación: $\sin 2x = 0$, a partir de $x_0 = 1,165$, aplicando el método de Newton de 2° orden.

3.4. Aplique el método de von Mises, y luego compárelo con Newton-Raphson y Newton de 2° orden, para resolver: $4x^3 - 18x^2 + 12x - 6 = 0$

3.5. Considere la pared de un horno, de 0,08 m de espesor, la temperatura del lado interno es 642 K, si las pérdidas de calor desde la superficie externa se producen por convección y radiación, determine la temperatura del lado externo de la pared (T_1). La ecuación que rige esta situación problemática es:

$$\frac{k}{\Delta x} (T_1 - T_0) + \varepsilon \sigma (T_1^4 - T_f^4) + h(T_1 - T_f) = 0$$

Los datos son:

Conductividad térmica, $k = 1,33$ W/mK; Emisividad, $\varepsilon = 0.8$; Temperatura del lado interno de la pared, $T_0 = 642$ K; Temperatura del lado externo de la pared, T_1 ; Temperatura del aire, $T_f = 299$ K;

Coeficiente convectivo de transferencia calórica, $h = 18 \text{ W/m}^2\text{K}$; Constante de Stefan-Boltzmann, $\sigma = 5,67 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4$; Espesor de la pared, $\Delta x = 0,08 \text{ m}$.

3.6. Un proyecto de Ingeniería Química requiere que se calcule, exactamente, el volumen molar (v) de monóxido de carbono a 80 bares de presión y 226 K, de tal forma que se pueda determinar el tubo adecuado que los contenga. Aplique los métodos de Newton Raphson y von Mises.

Datos: $R = 0,08314 \text{ bar m}^3/\text{kgmol K}$; $a = 1,396 \text{ bar m}^6/(\text{kgmol})^2$; $b = 0,0345 \text{ m}^3/\text{kgmol}$

3.7. Demuestre que: 1, 2 y -2, son raíces de la ecuación: $x^3 - x^2 - 4x + 4 = 0$, utilizando el teorema del factor.

3.8. Resuelva la ecuación: $x^3 - 7x^2 - 10x + 16 = 0$, utilice la regla de los signos de Descartes.

Capítulo 4

SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES

En muchas ocasiones los problemas de matemáticas aplicadas a la ciencia e ingeniería pueden reducirse a un sistema de ecuaciones algebraicas lineales. Estos sistemas pueden resolverse tanto por métodos exactos como por métodos aproximados.

4.1. CONCEPTOS PREVIOS

Una **ecuación algebraica lineal** es una ecuación en donde en cada término aparece únicamente una variable o incógnita elevada a la primera potencia.

Por ejemplo, $a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \dots + a_{1n} x_n = c_1$, es una ecuación algebraica lineal en las variables $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$. Se admite que los coeficientes $a_{11}, a_{12}, a_{13}, \dots, a_{1n}$ y el término independiente c_1 , son constantes reales.

Un **sistema de ecuaciones lineales** es un conjunto de ecuaciones que deben resolverse simultáneamente. Por ejemplo,

$$\begin{cases} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \dots + a_{1n} x_n = c_1 \\ a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + a_{23} x_3 + \dots + a_{2n} x_n = c_2 \\ a_{31} x_1 + a_{32} x_2 + a_{33} x_3 + \dots + a_{3n} x_n = c_3 \\ \vdots \\ a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + a_{n3} x_3 + \dots + a_{nn} x_n = c_n \end{cases} \quad (4.1)$$

Aplicando la definición de producto de matrices, en este sistema de n ecuaciones algebraicas lineales con n incógnitas, puede escribirse en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

Este sistema de ecuaciones se simboliza como $[A]_{n \times n} [X]_{n \times 1} = [C]_{n \times 1}$, en donde A es la matriz del sistema, X es el vector incógnita y C es el vector de términos independientes, que en forma sintética se simboliza como $AX=C$.

La matriz formada por A , a la que se le agrega el vector de términos independientes como última columna, se denomina matriz ampliada del sistema que se simboliza como $[A^a]$.

Solución de un sistema de ecuaciones: es un conjunto de valores de las incógnitas que verifican simultáneamente a todas y cada una de las ecuaciones del sistema.

De acuerdo con su solución, un sistema puede ser **compatible**, si admite solución; o **incompatible** si no admite solución. Un sistema compatible puede ser **determinado**, si la solución es única; o **indeterminado**, si la solución no es única.

Teorema de Rouché – Frobenius: Si el rango de la matriz de coeficientes es igual al rango de la matriz ampliada ($rg(A) = rg(A^a)$) entonces $AX = C$ es compatible, y recíprocamente.

El corolario de este teorema es el siguiente:

Un sistema Compatible será determinado (solución única) si el rango de la matriz de coeficientes es igual al número de incógnitas $r(A)=n$, y será indeterminado (infinitas soluciones) si el rango de la matriz de coeficientes es menor que el número de incógnitas $r(A) < n$

Las soluciones de un sistema compatible de la forma $AX=C$ permanecen invariantes ante las siguientes operaciones elementales:

- Intercambio de dos filas o renglones cualesquiera.
- Multiplicación de una fila por un escalar no nulo.
- Suma a una fila de una combinación lineal no nula de otro renglón

4.2. MÉTODOS DE RESOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES ALGEBRAICAS LINEALES

Para la resolución de Sistemas de ecuaciones algebraicas lineales se utilizan dos tipos de métodos: métodos directos y métodos iterativos.

4.2.1. Métodos directos

Los métodos directos son aquellos que obtiene la solución exacta, salvo errores de redondeo en los cálculos, luego de un número finito de operaciones elementales. Pertenecen a este grupo el método de eliminación de Gauss, el método de Gauss-Jordan, partición de matrices, etc. A continuación se describen los métodos mencionados.

4.2.1.1. Método de eliminación de Gauss

Consideremos el sistema de ecuaciones algebraicas lineales:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \dots + a_{1n} x_n = c_1 \\ a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + a_{23} x_3 + \dots + a_{2n} x_n = c_2 \\ a_{31} x_1 + a_{32} x_2 + a_{33} x_3 + \dots + a_{3n} x_n = c_3 \\ \vdots \\ a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + a_{n3} x_3 + \dots + a_{nn} x_n = c_n \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (4.3a) \\ (4.3b) \\ (4.3c) \\ \\ (4.3d) \end{array}$$

El procedimiento para resolver este sistema consta de dos pasos:

1. Eliminación hacia adelante de incógnitas.
2. Sustitución hacia atrás

1. Eliminación hacia adelante

En la eliminación hacia adelante, se reduce el conjunto de ecuaciones a un sistema triangular superior. El paso inicial consiste en multiplicar la primera ecuación del sistema (4.3a) por el cociente entre los coeficientes de la primera incógnita de la segunda y primera ecuación, $\frac{a_{21}}{a_{11}}$, obteniéndose:

$$a_{21}x_1 + \left(a_{21} \frac{a_{12}}{a_{11}}\right)x_2 + \dots + \left(a_{21} \frac{a_{1n}}{a_{11}}\right)x_n = a_{21} \frac{c_1}{a_{11}} \quad (4.4)$$

Como el primer término de la primera ecuación modificada (4.4) es idéntico al primer término de la segunda ecuación (4.3b), se elimina la primera incógnita de (4.3b) restando la ecuación (4.4) de (4.3b) y se llega a:

$$\left(a_{22} - a_{21} \frac{a_{12}}{a_{11}}\right)x_2 + \dots + \left(a_{2n} - a_{21} \frac{a_{1n}}{a_{11}}\right)x_n = c_2 - a_{21} \frac{c_1}{a_{11}}, \text{ es decir:}$$

$$a'_{22}x_2 + \dots + a'_{2n}x_n = c'_2 \quad (4.5)$$

el apóstrofe se utiliza para indicar que los coeficientes de las incógnitas han sufrido modificaciones en sus valores. El proceso se repite hasta que se elimina la primera incógnita de las ecuaciones restantes dando como resultado el siguiente sistema modificado:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \dots + a_{1n} x_n = c_1 \\ a'_{22} x_2 + a'_{23} x_3 + \dots + a'_{2n} x_n = c'_2 \\ \vdots \\ a'_{n2} x_2 + a'_{n3} x_3 + \dots + a'_{nn} x_n = c'_n \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} (4.6a) \\ (4.6b) \\ \\ (4.6d) \end{array}$$

La **ecuación pivotal**, es decir la que permanece invariante es la ecuación (4.6a). A continuación se repite el proceso para eliminar la segunda incógnita (x_2) desde la tercera ecuación hasta la última, restando a cada ecuación la segunda ecuación (4.6b) multiplicada por $\frac{a'_{i2}}{a'_{22}}$ (recordando que i representa al número de fila o renglón, siendo $i \geq 3$): Una vez completado este paso se repite el procedimiento de manera de eliminar las incógnitas iniciales de las ecuaciones subsiguientes hasta llegar a la última, transformándose el sistema en un sistema triangular superior:

$$a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \dots + a_{1n} x_n = c_1 \quad (4.7a)$$

$$a'_{22} x_2 + a'_{23} x_3 + \dots + a'_{2n} x_n = c'_2 \quad (4.7b)$$

$$a''_{33} x_3 + \dots + a''_{3n} x_n = c''_3 \quad (4.7c)$$

$$\vdots$$

$$a^{(n-1)}_{nn} x_n = c^{(n-1)}_n \quad (4.7d)$$

2. Sustitución hacia atrás

La ecuación (4.7c) puede resolverse para x_n :

$$x_n = \frac{c_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \quad (4.8)$$

Este resultado se puede sustituir en la $(n-1)$ -ésima ecuación y resolver ésta para x_{n-1} . El procedimiento se repite, evaluando las x restantes. Esquemáticamente:

$$\left. \begin{array}{l} \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & c_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & c_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & c_3 \end{array} \right] \\ \downarrow \\ \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & c_1 \\ & a'_{22} & a'_{23} & c'_2 \\ & & a''_{33} & c''_3 \end{array} \right] \end{array} \right\} \text{Eliminación hacia adelante}$$

$$\left. \begin{array}{l} x_3 = \frac{c''_3}{a''_{33}} \\ x_2 = \frac{(c'_2 - a'_{23} x_3)}{a_{22}} \\ x_1 = \frac{(c_1 - a_{12} x_2 - a_{13} x_3)}{a_{11}} \end{array} \right\} \text{Sustitución hacia atrás}$$

Una de las desventajas de este método es que durante el proceso en las fases de eliminación y sustitución es posible que ocurra una división entre cero. Por ello se ha desarrollado una estrategia del pivoteo que evita parcialmente estos problemas.

Si se resuelve un pequeño número de ecuaciones, el error por redondeo es pequeño y generalmente no afecta sustancialmente la precisión de los resultados, pero si se van a resolver simultáneamente muchas ecuaciones, el efecto acumulativo del error por redondeo puede introducir errores relativamente grandes en la solución. Por esta razón el número de ecuaciones simultáneas que se puede resolver satisfactoriamente con el método de eliminación de Gauss, utilizando de 8 a 10 dígitos significativos en las operaciones aritméticas, se limita generalmente a 15 o 20.

A continuación se indica el algoritmo del método.

Algoritmo de Eliminación de Gauss

Considerando el sistema (4.3) y la siguiente notación:

n : número de ecuaciones

a_{ij} : elementos de la matriz ampliada A^a ($1 \leq i \leq n$ y $1 \leq j \leq n + 1$)

p : índice del elemento pivote

F_i : fila i

Paso 1: Para $i = 1, \dots, n-1$ seguir los Pasos 2 a 4. (Eliminación hacia adelante)

Paso 2: Sea p el menor entero con $i \leq p \leq n$ y $a_{pi} \neq 0$.

Si p no puede encontrarse, SALIDA ('No existe solución única')

PARAR

Paso 3: Si $p \neq i$ intercambiar la fila p por la fila i

Paso 4: Para $j = i+1, \dots, n$ seguir los Pasos 5 a 6

Paso 5: Hacer $m_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{ii}}$

Paso 6: Realizar $F_j - m_{ij}F_i$ e intercambiarla por la fila F_j

Paso 7: Si $a_{nn} = 0$ entonces SALIDA ('No existe solución única')

PARAR

Paso 8: Hacer $x_n = \frac{c_n}{a_{nn}}$ (Sustitución hacia atrás)

Paso 9: Para $i = n-1, \dots, 1$ tomar $x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(c_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j \right)$

Paso 10: SALIDA X (es decir (x_1, x_2, \dots, x_n))

PARAR

- Por ejemplo, se desea resolver el sistema
$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 3 \\ 3x_1 - x_2 + x_3 = 1 \\ 2x_1 + 3x_2 - 4x_3 = 8 \end{cases}$$
, aplicando el método de eliminación gaussiana.

a) Eliminación hacia adelante

Como el coeficiente de la primera incógnita es 1, se multiplica la primera ecuación por 3 y se resta el resultado de la segunda ecuación, luego se multiplica por 2 la primera ecuación y se resta de la tercera de manera que el sistema queda reducido a:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 3 \\ -4x_2 - 5x_3 = -8 \\ x_2 - 8x_3 = 2 \end{cases}$$

Se procede ahora a eliminar la segunda incógnita de la tercera ecuación, para ello se divide la segunda ecuación por -4 y se multiplica por el coeficiente de la tercera ecuación que en este caso es 1, quedando la segunda como: $x_2 + \frac{5}{4}x_3 = 2$ y se resta este resultado de la tercera ecuación. El sistema es ahora:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + 2x_3 = 3 \\ -4x_2 - 5x_3 = -8 \\ -\frac{37}{4}x_3 = 0 \end{cases}$$

b) Sustitución hacia atrás

Se despeja x_3 de la tercera ecuación, en este caso: $x_3=0$, se reemplaza este valor en la segunda ecuación: $-4x_2 = -8$ por lo tanto $x_2=2$ y por último se reemplazan estos valores en la primera ecuación $x_1 + 2 = 3$ entonces $x_1=1$.

4.2.1.2. Método de Gauss - Jordan

Es diferente al método de eliminación gaussiana puesto que cuando se elimina una incógnita no sólo se elimina de las ecuaciones siguientes sino de todas las otras ecuaciones. De esta forma el paso de eliminación genera una **matriz identidad** en lugar de una matriz triangular. Por consiguiente no es necesario emplear la sustitución hacia atrás para obtener la solución. A continuación se esquematiza el método.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & | & c_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & | & c_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & | & c_3 \end{bmatrix}$$

$$\downarrow$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & | & c^*_1 \\ 0 & 1 & 0 & | & c^*_2 \\ 0 & 0 & 1 & | & c^*_3 \end{bmatrix}$$

$$\downarrow$$

$$\begin{aligned} x_1 &= c^*_1 \\ x_2 &= c^*_2 \\ x_3 &= c^*_3 \end{aligned}$$

- Por ejemplo, si se desea resolver el sistema anterior utilizando este método, se escribe el sistema en forma matricial, se trabaja con la matriz ampliada (formada por la matriz de coeficientes a la que se le adiciona una última columna constituida por los términos independientes), luego se efectúan operaciones elementales en las filas hasta llegar a la matriz identidad quedando los valores de las incógnitas en la última columna de la matriz ampliada.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 3 & -1 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & -4 & 8 \end{array} \right] \xrightarrow{\begin{matrix} -3F_1+F_2 \\ -2F_1+F_3 \end{matrix}} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & -4 & -5 & -8 \\ 0 & 1 & -8 & 2 \end{array} \right] \xrightarrow{-1/4F_{23}} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 5/4 & 2 \\ 0 & 1 & -8 & 2 \end{array} \right] \xrightarrow{\begin{matrix} -1F_2+F_1 \\ -F_2+F_3 \end{matrix}}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 3/4 & 1 \\ 0 & 1 & 5/4 & 2 \\ 0 & 0 & -37/4 & 0 \end{array} \right] \xrightarrow{-\frac{4}{37}F_3} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 3/4 & 1 \\ 0 & 1 & 5/4 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right] \xrightarrow{\begin{matrix} -3/4F_3+F_1 \\ -5/4F_3+F_2 \end{matrix}} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{array} \right]$$

Se llega al mismo resultado que con el método anterior, es decir $x_1=1$, $x_2=2$ y $x_3=0$.

Este no es un método recomendable ya que involucra alrededor de un 50% de cálculos adicionales, sin que haya más beneficios.

4.2.1.3. Partición de matrices

Este método puede utilizarse para resolver grandes sistemas de ecuaciones lineales, y consiste en dividir las matrices de la ecuación matricial del sistema en **submatrices de orden menor**.

Dado un sistema de ecuaciones, expresado en notación matricial, $[A]_{2 \times 2} [X]_{2 \times 1} = [C]_{2 \times 1}$. Si A_{22} representa una submatriz de A con inversa conocida, formada por alguno de los renglones de A y el mismo número de columnas de A , se puede expresar la ecuación matricial en forma notacional como:

$$\left[\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array} \right] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

En donde fijada la posición de la submatriz A_{22} en A , quedan obligadas las de las otras submatrices.

Para resolver el sistema matricial se realizan las operaciones matriciales indicadas en él, producto e igualdad, **teniendo en cuenta que los elementos matriciales son a la vez matrices.**

Se tiene:

$$A_{11} x_1 + A_{12} x_2 = c_1 \quad (4.10)$$

$$A_{21} x_1 + A_{22} x_2 = c_2 \quad (4.11)$$

Despejando el vector x_2 de (4.11), se obtiene: $A_{22} x_2 = c_2 - A_{21} x_1$ y por lo tanto:

$$x_2 = A_{22}^{-1}(c_2 - A_{21} x_1) \quad (4.13)$$

Sustituyendo (4.13) en (4.10) y despejando el vector x_1 , se llega a:

$$A_{11} x_1 + A_{12} A_{22}^{-1}(c_2 - A_{21} x_1) = c_1$$

$$(A_{11} - A_{12} A_{22}^{-1} A_{21}) x_1 = c_1 - A_{12} A_{22}^{-1} c_2$$

$$x_1 = (A_{11} - A_{12} A_{22}^{-1} A_{21})^{-1}(c_1 - A_{12} A_{22}^{-1} c_2) \quad (4.14)$$

En esta última expresión se hace $B = A_{11} - A_{12} A_{22}^{-1} A_{21}$ y $D = A_{12} A_{22}^{-1}$, por lo tanto (4.14) queda como:

$$x_1 = B^{-1}(c_1 - Dc_2) \quad (4.15)$$

Reemplazando la ecuación (4.15) en la ecuación (4.13):

$$x_2 = A_{22}^{-1} c_2 - A_{22}^{-1} A_{21} B^{-1}(c_1 - Dc_2)$$

$$x_2 = -A_{22}^{-1} A_{21} B^{-1} c_1 + (A_{22}^{-1} + A_{22}^{-1} A_{21} B^{-1} D) c_2 \quad (4.16)$$

Haciendo en esta última expresión: $E = A_{22}^{-1} A_{21}$ y $F = A_{22}^{-1} + E B^{-1} D$, se puede escribir (4.16) como sigue:

$$x_2 = -EB^{-1} c_1 + F c_2 \quad (4.17)$$

En síntesis se llega a:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B^{-1} & -B^{-1}D \\ -EB^{-1} & F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

4.2.2. Métodos iterativos

Los métodos iterativos o de aproximaciones sucesivas se utilizan cuando los sistemas de ecuaciones a resolver son de grandes dimensiones o bien son sistemas dispersos (la matriz de coeficientes posee muchos ceros). Estos métodos construyen una sucesión de aproximaciones a

la solución de las incógnitas hasta obtener una precisión determinada o hasta completar un número determinado de iteraciones. Son ejemplos el método de Jacobi, el de Gauss-Seidel, etc.

4.2.2.1. Método de Jacobi

Si se considera un sistema de ecuaciones algebraicas, que puede escribirse en forma matricial como $[A][X] = [C]$ y que $A = D + R$, donde D es una matriz diagonal; es decir, una matriz cuadrada cuyos elementos sobre la diagonal principal son los únicos diferentes de cero. Entonces puede escribirse que:

$$\begin{aligned}(D + R) X &= C \\ DX &= C - RX \\ X &= D^{-1}C - D^{-1}R X\end{aligned}\tag{4.19}$$

Se admite que la diagonal de A no contiene elementos nulos, para que exista la matriz inversa D^{-1} . La ecuación (4.19) sugiere el método iterativo:

$$X_{k+1} = D^{-1}C - D^{-1}R X_k\tag{4.20}$$

Este es el método iterativo de *Jacobi*, de *iteraciones totales* o de *desplazamientos simultáneos*, definido por la ecuación de recurrencia (4.20), significa que del sistema de ecuaciones, se despeja x_1 de la primera ecuación, x_2 de la segunda, etc., obteniéndose las siguientes ecuaciones:

$$x_1 = \frac{c_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \dots - a_{1n}x_n}{a_{11}}\tag{4.21}$$

$$x_2 = \frac{c_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \dots - a_{2n}x_n}{a_{22}}\tag{4.22}$$

$$x_3 = \frac{c_3 - a_{31}x_1 - a_{32}x_2 - \dots - a_{3n}x_n}{a_{33}}\tag{4.23}$$

⋮

$$x_n = \frac{c_n - a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \dots - a_{n,n-1}x_{n-1}}{a_{nn}}\tag{4.24}$$

Para aplicar el método, se considera una primera aproximación al valor de las incógnitas x , que se denomina $X^{(0)}$ (el supraíndice indica el orden de aproximación). Se sustituye esta primera aproximación en los segundos miembros de las ecuaciones (4.21) a (4.24), por ejemplo, si se toma la solución trivial, en la ecuación (4.21) se encuentra x_1 haciendo x_2 hasta x_n iguales a cero. Luego se calcula x_2 de la ecuación (4.22) tomando x_1 , x_3 , x_n iguales a cero y así sucesivamente hasta llegar a la última ecuación y encontrar x_n . Se obtiene de esta manera una nueva aproxima-

ción a los valores de las incógnitas, es la aproximación de orden 1, es decir $X^{(1)}$. El procedimiento se repite hasta que la solución converja cerca de los valores reales. La convergencia se puede verificar usando el criterio de error relativo.

Este método es muy poco utilizado debido a que el método de Gauss-Seidel converge más rápidamente a la solución y además lo hace cuando no se logra que el método de Jacobi converja.

La condición suficiente para que el método de Jacobi converja es que la matriz de coeficientes sea diagonal dominante, es decir que cada elemento de la diagonal principal es mayor en valor absoluto que la suma del resto de los elementos de la misma fila en la que se encuentra el elemento en cuestión.

A continuación se presenta un algoritmo para este método iterativo.

Algoritmo de Jacobi

Considerando la siguiente notación:

n : número de ecuaciones

a_{ij} : elementos de la matriz A (i indica el número de fila y j el número de columna en el que se encuentra el elemento en cuestión)

c_i : elementos del vector C

x_{0i} : componentes de la primera aproximación al vector solución (esta primera aproximación es X_0)

$x_i^{(k)}$: componentes de la aproximación de orden k al vector solución, k varía de 1 a N (indica el orden de aproximación o iteración)

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Para $k = 1$

Paso 2: Mientras $k \leq N$ seguir con los pasos 3 a 6

Paso 3: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la aproximación de orden 1 mediante la fórmula:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(c_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_{0j} \right)$$

Paso 4: Si $\|X - X_0\| < E$, SALIDA X (es decir (x_1, x_2, \dots, x_n))

PARAR

Paso 5: Tomar $k = k+1$

Paso 6: Para $i = 1, \dots, n$ tomar $x_{0i} = x_i$

Paso 7: SALIDA ('Número máximo de iteraciones completado')

PARAR

➤ Por ejemplo, se desea resolver el sistema
$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 - 0,1x_3 = 4 \\ 0,1x_1 + 7x_2 - 0,3 = 20 \\ 3x_1 - 2x_2 + 100x_3 = 450 \end{cases}$$
 utilizando este método,

suponiendo una cota de error del 3 %.

Se despeja x_1 de la primera ecuación, x_2 de la segunda y x_3 de la tercera ecuación.

$$x_1 = \frac{4 + x_2 + 0,1x_3}{2}; \quad x_2 = \frac{20 - 0,1x_1 + 0,3x_3}{7}; \quad x_3 = \frac{450 - 3x_1 + 2x_2}{100}$$

Se supone como primera aproximación la solución trivial, entonces de la primera ecuación se despeja x_1 suponiendo que $x_2 = x_3 = 0$ por lo tanto $x_1 = 2$.

