La solución con Métodos Numéricos

Genaro Altamirano García • José Antonio Zamora Plata

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

La solución con Métodos Numéricos

Genaro Altamirano García
José Antonio Zamora Plata

Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Estudios Superiores Zaragoza

Datos para catalogación bibliográfica

Autores: Genaro Altamirano García, José Antonio Zamora Plata

La solución con Métodos Numéricos.

UNAM, FES Zaragoza, mayo de 2024.

Peso: 19.7 MB.

ISBN: 978-607-30-9071-1.

Diseño de portada: Carlos Raziel Leaños Castillo.
Formación de interiores: Claudia Ahumada Ballesteros.

La solución con Métodos Numéricos.

D.R. © Universidad Nacional Autónoma de México
Av. Universidad # 3000, Col. Universidad Nacional Autónoma de México, C.U., Alcaldía Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México, México.

Facultad de Estudios Superiores Zaragoza
Av. Guelatao # 66, Col. Ejército de Oriente, Alcaldía Iztapalapa, C.P. 09230, Ciudad de México, México.

Contenido

Presentación

Este trabajo tiene la intención de servir de apoyo al curso de Métodos Numéricos que se imparte en la Carrera de Ingeniería Química de la Facultad de Estudios Superiores "Zaragoza", UNAM.

El material es producto de la experiencia que hemos tenido al impartir la materia desde 1999. Todos los apuntes originales preparados fueron enriquecidos permanentemente por los alumnos, con sus participaciones y aportaciones en clase, a quienes agradecemos su contribución indirecta para la elaboración de este trabajo.

De la misma manera, esperamos que, quienes lean estas notas también puedan contribuir con sus críticas y comentarios para el mejoramiento permanente de este producto que finalmente beneficiará a nuestros futuros y actuales estudiantes.

Con este trabajo pretendemos que el alumno de ingeniería adquiera conocimientos y habilidades que le permitan desenvolverse adecuadamente en la solución de problemas que se llegan a presentar mientras estudia. Se hace énfasis en emplear la computadora y los programas como una herramienta que le apoye en la solución de problemas que involucren el empleo de los métodos numéricos. Así mismo, decidimos elaborar este material basado en la aplicación de distintas herramientas de cómputo para que el estudiante y el docente conozcan distintos programas de computación y que cada quién elija la herramienta de cómputo que más le agrade.

El material está estructurado de tal forma que el estudiante refuerce sus conocimientos con la parte teórica de los modelos y con su aplicación inmediata. De ahí que consideramos que la mejor manera de aprender a resolver problemas es resolviendo varios problemas de distinta forma, así, cuando el estudiante se enfrente a un problema nuevo sólo tendrá que relacionarlo con alguno conocido, tal como ahora lo practican los estudiantes de cualquier colegio de México.

Agradecemos la colaboración de nuestros colegas y estudiantes para la actualización de este trabajo.

Los Autores

GENARO ALTAMIRANO GARCÍA

Ingeniero Químico, FES Zaragoza. Maestría en Matemáticas. Doctorado en Economía. Profesor de Carrera Asociado C.

JOSÉ ANTONIO ZAMORA PLATA

Ingeniero Químico, FES Zaragoza. Administrador en Informática. Técnico Académico Asociado C.

Agradecemos a los ingenieros que revisaron el material

Dr. Rodolfo Alberto Herrera Toledo

M.en I. Alejandro Juvenal Guzmán Gómez

I.Q. Blas Maldonado Sánchez

quiénes atinadamente enriquecieron con sus comentarios y recomendaciones este libro.

Objetivos

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar en el lector la capacidad de seleccionar a través de los métodos propuestos y los problemas resueltos la mejor solución para los diferentes problemas específicos que se desarrollen en la ingeniería de procesos, también el lector considerará la posibilidad de utilizar una herramienta computacional para agilizar el tiempo de resolución.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Dar una introducción a los métodos numéricos para que el alumno reconozca el tipo de problemas que requieren técnicas numéricas para su solución.
- Describir cómo funcionan los métodos numéricos en la solución de problemas.
- Instrumentar un procedimiento numérico para resolver un problema o aproximar una solución al problema.
- Representar el algoritmo de cada método que pueda ser codificado en cualquier lenguaje de programación.
- Emplear programas comerciales para agilizar y verificar la solución del problema con cierto grado de aproximación.