Se calcula x_2 suponiendo que $x_1 = x_3 = 0$, es decir: $x_2 = \frac{20}{7} = 2,857$ y por último x_3 que es:

$$x_3 = \frac{450}{100} = 4,5.$$

Se realiza una nueva iteración con los valores: $x_1 = 2$; $x_2 = 2,857$ y $x_3 = 4,5$, es decir:

$$x_1 = \frac{4 + 2,857 + 0,1(4,5)}{2} = 3,653$$

$$x_2 = \frac{20 - ((0,1) \cdot (2)) + 0,3(4,5)}{7} = 3,021$$

$$x_3 = \frac{450 - ((3) \cdot (2)) + 2(2,857)}{100} = 4,497$$

Se calcula el error relativo porcentual de aproximación:

$$E_{x_1} = \left| \frac{3,653 - 2}{3,653} \right| \cdot 100 = 45,25\%;$$

$$E_{x_2} = \left| \frac{3,021 - 2,857}{3,021} \right| \cdot 100 = 5,43\%;$$

$$E_{x_3} = \left| \frac{4,497 - 4,5}{4,497} \right| \cdot 100 = 0,07\%$$

Se realiza una nueva iteración, ahora con $x_1 = 3,653$; $x_2 = 3,021$ y $x_3 = 4,497$ y se llega a que $x_1 = 3,735$ con $E_{x_1} = 2,19\%$; $x_2 = 2,998$ con $E_{x_2} = 0,77\%$; $x_3 = 4,451$ con $E_{x_3} = 1,03\%$.

4.2.2.2. Método de Gauss–Seidel

Es un método iterativo que disminuye el error de redondeo, se denomina también de desplazamientos sucesivos o de iteraciones parciales. Si se tiene un conjunto de n ecuaciones (4.1), que puede escribirse en forma matricial como: $[A] [X] = [C]$ y si los elementos de la diagonal principal son diferentes de cero, la primera ecuación se puede resolver para x_1 , la segunda para x_2 , etc., lo que lleva a las ecuaciones (4.21) a (4.24).

Se puede comenzar el proceso de solución utilizando una aproximación inicial X_0 a la solución que es el vector columna X . La solución trivial puede servir de valor inicial, se supone que x_2, \dots, x_n valen 0. Estos valores se sustituyen en la ecuación (4.21) y de ella se despeja un nuevo valor de $x_1 = \frac{c_1}{a_{11}}$. Luego se sustituye el nuevo valor de x_1 con x_3, \dots, x_n iguales a cero en la ecuación (4.22) y se calcula un nuevo valor de x_2 . Este procedimiento se repite en cada una de las ecuaciones hasta llegar a la ecuación (4.24) de la que se calcula un nuevo valor de x_n . Se regresa a la primera ecuación y se repite todo el proceso hasta que la solución converja cerca de los valores reales. La convergencia se puede verificar usando el criterio de error relativo. Este método se diferencia del de Jacobi puesto que una vez que se calcula una aproximación a una incógnita se utiliza esta aproximación en la misma iteración.

Las condiciones suficientes para que el método de Gauss-Seidel converja es que la matriz de coeficientes sea diagonal dominante o bien que la matriz de coeficientes sea simétrica y definida positiva. Un algoritmo del método se muestra a continuación.

Algoritmo de Gauss-Seidel

Considerando la siguiente notación:

n : número de ecuaciones

a_{ij} : elementos de la matriz A (i indica el número de fila y j el número de columna en el que se encuentra el elemento en cuestión)

c_i : elementos del vector C

x_{0i} : componentes de la primera aproximación al vector solución (esta primera aproximación es X_0)

$x_i^{(k)}$: componentes de la aproximación de orden k al vector solución, k varía de 1 a N (indica el orden de aproximación o iteración)

E : cota de error o criterio de detención

N : número máximo de iteraciones

Paso 1: Para $k = 1$

Paso 2: Mientras $k \leq N$ seguir con los Pasos 3 a 6

Paso 3: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la aproximación de orden i mediante la fórmula:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}} \left(c_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_{0j} \right)$$

continúa
→

Paso 4: Si $\|X - X_0\| < E$, SALIDA X (es decir (x_1, x_2, \dots, x_n))

PARAR

Paso 5: Tomar $k = k+1$

Paso 6: Para $i = 1, \dots, n$ tomar $x_{0i} = x_i$

Paso 7: SALIDA ('Número máximo de iteraciones completado')

PARAR

➤ Por ejemplo, se desea resolver el sistema
$$\begin{cases} 2x_1 - x_2 - 0,1x_3 = 4 \\ 0,1x_1 + 7x_2 - 0,3 = 20 \\ 3x_1 - 2x_2 + 100x_3 = 450 \end{cases}$$
 utilizando este método,

suponiendo una cota de error del 3 %.

Se despeja x_1 de la primera ecuación, x_2 de la segunda y x_3 de la tercera ecuación.

$$x_1 = \frac{4 + x_2 + 0,1x_3}{2}; \quad x_2 = \frac{20 - 0,1x_1 + 0,3x_3}{7}; \quad x_3 = \frac{450 - 3x_1 + 2x_2}{100}$$

Se supone que $x_2 = x_3 = 0$, por lo tanto $x_1 = 2$, con este nuevo valor y con $x_3 = 0$ se calcula x_2 , es decir:

$$x_2 = \frac{20 - ((0,1) \cdot (2))}{7} = 2,828$$

con este valor y $x_1 = 2$ se calcula x_3 ,

$$x_3 = \frac{450 - ((3) \cdot (2)) + 2(2,828)}{100} = 4,497$$

Con estos nuevos valores de x_2 y x_3 se determina un nuevo valor de x_1

$$x_1 = \frac{4 + 2,828 + 0,1(4,497)}{2} = 3,639$$

Con este valor y $x_3 = 4,497$ se calcula x_2 :

$$x_2 = \frac{20 - ((0,1) \cdot (3,639)) + 0,3(4,497)}{7} = 2,998$$

Y con este valor y $x_1 = 3,639$ se encuentra el nuevo valor de x_3

$$x_3 = \frac{450 - ((3) \cdot (3,639)) + 2(2,998)}{100} = 4,451$$

Se calcula el error relativo porcentual de aproximación:

$$E_{x_1} = \left| \frac{3,639 - 2}{3,639} \right| \cdot 100 = 45,04\% ;$$

$$E_{x_2} = \left| \frac{2,998 - 2,828}{2,998} \right| \cdot 100 = 5,67\% ;$$

$$E_{x_3} = \left| \frac{4,451 - 4,497}{4,451} \right| \cdot 100 = 1,03\%$$

En la tercera iteración se llega a que $x_1=3,722$ con $E_{x_1}= 2,23 \%$; $x_2=2,995$ con $E_{x_2}= 0,1 \%$; $x_3=4,448$ con $E_{x_3}= 0,07 \%$.

4.2.2.3. Método de Relajación

El método de relajación fue ideado por el ingeniero británico Richard Southwell, converge más rápidamente que el de Gauss-Seidel. Consiste en tomar nueva aproximación a la solución como una combinación lineal de la solución de la etapa anterior, es decir aplicando la fórmula (4.24) correspondiente al método de Gauss-Seidel pero con la incorporación de un factor de relajación denominado w :

$$x_i^{(k)} = (1-w)x_i^{(k-1)} + w \frac{1}{a_{ii}} \left(c_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_{0j} \right) \quad (4.25)$$

En esta fórmula el supraíndice k indica que es la k -ésima iteración y a w se le asigna un valor entre 0 y 2, este valor se determina por prueba y error y el método se denominará:

- Método de sub-relajación, si $0 < w < 1$, es aplicable en los casos en que el método de Gauss-Seidel diverge
- Método de sobre-relajación, si $1 < w < 2$, se aplica para acelerar la convergencia del método de Gauss-Seidel
- Método de Gauss-Seidel si $w=1$

EJERCICIOS PROPUESTOS

4. 1. Utilice el método de eliminación gaussiana y el de Gauss-Jordan para resolver el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} 3x_1 - 0,1x_2 - 2x_3 = 14 \\ 0,1x_1 + 8x_2 - 2,3x_3 = -21 \\ 0,4x_1 - 0,8x_2 + 10x_3 = 75 \end{cases}$$

4.2. En una fábrica de embutidos, se elaboran tres tipos diferentes de estos productos que responden a las formulaciones A, B y C. En el cuadro que sigue se presentan las proporciones necesarias de las materias primas principales de cada formulación.

Si se dispone diariamente de 140 tn de hígado, 130 tn de carne porcina y 180 tn de tocino, indique la producción diaria de cada tipo de producto en kg/d.

Tipo de embutido	Hígado	Carne	Tocino
A	3	1	2
B	1	3	2
C	3	2	4

4.3. Calcule el valor de las incógnitas x_1 y x_2 del sistema de 5 ecuaciones con 5 incógnitas, aplicando el método de partición de matrices.

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 = 18 \\ x_1 + 2x_2 + 2x_3 + 3x_4 + 4x_5 = 27 \\ 2x_1 + x_2 - 2x_3 + 2x_4 - 3x_5 = -32 \\ 3x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 4x_4 + x_5 = 6 \\ -x_1 + x_2 - 4x_3 + 4x_4 + 2x_5 = -24 \end{cases}$$

4.4. Utilice el método de Jacobi para resolver el sistema indicado a continuación, calculando para cada iteración el error relativo porcentual. Utilice como criterio de parada un error del 6 %, compare con la solución obtenida anteriormente.

$$\begin{cases} 16x_1 + 2x_2 - 2x_3 = 16 \\ 4x_1 + 24x_2 + 18x_3 = 24 \\ 2x_1 - 14x_2 + 34x_3 = -16 \end{cases}$$

4.5. Resuelva el sistema anterior utilizando el método de Gauss-Seidel.

4.6. Resuelva el sistema anterior por el método de sobre-relajación, utilizando $w=1.4$

Capítulo 5

APROXIMACION POLINOMIAL Y FUNCIONAL

En la práctica es frecuente tratar funciones que no son del tipo de las elementales, además de funciones definidas de manera tabular o gráfica, de las que se desconoce su expresión analítica y de las que se necesita conocer valores de la variable que no están tabulados.

Existen casos de funciones expresadas en forma tabular en los que se requiere una alta aproximación y para ello existen métodos numéricos que por lo general utilizan funciones racionales enteras (polinomios), de manera que la curva descrita por los mismos toque todos los puntos definidos. Si no se requiere gran aproximación se deriva una curva simple que represente el comportamiento general de los datos.

5.1. APROXIMACIÓN POLINOMIAL

Si se tiene una función definida en forma tabular de la que se desconoce su expresión analítica puede afirmarse que para $n+1$ datos o puntos existe uno y solo un polinomio de n -ésimo grado que pasa a través de todos los puntos y existe una variedad de fórmulas matemáticas que permiten expresar a este polinomio.

5.1.1. Diferencias finitas

El cálculo de las diferencias finitas permite encontrar el grado del polinomio por el cual puede describirse una función tabular.

Dada la función $y=f(x)$ definida en forma tabular como la que se presenta en la Tabla 5.1, y suponiendo que los valores de la variable independiente x_n , están igualmente espaciados entre sí, es decir que el incremento o paso es igual a un valor constante denominado h .

Tabla 5.1. Función tabular de paso constante

x	y
x_0	y_0
$x_1 = x_0 + h$	y_1
$x_2 = x_0 + 2h$	y_2
$x_3 = x_0 + 3h$	y_3
...	...
$x_n = x_0 + nh$	y_n

Se denominan **primeras diferencias** hacia adelante y se representan con Δy_i a las diferencias entre dos valores consecutivos de y , es decir:

$$a_0 = y_1 - y_0 \quad (5.1)$$

$$a_1 = y_2 - y_1 \quad (5.2)$$

$$a_2 = y_3 - y_2 \quad (5.3)$$

...

$$a_{n-1} = y_n - y_{n-1} \quad (5.4)$$

Las diferencias de las primeras diferencias se llaman **segundas diferencias** hacia adelante, $\Delta^2 y_i$:

$$b_0 = a_1 - a_0 = y_2 - 2y_1 + y_0 \quad (5.5)$$

$$b_1 = a_2 - a_1 = y_3 - 2y_2 + y_1 \quad (5.6)$$

$$b_2 = a_3 - a_2 = y_4 - 2y_3 + y_2 \quad (5.7)$$

...

$$b_{n-2} = a_{n-1} - a_{n-2} = y_n - 2y_{n-1} + y_{n-2} \quad (5.8)$$

Las diferencias de las segundas diferencias se llaman **terceras diferencias** hacia adelante, $\Delta^3 y_i$:

$$c_0 = b_1 - b_0 = y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0 \quad (5.9)$$

$$c_1 = b_2 - b_1 = y_4 - 3y_3 + 3y_2 - y_1 \quad (5.10)$$

$$c_2 = b_3 - b_2 = y_5 - 3y_4 + 3y_3 - y_2 \quad (5.11)$$

...

$$c_{n-3} = b_{n-2} - b_{n-3} = y_n - 3y_{n-1} + 3y_{n-2} - y_{n-3} \quad (5.12)$$

Siguiendo este proceso se definen las cuartas, quintas, etc., diferencias hacia adelante. Todas las diferencias pueden arreglarse en una tabla de diferencias (ver Tabla 5.2), en donde cada diferencia se indica entre los dos elementos que la producen, ver la tabla siguiente:

Tabla 5.2. Tabla de diferencias

x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$...
x_0	y_0	$a_0 = y_1 - y_0$			
$x_1 = x_0 + h$	y_1	$a_1 = y_2 - y_1$	$b_0 = a_1 - a_0$		
$x_2 = x_0 + 2h$	y_2	$a_2 = y_3 - y_2$	$b_1 = a_2 - a_1$	$c_0 = b_1 - b_0$	
$x_3 = x_0 + 3h$	y_3	...	$b_2 = a_3 - a_2$	$c_1 = b_2 - b_1$	
...		$c_{n-3} = b_{n-2} - b_{n-3}$	
...	$b_{n-2} = a_{n-1} - a_{n-2}$		
$x_n = x_0 + nh$	y_n	$a_{n-1} = y_n - y_{n-1}$			

Si una de estas diferencias se vuelve constante (o aproximadamente constante), puede decirse que los valores tabulados pueden describirse por un polinomio de grado igual al orden de la diferencia constante (o aproximadamente constante).

5.1.2. Diferencias divididas

Si se considera la función $y=f(x)$ definida en forma tabular, parecida a la presentada en la Tabla 5.1, pero sin que los valores de la variable independiente tengan paso constante, puede escribirse un polinomio de grado n -ésimo que pase por todos los $(n+1)$ puntos definidos de la función tal como:

$$P_n(x) = a_0 + (x - x_0)a_1 + (x - x_0)(x - x_1)a_2 + \dots + (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})a_n \quad (5.13)$$

Los coeficientes a_i pueden determinarse fácilmente si se utilizan las diferencias divididas de los valores tabulados.

La diferencia dividida de orden cero se define como:

$$f[x_r] = f(x_r) \quad (5.14)$$

esta diferencia se puede denotar también como y_r ó bien f_r .

La diferencia de primer orden o diferencia de orden uno es igual a:

$$f[x_r, x_s] = \frac{f(x_s) - f(x_r)}{x_s - x_r} \quad (5.15)$$

Las diferencias de orden superior se definen en términos de diferencias de orden inferior, por ejemplo una diferencia de orden n se define como:

$$f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0} \quad (5.16)$$

Una vez definidas las diferencias, los coeficientes se determinan como sigue:

$$a_0 = f(x_0) \quad (5.17)$$

$$a_1 = f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \quad (5.18)$$

$$a_2 = f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0} = \frac{[f(x_2) - f(x_1)] - [f(x_1) - f(x_0)]}{x_2 - x_0} \quad (5.19)$$

⋮

$$a_n = f[x_0, x_1, \dots, x_n] = \frac{f[x_1, \dots, x_n] - f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]}{x_n - x_0} \quad (5.20)$$

Por lo tanto si se reemplaza en el polinomio dado por (5.13) se llega a que:

$$P_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)f[x_0, x_1] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_0, x_1, x_2] + \dots + (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})f[x_0, \dots, x_n] \quad (5.21)$$

Este polinomio se conoce como polinomio de interpolación con diferencias divididas de Newton.

5.1.3. Interpolación con incrementos constantes. Interpolación de Newton

Si se desea encontrar un valor incluido entre dos valores consecutivos de una función tabular puede utilizarse la interpolación de Newton. Para ello se utilizan las diferencias finitas definidas en el ítem 5.1.1.

Dada la función $y = f(x)$, definida en la Tabla 5.1, para encontrar un valor de x incluido entre dos valores consecutivos de la tabla mencionada, $x_k < x < x_{k+1}$, se supone que la función $f(x)$ se aproxima a un polinomio $P_n(x)$ de grado n , que pasa por todos los puntos que definen a la función (puesto que la diferencia de orden n es aproximadamente constante). Recordando la definición de diferencias hacia adelante y que las diferencias de orden superior se definen en función de las diferencias de orden inferior pueden calcularse los valores de la variable dependiente y en función de estas diferencias como se indica a continuación:

$$y_1 = y_0 + a_0 \quad (5.22)$$

$$y_2 = y_1 + a_1 = (y_0 + a_0) + (a_0 + b_0) = y_0 + 2a_0 + b_0 \quad (5.23)$$

$$y_3 = y_2 + a_2 = y_0 + 2a_0 + b_0 + (a_1 + b_1) = (y_0 + 2a_0 + b_0) + (a_0 + b_0 + b_0 + c_0) = y_0 + 3a_0 + 3b_0 + c_0 \quad (5.24)$$

En estas expresiones puede verse que aparecen las primeras de las distintas diferencias de órdenes sucesivos a partir de y_0 , afectadas por los coeficientes del desarrollo del binomio de Newton. Suponiendo que esto es verdadero para cualquier valor de y , puede establecerse que:

$$y_k = y_0 + ka_0 + \frac{k(k-1)}{2!}b_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!}c_0 + \frac{k(k-1)(k-2)(k-3)}{4!}d_0 + \dots \quad (5.25)$$

Y como: $a_0 = \Delta y_0$, $b_0 = \Delta^2 y_0$, $c_0 = \Delta^3 y_0$, $d_0 = \Delta^4 y_0 \dots$, puede escribirse:

$$y_k = y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)(k-3)}{4!}\Delta^4 y_0 + \dots \quad (5.26)$$

Esta fórmula es verdadera para todo valor entero positivo de k , se denomina **fórmula de interpolación de Newton** y es aplicable para cualquier valor de x_k correspondiente o no a la tabla. En esta fórmula, y_k es un valor aproximado (interpolado) de la función obtenida para $x = x_k$; y_0 es el valor inicial de y , el cual se considera inmediato al valor que se trata de interpolar; Δy_0 , $\Delta^2 y_0$, $\Delta^3 y_0$,

$\Delta^4 y_0, \dots$, son las diferencias hacia adelante de órdenes sucesivas correspondientes a y_0 ; y k se determina como sigue:

$$x_k = x_0 + kh \Rightarrow k = \frac{x_k - x_0}{h} \quad (5.27)$$

Si se considera el polinomio interpolante de Newton en función de las diferencias divididas, el error para un polinomio de grado n es:

$$f[x_{n+1}, x_n, x_{n-1}, \dots, x_0](x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n) \quad (5.28)$$

El algoritmo utilizando estas diferencias puede escribirse como:

Algoritmo de Interpolación de Newton

Considerando la siguiente notación:

$n+1$: número de datos o puntos definidos de la función tabular

k : subíndice que indica el número de orden de los datos, varía de 2 hasta n

x_k : valores de la variable independiente

y_k : valores de la variable dependiente

x_s : valor de la variable para el que se desea conocer el valor de $f(x_s)=y_s$

D : diferencias divididas

Paso 1: Tomar $j=2, \dots, n$

Paso 2: Para $k=j, \dots, n$, calcular las diferencias divididas con la fórmula:

$$D_{k,j} = \frac{D_{k,j-1} - D_{k-1,j-1}}{x_k - x_{k-j}}$$

Paso 3: Para $j=1, \dots, n$ hacer $C=D(1,j)$

Paso 4: Hacer $P_a=1$

Paso 5: Para $j=1, \dots, n$, tomar $P_a = P_a * (x_s - x_j)$

Paso 6: Tomar $y_s=0$

Paso 7: Para $j=1, \dots, n$, calcular y_s como $y_s = y_s + \sum_{j=1}^n C * P_a$

Paso 9: SALIDA y_s

PARAR

- Por ejemplo si se desea encontrar el valor de la variable independiente para $x=6,2$ de la función definida por la tabla

x	0	4	8	12	16	20
y	4	16	124	424	1012	1984

Se calculan las diferencias hacia adelante:

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
0	4			
4	16	12		
8	124	108	96	
12	424	300	192	96
16	1012	588	288	96
20	1984	972	384	96

Como puede observarse las diferencias de orden 3 ó terceras diferencias se mantienen constantes, por lo tanto la función puede describirse por un polinomio de tercer grado. Se aplica la fórmula (5.26) para encontrar el valor deseado. Siendo:

$$x_0=4, y_0=16; x_k=6,2; h=4; \Delta y=108; \Delta^2 y=192; \Delta^3 y=96; k=0,55$$

$$y_k = 16 + 0,55 \cdot 108 + \frac{0,55(0,55-1)}{2!} 192 + \frac{0,55(0,55-1)(0,55-2)}{3!} 96 = 62,1$$

O bien puede resolverse el problema encontrando el polinomio de interpolación de Newton, para ello se calculan las diferencias divididas hasta el orden quinto, es decir:

x	y	$f[x_0, x_1]$	$f[x_0, x_1, x_2]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$	$f[x_0, x_1, x_2, x_3, x_4]$
0	4					
4	16	3				
8	124	27	3			
12	424	75	4	0,083		
16	1012	147	4,5	0,031	$-3,25 \times 10^{-3}$	
20	1984	243	4,8	0,015	-8×10^{-4}	$-2,025 \times 10^{-4}$

El polinomio interpolador es un polinomio de quinto grado:

$$P(x) = 4 + 3(x-0) + 3(x-0)(x-4) + 0,083(x-0)(x-4)(x-8) - 3,25 \times 10^{-3}(x-0)(x-4)(x-8)(x-12) + 2,025 \times 10^{-4}(x-0)(x-4)(x-8)(x-12)(x-16)$$

Por lo tanto si $x=6,2$, se reemplaza en el polinomio de Newton y el valor de la variable dependiente es: 61,1.

5.1.4. Interpolación con incrementos variables. Interpolación de Lagrange

Este método se utiliza para funciones tabulares en las cuales los valores de x no son equidistantes. Para realizar la interpolación, se busca un polinomio que pase por todos los puntos. Si se tienen n puntos el polinomio debe ser de grado n-1, o sea:

$$y = a_0 x^{n-1} + a_1 x^{n-2} + \dots + a_{n-2} x + a_{n-1} \quad (5.29)$$

Este polinomio puede escribirse en la forma:

$$y = A_1(x-x_2)(x-x_3)\dots(x-x_n) + A_2(x-x_1)(x-x_3)\dots(x-x_n) + \dots + A_n(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1}) \quad (5.28)$$

el grado del polinomio es $n-1$. Los coeficientes $A_0, A_1, A_2, \dots, A_n$ se determinan de manera que la gráfica del polinomio pase por todos los puntos especificados.