Generalidades

En la carrera de Ingeniería Química se requiere dominar las ciencias matemáticas a lo largo de los nueve semestres de estudio, siendo sus principales áreas de trabajo: Cálculo; álgebra lineal; álgebra vectorial; ecuaciones diferenciales y métodos numéricos. En virtud de la primordial utilidad de los métodos numéricos para la solución de problemas típicos de ingeniería, se realizó una revisión de los métodos mayormente utilizados, encontrándose los siguientes:

1. **Solución de ecuaciones no lineales**
    a. Métodos gráficos
    b. Bisección
    c. Newton - Raphson
    d. Secante
    e. Falsa Posición (Regula Falsi)
    f. Punto fijo
    g. Müller
2. **Sistema de ecuaciones lineales y no lineales**
    - Lineales
        a. Gauss
        b. Jordan
        c. Seidel
        d. Jacobi
    - No Lineales
        a. Sustitución
        b. Reducción
        c. Newton Multivariable
        d. Broyden

3. **Aproximación polinomial e interpolación**
    a. Polinomio de Lagrange
    b. Spline cúbico
    c. Polinomio de Newton
    d. Mínimos cuadrados
4. **Integración y diferenciación numérica**
    a. Trapezoidal
    b. Simpson
    c. Cuadratura
5. **Ecuaciones diferenciales ordinarias**
    a. Taylor
    b. Euler modificado
    c. Runge – Kutta
6. **Transformadas de Laplace**

La mayoría de estos métodos son numéricos, pero también hay otros que son analíticos. **Un método analítico** separa las partes del problema hasta llegar a conocer sus principios o elementos, y por ello, son conocidos como métodos exactos. **Un método numérico**, por otra parte, se utiliza para determinar o aproximar soluciones cuantitativa y cualitativamente; en ellos está implícito un error y una aproximación. Generalmente son utilizados cuando no existe solución analítica o cuando esta solución analítica es muy complicada de obtener.

Es conocido que un método numérico realiza cálculos iterativos y en ocasiones bastante tediosos, por ello, generalmente se emplean programas computacionales elaborados por los propios usuarios o a través de programas comerciales. También, es conocido que la mayoría del software comercial es más utilizado por usuarios inexpertos a quiénes no les interesa el método utilizado para hallar la solución, pero si les importa el resultado. De ahí que, cotidianamente se recurra a programas comerciales o de calculadoras que faciliten el trabajo.

La mayoría de las computadoras tiene paquetes de matemáticas instalados que facilitan al usuario su empleo, pero su desventaja principal implica realizar una inversión en su compra y al mismo tiempo, hacen que el usuario de éstos utilice la paquetería sin conocer el fundamento y la validez de la solución en la mayoría de las veces. Algunos de los programas comerciales son por orden de antigüedad. *Eureka, Maple, MathCAD, Mathematica, Kaleida, y Matlab.* Todos y cada uno de ellos auxilian al usuario a la resolución de problemas matemáticos, pero el propósito del curso de Métodos Numéricos no es enseñarle al alumno a usar software porque con esta perspectiva se forman estudiantes dependientes de una herramienta y no se desarrolla su capacidad de análisis.

En un curso de métodos numéricos para ingenieros, es importante saber cuándo y cómo utilizar estas herramientas. Si al alumno se le dan los conocimientos y las herramientas necesarias, será más independiente e incluso podrá generar ese software casi de manera gratuita y con una formación más completa que de antemano, podemos garantizarles que la aplicaran en otras actividades de su vida.

Para esto, el alumno debe aprender a programar en algún lenguaje de programación como Fortran, C, Matlab, Python o Vbasic, no importa la versión, sólo la capacidad que tenga el alumno de aprender las instrucciones y la sintaxis de cada lenguaje.

Modelos matemáticos

Un modelo matemático puede definirse, de modo general, como una formulación o ecuación que expresa las características fundamentales de un sistema o proceso físico en términos matemáticos. Sus ventajas son:

a) Representa una idealización y una simplificación de la realidad

b) Conduce a resultados predecibles

Los modelos permiten definir con mayor precisión los conceptos relacionados con los métodos numéricos.

Los métodos numéricos tienen aplicaciones en diferentes áreas, como las siguientes:

1. Determinación de propiedades termodinámicas
2. Cálculo de diámetros de tuberías
3. Redes de Flujo de Fluidos
4. Determinación de los centroides de objetos en formas diversas
5. Predicción demográfica (razón de cambio de la población)
6. Aceleración de un cuerpo en caída libre (razón de cambio de la velocidad)
7. En Química para cuantificar las reacciones químicas.

Como ejemplo se podría analizar el origen de una ecuación diferencial de algún problema físico particular y resolverla. En ella evaluar algunos valores para tiempos diferentes y ver qué ocurre. Se complementaría con una gráfica. A la solución de la ecuación diferencial se le conoce como solución analítica o exacta ya que satisface exactamente a la ecuación original.

Hay muchos modelos matemáticos que no tienen soluciones exactas. Para una gran cantidad de ellos, la única alternativa es la de desarrollar una solución numérica que se aproxime a la solución exacta. Los métodos numéricos son esa alternativa. Por medio de ellos se reformula el problema matemático para que podamos resolverlo mediante operaciones aritméticas.

Para resolver problemas matemáticos de ingeniería, - y de otras áreas -, es recomendable emplear el método matemático siguiente que consta de cuatro etapas básicas:

1. **Formulación.** En esta etapa habrá que establecer la expresión del problema en lenguaje matemático, o en su defecto buscar qué modelo matemático existente y es útil para resolver el problema planteado.
2. **Resolución.** Una vez que se ha determinado qué método de solución se emplea, se realizan las operaciones apropiadas para poder sacar deducciones lógicas del modelo matemático.
3. **Interpretación.** Aquí, se lleva a cabo un análisis sobre los datos obtenidos; es decir, se analizan las relaciones existentes entre los resultados matemáticos y su significado con el mundo físico o problema establecido.
4. **Refinamiento.** Esta etapa final permite que se hagan las adecuaciones pertinentes para mejorar o corregir el método de solución. Se evalúa el procedimiento para obtener mejores predicciones, según lo marque las comprobaciones experimentales.

Hay tres importantes razones para que el estudiante de ingeniería aprenda a utilizar un método numérico.

1. Muchos problemas de ingeniería se reducen a ecuaciones que en muchas ocasiones llegan a ser tan complejas que no tienen soluciones analíticas.
2. Son un medio para reforzar su comprensión de las matemáticas. Porque una función de los métodos numéricos es la de reducir las matemáticas superiores a operaciones aritméticas básicas. Esta alternativa aumenta la capacidad de comprensión y entendimiento en la materia, y
3. Finalmente, requieren que el alumno emplee un lenguaje de programación u otra herramienta de cómputo que le dará la habilidad de servirse de las computadoras.

Para seleccionar el método numérico que resuelva un problema específico se deben reconocer los métodos disponibles, el fundamento o funcionamiento del método, las limitaciones de este, y las desventajas involucradas en su utilización.

Aproximación y errores

Con frecuencia, el ingeniero recurre a modelos matemáticos establecidos que tienen cierta aceptación o garantía, como en el caso de la ecuación general de segundo grado, por sólo citar un ejemplo simple. Para el ingeniero, no es relevante que los métodos de solución sean analíticos o numéricos, lo importante es que le faciliten o auxilien en la solución del problema. No obstante, es importante considerar el grado de aproximación existente entre ambos métodos. Siendo el principal inconveniente en ambos casos, minimizar el error involucrado en los cálculos, ya que como es sabido, generalmente las técnicas numéricas dan aproximaciones y casi siempre hay un grado de incertidumbre. De hecho, el error implícito está catalogado en varios tipos:

1. **Errores ilegítimos**. Son el resultado de equivocaciones humanas.
2. **Errores de redondeo**. Es el resultado de utilizar un número finito de *m* dígitos para aproximar un número infinito de *m* dígitos. Por ejemplo, considere los números fraccionarios 3/7, 2/3, 11/9, etc., como ejemplos típicos, ya que los aproximamos como 0.4290, 0.6670, 1.2220 redondeados a tres decimales, siendo que estamos omitiendo los dígitos a la derecha de la serie infinita. Por ello, también son llamados errores de precisión o de punto flotante. En las calculadoras el rango de números está redondeado de 1E-99 hasta 9E99. En las computadoras el rango oscila entre 16E-65 y 16E63. Por debajo y encima de estos límites se produce un error de desbordamiento de memoria *underflow y overflow* respectivamente.
3. **Errores de truncamiento**. Estos errores se producen por la sustitución de un número finito de decimales en lugar de una secuencia infinita de decimales que darían el resultado exacto. Son también llamados errores decimales. Similar al anterior, 1/3 puede representarse en decimales como 0.333333333333333..., e independientemente de cuantos decimales consideremos cortar siempre habrá un error por no haber considerado la secuencia infinita.
4. **Errores heredados**. Se presentan debido a errores en etapas previas del algoritmo de computación, un error de redondeo, más un error de truncamiento, más un error de medición, etc. También son conocidos como errores de propagación.