Si $x = x_n$, se tiene $y = y_n$, entonces reemplazando en la fórmula (5.28) se llega a que:

$$y_n = A_n(x_n - x_1)(x_n - x_2)(x_n - x_3) \dots (x_n - x_{n-1}) \quad (5.30)$$

y despejando el coeficiente A_n :

$$A_n = \frac{y_n}{(x_n - x_1)(x_n - x_2)(x_n - x_3) \dots (x_n - x_{n-1})} \quad (5.31)$$

Si se sustituyen los coeficientes dados por la ecuación (5.31) en la ecuación (5.29) se tiene la **fórmula de interpolación de Lagrange**:

$$y = \frac{(x - x_2)(x - x_3) \dots (x - x_n)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3) \dots (x_1 - x_n)} y_1 + \frac{(x - x_1)(x - x_3) \dots (x - x_n)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_3) \dots (x_2 - x_n)} y_2 + \dots + \frac{(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{n-1})}{(x_n - x_1)(x_n - x_2) \dots (x_n - x_{n-1})} y_n \quad (5.32)$$

Esta fórmula suele expresarse también como:

$$P_{n-1}(x) = \sum_{j=1}^n L_j(x) f(x_j) = \sum_{j=1}^n L_j(x) y_j \quad (5.33)$$

$$\text{con: } L_j(x) = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \frac{x - x_k}{x_j - x_k}$$

La fórmula de error para el polinomio de Lagrange de grado $n-1$ es similar a la fórmula de error para el polinomio de Taylor salvo que contiene un producto de n términos:

$$\frac{f^{(n)}(\xi(x))}{n!} (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_{n-1}) \quad (5.34)$$

El algoritmo para la interpolación de Lagrange es:

Algoritmo de Interpolación de Lagrange

Considerando la siguiente notación:

n : número de datos o puntos definidos de la función tabular

x : valores de la variable independiente

y : valores de la variable dependiente

x_s : valor de la variable para el que se desea conocer el valor de $f(x_s) = y_s$

L : es el coeficiente polinómico de Lagrange

Paso 1: Tomar $y_i = 0$

Paso 2: Para $i = 1, \dots, n+1$, tomar $L = 1$

continua
→

Paso 3: Para $j = 1, \dots, n+1$, si $i \neq j$ calcular el coeficiente polinómico mediante la fórmula: $L_j = L \frac{x_s - x_j}{x_i - x_j}$

Paso 4: Calcular y_s mediante la fórmula $y_s = y_i + \sum_{j=1}^{n+1} L_j y_j$

Paso 5: SALIDA y_s
PARAR

- Por ejemplo si se deseara encontrar el valor de la función tabular dada por la tabla para $x=4$ aplicando la interpolación de Lagrange:

x	2	8	12
y	0,69315	2,07944	2,48491

Se utiliza interpolación de orden 2 puesto que se tiene 3 puntos definidos:

$$P_2(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} y_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} y_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} y_3$$

reemplazando por los valores correspondientes:

$$P_2(4) = \frac{(4-8)(4-12)}{(2-8)(2-12)} 0,69315 + \frac{(4-2)(4-12)}{(8-2)(8-12)} 2,07944 + \frac{(4-2)(4-8)}{(12-2)(12-8)} 2,48491 = 1,25899$$

5.1.5. Interpolación inversa

El problema de interpolación inversa consiste en determinar el valor de la variable independiente x conocido el valor de la función $f(x)$. Se resuelve utilizando la fórmula de interpolación de Lagrange y formando una tabla con los valores de la variable dependiente como valores de x y los de la independiente como los de y .

5.1.6. Derivación numérica

Dada la función $y = f(x)$ se trata de calcular el valor de sus derivadas en algunos de los puntos $x = x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$. Si se acepta aproximar la función con la fórmula de interpolación de Newton (5.26):

$$y_k = y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)(k-3)}{4!} \Delta^4 y_0 + \dots$$

Derivando ambos miembros de la ecuación (5.26) con respecto a x y teniendo en cuenta que el segundo miembro es una función compuesta de x , se tiene:

$$\frac{d}{dx} f(x) = \frac{d}{dk} \left[y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k^2 - k}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{k^3 - 3k^2 + 2k}{3!} \Delta^3 y_0 + \dots \right] \frac{dk}{dx} \quad (5.35)$$

y de (5.27), $\frac{dk}{dx} = \frac{1}{h}$, entonces la ecuación (5.35) queda reducida a:

$$\frac{d}{dx} f(x) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 + \frac{2k-1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{3k^2 - 6k + 2}{6} \Delta^3 y_0 + \dots \right] \quad (5.36)$$

Derivando esta ecuación con respecto a x , se obtiene la segunda derivada.

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x) = \frac{1}{h} \frac{d}{dk} \left[\Delta y_0 + \frac{2k-1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{3k^2 - 6k + 2}{6} \Delta^3 y_0 + \dots \right] \frac{dk}{dx} \text{ por lo que:}$$

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x) = \frac{1}{h^2} \left[\Delta^2 y_0 + (k-1) \Delta^3 y_0 + \dots \right] \quad (5.37)$$

Si se deriva de nuevo con respecto a x , se obtiene la tercera derivada:

$$\frac{d^3}{dx^3} f(x) = \frac{1}{h^3} \left[\Delta^3 y_0 + \dots \right] \quad (5.38)$$

Considerando que si $x=x_0$ entonces $k=0$, se puede escribir una fórmula muy simple para estimar la primera derivada de la función en ese punto x_i como se indica a continuación:

$$\frac{d}{dx} f(x) = f'(x_i) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{1}{3} \Delta^3 y_0 + \dots (-1)^{n-1} \frac{\Delta^n y_0}{n} \right] \quad (5.39)$$

Si se utiliza el primer término de la fórmula (5.39) esto significa que la interpolación es lineal y la fórmula, considerando el error (último término) es:

$$f'(x_i) = \frac{1}{h} [\Delta y_0] - \frac{1}{2} h \Delta^2 f^{(2)}(\xi) \quad (5.40)$$

Con dos términos se tiene:

$$f'(x_i) = \frac{1}{h} \left[\Delta y_0 - \frac{1}{2} \Delta^2 y_0 \right] + \frac{1}{3} h^2 f^{(3)}(\xi) \quad (5.41)$$

La fórmula de la ecuación (5.39) se denomina **aproximación de diferencias hacia adelante** debido a que todas las diferencias se realizan con valores de la función que están delante de y_i . Si se utilizan diferencias entre valores de la función que están antes de y_i , se tienen la **aproximación de diferencias hacia atrás** y si se utilizan intervalos de diferencias en los que el valor considerado se encuentra en el centro del intervalo se tiene la **aproximación de diferencias centrales**. En la Tabla 5.1 se presentan fórmulas para calcular derivadas de primer a tercer orden

utilizando uno a cuatro términos de la ecuación (5.39) con diferencias hacia adelante, hacia atrás y centrales. Para facilitar la escritura se hace $f(x_i) = f_i$.

Tabla 5.3. Fórmulas para calcular derivadas mediante aproximaciones de diferencia

Primera derivada	
Aproximaciones de diferencia hacia adelante	
$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + E,$	$E \approx -\frac{1}{2}h f''_i$
$f'_i = \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2h} + E,$	$E \approx -\frac{1}{3}h^2 f'''_i$
$f'_i = \frac{2f_{i+3} - 9f_{i+2} + 18f_{i+1} - 11f_i}{6h} + E,$	$E \approx -\frac{1}{4}h^3 f''''_i$
Aproximaciones de diferencia hacia atrás	
$f'_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + E,$	$E \approx \frac{1}{2}h f''_i$
$f'_i = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} + E,$	$E \approx \frac{1}{3}h^2 f'''_i$
$f'_i = \frac{11f_i - 18f_{i-1} + 9f_{i-2} - 2f_{i-3}}{6h} + E,$	$E \approx \frac{1}{4}h^3 f''''_i$
Aproximaciones de diferencias centrales	
$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + E,$	$E \approx -\frac{h^2}{6} f'''_i$
$f'_i = \frac{-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}}{12h} + E,$	$E \approx \frac{1}{30}h^4 f_i^{(v)}$
Segunda derivada	
Aproximaciones de diferencia hacia adelante	
$f''_i = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{h^2} + E,$	$E \approx -h f'''_i$
$f''_i = \frac{-f_{i+3} + 4f_{i+2} - 5f_{i+1} + 2f_i}{h^2} + E,$	$E \approx \frac{11}{12}h^2 f_i''''$
Aproximaciones de diferencia hacia atrás	
$f''_i = \frac{f_i - 2f_{i-1} + f_{i-2}}{h^2} + E,$	$E \approx h f'''_i$
$f''_i = \frac{-f_i + 4f_{i-1} - 5f_{i-2} + 2f_{i-3}}{h^2} + E,$	$E \approx \frac{11}{12}h^2 f_i''''$
Aproximaciones de diferencias centrales	
$f''_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + E,$	$E \approx \frac{h^2}{12} f_i''''$

$$f_i'' = \frac{-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2}}{12h^2} + E, \quad E \approx \frac{1}{90}h^4 f_i^{(vi)}$$

Tercera derivada

Aproximaciones de diferencia hacia adelante

$$f_i''' = \frac{f_{i+3} - 3f_{i+2} + 3f_{i+1} - f_i}{h^3} + E, \quad E \approx -\frac{3}{2}h^2 f_i''''$$

Aproximaciones de diferencia hacia atrás

$$f_i''' = \frac{f_i - 3f_{i-1} + 3f_{i-2} - 2f_{i-3}}{h^3} + E, \quad E \approx \frac{3}{2}h^2 f_i''''$$

Aproximaciones de diferencias centrales

$$f_i'' = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - 2f_{i-2}}{2h^3} + E, \quad E \approx -\frac{1}{4}h^2 f_i^{(v)}$$

- Por ejemplo si se deseara encontrar el valor de la segunda derivada para $x=4$ para la función tabular:

x	2	3	4	5
y	3,010	4,771	6,021	6,990

Se utiliza la fórmula dada en la tabla 5.1:

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = \frac{6,990 - 2 * 6,021 + 4,771}{1} = -0,281$$

5.1.7. Integración numérica

Dada la función $f(x)$ cuya aproximación está dada por la ecuación (5.26) que pasa por los $n+1$ puntos pivotes para los que $x = x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, todos ellos igualmente espaciados, entonces se podrá tener una aproximación a la integral de la función:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \int_{x_0}^{x_n} \left[y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k(k-1)}{2!} \Delta^2 y_0 + \frac{k(k-1)(k-2)}{3!} \Delta^3 y_0 + \dots \right] dx \quad (5.42)$$

Haciendo un cambio de variable en el que x es igual a $x_0 + kh$, y diferenciando, se tiene que $dx = hdk$. Además si $x = x_0$ entonces $k=0$ y si $x = x_n = x_0 + nh$, entonces $k=n$. Sustituyendo estos valores en la ecuación (5.42) se llega a que:

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= \int_0^n \left[y_0 + k\Delta y_0 + \frac{k^2 - k}{2} \Delta^2 y_0 + \frac{k^3 - 3k^2 + 2k}{6} \Delta^3 y_0 + \dots \right] hdk = \\ &= h \left[ky_0 + \frac{k^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{k^3}{6} - \frac{k^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 + \left(\frac{k^4}{24} - \frac{k^3}{6} + \frac{k^2}{6} \right) \Delta^3 y_0 + \dots \right]_0^n \end{aligned} \quad (5.43)$$

Por lo tanto, reemplazando los límites se llega a que:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = h \left[ny_0 + \frac{n^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{n^3}{6} - \frac{n^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 + \left(\frac{n^4}{24} - \frac{n^3}{6} + \frac{n^2}{6} \right) \Delta^3 y_0 + \dots \right] \quad (5.47)$$

A continuación se presentan algunas reglas de aproximación a la integral de una función: regla del trapecio, regla de Simpson 1/3 y regla de Simpson de 3/8.

5.1.7.1. Regla trapecial

Si la interpolación se limita al primer orden, y la integral solo se calcula entre los dos primeros valores de x , es decir entre x_0 y x_1 ($n=1$), aplicando (5.47), se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = h \left(y_0 + \frac{1}{2} \Delta y_0 \right) \text{ y como } \Delta y_0 = y_1 - y_0, \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{2} (y_0 + y_1) \quad (5.48)$$

Geoméricamente, el primer miembro de la expresión anterior corresponde al área A_1 bajo la curva $y = f(x)$ entre las rectas $x = x_0$ y $x = x_1$ y el eje x . El segundo miembro, que es el valor aproximado de la integral representa al área del trapecio formado por las tres rectas antes mencionadas y la que une los puntos pivotes usados en la interpolación lineal. De manera semejante a como se obtuvo la expresión (5.48) para el área elemental A_1 , se pueden obtener expresiones para A_2, A_3, \dots, A_n (ver Figura 5.1). Por ejemplo, para A_n se tiene:

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx = \frac{h}{2} (y_{n-1} + y_n).$$

Sumando miembro a miembro las expresiones individuales se obtiene que:

$$\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x) dx = \frac{h}{2} (y_0 + y_n + 2(y_1 + y_2 + y_3 + \dots + y_{n-1})) \quad (5.48)$$

El segundo miembro de esta expresión, que proporciona un valor aproximado a la integral del primer miembro, recibe el nombre de **fórmula o regla trapecial**, la cual se expresa en la forma:

$$A_{\frac{1}{2}} = \frac{h}{2} [y_0 + y_n + 2 \sum \text{resto de las ordenadas}] \quad (5.49)$$

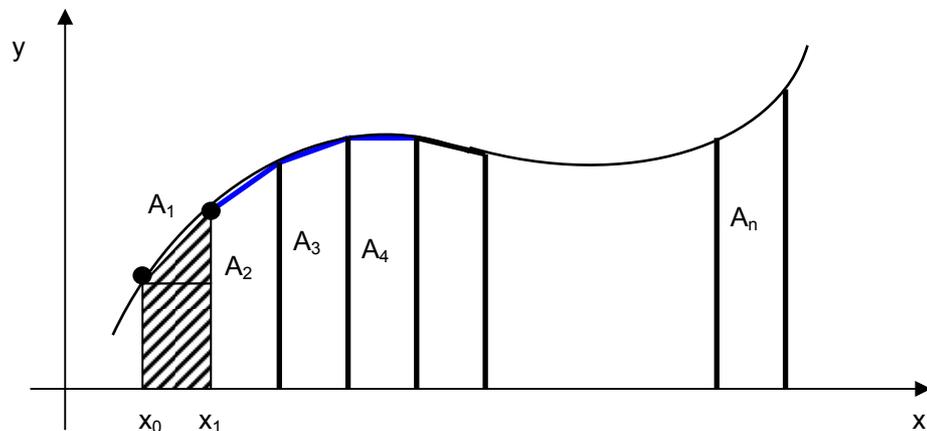


Figura 5.1 Aproximación al área bajo la curva con la fórmula trapecial

Para mejorar la exactitud de la regla del trapecio, se puede dividir el intervalo de integración en h segmentos y aplicar el método a cada uno de ellos. El ancho de segmento se calcula como $h = \frac{x_n - x_0}{n}$ y la regla se denomina trapecial de segmentos múltiples.

Algoritmo para Integración por la regla trapecial de segmentos múltiples

Considerando la siguiente notación:

n : número de datos o puntos definidos de la función tabular

m : número de segmentos

h : ancho de segmentos

x_0 : límite inferior de integración

x_n : límite superior de integración

y_i : valor de la variable dependiente

SU: valor de y para la subrutina de cálculo

A: área del segmento

IN: valor de la integral

Paso 1: Ingresar n

Paso 2: Hacer $m=n-1$

Paso 3: Ingresar x_0, x_n

Paso 4: Calcular h como $h = \frac{x_n - x_0}{m}$

Paso 5: Ingresar y_1

Paso 6: Hacer $SU = y_1$

Paso 7: Para $i=2$ hasta m hacer $SU = SU + 2*y_i$

Paso 8: Calcular el área mediante la fórmula $A = (SU + y_n) / 2 * m$

Paso 9: Calcular IN mediante la fórmula $IN = (x_n - x_0) * A$

Paso 10: la SALIDA es IN

PARAR

5.1.7.2. Regla de Simpson 1/3

Si la interpolación es limitada de segundo orden y la integral solo se calcula entre los tres primeros valores de x ($n=2$) en (5.47) se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = h \left[2y_0 + \frac{2^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{2^3}{6} - \frac{2^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 + \left(\frac{2^4}{24} - \frac{2^3}{6} + \frac{2^2}{6} \right) \Delta^3 y_0 + \dots \right] \quad (5.50)$$

y como $\Delta y_0 = y_1 - y_0$ y $\Delta^2 y_0 = y_2 - 2y_1 + y_0$ se tiene:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = h \left[2y_0 + 2(y_1 - y_0) + \frac{1}{3}(y_2 - 2y_1 + y_0) \right] = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2), \text{ en forma general:}$$

$$\int_{x_{0-2}}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{3}(y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n) \quad (5.51)$$

Sumando miembro a miembro se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)dx = \frac{h}{3}[y_0 + y_n + 2(y_2 + y_4 + y_6 + \dots + y_{n-2}) + 4(y_1 + y_3 + y_5 + \dots + y_{n-1})] \quad (5.52)$$

El segundo miembro de la ecuación se denomina **fórmula de Simpson** del 1/3 y se expresa como:

$$A_{\frac{1}{3}} = \frac{h}{3}[y_0 + y_n + 2\sum \text{ordenadas de orden par} + 4\sum \text{ordenadas de orden impar}] \quad (5.53)$$

En la Figura 5.2 se muestra un esquema de aplicación de esta fórmula:

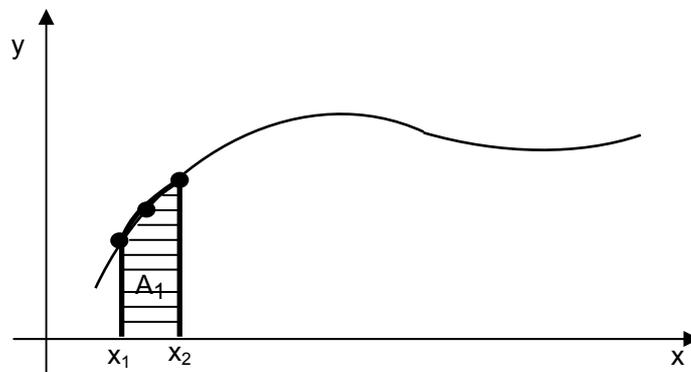


Figura 5.2 Aproximación al área bajo la curva con la fórmula de Simpson de 1/3

5.1.7.3. Regla de Simpson 3/8

Si la interpolación es de tercer orden y se toma $n=3$, se obtiene:

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = h \left[3y_0 + \frac{3^2}{2} \Delta y_0 + \left(\frac{3^3}{6} - \frac{3^2}{4} \right) \Delta^2 y_0 + \left(\frac{3^4}{24} - \frac{3^3}{6} + \frac{3^2}{6} \right) \Delta^3 y_0 + \dots \right] \quad (5.54)$$

$$\int_{x_0}^{x_3} f(x)dx = h \left[3y_0 + \frac{9}{2}(y_1 - y_0) + \frac{9}{4}(y_2 - 2y_1 + y_0) + \frac{3}{8}(y_3 - 3y_2 + 3y_1 - y_0) \right] =$$

$$= \frac{3}{8}h(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3)$$

en forma general:

$$\int_{x_{0-3}}^{x_n} f(x)dx = \frac{3}{8}h(y_{n-3} + 3y_{n-2} + 3y_{n-1} + y_n) \quad (5.55)$$

Sumando miembro a miembro:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx = \frac{3}{8} h \left[y_0 + y_n + 2(y_3 + y_6 + y_9 + \dots + y_{n-3}) + 3(y_1 + y_2 + y_4 + y_5 + y_7 + y_8 + \dots + y_{n-2} + y_{n-1}) \right] \quad (5.56)$$

El segundo miembro de la ecuación se denomina **fórmula de Simpson** del 3/8 y se expresa como:

$$A_{\frac{3}{8}} = \frac{3}{8} h [y_0 + y_n + 2 \sum \text{ordenadas de orden múltiplo de 3} + 3 \sum \text{resto de ordenadas}] \quad (5.57)$$

En la Figura 5.3 se muestra un esquema de aplicación de esta fórmula:

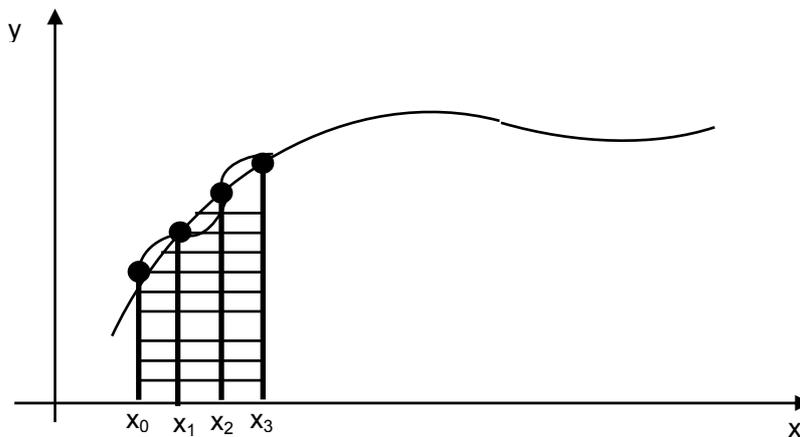


Figura 5.3 Aproximación al área bajo la curva con la fórmula de Simpson de 3/8

➤ Por ejemplo si se deseara encontrar el valor aproximado de la integral de la función tabular:

x	2	4	6	8	10	12	14	16
y	8	4	2	1	2	6	9	10

Utilizando la regla trapezoidal y las de Simpson se obtiene:

$$A_{1/2} = \frac{2[8 + 10 + 2(4 + 2 + 1 + 2 + 6 + 9)]}{2} = 66$$

$$A_{1/3} = \frac{2[8 + 10 + 2(2 + 2 + 9) + 4(4 + 1 + 6)]}{3} = 58,66$$

$$A_{3/8} = \frac{2.3[8 + 10 + 2(1 + 9) + 3(4 + 2 + 2 + 6)]}{8} = 60$$

5.2. APROXIMACIÓN FUNCIONAL

En este tipo de aproximación se trata de encontrar la ecuación de una curva que, aunque no pase por todos los puntos, tenga pocas variaciones, es decir sea suave y pase lo más cerca posible de todos ellos, para ello es necesario aplicar el criterio de **mínimos cuadrados**. Antes de aplicar este criterio, debe escogerse la forma de la curva que se va a ajustar al conjunto de puntos dado y su ecuación puede obtenerse desde un conocimiento previo del problema, es decir por su interpretación física o en forma arbitraria observando que ecuación conocida describe aproximadamente a esta curva.

Dentro de la aproximación funcional por mínimos cuadrados se distinguen tres tipos de regresión: lineal, polinomial, lineal múltiple.

5.2.1. Regresión lineal

El ejemplo más simple de aproximación por mínimos cuadrados es el ajuste de un conjunto de datos a una línea recta.

La expresión matemática de una recta es:

$$y = a_0 + a_1x + E \quad (5.58)$$

en donde a_0 y a_1 son coeficientes que representan la intersección con el eje de las ordenadas y la pendiente, respectivamente y E es el error o residuo entre el modelo y las observaciones. Reordenando, se puede calcular el error como

$$E = y - a_0 - a_1x \quad (5.59)$$

es decir, es la diferencia entre el valor real de y y el valor aproximado, $a_0 + a_1x$ que predice la ecuación lineal.

Una forma de obtener un mejor ajuste es minimizar la suma de cuadrados de los residuos, S_r , de la siguiente manera:

$$S_r = \sum_{i=1}^n E_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i)^2 \quad (5.50)$$

Para encontrar los valores de a_0 y a_1 que minimicen la ecuación (5.50) se debe derivar esta ecuación con respecto a los coeficientes indicados, es decir:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i) \quad (5.51)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i)x_i \quad (5.52)$$

Para generar un mínimo, se igualan estas derivadas a cero y se expresan como un conjunto de dos ecuaciones lineales con dos incógnitas a_0 y a_1 .

$$\begin{cases} na_0 + \sum x_i a_1 = \sum y_i \\ \sum x_i a_0 + \sum x_i^2 a_1 = \sum x_i y_i \end{cases} \quad (5.53)$$

Si se resuelve este sistema se obtiene:

$$a_1 = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \quad (5.54)$$

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x} \quad (5.55)$$

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

El error estándar de aproximación $S_{y/x}$, que indica el error para los valores predichos de y correspondientes a los valores particulares de x y permite cuantificar la dispersión alrededor de la línea de regresión, se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n-2}} \quad (5.56)$$

Para cuantificar la eficiencia del ajuste, que es particularmente útil en la comparación de varias regresiones, se utilizan el coeficiente de determinación r^2 y el de correlación r , que es la raíz cuadrada del coeficiente anterior.

El coeficiente de determinación se calcula como sigue:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \quad (5.57)$$

donde: $S_t = \sum (y_i - \bar{y})^2$ es la cantidad de dispersión en la variable dependiente que existe antes de la regresión.

La diferencia entre las dos cantidades cuantifica la mejora en la reducción del error debido al modelo de la línea recta.

Para un ajuste perfecto $S_r = 0$ y $r^2 = 1$, así la línea recta explica un 100 % de la variabilidad.