Determinación de errores

Con las técnicas numéricas se obtienen soluciones cercanas a las reales. Gran parte de estas tienen la desventaja de poseer errores. En la práctica profesional, los errores pueden resultar costosos y en algunas ocasiones catastróficos.

Algunas personas pueden morir si una estructura o un mecanismo llegan a fallar. Por eso es importante identificar, cuantificar y minimizar los errores. No tiene sentido efectuar desarrollos complicados a menos de tener una seguridad razonable de que las respuestas serán correctas y cercanas a la exactitud como el objetivo necesite.

Para cuantificar el error involucrado en un método numérico recurrimos al error absoluto y al error relativo principalmente; sin embargo, los errores son parte integrante de muchos procesos y por ello debemos analizar sus características.

Para los dos tipos de errores, la relación entre el resultado exacto o verdadero y el aproximado está dado por:

$$\text{valor verdadero} = \text{valor aproximado} + \text{error}$$

o bien

$$E_v = \text{valor verdadero} - \text{valor aproximado}$$

donde E_v se usa para representar el valor exacto del error.

En el caso de la raíz de 9, el valor verdadero es 3, un valor aproximado de 2.9 implica que el error verdadero es de 0.1

$$E_v = 3 - 2.9 = 0.1$$

Al error verdadero también se le conoce como error absoluto.

Otra manera de cuantificar el error es como error relativo. Este se expresa como

$$E_r = \frac{error\ \ absoluto}{valor\ verdadero}$$

donde E_r se puede representar como el error relativo porcentual al multiplicarlo por 100.

El error relativo de la raíz de 9 que se aproxima como 2.9, y corresponde a 0.033 o 3.33%

$$E_r = \frac{0.1}{3} = 0.0333$$

En las situaciones reales no es fácil contar con tal información. En los métodos numéricos el valor verdadero se conoce únicamente cuando tratamos con funciones que se pueden resolver analíticamente. Por lo general, este es el caso cuando estudiamos el comportamiento teórico de una técnica particular.

Por otro lado, comprendemos que, en las aplicaciones reales, no conocemos la respuesta correcta. En estas situaciones normalizar el error es una alternativa, empleando la mejor estimación posible del valor verdadero, es decir, a la aproximación misma, como un error aproximado calculado a partir de un valor y un error aproximados, esto es

$$E_n = \frac{error\ aproximado}{valor\ aproximado}$$

donde el subíndice **n** significa que el error está ***normalizado*** a un valor aproximado.

También se puede recurrir a la tolerancia como

$$tol = \left|\frac{x_2 - x_1}{x_2}\right|$$

Consideremos que desconocemos el valor exacto de la raíz de nueve, pero conforme se realizan los cálculos se tienen cuatro aproximaciones: 2.97, 2.98, 2.99 y 2.998. Al cuantificar el error normalizado o tolerancia, se observa que va disminuyendo. Esto es,

$$tol = \left|\frac{2.98 - 2.97}{2.98}\right| = 0.003355,$$

$$tol = \left|\frac{2.99 - 2.98}{2.99}\right| = 0.003344,$$

$$tol = \left|\frac{2.998 - 2.99}{2.998}\right| = 0.0026$$

Este procedimiento puede servir como un criterio para detener los cálculos o iteraciones y aceptar el valor como una aproximación válida de solución al problema.

Además, pueden existir errores en la formulación de modelos, también por equivocaciones personales o por una incertidumbre en la obtención de datos.

Cuando se emplean números para efectuar determinados cálculos, debe haber siempre seguridad en que pueden emplearse con confianza. El concepto de cifras significativas se ha implementado para designar formalmente la confiabilidad de un valor numérico. "El número de cifras significativas es el número de dígitos, más un dígito estimado que se pueda usar con confianza". Los ceros no siempre son cifras significativas ya que pueden usarse sólo para ubicar el punto decimal.