El algoritmo para regresión lineal es:

Algoritmo para Regresión lineal

Considerando la siguiente notación:

n : número de datos o puntos definidos de la función tabular

x_i : valor de la variable independiente (i varía de 1 a n)

y_i : valor de la variable dependiente

S_x : suma de los valores de x_i

S_y : suma de los valores de y_i

X^2 : suma de cuadrados de x_i

Y^2 : suma de cuadrados de y_i

XY : suma del producto

x_m : valor medio de x

y_m : valor medio de y

a_1 : pendiente

a_0 : término independiente

Paso 1: Para $i = 1, \dots, n$, seguir los pasos 2 a 4

Paso 2: calcular la suma de los valores de x como: $S_x = S_x + x_i$

Paso 3: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la suma de los valores de y como: $S_y = S_y + y_i$

Paso 4: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la suma de cuadrados de x como: $X^2 = x_i^2 + x_i^2$

Paso 5: Para $i = 1, \dots, n$, calcular la suma de cuadrados de y como: $Y^2 = y_i^2 + y_i^2$

Paso 6: Hacer $x_m = S_x/n$

Paso 7: Hacer $y_m = S_y/n$

Paso 8: Calcular a_1 mediante la fórmula: $a_1 = (n \cdot XY - S_x \cdot S_y) / (n \cdot X^2 - S_x^2)$

Paso 9: Calcular a_0 mediante la fórmula: $a_0 = y_m - a_1 \cdot x_m$

Paso 10: la SALIDA es a_0 y a_1

PARAR

5.2.2. Linealización de relaciones no lineales

En el caso de tener relaciones no lineales se pueden hacer transformaciones que expresen los datos de manera que sean compatibles con la regresión lineal. A continuación se presentan algunos ejemplos.

Modelo exponencial

$$y = d_1 e^{b_1 x} \quad (5.58)$$

en donde d_1 y b_1 son constantes. Para linealizar este modelo se aplican logaritmos naturales, es decir:

$$\ln y = \ln d_1 + b_1 \ln e \quad (5.59)$$

En una gráfica semilogarítmica de $\ln y$ vs. x se genera una línea recta con pendiente b_1 y ordenada al origen: $\ln d_1$.

Modelo de ecuación elevada a una potencia

$$y = d_2 x^{b_2} \quad (5.60)$$

En donde d_2 y b_2 son coeficientes, puede linealizarse mediante logaritmos en base 10, o sea:

$$\log y = b_2 \log x + \log d_2 \quad (5.61)$$

de forma que en una gráfica logarítmica de $\log y$ vs $\log x$ se genera una línea recta con pendiente b_2 y ordenada al origen $\log d_2$.

Modelo de crecimiento a saturación

$$y = d_3 \frac{x}{b_3 + x} \quad (5.62)$$

Los coeficientes d_3 y b_3 son constantes y puede linealizarse si se invierte la ecuación (5.62), es decir:

$$\frac{1}{y} = \frac{b_3}{d_3} \frac{1}{x} + \frac{1}{d_3} \quad (5.63)$$

Una gráfica de $1/y$ contra $1/x$ será lineal, con pendiente b_3/d_3 y ordenada al origen $1/d_3$.

5.2.3. Regresión polinomial

El procedimiento de mínimos cuadrados se puede extender fácilmente y ajustar los datos a un polinomio de m -ésimo grado.

$$y = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m \quad (5.64)$$

En este caso la suma de cuadrados de los residuos es:

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2 - \dots - a_mx_i^m)^2 \quad (5.65)$$

Siguiendo el procedimiento anterior, se deriva la ecuación con respecto a cada uno de los coeficientes del polinomio, para obtener:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2 - \dots - a_mx_i^m) \quad (5.66)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - a_0 - a_1x_i - a_2x_i^2 - \dots - a_mx_i^m) \quad (5.67)$$

...

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_m} = -2 \sum_{i=1}^n x_i^m (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - \dots - a_m x_i^m) \quad (5.68)$$

Si estas ecuaciones se igualan a cero y se reordenan se obtiene un conjunto de ecuaciones normales:

$$\left\{ \begin{array}{l} na_0 + a_1 \sum x_i + a_2 \sum x_i^2 + \dots + a_m \sum x_i^m = \sum y_i \\ a_0 \sum x_i + a_1 \sum x_i^2 + a_2 \sum x_i^3 + \dots + a_m \sum x_i^{m+1} = \sum x_i y_i \\ a_0 \sum x_i^2 + a_1 \sum x_i^3 + a_2 \sum x_i^4 + \dots + a_m \sum x_i^{m+2} = \sum x_i^2 y_i \\ \vdots \\ a_0 \sum x_i^m + a_1 \sum x_i^{m+1} + a_2 \sum x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum x_i^{2m} = \sum x_i^m y_i \end{array} \right. \quad (5.69)$$

El error de regresión polinomial se calcula con:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{n - (m + 1)}} \quad (5.70)$$

Y el coeficiente de determinación con

$$r^2 = \frac{S_v - S_r}{S_v} \quad (5.71)$$

5.2.4. Regresión lineal múltiple

Se utiliza si y es una función de dos o más variables. Por ejemplo si y es función lineal de x_1 y x_2 de la forma:

$$y = a_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 \quad (5.72)$$

La suma de los residuos es:

$$S_r = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i})^2 \quad (5.73)$$

Si se deriva con respecto a cada uno de los coeficientes se obtiene:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i}) \quad (5.74)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2 \sum_{i=1}^n x_{1,i} (y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i}) \quad (5.75)$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_2} = -2 \sum_{i=1}^n x_{2,i} (y_i - a_0 - a_1 x_{1,i} - a_2 x_{2,i}) \quad (5.76)$$

Los coeficientes que generan la suma mínima de los cuadrados de los residuos se obtienen igualando a cero cada una de las derivadas parciales y expresando las ecuaciones como un conjunto de ecuaciones lineales simultáneas, de la forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} na_0 + a_1 \sum x_{1,i} + a_2 \sum x_{2,i} = \sum y_i \\ a_0 \sum x_{1,i} + a_1 \sum x_{1,i}^2 + a_2 \sum x_{1,i} x_{2,i} = \sum x_{1,i} y_i \\ a_0 \sum x_{2,i} + a_1 \sum x_{1,i} x_{2,i} + a_2 \sum x_{2,i}^2 = \sum x_{2,i} y_i \end{array} \right. \quad (5.77)$$

- Por ejemplo se desean ajustar los datos experimentales de la tabla que se presenta a continuación a un modelo exponencial.

x	1	2	2,5	4	6
y	0,4	0,7	0,8	1,0	1,2

La ecuación que describe estos datos es la (5.59):

$$y = d_1 e^{b_1 x}$$

Aplicando logaritmos neperianos a ambos miembros de la ecuación se llega a que:

$$\ln y = \ln d_1 + b_1 \ln e$$

Por lo tanto se puede llamar Y a $\ln y$; a_0 al $\ln d_1$ y a_1 a b_1 , de manera que la ecuación con esa transformación es una ecuación lineal:

$$Y = a_0 + a_1 x$$

En la tabla que sigue se presenta la transformación de los datos

x	y	Y=ln y	x.Y	x²
1	0,4	-0,916	-0,916	1
2	0,7	-0,365	-0,712	4
2,5	0,8	-0,223	-0,557	6,25
4	1	0	0	16
6	1,2	0,182	1,092	36
Σ	15,5	-1,313	-1,093	63,25

El valor medio de x es 3,1 y el de Y es -0,262

El cálculo de la pendiente en base a la fórmula (5.54) es:

$$a_1 = \frac{5(-1,0935) - 15,5(-1,313)}{5(63,25) - (15,5)^2} = 0,195$$

$$a_0 = -0,262 - (0,195 \cdot 3,1) = -0,867$$

Como $a_0 = \ln d_1$, entonces $d_1 = e^{-0,867} = 0,420$

Como $a_1 = b_1$, entonces b_1 es 0,195

La ecuación ajustada es:

$$y = 0,420 e^{0,195 x}$$

EJERCICIOS PROPUESTOS

5.1. Obtenga, aplicando el método de diferencias finitas, el grado del polinomio que puede representar al conjunto de valores de la siguiente tabla:

x	0	6	12	18	24	30
y	2	8	62	212	506	992

5.2. Utilice el método de interpolación que corresponda para:

- a) conocer la producción de arroz parboilizado durante el año 95 si los datos de producción en toneladas se presentan en la tabla que sigue:

Año	90	92	94	96	98
Producción (tn)	1229	1302	1100	1200	1220

- b) determinar la conductividad térmica de las frutillas a -25°C si su conductividad en W/m K a diferentes temperaturas es:

T ($^\circ\text{C}$)	-40	-34	-30	-24	-20	-15	-10	-5
k(W/m K)	1.489	1.450	1.413	1.375	1.388	1.299	1.255	1.183

5.3. Para la función definida en la tabla de la distribución de velocidades de leche en una tubería, calcule:

- a) la primera derivada en $x = 2$, utilizando las fórmulas de interpolación limitadas al primero, segundo y tercer orden.
- b) La primera y segunda derivadas para $x = 4$, aplicando la interpolación de segundo orden.

X	2	3	4	5	6	7
y	6,010	8,144	12,022	14,990	16,781	20,451

5.4. Si se tiene una curva de crecimiento de *Clostridium sporogenes* en la que se representa la velocidad de crecimiento en función del tiempo, descrita por los datos que se presentan en la tabla, indique el valor de la pendiente de la curva en un tiempo $t = 300$ min.

t(min)	0	100	200	300	400
$\frac{v}{(N/min) \times 10^6}$	0	30	45	50	50

5.5. Las dos primeras columnas de la tabla que se presenta a continuación indican las relaciones tiempo temperatura en el centro de una lata de habas en salsa de tomates que se está esterilizando en un autoclave discontinuo. La tercera columna presenta el valor letal de las temperaturas superiores a 100 °C. Como el área bajo la curva de letalidad vs. tiempo corresponde al valor esterilizante de este tratamiento, determine si el mismo es suficiente considerando que el valor apropiado es 6 minutos.

t (min)	T (°C)	L
0	54,44	$2,208 \times 10^{-7}$
1	62,78	$1,506 \times 10^{-6}$
2	68,54	$5,675 \times 10^{-6}$
3	75,55	$2,851 \times 10^{-5}$
4	81,66	$1,164 \times 10^{-4}$
5	87,22	$4,188 \times 10^{-4}$
6	92,77	$1,503 \times 10^{-4}$
7	97,77	$4,753 \times 10^{-3}$
8	102,22	0,013
9	105,55	0,028
10	108,33	0,054
11	110,55	0,090
12	112,77	0,150
13	114,44	0,221

t (min)	T (°C)	L
14	116,77	0,378
15	117,22	0,419
16	118,05	0,507
17	118,61	0,577
18	119,05	0,638
19	119,5	0,708
20	119,61	0,726
21	117,77	0,475
22	108,33	0,054
23	93,33	$1,710 \times 10^{-3}$
24	80,00	$7,943 \times 10^{-5}$
25	68,88	$6,138 \times 10^{-6}$

5.6. Determine la ecuación de la recta de regresión para los datos de la tabla que sigue que representan la cantidad de β -caroteno (mg) extraído de granos de maíz (kg). Grafique la función tabular y el ajuste. Calcule la media, desviación estándar y el coeficiente de variación.

Maíz (kg)	0,1	0,4	0,5	0,7	0,8	0,9
β -caroteno (mg)	0,61	0,92	0,99	1,52	1,47	2,03

5.7. Ajuste a un polinomio de segundo orden los datos que siguen:

x	0	1	2	3	4	5
y	4,1	14,7	26,6	52,2	80,9	122,1

Grafique los datos y el polinomio de ajuste, calcule el error de aproximación y el coeficiente de correlación

5.8. Considere que p representa a la población de levaduras del género *Saccharomyces* que se utilizan en la elaboración de cerveza y que f es la concentración de la fuente de carbono que servirá de sustrato a estos microorganismos. Las medidas de k (tasa de crecimiento específico en días⁻¹ contra f (mg/L) se muestran en la tabla. Determine los valores de $k_{m\acute{a}x}$ (tasa máxima de crecimiento para valores de f) y K (constante de semi-saturación), empleando la linealización del modelo de promedio de crecimiento a saturación.

La ecuación que rige el modelo es: $k = k_{m\acute{a}x} \frac{f}{K + f}$

x	7	9	15	25	40	75	100	150
y	0,28	0,36	0,56	0,74	0,86	0,97	0,99	1,14

5.9. La relación entre la concentración de una sustancia orgánica en función del tiempo está expresada por la siguiente tabla de datos experimentales:

Tiempo (min)	0,1	0,4	0,5	0,7	0,7	0,9
Concentración (mgL ⁻¹)	0,61	0,92	0,99	1,52	1,47	2,03

Establezca la relación empírica $C=f(t)$ que mejor se ajuste a los datos y grafique los datos experimentales y el ajuste.

5.10. La relación entre el contenido en CO₂ de un determinado vapor (W en ppm) y la conductividad específica del condensado (C en mhos cm⁻¹) está dada por la siguiente tabla:

C (mhos cm ⁻¹)	0,49	1,56	2,32	3,11	3,74	4,44	5,36
W (ppm)	0,78	3,09	5,25	8,44	11,88	15,79	20,18

Determine la ecuación polinomial $W=f(C)$ que se ajuste a los datos y grafique.

Capítulo 6

SIMULACION

El término simulación se refiere a la construcción de una representación simplificada de un proceso o un sistema físico con el fin de facilitar su análisis, se caracteriza por el hecho de no incluir todas las propiedades del sistema real; es decir, que el propósito de la simulación es mostrar el efecto de ciertos factores particulares que se están investigando.

Se utiliza simulación si no existe una formulación matemática o métodos de resolución analíticos (o son demasiado complejos); se desea experimentar con el sistema antes de su construcción e interesa controlar las condiciones del sistema y resulta imposible experimentar sobre el mismo. Sus objetivos son observar, predecir, modificar y optimizar un sistema. De esta manera es posible estudiar el comportamiento del sistema, imaginar situaciones para mejorarlo, con costos bajos o poco peligrosos.

6.1. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN

Debido al carácter tan complejo de un sistema real, el estudio que se hace para obtener un modelo o simulación se considera dividido en cuatro etapas principales, que son las siguientes:

1. **Observación del sistema:** representa la fase experimental del estudio en la que se hace un análisis preliminar del sistema, con el fin de determinar la interacción con otros sistemas, sus restricciones, las variables que interactúan dentro del mismo y sus interrelaciones, las medidas de efectividad que se van a utilizar para definirlo y estudiarlo y los resultados que se esperan obtener del estudio que fundamentarán el diseño del modelo.
2. **Establecimiento del sistema matemático:** de las conclusiones inferidas en la etapa anterior se fijan los postulados sobre los que se fundamenta el modelo matemático y en general puede consistir en un sistema de ecuaciones diferenciales o de diferencias. En la formulación del modelo es necesario definir todas las variables que forman parte de él, sus relaciones lógicas y los diagramas de flujo que describan en forma completa el modelo.
3. **Solución del modelo matemático:** esta proporciona información que predice el comportamiento del sistema real, el cual sirve para conocer el grado de validez del modelo. Si no se pueden resolver las ecuaciones que forman el modelo matemático, ya sea por la cantidad de cálculos matemáticos que requieren, por falta de capacidad de la computadora o por no poder obtenerse

exactamente la solución, se puede hacer un análisis cualitativo del modelo matemático con el fin de resolverlo; el planteamiento y solución de estos modelos cualitativos es lo que constituye los métodos de Montecarlo.

4. **Verificación y ajuste del modelo:** Los resultados obtenidos en la etapa anterior se comparan con los resultados del comportamiento que sigue el sistema real y con los cuales se estableció el modelo de la etapa 1.

6.1.1. Métodos de Montecarlo

Los métodos de Montecarlo abarcan una colección de técnicas que permiten obtener soluciones de problemas matemáticos o físicos por medio de pruebas aleatorias repetidas. En la práctica, las pruebas aleatorias se sustituyen por resultados de ciertos cálculos realizados con números aleatorios.

El problema crucial de la aplicación de estos métodos es hallar los valores de una variable aleatoria (discreta o continua) con una distribución de probabilidad dada por la función $p(x)$ a partir de una transformación de los valores de una variable aleatoria uniformemente distribuida en el intervalo $[0,1)$, proporcionada por la computadora o por una rutina incorporada al programa (esto se denomina generación de números aleatorios).

6.1.1.1. Generación de números aleatorios

En los experimentos de simulación, es necesario aplicar un mecanismo que proporcione **números aleatorios**. La forma de obtenerlos es variada, entre los primeros mecanismos se tenían las ruletas, dados, cartas, etc., actualmente pueden generarse mediante técnicas que utilizan tablas, computadoras analógicas y digitales. En la Tabla 6.1 se presenta un cuadro comparativo de estas técnicas.

Tabla 6.1. Técnicas de generación de números aleatorios

TECNICA	CARACTERISTICAS DE OPERACION	VENTAJAS	DESVENTAJAS
TABLAS	Los números han sido generados por algún otro medio.	Se puede repetir la misma secuencia de números.	Es lenta y puede quedar limitada si se trata de una muestra grande. Los números con los que se trabaja son siempre los mismos para cualquier problema.
COMPUTADORAS ANALOGICAS	Generan los números por algún proceso físico.	Los números son verdaderamente aleatorios con alta frecuencia.	No se puede repetir la misma secuencia.
COMPUTADORAS DIGITALES	Los números se generan por medio de tablas con algún aditamento analógico que establezca algún proceso físico o bien por generación interna utilizando una relación de recurrencia.	La generación interna por medio de alguna relación de recurrencia se puede considerar como una operación normal de la computadora y se pueden lograr grandes muestras de números en poco tiempo y es posible reproducir el proceso.	En el caso de tablas la generación se vuelve lenta y ocupa un gran espacio en la memoria y en el caso de aditamentos analógicos no se puede reproducir una misma secuencia de números.

Cabe aclarar que las relaciones de recurrencia producen secuencias en las que es posible identificar cualquier número de antemano, estableciendo una secuencia determinística y perdiendo su carácter aleatorio. Estas secuencias se consideran aleatorias si las sucesiones de números generados tienen una distribución uniforme y son estadísticamente independientes y se denominan **números pseudoaleatorios** o números aleatorios producidos por métodos secuenciales.

6.1.1.2. *Generación de Números pseudoaleatorios*

Para generarlos pueden utilizarse los métodos de cuadrados centrales, de los productos centrales y métodos congruenciales.

6.1.1.2.1. Método de los cuadrados centrales

Se parte de un número de n cifras que se eleva al cuadrado y del resultado obtenido, que por lo general es un número de $2n$ cifras, se toman las n cifras de la parte central, que a su vez se vuelven a elevar al cuadrado y así sucesivamente. La desventaja es que tiende a degenerar rápidamente hacia valores constantes dependiendo del número inicial que se elija.

- Por ejemplo se desean generar números entre 0 y 999 y se elige como número inicial a 204, que genera la secuencia:

$$204^2=41616 \rightarrow 161$$

$$161^2=25921 \rightarrow 592$$

$$592^2=350464 \rightarrow 504$$

6.1.1.2.2. Método de los productos centrales

Se efectúa el producto entre dos números seguidos de la sucesión de números pseudoaleatorios y del resultado tomar los números del medio para obtener el número siguiente de la sucesión. También tiende a degenerar a valores constantes.

- Por ejemplo se desean generar 3 números aleatorios y se eligen como números iniciales a 1425 y 1915, que generan la secuencia:

$$(1425)(1915)=2728875 \rightarrow 7288$$

$$(7288)(1915)=13956520 \rightarrow 9565$$

$$(9565)(7288)=69709720 \rightarrow 7097$$

6.1.1.2.3. Métodos congruenciales

Dentro de los métodos secuenciales, los más importantes son los de tipo congruencial y responden a una expresión general de la forma:

$$U_{i+1} = (\alpha U_i + k) \text{ mód } m \quad (6.1)$$

donde:

U_{i+1} : número aleatorio generado en el paso $i+1$

U_i : número aleatorio generado en el paso i

α : multiplicador

k : incremento

m : módulo

Significa que $(\alpha U_i + k)$ se divide entre m y el residuo que se obtenga es el valor de U_{i+1} . Estos números quedan limitados ya que U_0 y k deben ser mayores o iguales a 0, pero menores que m . El multiplicador α debe ser mayor que cero y menor que m .

Pueden distinguirse los siguientes métodos congruenciales:

a) Método congruencial mixto

Se lo denomina así si k es una constante diferente de cero. Para asegurar que el período de una secuencia sea mayor a la cantidad de números aleatorios requeridos es importante la selección del módulo, incremento, multiplicador y del valor inicial.

Se puede obtener una muestra con un período igual al módulo m si se cumplen las siguientes condiciones:

1. k y m son números primos relativos
2. $\alpha = pt + 1$, siendo p un factor primo de m y t cualquier entero no negativo.
3. En el caso de que 4 sea un factor de m , se aplica la condición:
 $\alpha = 4t + 1$, donde t es cualquier entero no negativo.

Como las computadoras emplean números binarios o decimales, se utilizan criterios diferentes para la selección de m , por ejemplo para computadoras decimales conviene que m valga 10^d , siendo d el número de dígitos decimales que se tiene en una palabra. U_0 puede ser cualquier número decimal positivo, k un número impar positivo no divisible entre 5, y $\alpha = 20t + 1$, donde t es cualquier entero no negativo o bien $\alpha = 10^s + 1$, con $s > 1$.

b) Método congruencial multiplicativo

Es el más empleado, se obtiene cuando $k = 0$, o sea:

$$U_{i+1} = (\alpha U_i) \text{ mód } m \quad (6.2)$$

c) Método congruencial aditivo

En este caso $\alpha = 1$ y se tiene la fórmula:

$$U_{i+1} = (U_i + U_{i+s}) \text{ mód } m \quad (6.3)$$

y si s es igual a 1, $U_0 = y$ y $U_1 = 1$, se obtiene la secuencia de Fibonacci.

6.1.1.3. Aplicaciones de los métodos de Montecarlo

Como aplicaciones de estos métodos se pueden mencionar: paseo aleatorio, integración por simulación y línea de espera.

6.1.1.3.1. Paseo aleatorio

Para explicar este método supongamos que se desea saber cual es la distancia D que recorre un niño en una plaza después de haber dado n pasos, cada paso tiene la misma longitud P , variando exclusivamente la dirección hacia la que se mueve dentro de un ángulo α tal que $0^\circ \leq \alpha \leq 360^\circ$, como se muestra en la Figura 6.1.

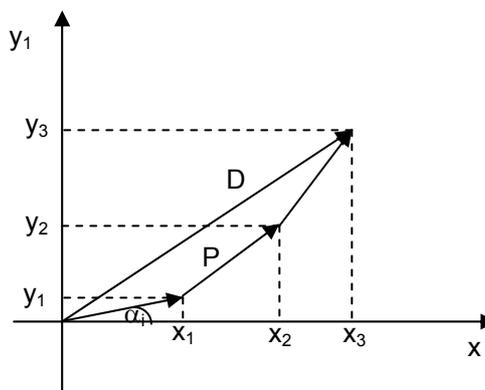


Figura 6.1. Paseo aleatorio

La distancia esperada se define como:

$$D_{\text{esp}} = P \sqrt{n} \quad (6.4)$$

Para realizar la simulación de la distancia recorrida por el niño se genera un número aleatorio U_i , para obtener el ángulo α_i en radianes se multiplica al número por 2π .

Las componentes de cada paso dado se calculan mediante las expresiones:

$$x_i = P \cos \alpha_i \quad (6.5)$$

$$y_i = P \sen \alpha_i \quad (6.6)$$

La distancia después de n pasos, con la ecuación:

$$D_{\text{esp}} = \sqrt{\left(\sum_{i=1}^n X_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^n Y_i\right)^2} \quad (6.7)$$

Un algoritmo para el paseo aleatorio es:

Algoritmo para el Paseo aleatorio

Para determinar la distancia esperada luego de un número N de simulaciones, para número de pasos y longitud de paso determinadas

Considerando la siguiente notación:

n: número de pasos

P: longitud del paso

N: número máximo de simulaciones

x y y: componentes del paso

Sx: sumatoria de las componentes x; Sy: sumatoria de las componentes y

α : ángulo simulado en radianes

U: número aleatorio de 0 a 1

D(j): distancia acumulada hasta el paseo j-ésimo

DE: distancia esperada que se calcula como $P\sqrt{n}$

DM: distancia media obtenida por simulación

E: diferencia entre la DE y la distancia obtenida por simulación

Paso 1: Tomar $j=1$

Paso 2: Hacer $D(j)=DE$

Paso 3: Tomar $j=2$

Paso 4: Tomar $S_x=0$;

$S_y=0$

Paso 5: Si $j \leq N$ seguir los pasos 6 a 11

Paso 6: Tomar $i=1$

Paso 7: Si $i \leq n$ seguir los pasos 8 a 11

Paso 8: Generar $U=\text{rand}(1)$

Paso 9: Hacer $\alpha=2\pi*U$;

$x= P * \cos \alpha$

$y = P * \text{sen } \alpha$

Paso 10: Hacer $S_x=S_x+x$;

$S_y=S_y+y$

Paso 11: Tomar $i=i+1$

Paso 12: Si $i > N$, calcular la distancia acumulada mediante la fórmula

$$D(j) = D(j-1) + \sqrt{S_x^2 + S_y^2}$$

Paso 13: Tomar $j=j+1$

Paso 14: Repetir los pasos 7a 11

Paso 15: Si $j > N$ entonces hacer $DM=D(j)/j$;

$$E = \left| \frac{DE - DM}{DE} \right| \cdot 100$$

Paso 16: la SALIDA es DM, E

PARAR

6.1.1.3.2. Integración por simulación

Una de las aplicaciones más frecuentes que han tenido los métodos de Montecarlo ha sido el cálculo de áreas o volúmenes.

Si se desea calcular el área bajo la curva de una función, en el intervalo (a,b) , como la que se muestra en la Figura 6.2., se deben seguir ciertos pasos.

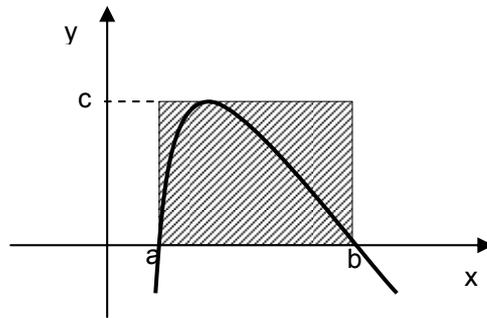


Figura 6.2. Gráfico de una función cuya área se desea calcular

Estos pasos son:

1. Definir un área conocida que comprende el área que se desea integrar, en este caso un rectángulo.
2. Considerar esta área como un blanco con dos zonas, sobre la que se lanzan dardos, que se distribuyen sobre toda el área. Cada vez que se lanza el dardo, se observa si quedó en el área bajo la curva, contabilizando como un acierto en el caso de que así ocurra y no indicando nada en caso contrario.
3. Repetir este proceso N veces
4. Se aproxima el número de aciertos, n , a :

$$n \cong p_a N \quad (6.8)$$

donde p_a es la probabilidad de acertar.

5. A partir de la consideración de que la distribución de dardos es uniforme, se puede pensar que n es un número asociado al área buscada y N el valor asociado al área del rectángulo, por lo cual se tiene:

Área $\cong p_a$ (área rectangular), esta probabilidad es $p_a = n/N$ de la ecuación (6.8), por lo tanto

$$\text{Área} \cong n/N \text{ (área rectangular)} \quad (6.9)$$

El procedimiento descrito puede hacerse por generación de números aleatorios.

6.1.1.3.2. Línea de espera

Se puede utilizar el método de Montecarlo para calcular el tiempo medio de espera en una situación dada.

El problema se estudia para distintas frecuencias de llegada y se simula el transcurso del tiempo por medio del generador de números aleatorios, el cual proporciona un número cada minuto y de acuerdo al número se tendrá o no el arribo de una muestra para hacer uso del servicio.

El tiempo de servicio, que por lo general no depende de cuando ocurre el período sino más bien de la longitud del intervalo, es bastante común en las situaciones cotidianas de líneas de espera. Para calcular el tiempo se aplican los siguientes pasos:

1. Cálculo de la probabilidad de que el sistema esté ocupado P_w

$$P_w = \frac{\lambda}{\mu} = \rho \quad (6.10)$$

dónde λ es la tasa promedio de llegadas y μ es la tasa promedio de servicio.

2. Cálculo de la probabilidad de que el sistema no esté trabajando, o esté vacío:

$$P_0 = 1 - P_w = 1 - \rho \quad (6.11)$$

3. Cálculo de la probabilidad de que haya n muestras en el sistema P_n :

$$P_n = P_0 \rho^n \quad (6.12)$$

donde n es cualquier entero no negativo.

4. Cálculo del número promedio de muestras que se encuentran en el sistema, L , ya sea esperando o siendo analizadas:

$$L = \frac{\rho}{1-\rho} \quad (6.13)$$

5. Cálculo del número promedio de muestras que esperan ser analizadas, L_q .

$$L_q = L - \rho = \frac{\rho^2}{1-\rho} \quad (6.14)$$

6. Cálculo del tiempo de espera, en el se distinguen:

Tiempo promedio de una unidad en el sistema,

$$W = \frac{L}{\lambda} \quad (6.15)$$

y el Tiempo de espera de una muestra para ser analizada:

$$W_q = \frac{L_q}{\lambda} \quad (6.16)$$

- Por ejemplo, si se quiere calcular el tiempo de espera en un laboratorio de análisis de agua al que llegan 20 muestras por hora y el tiempo promedio de análisis es 30 muestras por hora.

Se calcula la probabilidad de que el sistema esté ocupado $P_w = \frac{\lambda}{\mu} = \frac{20}{30} = \frac{2}{3}$, la probabilidad de que no lo esté es $1/3$.

El número de muestras que se encuentran en el sistema siendo analizadas o en espera es:

$$L = \frac{2/3}{1/3} = 2, \text{ por lo tanto el número que espera ser analizado es } L_q = 2 - \frac{2}{3} = \frac{4}{3}.$$

El tiempo promedio de una unidad en el sistema es $W = \frac{2}{20} = \frac{1}{10} \text{ h} = 6 \text{ min}$ y el tiempo pro-

medio de espera es $W_q = \frac{4/3}{20} = \frac{1}{15} \text{ h} = 15 \text{ min}$

6.2. Modelos Demográficos y de la Cinética Química

Como ejemplos de modelos de la dinámica de sistemas pueden mencionarse los modelos demográficos y los de la cinética química.

6.2.1. Modelo demográfico

La relación entre la población en un instante de tiempo $P(T)$ y un instante anterior $P(T-1)$, donde H es el tiempo transcurrido entre ambos, y N y D son los nacimientos y las defunciones ocurridos en ese tiempo, pueden modelarse por la ecuación:

$$P(T) = P(T-1) + H*(N - D) \quad (6.17)$$

Esta ecuación representa un modelo matemático simple de la población y permite determinar la población en el instante T .

Además, por lo general, los nacimientos y las defunciones se expresan en función de las tasas de natalidad, TN , y de defunción TD , entonces se tienen las siguientes expresiones:

$$N = P(T-1)*TN \quad (6.18)$$

$$D = P(T-1)*TD \quad (6.19)$$

Se tienen tres ecuaciones, que se pueden interpretar como tres instrucciones de programación que pueden integrarse en un programa de una computadora. Para generarlo deben realizarse las siguientes tareas:

1. **Encabezamiento:** se identifica el nombre del programa y su versión, año, autores, finalidad y otros datos de interés para el usuario.
2. **Inicialización:** se definen todos los elementos que participan en el programa, por ejemplo, variables, parámetros, constantes, etc. Es conveniente especificar el nombre o el rol de cada variable.
3. **Dimensionamiento de las variables:** se especifica la dimensiones de las variables que requieren exigen la reserva de memoria en la computadora y se almacenan en vectores para su posterior impresión en tablas.
4. **Ingreso de datos:** el programa debe ser versátil, es decir debe permitir la modificación de los datos de entrada.
5. **Módulo de cálculo:** en el se incluye una estructura iterativa mediante la cual se ordena a la computadora que realice la tarea incluida entre las instrucciones FOR T =... y NEXT T, hasta alcanzar una determinada condición.

6.2.2. Modelos de la cinética química

La cinética química tiene por objetivo el estudio de las velocidades de las reacciones químicas en sistemas homogéneos y heterogéneos, así como los factores que determinan esas velocidades. El estudio de estos últimos permite formular conclusiones sobre el mecanismo que rige en esas reacciones.

En el estudio de estos modelos se pueden considerar dos aspectos: el fenomenológico y el teórico.

Con respecto al primero se estudia la forma en que las velocidades dependen de la concentración.

La velocidad de una reacción, puede definirse como la cantidad de sustancia transformada en la unidad de tiempo. El estudio se realiza sobre una reacción conocida es decir una en la que ya están establecidas las reacciones estequiométricas entre reactantes y productos,



en la que el segundo miembro puede ser reemplazado por P (productos):



La teoría demuestra que, en general, la velocidad de reacción en un instante t es proporcional a los productos de las concentraciones molares actuales (masas activas) de los reactivos, elevadas a una potencia igual a su respectivo coeficiente estequiométrico. La cantidad de sustancia transformada puede expresarse en número de unidades de reacción convertidos en productos. Si esta cantidad es x en el tiempo t, la velocidad es:

$$v = \frac{dx}{dt} = k[A]^a [B]^b [C]^c \dots \quad (6.22)$$

esta expresión constituye la ley básica de la cinética química.

La velocidad de una reacción puede expresarse en función de la variación de la concentración molar de uno de los reactivos (que se consume) o de uno de los productos (que se forma). La sustancia se selecciona según convenga por su significación, por su facilidad de ser valorada, etc.

La velocidad de consumo de A, puede expresarse como:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^a [B]^b [C]^c \dots \quad (6.23)$$

La constante k es la constante de velocidad o velocidad específica, se determina isotérmicamente. El orden total de la reacción, N, se define como el número total de moléculas o átomos de las sustancias reaccionantes cuyas concentraciones, al variar en función del tiempo, participan en la expresión de la velocidad de la reacción.

La experiencia prueba que no siempre las reacciones ocurren de acuerdo a lo expresado en las expresiones anteriores y la ley fundamental de la cinética se expresa en función de los órdenes de reacción v_i con respecto a la concentración que ponderan, es decir:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A]^{v_a} [B]^{v_b} [C]^{v_c} \dots \quad (6.24)$$

El objetivo de los modelos es determinar esos exponentes (coeficientes estequiométricos), que se llaman x, y, z, Pueden emplearse dos métodos: el método diferencial y el integral.

6.2.2.1. Método diferencial

Se determinan los valores de la derivada de la concentración con respecto al tiempo.

Una forma de obtenerlos es a través de las concentraciones con el tiempo y representando [...] frente a t, ya que la pendiente es la derivada buscada. Estas se comparan con la ecuación cinética.

La determinación de los órdenes de reacción se efectúa determinando el valor inicial de la velocidad, para lo que se emplean tiempos de reacción cortos de manera que no haya cambios apreciables en la concentración y se mide la velocidad. Por ejemplo si se mantienen constantes todas las concentraciones y al duplicar la de A se observa que la velocidad $[A]'$ se cuadruplica, entonces $x = 2$ y así se determinan todos los exponentes. A continuación se determina k empleando valores medidos, en un experimento de [A], [B], [C],

6.2.2.2. Método integral

La ecuación diferencial se transforma por integración en otra que exprese la concentración en función del tiempo. Para ello se mide la velocidad de reacción durante un largo período de tiempo y luego se ajustan los datos a la ecuación integrada.

Por ejemplo, se supone que la cinética es de primer orden,

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A] \quad (6.25)$$

la ecuación integrada es

$$[A] = [A]_0 e^{-kt} \quad (6.26)$$

por lo tanto una representación de $\log \frac{[A]}{[A]_0}$ frente al tiempo t es una línea recta de pendiente $-k$,

por lo que a partir de las medidas experimentales de $[A]$ con el tiempo se puede obtener el valor de la constante de velocidad k a partir de la pendiente de la gráfica.

El método integral tiene mucho de artesanal, ya que se formula una hipótesis sobre la ecuación de velocidad y los órdenes de reacción en reactantes y productos y se valida por contraste con los resultados experimentales. Si no existe buena concordancia se formula otra hipótesis y se repiten los cálculos hasta llegar a un resultado satisfactorio.

Este método es el más usado, su principal inconveniente es que se supone que los órdenes de reacción son números enteros y esto no siempre es así, además se aplica a una sola curva de cinética en determinadas condiciones.

El método diferencial es teóricamente más correcto, su inconveniente deriva de la determinación de las pendientes.

6.2.2.3. Dinámica de sistemas cinetoquímicos

Considerando una reacción simple:



Si una molécula de A entra en colisión con una de B, pueden reaccionar y formar C y D. Suponiendo coeficientes estequiométricos iguales a 1, la velocidad de reacción se puede expresar como:

$$\frac{d[A]}{dt} = -k[A][B] \quad (6.28)$$

Si la variación de $[A]$ fuese lineal, para un tiempo T transcurrido entre $T - 1$ y T , con $H = T - (T-1)$, se obtiene:

$$\frac{[\dots]_{(T)} - [\dots]_{(T-1)}}{H} = -K[A]_{(T-1)}[B]_{(T-1)} \quad (6.29)$$

Entonces, el comportamiento temporal de la concentración del reactante A se expresa como:

$$[A]_{(T)} = [A]_{(T-1)} - K[A]_{(T-1)}[B]_{(T-1)}H \quad (6.30)$$

Reemplazando A en el primer miembro por B, C y D, se obtiene las restantes expresiones y se obtiene la velocidad por cualquiera de los métodos estudiados.

EJERCICIOS PROPUESTOS

- 6.1.** Encuentre 7 números aleatorios generados por el método de cuadrados centrales, entre 0 y 999, considerando como número inicial 612.
- 6.2.** Calcule los cinco primeros números aleatorios aplicando el método de los productos centrales si $U_0 = 1422$ y $U_1 = 1963$
- 6.3.** A una línea de espera de un laboratorio de análisis de miel llegan 30 muestras por hora y el tiempo promedio de análisis es 10 muestras por hora, realice un análisis de esta línea de espera.
- 6.4.** Considere la sección de empaque de una gran fábrica de galletitas a donde llega el producto listo para ser envasado. Si llegan a una tasa de 90 grupos a ser envasados por hora y existen 10 líneas de envasado si la tasa de servicio es 12 por hora calcule el tiempo de espera promedio y la utilización de la instalación.
- 6.5.** Considere una reacción irreversible de primer orden y que la velocidad de reacción se ha seguido midiendo la absorbancia de la disolución en distintos tiempos, con los siguientes resultados:

Tiempo (min)	0	18	57	130	240	337	398
Absorbancia	1,39	1,26	1,03	0,706	0,398	0,251	0,18

Si $[A]_0 = 1,39$ y $[B]_0 = 0$, encuentre el valor de k y los valores de $[A]_t$ por aplicación del modelo y por integración directa para $t = 0$ hasta 70 minutos con $H = 10$ min.

Capítulo 7

SERIES DE FOURIER

En numerosos problemas de ingeniería aparecen funciones periódicas discontinuas y funciones aperiódicas que pueden representarse por funciones senoidales, esto conduce a la Teoría de las Series e Integrales de Fourier.

La idea básica de las series de Fourier es que toda función periódica de período T puede ser expresada como una suma trigonométrica de senos y cosenos del mismo período T .

Neugebauer en 1952 descubrió que los Babilonios utilizaron una forma primitiva de las series de Fourier para predecir eventos celestiales. La historia moderna de las series de Fourier comenzó en 1747 con D'Alembert y su tratado sobre las oscilaciones de las cuerdas de un violín. Euler en 1748 propuso que la solución podía ser expresada en una serie senoidal. Las mismas ideas fueron luego expuestas por D. Bernoulli (1753) y Lagrange (1759). La fórmula para calcular los coeficientes apareció por primera vez en un artículo escrito por Euler en 1777. La contribución de Fourier comenzó en 1807 con sus estudios del problema del flujo del calor.

7.1. CONSIDERACIONES PREVIAS

7.1.1. Funciones periódicas

Una función $f(x)$ es periódica con período T si está definida para cualquier valor de x real y si existe un número positivo T tal que:

$$f(x+T) = f(x) \quad (7.1)$$

En la Figura 7.1 se muestra un ejemplo de función periódica. Además de la definición puede deducirse que si el período es T entonces cualquier múltiplo entero de T también lo es.

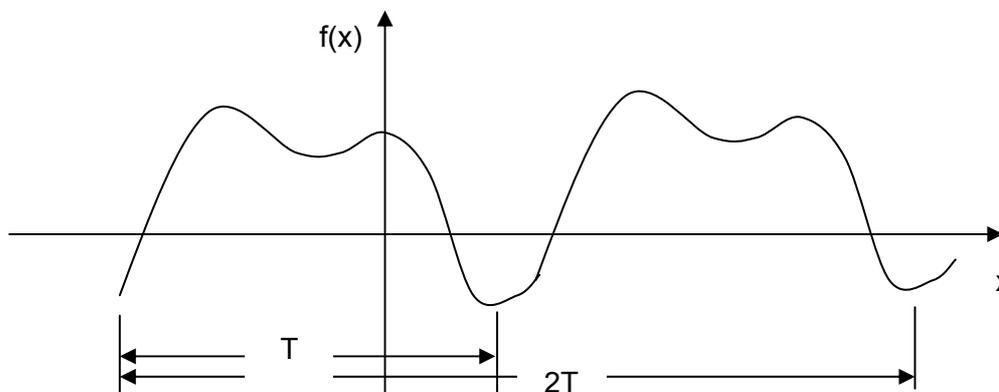


Figura 7.1. Función periódica con período T

El valor más pequeño de T para el cual se cumple la ecuación (7.1) se denomina **período fundamental** de $f(x)$.

Puede demostrarse que si $f(x)$ y $g(x)$ son funciones de período T , la función: $h(x) = f(x) + g(x)$ también tiene período T .

7.1.2. Series trigonométricas

Una serie trigonométrica puede representarse como:

$$a_0 + a_1 \cos x + b_1 \sin x + a_2 \cos 2x + b_2 \sin 2x + \dots \quad (7.2)$$

donde a_n y b_n son coeficientes de la serie y cada término tiene período 2π . Si la serie converge, su suma es una función de período 2π .

7.1.3. Funciones seccionalmente continuas

Una función de valor real f es seccionalmente continua en un intervalo $[a, b]$ si:

- f es definida y continua en todos, excepto en un número finito de puntos de $[a, b]$ y
- los siguientes límites existen en cada punto de discontinuidad x_0 en $[a, b]$:

$$f(x_0^+) = \lim_{h \rightarrow 0} f(x_0 + h) \quad (7.3)$$

$$f(x_0^-) = \lim_{h \rightarrow 0} f(x_0 - h) \quad (7.4)$$

Las discontinuidades aceptadas se denominan discontinuidades por salto, de magnitud:

$$\text{Salto} = f(x_0^+) - f(x_0^-)$$

Propiedades

- Si $f(x) \in \mathcal{C} [a, b]$ entonces existe la integral de la función en este intervalo y es independiente de los valores que toma la función f en sus puntos de discontinuidad. En particular si $f(x)$ y $g(x)$ son idénticas en $[a, b]$ excepto en sus puntos de discontinuidad, entonces puede escribirse la siguiente igualdad:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b g(x) dx \quad (7.5)$$

b) Si $f(x)$ y $g(x) \in \mathcal{C} [a, b]$ también lo es su producto interno, entonces la integral del producto de dos funciones seccionalmente continuas siempre existe.

Definido el producto interno en $\mathcal{C} [a, b]$ puede demostrarse que el conjunto de funciones seccionalmente continuas en el intervalo mencionado es un espacio euclidiano denotado por $\mathcal{C} [a, b]$ y contiene a $\mathcal{C} [a, b]$ como subespacio.

7.1.4. Funciones pares e impares

Las funciones pares e impares se caracterizan por su simetría con respecto al eje de las ordenadas y al origen de coordenadas, respectivamente.

Analíticamente las funciones pares son aquellas para las cuales se verifica que:

$$f(-x) = f(x) \quad (7.6)$$

mientras que las funciones impares satisfacen:

$$f(-x) = -f(x) \quad (7.7)$$

En la Figura 7.2 (a) y (b) se esquematizan estas funciones.

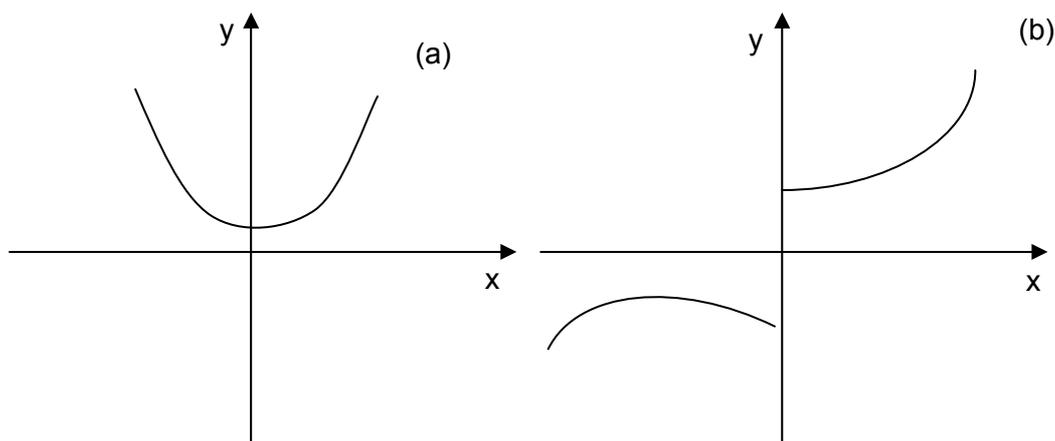


Figura 7.2. Funciones con simetría: par (a) e impar (b)

Son ejemplos de funciones pares x^2 , $\cos nx$, x^{2n} , $|x|$ y de funciones impares x , x^3 , $\sin nx$, x^{2n+1} .

Estas funciones tienen propiedades que son muy útiles para el desarrollo de funciones en serie de Fourier, a continuación se enuncian las más interesantes:

- ✓ La suma o diferencia y el producto o cociente de dos funciones pares da como resultado una función par.
- ✓ La suma o diferencia de dos funciones impares es impar.
- ✓ El producto o cociente entre dos funciones impares es par.
- ✓ La suma o diferencia de una función impar y una función par no es par ni impar.
- ✓ El producto o cociente entre una función impar y una función par es impar.

7.2. DESARROLLO EN SERIE DE FOURIER

Sea $f(x)$ una función de la variable real x , que en el intervalo $(\theta, \theta + 2\pi)$ satisface las condiciones de Dirichlet, es decir:

- 1) $f(x)$ tiene un número finito de discontinuidades,
- 2) $f(x)$ tiene un número finito de máximos y mínimos
- 3) $f(x)$ es acotada

entonces, $f(x)$ pertenece a la clase de funciones seccionalmente continuas o continuas por partes o por tramos, $f(x) \in \mathcal{C}(\theta, \theta + 2\pi)$ y admite como modelo matemático la **Serie trigonométrica de Fourier**:

$$f(x) = \frac{b_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{sen} nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{cos} nx, \text{ con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.8)$$

Siendo a_n y b_n los coeficientes de Fourier que se calculan con las fórmulas siguientes:

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \operatorname{sen} nx \, dx \quad (7.9)$$

$$b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \operatorname{cos} nx \, dx \quad (7.10)$$

$$\frac{b_0}{2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \, dx \quad (7.11)$$

El intervalo de integración podría extenderse de 0 a 2π o desde x_0 a $(x_0+2\pi)$ para todo x_0 , sin afectar el valor de los coeficientes a_n y b_n puesto que la función $f(x)$ se repite idénticamente al cabo del periodo 2π independientemente del límite inferior del intervalo. La elección del intervalo fundamental $[-\pi, \pi]$ es a los fines de facilitar las discusiones de simetría que se presentan más adelante.

7.2.1. Cálculo de los coeficientes de Fourier

Para demostrar la validez de las ecuaciones (7.9) y (7.11) se utilizan las siguientes propiedades de las funciones senoidales:

$$\text{a) } \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \text{ sen } mx \, dx = \begin{cases} 0 & \text{para } n \neq m \\ \pi & \text{para } n = m \end{cases}$$

$$\text{b) } \int_{-\pi}^{\pi} \text{cos } nx \text{ cos } mx \, dx = \begin{cases} 0 & \text{para } n \neq m \\ \pi & \text{para } n = m \end{cases}$$

$$\text{c) } \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } nx \text{ cos } mx \, dx = 0$$

Para determinar a_n , se multiplican ambos miembros de la serie (7.8) por $\text{sen } mx$ y se integra en un período es decir:

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \text{sen } mx \, dx = \int_{-\pi}^{\pi} \text{sen } mx \left[\frac{b_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \text{sen } nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \text{cos } nx \right] dx \quad (7.12)$$

El resultado de esta integral es:

$$\int_{-\pi}^{\pi} a_n \text{sen } nx \text{ sen } mx \, dx = a_n \pi \quad (7.13)$$

Por lo tanto,

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x) \text{sen } mx \, dx = a_n \pi \therefore a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \text{sen } nx \, dx \quad (7.14)$$

Un cálculo análogo multiplicando por $\text{cos } mx$ e integrando en un período completo permite obtener b_n .

Significado de $b_0/2$

Su expresión, dada por la fórmula (7.11), se denomina coeficiente constante, es el valor medio de la función en el intervalo $(-\pi, \pi)$. Se puede evaluar si se calcula el área encerrada por $f(x)$ en un período y dividirlo entre este período.

7.2.2. Expresión de la serie de Fourier para funciones de período arbitrario

En la práctica las funciones periódicas rara vez tiene un período igual a 2π , por lo general tiene cualquier período T , por lo general expresado en unidades de tiempo. Para solucionar esto se utiliza un cambio de escala.

Suponiendo una función $f(t)$ de periodo T , puede introducirse una nueva variable x tal que $f(t)$ como función de x tenga período 2π . Si se hace que:

$$t = \frac{T}{2\pi} x \quad (7.15)$$

puede deducirse que x es:

$$x = \frac{2\pi}{T} t \quad (7.16)$$

Por lo tanto si $x = \pm\pi$ corresponde a $t = \pm \frac{T}{2}$. Esto significa que $f(x)$ tiene período 2π . De donde si f tiene una serie de Fourier, será de la forma:

$$f(t) = f\left(\frac{T}{2\pi} x\right) = \frac{b_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{sen} nx + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{cos} nx \quad (7.17)$$

con coeficientes de la forma:

$$a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f\left(\frac{T}{2\pi} x\right) \operatorname{sen} nx \, dx ; \quad b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f\left(\frac{T}{2\pi} x\right) \operatorname{cos} nx \, dx ; \quad \frac{b_0}{2} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f\left(\frac{T}{2\pi} x\right) \, dx$$

Si se diferencia la ecuación (7.16) se tiene que:

$$dx = \frac{2\pi}{T} dt \quad (7.18)$$

Y el intervalo de integración sobre el eje x corresponde al intervalo $-\frac{T}{2} \leq t \leq \frac{T}{2}$, por lo tanto considerando que $\omega = \frac{2\pi}{T}$ y reemplazando en las expresiones de la serie y de los coeficientes se tiene que:

$$f(t) = \frac{b_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{sen} n\omega t + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{cos} n\omega t \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots \quad (7.19)$$

$$a_n = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \operatorname{sen} n\omega t dt \quad (7.20)$$

$$b_n = \frac{2}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) \operatorname{cos} n\omega t dt \quad (7.21)$$

$$b_0 = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) dt \quad (7.22)$$

7.2.3. Forma exponencial de la serie de Fourier

Si se consideran las relaciones de Euler: $e^{\pm ix} = \cos x \pm i \operatorname{sen} x$ la serie puede expresarse como sigue:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \beta_n e^{in\omega t} \quad (7.23)$$

$$\text{Con } \beta_n = \frac{1}{T} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f(t) e^{-in\omega t} dt, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (7.24)$$

7.2.4. Consideraciones simplificatorias

Tomando en cuenta la geometría de las funciones periódicas pueden realizarse algunas simplificaciones que ayudan al cálculo de la expresión en serie de Fourier.

- ✓ Si $f(x)$ es una función **par** en el intervalo considerado $(-\pi, \pi)$, su desarrollo en serie de Fourier es:

$$f(x) = \frac{b_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \operatorname{cos} nx \quad \text{y además } b_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \operatorname{cos} nx dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \operatorname{cos} nx dx$$

- ✓ Si $f(x)$ es una función **impar** en el intervalo considerado $(-\pi, \pi)$, su desarrollo en serie de Fourier es:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{sen} nx \quad \text{y además } a_n = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \operatorname{sen} nx dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \operatorname{sen} nx dx$$

El desarrollo en el período $(-\pi, \pi)$ es igual al desarrollo en el período $(0, \pi)$ multiplicado por dos.

7.2.5. Espectro de frecuencias

Si la función a desarrollar es función del tiempo y si T es el período, se puede expresar de acuerdo a la expresión (7.19), ésta puede escribirse en forma más compacta como:

$$f(t) = \frac{b_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} C_n \cos(n\omega t - \varphi_n) \quad (7.25)$$

$$\text{con } C_n = \sqrt{a_n^2 + b_n^2} \quad (7.26)$$

$$\text{y con } \varphi_n = \text{tg}^{-1} \frac{a_n}{b_n} \quad (7.27)$$

La función $f(t)$ queda desarrollada en una suma de componentes armónicas en las que C_n y φ_n son la amplitud y el ángulo de fase respectivamente, como se observa en la Figura 7.3.

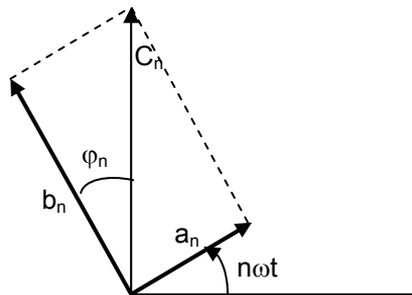


Figura 7.3. Diagrama fasorial de la Serie de Fourier

La ecuación (7.25) muestra claramente que una función periódica que satisface las condiciones de Dirichlet puede descomponerse en un valor medio y componentes senoidales armónicamente relacionadas cuyas frecuencias son múltiplos enteros de la frecuencia fundamental $1/T$. La amplitud y fase de las componentes están dadas por las expresiones (7.26) y (7.27), respectivamente.

Si se representa gráficamente el valor absoluto de C_n en función de $n\omega$, se **obtiene el espectro discreto de frecuencias**, si se desea representar también φ_n , se deben ampliar las denominaciones a **espectro discreto de amplitud** (Figura 7.4.(a)) y el **espectro discreto de fase** (Figura 7.4 (b)), respectivamente, en el que cada componente de fase o de amplitud está espaciada en ω y consiste en líneas discretas.

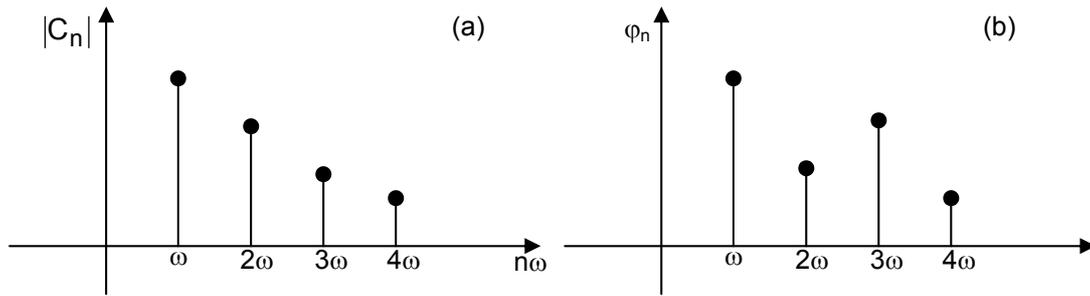


Figura 7.4. Espectro discreto de amplitud (a) y de fases (b)

7.3. INTEGRALES DE FOURIER

Las integrales de Fourier pueden interpretarse como el resultado de una generalización del método de las Series de Fourier para incluir funciones no periódicas. La forma más frecuentemente adoptada es del **par unilateral de integrales de Fourier**, que se representa como sigue:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} g(\omega) e^{i\omega t} d\omega = F^{-1}(g(\omega)) \quad (7.28)$$

$$g(\omega) = \int_0^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt = F(f(t)) \quad (7.29)$$

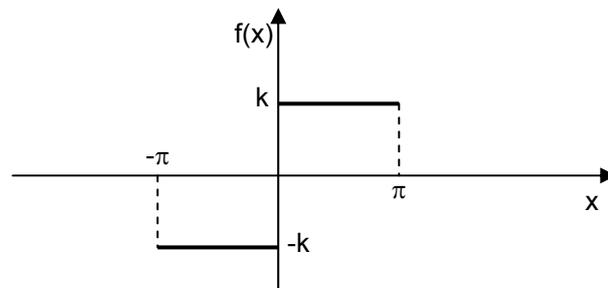
Siendo la expresión (7.28) la Integral inversa de Fourier y (7.29) la integral de Fourier.

➤ Por ejemplo si se desea encontrar el desarrollo en serie de Fourier de la función:

$$f(x) = \begin{cases} -k & \text{para } -\pi < x < 0 \\ k & \text{para } 0 < x < \pi \end{cases}$$

Considerando que $f(x + 2\pi) = f(x)$

En primer lugar se realiza un gráfico de la función:



Por inspección gráfica se puede afirmar que es una función impar puesto que $f(x)=-f(-x)$, y tomando en cuenta las consideraciones simplificatorias el desarrollo en Serie de Fourier está dado

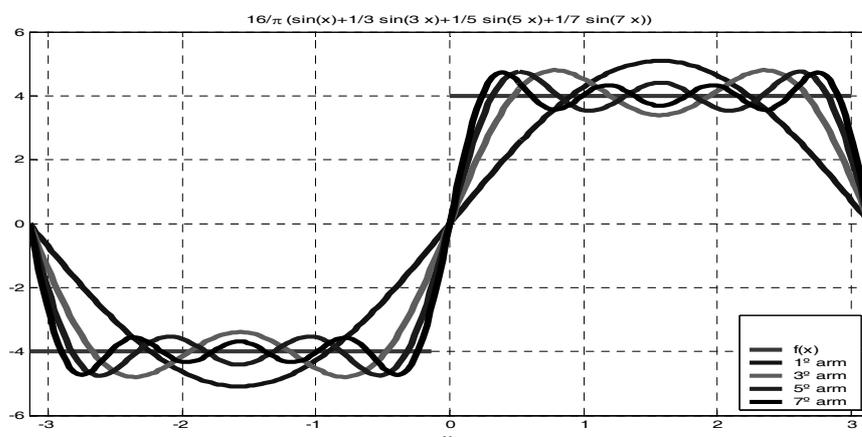
por: $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \operatorname{sen} nx$ y el coeficiente a_n se calcula como:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \operatorname{sen} nx \, dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} f(x) \operatorname{sen} nx \, dx = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} k \operatorname{sen} nx \, dx = \frac{2}{\pi} \left[-\frac{k}{n} \cos nx \right]_0^{\pi} = \frac{2k}{n\pi} (-\cos n\pi + \cos 0) = \\ &= \frac{2k}{n\pi} (1 - \cos n\pi) \end{aligned}$$

Puede deducirse que si n es impar $(1 - \cos n\pi)$ es igual a 2 y si n es par $(1 - \cos n\pi)$ es igual a cero, por lo tanto la serie toma valores solamente para n impar, esto puede expresarse tomando $(2n-1)$ como coeficiente del argumento. En síntesis, la serie en forma compacta es:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4k}{(2n-1)\pi} \operatorname{sen}(2n-1)x$$

Una representación de la función y de la 1ª, 3ª, 5ª y 7ª armónica se muestra en la figura que sigue.



EJERCICIOS PROPUESTOS

7.1. Demuestre que las formas trigonométricas dadas a continuación son expresiones de la serie de Fourier:

a) $f(t) = c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \cos(n\omega t - \phi_n)$

b) $f(t) = c_0 + \sum_{n=1}^{\infty} c_n \operatorname{sen}(n\omega t + \phi_n)$

7.2. A partir de la forma básica de la Serie de Fourier deduzca su expresión exponencial.

7.3. Encuentre el desarrollo en serie de Fourier de la función definida por:

$$f(t) = \begin{cases} 0, & \text{en } -T/6 < t < -T/12 \\ A, & \text{en } -T/12 < t < T/12 \\ 0, & \text{en } T/12 < t < T/6 \end{cases}$$

7.4. Desarrolle en Serie de Fourier la función:

$$f(x) = \begin{cases} -8 & \text{para } -\pi < x < 0 \\ 8 & \text{para } 0 < x < \pi \end{cases}$$

Considere que $f(x + 2\pi) = f(x)$

7.5. Desarrolle $f(x) = 3x^2$, en serie de Fourier si el período es 2π .

7.6. Sea $f(x) = |x|$ periódica en el intervalo $(-4, 4)$, encuentre los coeficientes y escriba su desarrollo en serie de Fourier.

Capítulo 8

TRANSFORMADA DE LAPLACE

El método de la Transformada de Laplace constituye una valiosa herramienta para la resolución de numerosos problemas que se presentan en ingeniería, tales como la resolución de ecuaciones diferenciales, evaluación de integrales, solución de ecuaciones integrales, etc.

En el caso particular de la resolución de ecuaciones diferenciales, este método tiene notables ventajas sobre los otros métodos de resolución ya que se pueden transformar las ecuaciones diferenciales en algebraicas, cualesquiera sean las condiciones iniciales dadas, estas se incorporan al problema algebraico y el uso de tablas de transformadas de Laplace facilita notablemente la resolución.

8.1. DEFINICIÓN DE TRANSFORMADA DE LAPLACE

Sea $f(t)$ una función de t definida para $t \geq 0$, la **Transformada de Laplace** de $f(t)$, que se denota por $\mathcal{L}[f(t)]$ ó por $F(s)$, está definida por la ecuación:

$$\mathcal{L}[f(t)] = F(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (8.1)$$

donde s es un parámetro complejo, pero se restringe a valores reales. El símbolo \mathcal{L} se denomina operador de la Transformada de Laplace. La integral impropia de la ecuación (8.1) puede definirse como:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \int_0^m e^{-st} f(t) dt \quad (8.2)$$

Si este límite existe, la integral converge y puede asegurarse la existencia de la Transformada de Laplace. A continuación se indica el teorema para la existencia de la transformada.

Teorema para la existencia de la transformada de Laplace: Si $f(t)$ es seccionalmente continua en el intervalo $0 \leq t \leq A$, para cualquier A positiva y además $|f(t)| \leq Ke^{at}$ donde $t \geq M$ y K , a y M son constantes reales y K y M necesariamente positivas, entonces existe la Transformada de Laplace de $f(t)$ para $s > a$.

Algunas características de la función $f(t)$ son las siguientes:

- ✓ la variable real no necesariamente representa al tiempo, puede utilizarse el símbolo adecuado para el sistema en consideración,
- ✓ $f(t)$ debe ser una función unívoca para que tenga una única $F(s)$. Sin embargo, se admite que la función tenga un número finito de discontinuidades,
- ✓ si existe discontinuidad para $f(t)$ en $t=0$, entonces el límite inferior de la transformada se considera como una aproximación por el lado positivo, es decir $f(0^+)$.

8.2. PROPIEDADES IMPORTANTES DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE

Se detallan, en los apartados que siguen, propiedades de la transformada de Laplace que facilitan notablemente su cálculo.

a) Linealidad

Teorema: Si c_1 y c_2 son constantes y $f_1(t)$ y $f_2(t)$ son funciones cuyas transformadas de Laplace son, respectivamente, $F_1(s)$ y $F_2(s)$, entonces:

$$\mathcal{L}[c_1 f_1(t) + c_2 f_2(t)] = c_1 \mathcal{L}[f_1(t)] + c_2 \mathcal{L}[f_2(t)] = c_1 F_1(s) + c_2 F_2(s) \quad (8.3)$$

El símbolo \mathcal{L} es el operador transformada de Laplace y debido a la propiedad de linealidad expresada en este teorema se dice que \mathcal{L} es un **operador lineal**.

b) Traslación o desplazamiento de frecuencia

Teorema: La transformada de Laplace de $e^{-\alpha t}$ veces una función es igual a la transformada de Laplace de la función con s reemplazado por $(s + \alpha)$.

$$\mathcal{L}[e^{-\alpha t} f(t)] = F(s + \alpha) \quad (8.4)$$

c) Desplazamiento temporal

Teorema: Si $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$, entonces: $\mathcal{L}[f(t - t_0) u(t - t_0)] = e^{-t_0 s} F(s)$ (8.5)

d) Cambio de escala

Teorema: Si $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$, entonces: $\mathcal{L}[f(at)] = \frac{1}{a} F\left(\frac{s}{a}\right)$ (8.6)

8.2.1. Transformada de Laplace de operaciones

Al aplicar la transformada de Laplace a la solución de ecuaciones diferenciales se deben transformar no solamente funciones sino también operaciones, por ello se enuncian a continuación los teoremas pertinentes

Teorema de la derivación: Si una función $f(t)$ y su primera derivada son ambas Laplace transformables y si

$$\mathcal{L}[f(t)] = F(s), \text{ entonces: } \mathcal{L}\left[\frac{df(t)}{dt}\right] = \mathcal{L}[Df(t)] = sF(s) - f(0^+) \quad (8.7)$$

Esta propiedad se extiende para las derivadas de orden superior.

Teorema de la integración: Si $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$, entonces: $\mathcal{L}\left[\int_0^t f(t)dt\right] = \frac{F(s)}{s}$ (8.8)

Teorema de la multiplicación por t: Si $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$, entonces: $\mathcal{L}[tf(t)] = -\frac{dF(s)}{ds}$ (8.9)

Teorema de la división por t: Si $\mathcal{L}[f(t)] = F(s)$, entonces: $\mathcal{L}\left[\frac{1}{t}f(t)\right] = \int_s^\infty F(s)ds$ (8.10)

8.3. MÉTODOS PARA CALCULAR TRANSFORMADAS DE LAPLACE

Existen varios métodos para encontrar las transformadas de Laplace:

- ✓ Método directo: utilizando la definición dada en la expresión (8.1).
- ✓ Método de las series: si $f(t)$ tiene un desarrollo en serie dado por:
- ✓ $F(t) = a_0 + a_1t + a_2t^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} a_n t^n$, su transformada de Laplace puede calcularse como la suma de la transformada de cada uno de los sumandos de la serie, es decir:
- ✓ $\mathcal{L}[f(t)] = \frac{a_0}{s} + \frac{a_1}{s^2} + \frac{2!a_2}{s^3} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!a_n}{s^{n+1}}$
- ✓ Método de las ecuaciones diferenciales: consiste en encontrar una ecuación diferencial que sea satisfecha por $f(t)$ y aplicar luego los teoremas anteriores.
- ✓ Mediante el uso de tablas.

8.4. VENTAJAS DEL MÉTODO DE LA TRANSFORMADA DE LAPLACE

- ✓ Simplifica funciones: pues la transformada convierte funciones que ocurren frecuentemente, tales como funciones exponenciales o funciones trascendentes y sus combinaciones en simples funciones algebraicas, fáciles de operar.

- ✓ Simplifica operaciones: la transformada de Laplace convierte la derivación en multiplicación y la integración en división.
- ✓ Determina constantes automáticamente: al resolver la ecuación diferencial de un sistema dado por el método de la transformada de Laplace, la solución surge completa y no es necesario operar adicionalmente para determinar las constantes.
- ✓ Permite generalizar respuestas de sistemas: si se determina la respuesta de un sistema a las funciones escalón o impulso como excitación, es posible determinar fácilmente la respuesta del mismo sistema a cualquier otro tipo de función excitación.

8.5. TRANSFORMADA DE LAPLACE DE ALGUNAS FUNCIONES IMPORTANTES

En la Tabla 8.1 se muestran las transformadas de Laplace para algunas funciones importantes.

Tabla 8.1. Transformadas de Laplace de algunas funciones utilizadas con frecuencia

Nombre de la Función	Expresión	Transformada de Laplace
Escalón unitaria	$u(t)$	$\frac{1}{s}$
Exponencial de t	e^{at}	$\frac{1}{s-a}$
Seno	$\text{sen } \omega t$	$\frac{\omega}{s^2 + \omega^2}$
Coseno	$\text{cos } \omega t$	$\frac{s}{s^2 + \omega^2}$
Seno hiperbólico	$\text{senh } bt$	$\frac{b}{s^2 - b^2}$
Coseno hiperbólico	$\text{cosh } bt$	$\frac{s}{s^2 - b^2}$
Potencias positiva de t	t^n	$\frac{n!}{s^{n+1}}$

➤ Por ejemplo, si se desea calcular la transformada de Laplace de la siguiente función:

$$f(t) = 8e^{5t} + 12t^3 - 6\text{sen } 4t + 4\text{cos } 2t$$

Utilizando la propiedad de linealidad se puede escribir la transformada como sigue:

$$\mathcal{L}[4e^{5t} + 6t^3 - 3\text{sen } 4t + 2\text{cos } 2t] = \mathcal{L}[4e^{5t}] + \mathcal{L}[6t^3] - \mathcal{L}[3\text{sen } 4t] + \mathcal{L}[2\text{cos } 2t]$$

Utilizando la Tabla 8.1, el cálculo se simplifica notablemente y se llega que:

$$\mathcal{L}[f(t)] = \frac{8}{s-5} + \frac{72}{s^4} - \frac{24}{s^2+16} + \frac{4s}{s^2+4}$$

8.6. TRANSFORMADA INVERSA DE LAPLACE

Si se necesita encontrar una función $f(t)$ cuya transformada de Laplace se conoce, es decir $F(s)$, lo que se está buscando es en realidad una función que se denomina **transformada inversa de Laplace** que se simboliza como $\mathcal{L}^{-1}[f(t)]$, donde \mathcal{L}^{-1} se denomina operador de la transformada inversa de Laplace.

Para evaluar estas transformadas inversas se pueden utilizar varios métodos, tales como el uso de tablas, de teoremas sobre transformadas inversas de Laplace, el método de las convoluciones.

➤ Por ejemplo si se desea determinar la función que tiene como transformada de Laplace a:

$F(s) = \frac{8}{(s-1)} - \frac{9}{(s-3)}$, utilizando la columna de la derecha de la Tabla 8.1, se puede deducir que:

$$\mathcal{L}^{-1} F(s) = 8e^t - 9e^{3t}$$

8.7. INTEGRAL DE CONVOLUCION

Si $F(s)$ y $G(s)$ son las transformadas de Laplace de las funciones $f(t)$ y $g(t)$, respectivamente, entonces:

$$\mathcal{L}^{-1} [F(s) \pm G(s)] = f(t) \pm g(t) \quad (8.11)$$

Es interesante saber si existe alguna expresión para la transformada inversa de Laplace del producto $F(s)G(s)$ en términos de las funciones originales, para ello se utiliza el siguiente teorema:

Teorema de convolución:

Si $\mathcal{L}^{-1}[F(s)] = f(t)$ y $\mathcal{L}^{-1}[G(s)] = g(t)$, entonces $\mathcal{L}^{-1}[F(s)G(s)] = \int_0^t f(u)g(t-u)du = f * g$.

Donde $f * g$ se denomina la convolución de f y g .

En forma equivalente se tiene que:

$$\mathcal{L}^{-1}[f * g] = \mathcal{L} \left\{ \int_0^t f(u)g(t-u)du \right\} = F(s)G(s)$$

➤ Por ejemplo si se desea encontrar la transformada inversa de Laplace de: $\frac{s}{(s^2 + 1)^2}$, se

tiene que: $\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{s}{(s^2 + 1)} \right\} = \cos t$ y que $\mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{1}{(s^2 + 1)} \right\} = \sin t$. Por el teorema de convolución se llega

a que:

$$\begin{aligned} & \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{s}{(s^2 + 1)} \cdot \frac{1}{(s^2 + 1)} \right\} = \cos t * \sin t = \int_0^t \cos u \sin(t-u) du = \\ & = \int_0^t \cos u [\sin t \cos u - \cos t \sin u] du = \\ & = \sin t \int_0^t \cos^2 u du - \cos t \int_0^t \sin u \cos u du = \sin t \left[\frac{1}{2} t + \frac{1}{2} \sin t \cos t \right] - \cos t \left[\frac{1}{2} \sin^2 t \right] = \frac{1}{2} t \sin t \end{aligned}$$

EJERCICIOS PROPUESTOS

8. 1. Demuestre, suponiendo que $s > 0$ y $s > a$, que:

$$a) \mathcal{L} [e^{at}] = \frac{1}{s-a}; \quad b) \mathcal{L} [\sin at] = \frac{a}{s^2 + a^2}; \quad c) \mathcal{L} [\cos at] = \frac{s}{s^2 + a^2}$$

8.2. Encuentre la transformada de Laplace de las siguientes funciones:

$$a) t^2 e^{3t}; \quad b) e^{-2t} \sin 4t; \quad c) \frac{\sin \omega t}{t}$$

8.3. Encuentre la transformada inversa de Laplace de:

$$a) \frac{1}{s-a}; \quad \frac{1}{s^2 + 9}; \quad \frac{4s+12}{s^2 + 8s+16}$$

8.4. Encuentre la Transformada Inversa de Laplace de las ecuaciones diferenciales:

$$a) y'' + y = 16 \cos t; \quad y(0)=0, \quad y'(0)=0$$

$$b) y'' + 2y' + 5y = 0; \quad y(0)=3, \quad y'(0)=-7$$

8.5. Considere dos tanques de salmuera conectados como se indica en la Figura 2. El tanque 1 contiene x kg de sal en 100 l de salmuera y el tanque 2 y kg de sal en 200 l de salmuera. Esta se conserva uniforme por agitación y se bombea de un tanque a otro a la tasa indicada. Además al tanque 1 fluye agua pura a una tasa de 7,08 l/s y del tanque 2 salen 7,08 l/s por lo que el volumen de salmuera en ambos tanques permanece constante. Encuentre la concentración de sal en cada tanque en función del tiempo, considerando que la concentración inicial es 0,4 kg/l en el tanque 1 y 0,3 kg/l en el tanque 2.

Capítulo 9

ECUACIONES DIFERENCIALES

La importancia de las ecuaciones diferenciales en matemáticas aplicadas se debe al hecho que la mayor parte de las leyes científicas se expresan en términos de la rapidez de variación de una variable con respecto otra. Además proporcionan una herramienta esencial para modelar muchos problemas en Ingeniería, Física, Economía y Biología, puesto que estos, por lo general, requieren la determinación de una función que satisfice a una ecuación diferencial.

9.1. CONCEPTOS PREVIOS

Una **ecuación diferencial** es una ecuación que involucra derivadas de una función desconocida de una o más variables.

Una **ecuación diferencial ordinaria** es aquella en la que la función desconocida depende de una variable (las derivadas son derivadas ordinarias). Un ejemplo se muestra en la ecuación (9.1).

$$\frac{dy}{dx} = 4x - y \text{ o } y' = 4x - 4 \text{ o bien } Dy = 4x - 4 \quad (9.1)$$

Una **ecuación diferencial parcial** es aquella en la que la función desconocida depende de más de una variable (las derivadas son derivadas parciales), tal como se muestra en la ecuación (9.2).

$$\frac{\partial^2 v}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} = v \quad (9.2)$$

El **orden** de una ecuación diferencial es el orden de la derivada más alta que aparece en la ecuación.

El **grado** de una ecuación diferencial es el grado algebraico de la derivada de mayor orden que aparece en la ecuación.

Ecuación diferencial lineal: es la ecuación en la que no aparecen potencias de la variable dependiente y ni de sus derivadas, ni productos de la variable dependiente por sus derivadas o productos entre derivadas, puede escribirse como:

$$a_0(x)y^{(n)} + a_1(x)y^{(n-1)} + \dots + a_{n-1}(x)y' + a_n(x)y = f(x) \quad (9.3)$$

donde $f(x)$ y los coeficientes $a_0(x), a_1(x), \dots, a_n(x)$ son funciones de x y $a_0(x)$ no es idéntica a 0.

Solución de una ecuación diferencial: es cualquier relación funcional que no incluya derivadas o integrales de funciones desconocidas y que implique a la propia ecuación diferencial, en el sentido que la verifique idénticamente por sustitución directa.

Ecuación o condiciones homogéneas: se dan si son satisfechas por una función particular $y(x)$ y también por $cy(x)$, donde c es una constante arbitraria. Por ejemplo, una condición homogénea puede obtenerse del requerimiento de que una función o una de sus derivadas (o alguna combinación lineal de la función y/o ciertas de sus derivadas) sea nula.

Problemas de valor inicial y de frontera

Dada una ecuación diferencial ordinaria de orden n y cualquier grado, se establece que en su solución general deben aparecer **n constantes arbitrarias**, entonces la solución general es una función g de la forma: $g(x, y, c_1, c_2, \dots, c_n) = 0$ y los valores de estas constantes se determinan sujetando la solución general a n condiciones independientes.

Dependiendo de cómo se establezcan estas condiciones, se distinguen dos tipos de **problemas**: los de **valores iniciales** y los de **valores de frontera**.

- ✓ Un **problema de valor inicial** es un problema que busca determinar una solución a una ecuación diferencial sujeta a **condiciones** sobre la función desconocida y sus derivadas especificadas en **un valor** de la variable independiente. Estas condiciones se denominan **condiciones iniciales**.
- ✓ Un **problema de valor de frontera** es un problema que busca determinar una solución a una ecuación diferencial sujeta a **condiciones** sobre la función desconocida especificadas en **dos ó más valores** de la variable independiente. Estas condiciones se denominan **condiciones de frontera**.

9.2. ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS LINEALES DE PRIMER ORDEN

Una ecuación diferencial ordinaria puede simbolizarse como

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad (9.4)$$

Dentro del tema de las ecuaciones diferenciales ordinarias, se destaca, dentro de las matemáticas aplicadas, el problema del valor inicial.

El conjunto constituido por una ecuación diferencial ordinaria lineal y la condición inicial constituyen el **problema del valor inicial**, que puede expresarse como sigue:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_1 \frac{dy}{dx} + a_0(x)y(x) = f(x) \\ y(0) = y_0 \end{array} \right\} \quad (9.5)$$

donde a_1 y a_2 son coeficientes, y es la variable dependiente, x la variable independiente, $f(x)$ es una función. Desde el punto de vista sistémico, se puede decir que $f(x)$ es la excitación o entrada del sistema y y es la respuesta o salida del sistema.

9.2.1. Solución analítica

Si se normaliza la ecuación, es decir se dividen ambos miembros por el coeficiente de la derivada de mayor orden, se tiene:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dy}{dx} + b_0(x)y(x) = h(x) \\ y(0) = y_0 \end{array} \right\} \quad (9.6)$$

en la que $b_0 = \frac{a_0}{a_1}$ y $h(x) = \frac{f(x)}{a_1}$

Recordando lo estudiado en análisis matemático puede afirmarse que la solución general del problema de valor inicial es:

$$y(x) = K e^{-\int b_0(x) dx} + e^{-\int b_0(x) dx} \int h(x) e^{\int b_0(x) dx} dx \quad (9.7)$$

La solución general está constituida por el primer sumando que corresponde a la **solución transitoria o función complementaria $y_c(x)$** , que es independiente de la función excitación y el segundo sumando que corresponde a la **solución permanente o forzada $y_p(x)$** que depende de la función excitación.

Por lo general se trabajan con coeficientes constantes, por lo tanto la solución general de una ecuación diferencial lineal de 1º orden puede expresarse como sigue:

$$y(x) = K e^{-b_0 x} + e^{-b_0 x} \int h(x) e^{b_0 x} dx \quad (9.8)$$

La constante K se evalúa con la condición inicial $y(0) = y_0$.

9.2.1.1. Solución por el método del operador diferencial

Si se considera ahora una ecuación diferencial en la que la variable independiente es el tiempo, se tiene:

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} + \alpha u(t) = h(t) \\ u(t_0) = u_0 \end{cases} \quad (9.9)$$

La solución general aplicando la fórmula (9.7) es:

$$u(t) = K e^{-\alpha t} + e^{-\alpha t} \int h(t) e^{\alpha t} dt \quad (9.10)$$

Como se observa, esta solución es la suma de la suma de la solución complementaria y de la particular:

$$u(t) = u_c(t) + u_p(t) \quad (9.11)$$

Si la función excitación $h(t)$ es nula, el problema descrito por (9.9) se puede escribir como:

$$\begin{cases} \frac{du_c}{dt} + \alpha u_c(t) = 0 \\ u_c(t_0) = u_0 \end{cases} \quad (9.12)$$

y su solución es:

$$u_c(t) = K e^{-\alpha t}$$

En forma abreviada puede expresarse que:

$$D u_c(t) + \alpha u_c(t) = 0 \Rightarrow u_c(t) = K e^{-\alpha t}$$

La inferencia que puede extraerse de la expresión anterior es:

$$I_1: (D + \alpha) u_c(t) = K e^{-\alpha t} \quad (9.13)$$

Si existe función excitación la ecuación (9.9) puede escribirse en forma abreviada como:

$$D u(t) + \alpha u(t) = h(t) \quad (9.14)$$

y su solución particular es:

$$u_p(t) = e^{-\alpha t} \int h(t) e^{\alpha t} dt \quad (9.15)$$

por lo tanto puede inferirse que:

$$I_2: u_p(t) = \frac{1}{D + \alpha} h(t) \Rightarrow u_p(t) = e^{-\alpha t} \int h(t) e^{\alpha t} dt \quad (9.16)$$

Donde $(D + \alpha)$ es el operador derivada polinómico y $\frac{1}{D + \alpha}$ es el operador derivada polinómico inverso.

9.2.2. Solución por métodos numéricos

Dentro de los métodos numéricos de solución aproximada a ecuaciones diferenciales ordinarias, se distinguen los métodos de un paso y los de pasos múltiples.

9.2.2.1. Métodos de un paso

Con los métodos de Paso Único, la solución numérica a una ecuación diferencial, se encuentra utilizando la información de la derivada en el punto x_i para extrapolar a partir de un valor anterior y_i a un valor actual y_{i+1} en una distancia determinada, denotada con h . Este procedimiento se aplica paso a paso para encontrar el valor de y y trazar la trayectoria de la solución. En cada paso de extrapolación se comete error. Puede simbolizarse como:

$$y_{i+1} = y_i + \phi h \quad (9.17)$$

Donde y_{i+1} es el nuevo valor, y_i es el valor anterior, ϕ es la función de incremento o pendiente y h el paso.

9.2.2.1.1. Método de la Serie de Taylor

Este método no es estrictamente un método numérico pero por lo general se utiliza junto con los esquemas numéricos, es de aplicabilidad general y sirve como punto de partida para otros métodos.

Dada una ecuación diferencial como la explicitada en la ecuación (9.4), la relación entre x y y se obtiene al encontrar los coeficientes de la Serie de Taylor. Desarrollando la serie para un valor x_i se tiene:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2!}(x_{i+1} - x_i)^2 + \dots + \frac{f^{(n)}(x_i)}{n!}(x_{i+1} - x_i)^n \quad (9.18)$$

Si se trunca la serie en el tercer término, el método se denomina de 2º orden y reemplazando $f(x)$ por $y(x)$ y $(x_{i+1}-x_i)$ por h , se obtiene:

$$y(x_{i+1}) = y_i + y'(x_i)h + \frac{y''(x_i)}{2!}h^2 \quad (9.19)$$

El valor de $y'(x)$ se conoce a partir de la ecuación diferencial y $y''(x)$ se obtiene por diferenciación de la ecuación original. Incrementando el orden del método se obtiene mayor precisión pero las expresiones se tornan complicadas, por lo general se utiliza muy poco en la práctica.

➤ Por ejemplo si se desea encontrar la solución del siguiente problema de valor inicial para $x=1$:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = x + y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Para aplicar la fórmula (9.19) las derivadas son:

$y'(x_i) = x_i + y(x_i)$ y derivando esta expresión con respecto a x , se tiene

$$y''(x_i) = 1 + y'(x_i) = 1 + x_i + y(x_i)$$

Por lo tanto la expresión de recurrencia a aplicar reemplazando estos valores en (9.18) es:

$$y(x_{i+1}) = y_i + (x_i + y_i)h + \frac{h^2}{2!}(1 + x_i + y_i)$$

Se comienza con $x=0$ para el que $y(0)=1$ y suponiendo un paso $h=0,1$ en la tabla que sigue se explicitan los valores obtenidos. Se incluyen también los valores que se obtiene utilizando la solución analítica que es: $y(x)=2e^x-x-1$.

	Método de la Serie de Taylor	Método analítico	Error verdadero
x_i	y_i	y_i	
0	1,000	1	0
0,1	1,110	1,110	0
0,2	1,240	1,243	0,003
0,3	1,390	1,399	0,09
0,4	1,560	1,584	0,024
0,5	1,750	1,797	0,047
0,6	1,960	2,044	0,084
0,7	2,190	2,327	0,137
0,8	2,440	2,651	0,211
0,9	2,710	3,019	0,309
1	3,000	3,436	0,436

9.2.2.1.2. Método de Euler

Si se trunca la serie de Taylor a partir de su segundo término, se tiene la siguiente expresión:

$$y(x_{i+1}) = y_i + y'(x_i)h \quad (9.20)$$

Por lo general y por razones de simplicidad se denota a $y'(x_i)$ como $f(x_i, y_i)$. A la expresión (9.20) se la conoce como método de Euler o método de Euler-Cauchy o de pendiente puntual. Se caracteriza porque se predice un nuevo valor de y usando la pendiente, es decir la primera derivada en el valor anterior de x para extrapolar linealmente sobre un tamaño de paso constante h . En la figura 9.1 se muestra un esquema del método.

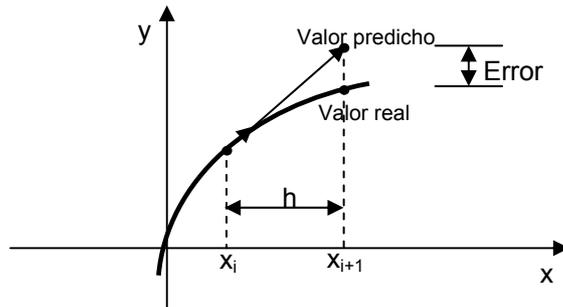


Figura 9.1. Esquema del método de Euler

Puede decirse que el método puede sintetizarse como:

$$\text{Valor nuevo} = \text{valor anterior} + \text{pendiente} * \text{paso}$$

La solución de una ecuación diferencial ordinaria por este método incluye dos tipos de error: error de truncamiento y de redondeo. El error de truncamiento se compone de dos partes, el error de truncamiento local que resulta de aplicar el método en un paso y el error de propagación que resulta de las aproximaciones producidas en los pasos anteriores, la suma de ambos da el error de truncamiento global. A partir de la serie de Taylor puede deducirse que el error de truncamiento local es:

$$E_t = \frac{f'(x_i, y_i)}{2} h^2 + \dots + O(h^{(n+1)}) \quad (9.20)$$

Para un paso lo suficientemente pequeño los errores decrecen a medida que el orden crece y por lo general se calcula el error de truncamiento local aproximado:

$$E_{ta} = \frac{f'(x_i, y_i)}{2} h^2 = O(h^2) \quad (9.21)$$

El algoritmo correspondiente es:

Algoritmo para aproximar la solución de un problema de valor inicial por el método de Euler

Considerando la siguiente notación:

$y' = f(x, y)$, $x_0 \leq x \leq x_n$, $y(x_0) = y_0$: problema de valor inicial

$f(x, y)$: función que especifica la ecuación diferencial

X : valor de la variable independiente

x_0 : valor inicial de la variable independiente

x_n : valor final de la variable independiente

Y : valor de la variable dependiente

y_0 : valor inicial de la variable dependiente

h : tamaño de paso

continua



N: número entero que indica el número de segmentos igualmente espaciados (es igual al número de datos menos 1)

Paso 1: Ingresar x_0, x_n, N, y_0

Paso 2: Hacer $h = \frac{(x_0 - x_n)}{N}$

Paso 3: Hacer $X = x_0, Y = y_0$

Paso 3: Para $i=1, 2, \dots, N$ seguir los pasos 4 y 5

Paso 4: Tomar $Y = Y + h \cdot f(x, y)$

$$X = X + h$$

Paso 5: la SALIDA es (X, Y)

PARAR

- Por ejemplo si se desea encontrar la solución del problema de valor inicial planteado en el ítem anterior la expresión que surge de aplicar la ecuación (9.19) es:

$$y(x_{i+1}) = x_i + (x_i + y_i)h$$

Si se desea calcular $y(x_0) = y_0 + (x_0 + y_0)h = 1 + (0 + 1)0,1 = 1,1$ y así sucesivamente.

	Método de Euler	Método analítico	Error verdadero
x_i	y_i	y_i	
0	1,000	1	0
0,1	1,100	1,110	0,010
0,2	1,220	1,243	0,023
0,3	1,362	1,399	0,037
0,4	1,528	1,584	0,056
0,5	1,721	1,797	0,076
0,6	1,943	2,044	0,101
0,7	2,197	2,327	0,130
0,8	2,487	2,651	0,164
0,9	2,816	3,019	0,203
1	3,187	3,436	0,249

9.2.2.1.3 Métodos de Runge-Kutta

Se trata de una familia de métodos y si bien se estima el valor de la función utilizando la expresión general dada por la ecuación (9.17), en lugar de calcular derivadas de orden superior, se evalúa la función en un mayor número de puntos, tratando de igualar la precisión del método de la serie de Taylor.

La fórmula general está dada por la expresión:

$$y_{i+1} = y_i + \phi(x_i, y_i, h)h \quad (9.22)$$

Donde $\phi(x_i, y_i, h)$ es la **función de incremento** y puede interpretarse como el promedio de la pendiente sobre el intervalo.

Esta función de incremento puede escribirse como:

$$\phi = \alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2 + \dots + \alpha_n b_n \quad (9.23)$$

los valores de α son constantes y los de b son en realidad ecuaciones recurrentes de la forma:

$$b_1 = f(x_i, y_i) \quad (9.23a)$$

$$b_2 = f(x_i + l_1 h, y_i + m_{11} b_1 h) \quad (9.23b)$$

$$b_3 = f(x_i + l_2 h, y_i + m_{21} b_1 h + m_{22} b_2 h) \quad (9.23c)$$

⋮

$$b_n = f(x_i + l_{n-1} h, y_i + m_{n-1,1} b_1 h + m_{n-1,2} b_2 h + \dots + m_{n-1,n-1} b_{n-1} h) \quad (9.23c)$$

Una vez que se establece n los valores de α , l y m , se evalúan igualando la ecuación (9.22) a la serie de Taylor (9.18). El método de Runge-Kutta de 1° orden ($n=1$) es el método de Euler, los métodos de Runge-Kutta de 2° orden utilizan una función de incremento con dos términos y debido a que se desprecian los términos con h^3 y de orden superior durante la derivación, el error local de truncamiento es $O(h^3)$ y el error global es $O(h^2)$. Si $n=3$ el método es de 3° orden, si $n=4$ es de 4° orden.

✓ Método de Runge-Kutta de 2° orden

En este caso las ecuaciones (9.22), (9.23a) y (9.23b) pueden expresarse como:

$$y_{i+1} = y_i + (\alpha_1 b_1 + \alpha_2 b_2) h \quad (9.24)$$

$$b_1 = f(x_i, y_i) \quad (9.24a)$$

$$b_2 = f(x_i + l_1 h, y_i + m_{11} b_1 h) \quad (9.24b)$$

Para obtener el valor de los coeficientes se debe igualar la ecuación (9.24) a la serie de Taylor de 2° orden que es:

$$y(x_{i+1}) = y_i + f(x_i, y_i) h + f'(x_i, y_i) \frac{h^2}{2!} \quad (9.25)$$

donde $f'(x_i, y_i)$ debe determinarse utilizando la regla de la cadena, es decir:

$$f'(x_i, y_i) = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} \quad (9.26)$$

y sustituyendo (9.26) en (9.25) se llega a que:

$$y(x_{i+1}) = y_i + f(x_i, y_i) h + \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dx} \right) \frac{h^2}{2!} \quad (9.27)$$

Para tratar de igualar la expresión (9.24b) a la serie se utiliza la expresión (9.27) pero aplicada a una función de dos variables, es decir:

$$f(x_i + l_1 h, y_i + m_{11} b_1 h) = f(x_i, y_i) + l_1 h \frac{\partial f}{\partial x} + m_{11} b_1 h \frac{\partial f}{\partial y} + O(h^2) \quad (9.28)$$

Por lo tanto si sustituimos este resultado en (9.24) se obtiene:

$$y_{i+1} = y_i + \alpha_1 h f(x_i, y_i) + \alpha_2 h f(x_i, y_i) + \alpha_2 l_1 h^2 \frac{\partial f}{\partial x} + \alpha_2 m_{11} h^2 f(x_i, y_i) \frac{\partial f}{\partial y} + O(h^3) \quad (9.29)$$

Y reordenando términos en la ecuación (9.29) se llega a que:

$$y_{i+1} = y_i + [\alpha_1 f(x_i, y_i) + \alpha_2 f(x_i, y_i)]h + \left[\alpha_2 l_1 \frac{\partial f}{\partial x} + \alpha_2 m_{11} f(x_i, y_i) \frac{\partial f}{\partial y} \right] h^2 + O(h^3) \quad (9.30)$$

Comparando (9.30) con (9.27) se determina que para que las dos expresiones sean equivalentes, se debe cumplir que:

$$\alpha_1 + \alpha_2 = 1$$

$$\alpha_2 l_1 = \frac{1}{2} \quad (9.31)$$

$$\alpha_2 m_{11} = \frac{1}{2}$$

Volviendo a la expresión (9.24), para calcular los coeficientes con las expresiones (9.31) se debe suponer el valor de una de ellas para calcular el resto. Suponiendo que se especifique el valor de α_2 , las ecuaciones se resuelven para:

$$\alpha_1 = 1 - \alpha_2 \quad (9.32)$$

$$l_1 = m_{11} = \frac{1}{2\alpha_2}$$

Si se considera que α_2 es igual a $\frac{1}{2}$, las ecuaciones (9.32) pueden resolverse y se obtiene $\alpha_1 = 1/2$ y $l_1 = m_{11} = 1$, sustituyendo estos valores en la ecuación (9.24) se tiene:

$$y_{i+1} = y_i + \left(\frac{1}{2} b_1 + \frac{1}{2} b_2 \right) h \quad (9.33)$$

donde:

$$b_1 = f(x_i, y_i) \quad (9.33a)$$

$$b_2 = f(x_i + h, y_i + b_1 h) \quad (9.33b)$$

Un algoritmo para este método es el que sigue.

Algoritmo para aproximar la solución de un problema de valor inicial por el método de Runge-Kutta de 2º orden suponiendo $\alpha_2 = 1/2$,

Considerando la siguiente notación:

$y' = f(x, y)$, $x_0 \leq x \leq x_n$, $y(x_0) = y_0$: problema de valor inicial

$f(x, y)$: función que especifica la ecuación diferencial

X : valor de la variable independiente

x_0 : valor inicial de la variable independiente

x_n : valor final de la variable independiente

Y : valor de la variable dependiente

y_0 : valor inicial de la variable dependiente

h : tamaño de paso

N : número entero que indica el número de segmentos igualmente espaciados (es igual al número de datos menos 1)

Paso 1: Ingresar x_0, x_n, N, y_0

Paso 2: Hacer $h = \frac{(x_0 - x_n)}{N}$

Paso 3: Hacer $X = x_0$; $Y = y_0$

Paso 3: Para $i=1, 2, \dots, N$ seguir los pasos 4 y 5

Paso 4: Tomar $b_1 = f(x, y)$;

$$b_2 = f(X + h, Y + b_1 h)$$

Paso 5: Tomar $Y = Y + \frac{h}{2}(b_1 + b_2)$ $Y = Y + h * f(x, y)$

$$X = X + h$$

Paso 6: la SALIDA es (X, Y)

PARAR

Si se considera que α_2 es igual a $2/3$ las ecuaciones (9.32) pueden resolverse y se obtiene $\alpha_1 = 1/3$ y $l_1 = m_{11} = 3/4$, sustituyendo estos valores en la ecuación (9.24) se tiene:

$$y_{i+1} = y_i + \left(\frac{1}{3}b_1 + \frac{2}{3}b_2\right)h \quad (9.34)$$

donde:

$$b_1 = f(x_i, y_i) \quad (9.34a)$$

$$b_2 = f\left(x_i + \frac{3}{4}h, y_i + \frac{3}{4}hb_1\right) \quad (9.34b)$$

✓ Método de Runge-Kutta de 3º orden

Una versión común es la dada por:

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{6}(b_1 + 4b_2 + b_3) \right] h \quad (9.35)$$

$$b_1 = f(x_i, y_i) \quad (9.35a)$$

$$b_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hb_1\right) \quad (9.35b)$$

$$b_3 = f(x_i + h, y_i - hb_1 + 2hb_2) \quad (9.35c)$$

✓ Método de Runge-Kutta de 4° orden

Una versión común es la dada por:

$$y_{i+1} = y_i + \left[\frac{1}{6}(b_1 + 2b_2 + 2b_3 + b_4) \right] h \quad (9.36)$$

$$b_1 = f(x_i, y_i) \quad (9.36a)$$

$$b_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hb_1\right) \quad (9.36b)$$

$$b_3 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}hb_2\right) \quad (9.36c)$$

$$b_4 = f(x_i + h, y_i + hb_3) \quad (9.36d)$$

9.2.2.1.4 Método de Heun

Este es un método que permite mejorar la aproximación de la pendiente e implica el cálculo de dos derivadas, se promedian las mismas y se obtiene una aproximación mejorada de la pendiente en el intervalo completo. Puede decirse que el método de Heun utiliza un esquema predictor-corrector.

El valor de la pendiente, es decir

$$y'_i = f(x_i, y_i) \quad (9.37)$$

se toma para extrapolar linealmente a y_{i+1} , obteniéndose la ecuación predictora:

$$y_{i+1}^p = y_i + f(x_i, y_i)h \quad (9.38)$$

este valor de y se utiliza para calcular una pendiente aproximada al final del intervalo:

$$y'_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^p) \quad (9.39)$$

Se promedian las pendientes obtenidas en las ecuaciones (9.37 y 9.39) y se tiene:

$$\bar{y}' = \frac{y_i' + y_{i+1}'}{2} = \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^p)}{2} \quad (9.40)$$

Esta pendiente se utiliza en la ecuación correctora que permite calcular el valor de la variable dependiente de la función:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^p)}{2} h \quad (9.41)$$

El algoritmo correspondiente es el especificado para el método de Runge-Kutta de 2° orden con $\alpha_2 = 1/2$.

- Por ejemplo si se desea encontrar la solución del problema de valor inicial, ya resuelto por el método de la serie de Taylor y de Euler para $x=1$:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = x + y \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

La pendiente en (x_0, y_0) es 1

Se toma este resultado para extrapolar linealmente a y_1 , considerando $h=0,1$ se obtiene la ecuación predictora:

$$y_1^p = y_0 + 1h = 1 + 0,1 = 1,1$$

este valor de y se utiliza para calcular una pendiente aproximada al final del intervalo:

$$y'_{i+1} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^p) = 0,1 + 1,1 = 1,2$$

Se promedian las pendientes obtenidas en las ecuaciones y se tiene:

$$\bar{y}' = \frac{1 + 1,2}{2} = 1,1$$

Esta pendiente se utiliza en la ecuación correctora que permite calcular el valor de la variable dependiente de la función:

$y_1 = y_0 + \bar{y}' h = 1 + 1,1 * 0,1 = 1,11$ y así se va repitiendo el cálculo hasta llegar al valor deseado de y , a continuación se muestra una tabla con los valores obtenidos aplicando este método.

	Método de Heun	Método analítico	Error verdadero
x_i	y_i	y_i	
0	1,000	1	0
0,1	1,110	1,110	0
0,2	1,242	1,243	0,001
0,3	1,398	1,399	0,001
0,4	1,582	1,584	0,002
0,5	1,795	1,797	0,002
0,6	2,041	2,044	0,003
0,7	2,323	2,327	0,004
0,8	2,646	2,651	0,005
0,9	3,012	3,019	0,007
1	3,428	3,436	0,008

9.2.2.2. Métodos de pasos múltiples

Los métodos de pasos múltiples se basan en que una vez que los cálculos han comenzado, los datos obtenidos en puntos anteriores sirven de guía. Se caracterizan porque no se inician por sí mismos, requieren de valores previos que deben ser obtenidos por otros métodos, los cambios de paso son complicados.

9.3. ECUACIÓN DIFERENCIAL LINEAL DE SEGUNDO ORDEN

Una ecuación diferencial de 2º orden con coeficientes constantes puede expresarse como sigue:

$$a_2 \frac{d^2 y}{dt^2} + a_1 \frac{dy}{dt} + a_0 y(t) = f(t) \quad (9.42)$$

Normalizando, es decir dividiéndola por el coeficiente de la derivada de mayor orden se tiene:

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + b_1 \frac{dy}{dt} + b_0 y(t) = h(t) \quad (9.43)$$

9.3.1. Métodos de resolución

9.3.1.1. Método del operador diferencial

Si se utiliza el operador diferencial se puede escribir esta ecuación de la siguiente manera:

$$D^2 y(t) + b_1 D y(t) + b_0 y(t) = h(t) \quad (9.44)$$

y factorizando:

$$(D^2 + b_1 D + b_0) y(t) = h(t) \quad (9.45)$$

Si se reemplaza por λ a este operador polinómico, y considerando la función excitación $h(t)$ igual a 0, se llega a la (**ecuación característica**):

$$\lambda^2 + b_1 \lambda + b_0 = 0 \quad (9.46)$$

que se puede interpretar como una ecuación cuadrática y si sus raíces son: λ_1 y λ_2 , el paréntesis de la ecuación (9.45) puede expresarse en función de las mismas:

$$(D - \lambda_1) (D - \lambda_2) y(t) = h(t) \quad (9.47)$$

Las raíces de la ecuación característica se calculan mediante la ecuación (9.48):

$$\lambda_{1,2} = -\frac{b_1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{b_1}{2}\right)^2 - b_0} \quad (9.48)$$

que puede expresarse también como $\lambda_{1,2} = \alpha \pm \beta$

Se debe recordar que la solución general es la suma de la solución complementaria ($y_c(t)$) y de la particular ($y_p(t)$):

$$y(t) = y_c(t) + y_p(t) \quad (9.50)$$

9.3.1.1.1. Solución complementaria

Considerando la ecuación (9.47), si la función excitación es nula, se obtiene la solución complementaria:

$$(D - \lambda_1) (D - \lambda_2) y_c(t) = 0 \quad (9.51)$$

y según el tipo de raíces λ_1 y λ_2 se tienen tres casos:

1. Caso sobre-amortiguado, raíces reales y distintas
2. Caso oscilatorio amortiguado, raíces complejas y distintas
3. Caso crítico, raíces reales e iguales.

9.3.1.1.1.1. *Caso sobre-amortiguado*

Las raíces λ_1 y λ_2 son **reales y distintas**, la solución es:

$$y_c(t) = K_1 e^{\lambda_1 t} + K_2 e^{\lambda_2 t} \quad (9.52)$$

donde K_1 y K_2 son constantes de integración que pueden determinarse a partir de condiciones iniciales. En la Figura 9.2 se muestra un esquema del caso sobreamortiguado considerando las constantes K_1 y K_2 positivas.

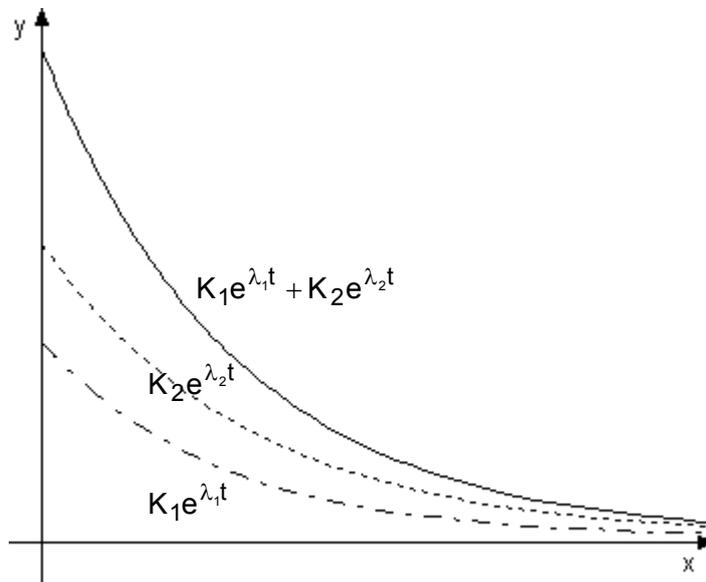


Figura 9.2. Esquema de un caso sobreamortiguado

9.3.1.1.1.2. Caso crítico

Las raíces λ_1 y λ_2 son **reales e iguales**, es decir: $\lambda_1 = \lambda_2$, la solución es:

$$y_c(t) = (K_1 + K_2 t)e^{\lambda_1 t} \quad (9.53)$$

En la Figura 9.3 se muestra un esquema del caso crítico considerando las constantes K_1 y K_2 positivas.

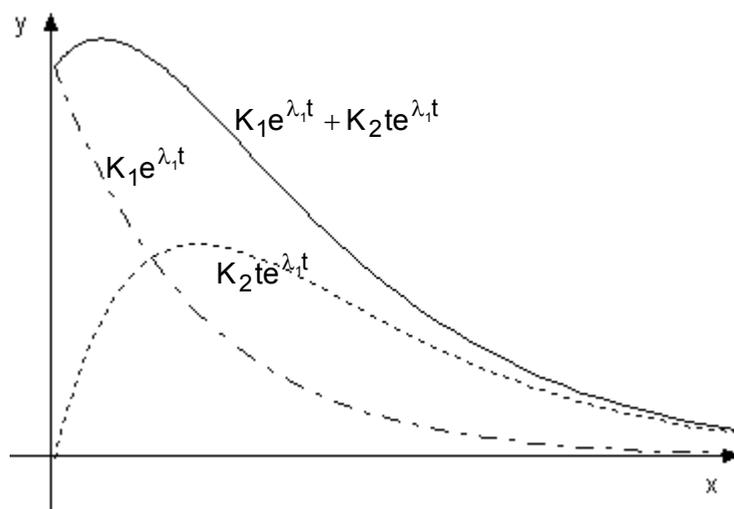


Figura 9.3. Esquema de un caso crítico

9.3.1.1.1.3. Caso oscilatorio amortiguado

Las raíces λ_1 y λ_2 son **complejas y distintas**, es decir: $\lambda_{1,2} = \alpha \pm i\beta$, la solución puede expresarse de cuatro formas diferentes:

$$y_c(t) = e^{-\alpha t} (K_1 e^{i\beta t} + K_2 e^{-i\beta t}) \quad (9.54)$$

$$y_c(t) = e^{-\alpha t} (A \cos \beta t + B \sin \beta t) \quad (9.55)$$

$$y_c(t) = C e^{-\alpha t} \cos(\beta t - \phi) \quad (9.56)$$

$$y_c(t) = C e^{-\alpha t} \sin(\beta t + \phi) \quad (9.57)$$

En la figura 9.4 se muestra un esquema de este caso.

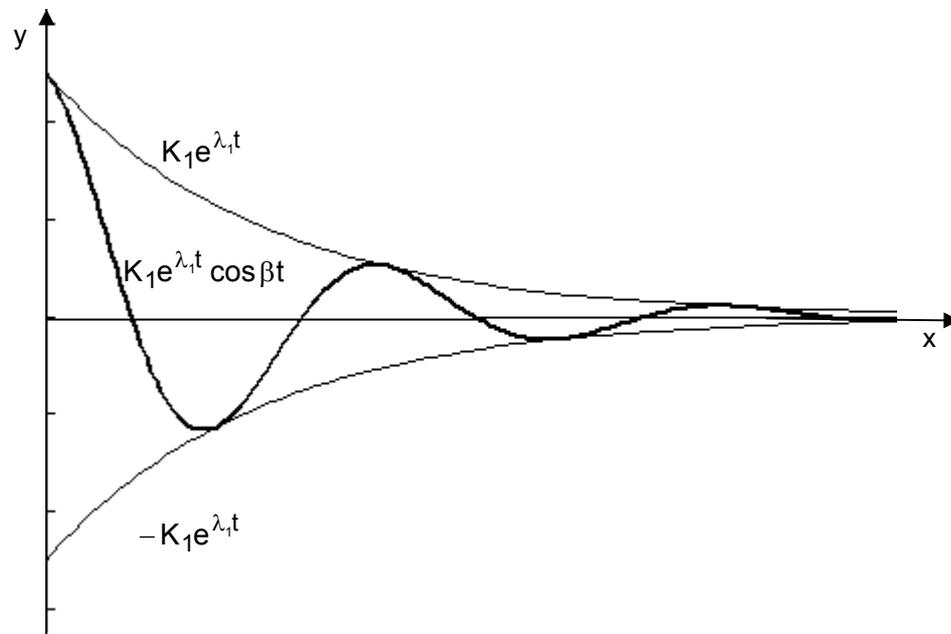


Figura 9.4. Esquema de un caso oscilatorio amortiguado

9.3.1.1.2. Solución particular

Esta solución se expresa como:

$$y_p(t) = e^{\lambda_1 t} \int e^{\lambda_2 t} \int h(t) e^{-(\lambda_1 + \lambda_2)t} (dt)^2 \quad (9.58)$$

9.3.1.1.3. Solución general

Como se expresó anteriormente, la solución general es la suma de la solución complementaria y de la particular, esta suma puede esquematizarse como:

$$y(t) = \left\{ \begin{array}{l} k_1 e^{\lambda_1 t} + k_2 e^{\lambda_2 t} \\ (k_1 + k_2 t) e^{\lambda_1 t} \\ C e^{-\alpha t} \cos(\beta t - \varphi) \end{array} \right\} + e^{\lambda_1 t} \int e^{\lambda_2 t} \int h(t) e^{-(\lambda_1 + \lambda_2)t} (dt)^2 \quad (9.59)$$

✓ Por ejemplo si se desea calcular la solución del siguiente problema de valor inicial:

$$y'' - 4y' + 4y = 0 \quad \text{con } y(0) = 3; y'(0) = 1.$$

Como es una ecuación homogénea, no tiene función excitación, se necesita calcular solamente la solución complementaria. Aplicando la ecuación (9.48) se obtienen las raíces λ_1 y λ_2 que son **reales e iguales**, es decir: $\lambda_1 = \lambda_2 = 2$, por lo tanto el caso que se presenta es el caso crítico y la solución es:

$$y_c(t) = (K_1 + K_2 t) e^{2t}$$

Para calcular las constantes K_1 y K_2 , se aplican las condiciones iniciales:

$$y(0) = (K_1 + K_2 \cdot 0) e^{2 \cdot 0} = 3 \Rightarrow K_1 = 3$$

Para aplicar la segunda condición inicial se debe derivar la solución, es decir:

$$y'(t) = (2K_1 e^{2t} + K_2 e^{2t} + 2K_2 t e^{2t})$$

Y particularizando para $y'(0) = 1$, se tiene:

$$y'(0) = (2 \cdot 3e^0 + K_2 e^0 + 0) = 1 \Rightarrow K_2 = 1 - 6 = -5$$

La solución complementaria que también es la solución general se escribe como:

$$y_c(t) = (3 - 5t) e^{2t}$$

9.3.1.2. Método de los coeficientes indeterminados

Este método se emplea en ecuaciones diferenciales en las cuales la función excitación contiene un polinomio, términos de la forma $\sin r x$, $\cos r x$, e^{rx} donde r es constante, o combinaciones de sumas y productos de estos.

Consiste en hacer una hipótesis inteligente de la forma de la solución particular y sustituir esta función, que en general involucra uno o más coeficientes desconocidos, en la ecuación diferencial. Para que este método sea aplicable con éxito, se deben determinar los coeficientes desconocidos, de tal manera que la función satisfaga a la ecuación diferencial. Por ello se dice que se basa en la habilidad para suponer la forma general de la solución particular.

Si la ecuación es de la forma:

$$a \frac{d^2 y}{dx^2} + b \frac{dy}{dx} + c y = h(x) \quad (9.60)$$

La función excitación puede tener alguna de las formas que se presentan a continuación:

$$h(x) = \begin{cases} P_n(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_n \\ e^{\alpha x} P_n(x) \\ e^{\alpha x} P_n(x) \operatorname{sen} \beta x \\ e^{\alpha x} P_n(x) \operatorname{cos} \beta x \end{cases} \quad (9.61)$$

✓ Si $h(x) = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_n$, la solución particular se supone como:

$$y_p(x) = A_0 x^n + A_1 x^{n-1} + A_n \quad (9.62)$$

✓ Si $h(x) = e^{\alpha x} P_n(x)$ la solución particular se supone como:

$$y_p(x) = e^{\alpha x} (A_0 x^n + A_1 x^{n-1} + A_n) \quad (9.63)$$

✓ Si $h(x) = e^{\alpha x} (a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + \dots + a_n) \begin{cases} \operatorname{cos} \beta t \\ \operatorname{sen} \beta t \end{cases}$, la solución es:

$$y_p(x) = e^{\alpha x} (A_0 x^n + A_1 x^{n-1} + A_n) \operatorname{cos} \beta t + e^{\alpha x} (A_0 x^n + A_1 x^{n-1} + A_n) \operatorname{sen} \beta t \quad (9.64)$$

Por ejemplo si se desea calcular la solución particular de la ecuación diferencial:

$$y'' + 4y' + 9y = x^2 + 3x$$

Se supone que la solución particular es:

$$y_p(x) = A_0 x^2 + A_1 x + A_2$$

Se deriva esta solución y se llega a:

$$y'_p(x) = 2A_0 x + A_1$$

y se deriva de nuevo:

$$y''_p(x) = 2A_0$$

Se reemplazan estos valores en la ecuación diferencial original y se tiene:

$$2A_0 + 4(2A_0 x + A_1) + 9(A_0 x^2 + A_1 x + A_2) = x^2 + 3x$$

Distribuyendo y agrupando términos se obtiene:

$$9A_0 x^2 + (8A_0 + 9A_1) x + 2A_0 + 4A_1 + A_2 = x^2 + 3x$$

Por igualdad de polinomios se llega a que:

$$A_0=1/9; A_1=19/81; A_2= - 94/729$$

La solución particular es:

$$y_p(x) = \frac{1}{9} x^2 + \frac{19}{81} x - \frac{94}{729} A_2$$

9.4. ECUACIONES DIFERENCIALES PARCIALES

Una forma de representar una ecuación diferencial parcial de segundo orden con dos variables independientes es:

$$A \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + E \frac{\partial u}{\partial x} + F \frac{\partial u}{\partial y} + Gu(x, y) = H(x, y) \quad (9.65)$$

Estas ecuaciones se clasifican de acuerdo a la relación de los coeficientes A, B, y C, en los siguientes tipos:

- ✓ Elíptica si $B^2 - 4AC < 0$
- ✓ Parabólica si $B^2 - 4AC = 0$
- ✓ Hiperbólica si $B^2 - 4AC > 0$

A continuación se presentan los ejemplos típicos de cada uno de estos tipos:

9.4.1. Ecuaciones elípticas

Ecuación de Laplace:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} &= 0 \\ u(a, y) &= f_1(y) \\ u(b, y) &= f_2(y) \\ u(x, c) &= g_1(x) \\ u(x, e) &= g_2(x) \end{aligned}$$

Ecuación de Poisson:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = F(x, y)$$

9.4.2. Ecuación Parabólica

Ecuación de calor:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial u}{\partial t} \\ u(0, t) &= T_1 \\ u(L, t) &= T_2 \\ u(x, 0) &= f(x) \end{aligned}$$

9.4.3. Ecuación Hiperbólica

Ecuación de onda:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{1}{\alpha} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \\ u(0, t) &= 0 \\ u(L, t) &= 0 \\ u(x, 0) &= f(x) \\ \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) &= g(x)\end{aligned}$$

Para solucionar estas ecuaciones se utiliza el Método de separación de variables, por ejemplo si se tienen una ecuación diferencial parcial, de segundo orden, con dos variables independientes, $u(x, t)$ la misma puede expresarse como el producto de dos funciones, una que depende solo de x y otra que depende solo de t .

EJERCICIOS PROPUESTOS

1.1. En una población aislada $p(t)$, la rapidez de crecimiento de la población dp/dt es igual a una función de la población; así: $\frac{dp}{dt} = f(p)$

La expresión más simple para $f(p)$ es $f(p) = \varepsilon p(t)$, donde ε es una constante positiva. Determine: la población en función del tiempo si $p(0) = p_0$

1.2. Se determinó experimentalmente que un cierto material radioactivo decae con una rapidez que es proporcional a la cantidad presente. Un bloque de este material tiene originalmente una masa de 100 g y se observa que al cabo de 20 años es de 75 g.

- Determine una expresión para la masa en función del tiempo.
- Determine el tiempo de vida media del material.
- Represente gráficamente masa en función del tiempo.

1.3. Un cuerpo de masa M se lanza verticalmente con una velocidad v_0 . Se asume que el aire presenta una fuerza de roce proporcional a la velocidad con un coeficiente de roce γ .

Determine la expresión que permite evaluar la altura máxima y el tiempo que tarda en alcanzarla. Represente gráficamente.

1.4. De acuerdo con la Ley de enfriamiento de Newton, la velocidad a la que se enfría una sustancia al aire libre es proporcional a la diferencia entre la temperatura de la sustancia y la del aire. Si la temperatura del aire es 28°C y la de la sustancia se enfría desde 100°C a 75°C en 15 minutos, indique ¿cuánto tardará dicha sustancia en alcanzar 50°C ? Resuelva analíticamente y por los métodos de la serie de Taylor, Euler, Heun y Runge-Kutta de 4º orden.

1.5. Un trozo de carne de 2,3 kg, originalmente a 10°C, se lleva a un horno a 300 °C a las 20 horas, después de 75 minutos se determinó mediante termocupla la temperatura de la carne que fue de 168 °C ¿a qué hora se alcanzarán 212°C , temperatura necesaria para que la carne este cocida término medio? Resuelva analíticamente y por los métodos de la serie de Taylor, Euler, Heun y Runge-Kutta de 4° orden.

1.6. Utilizando el método de los coeficientes indeterminados encuentre la solución particular para:

a) $y'' + 4y = 9e^{2x}$

b) $y'' + 4y' + 48y = x^2 + 2x$

c) $y'' + 12y' + 16y = 24 \sin 8x$

1.7. Se encontró experimentalmente que un peso de 8 N estira un resorte 8 cm. Si el peso se lleva 5 cm por debajo de la posición de equilibrio y se suelta:

- Establezca la ecuación diferencial y las condiciones asociadas que describan el movimiento;
- Encuentre la posición del peso como una función del tiempo;
- Determine la posición, velocidad, y aceleración del peso 0,6 s después de haberlo soltado.

BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

- AYRES, F Jr. 1991. Ecuaciones diferenciales. Editorial Mc Graw – Hill/ Interamericana de México, S.A. México.
- BOYCE, W. E.; DI PRIMA, R. C. 1974. Ecuaciones diferenciales y problemas con valores en la frontera. Editorial LIMUSA. México.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. 1985. Análisis Numérico. Grupo editorial Interamericana de México, S.A. de C. V. México.
- CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. 1994. Métodos Numéricos para Ingenieros. Editorial Mc Graw – Hill/ Interamericana de México, S.A. México.
- EDWARDS, C. H. Jr., PENNEY, D. E. 1993. Ecuaciones diferenciales aplicadas. Editorial Prentice – Hall Hispanoamericana S.A. México. 3º edición. México.
- KREYSZIG., E. 1991. Matemáticas avanzadas para Ingeniería. Vol I y II. Editorial LIMUSA, S. A. de C. V. México.
- LASBAINES A. 2003. Introducción al Cálculo Numérico. Cuaderno de Laboratorio de Teoría de Sistemas N° 6. UNSE. Santiago del Estero. Argentina
- LUTHE, R.; OLIVERA, A.; SCHUTZ, F. 1995. Métodos Numéricos. Editorial LIMUSA, S. A. de C. V. México.
- PITA, C. 1989. Ecuaciones diferenciales: una introducción con aplicaciones. Editorial LIMUSA, S. A. de C. V. México.
- SPIEGEL, M. R. 1997. Ecuaciones diferenciales aplicadas. Editorial Prentice – Hall Hispanoamericana S.A. México.
- SPIEGEL, M. R. 1997. Transformadas de Laplace. Editorial Mc Graw – Hill/ Interamericana de México, S.A. México.
- WILLIAMS, J. 1975. Transformadas de Laplace. Vol. 10. Editorial LIMUSA. México.