Los tres números: 0.000 018 81, 0.000 188 1, 0.001 881

tienen cuatro cifras significativas, debido a que los ceros son insignificantes.

Se deben desarrollar criterios para especificar qué tan precisos serán los resultados obtenidos. Una manera de hacerlo es en términos de cifras significativas.

Cantidades como π, e, representan números específicos. No los podemos representar exactamente con un número finito de dígitos. A la omisión del resto de cifras significativas se mencionó que corresponde a un error de redondeo. De esta manera, los errores de redondeo y el uso de cifras significativas se emplean para expresar la exactitud de un número.

Resumiendo:

Los errores aritméticos en que puede incurrirse, y que se relacionan con la solución de problemas empleando computadoras, provienen de tres fuentes.

1. El primer tipo corresponde a los errores propios de los datos, y es debido a que los datos representan cantidades físicas, sobre las cuales existe incertidumbre en su medida.

2. El segundo tipo son los errores de truncamiento. Corresponden al caso de calcular por ejemplo *sen x*, *cos x*, e^x, etc., usando series. Estas series tienen un número indeterminado de elementos, pero evidentemente para calcular su valor sólo se puede considerar un número finito de ellos. En el caso de constantes que no pueden representarse exactamente, como por ejemplo, los números π y e, o fracciones como

$\frac{1}{3}, \frac{2}{3}$, etc. Estos errores también se presentan cuando se hacen transformaciones del sistema decimal al binario y viceversa.

3. El tercer tipo son los errores de redondeo o de aproximación. Estos se producen ya que los números pueden tener únicamente determinado número de dígitos y en operaciones como multiplicación $A = B \cdot C$, el resultado puede tener un número de dígitos mayor que el permitido. En este caso el resultado se redondea o simplemente se pierden los dígitos menos significativos.

Luego de lo comentado, para hacer un buen uso de los métodos numéricos, debemos estudiar los fundamentos matemáticos en los que se basan estos métodos. Para posteriormente, crear sus propios programas de cómputo cuando se adquieran los conocimientos de matemáticas y de algún lenguaje de programación de alto nivel.

Los métodos numéricos los podemos emplear en la resolución de:

1) Raíces de ecuaciones no lineales
2) Sistemas de ecuaciones lineales y no lineales
3) Ajuste de curvas (regresión y correlación)
4) Integración y diferenciación
5) Ecuaciones diferenciales (ordinarias y parciales)

UNIDAD 1
Solución de ecuaciones no lineales

Uno de los problemas básicos del análisis numérico es el problema llamado ***búsqueda de raíces***. Consiste en encontrar los valores de la variable x que satisfacen la ecuación $f(x) = 0$ para una función dada. A una solución de este problema se le conoce como un cero o una raíz de la función $f(x)$.

TEOREMA. Sea dada una función $f(x)$, su solución será aquel número x tal que $f(x) = 0$. La función $f(x)$ puede tener

a) una solución

b) más de una solución

c) sin solución

Los métodos utilizados para hallar las raíces de una ecuación no lineal son los siguientes:

A. Método gráfico
B. Método de Bisección
C. Método de Newton Raphson
D. Método de punto fijo
E. Método de la Secante
F. Método de falsa posición
G. Método de Müller

Previo a describir cada uno de los métodos numéricos utilizados para hallar la solución de una función no lineal es necesario recordar algunos conceptos fundamentales del álgebra y la ayuda del método gráfico para comprender mejor las explicaciones a futuro.

1.1 MÉTODO GRÁFICO

El método gráfico es intuitivo, muy visual. Se basa en el hecho de una función cambia de signo en la vecindad de una raíz real, al especificar un intervalo, entre los dos valores se localiza la raíz. Se pueden usar diferentes estrategias para reducir sistemáticamente el tamaño del intervalo y de esta manera converger a la respuesta correcta. Por ello, se le asignan valores arbitrarios a la variable y luego se determina el valor correspondiente al aplicarlo a la función. Inicialmente se asignan de 5 a 10 datos, se genera una tabla, y luego se grafican para observar en qué valor de la función corta el eje de las ordenadas. Ahora vamos a emplear este teorema en un ejemplo para estimar la localización de las raíces.

Consideremos la función $f(x) = x^3 - x^2 - 1$

Obtenemos la gráfica de esta función con ayuda de una tabla de valores.

x	– 3	– 2	– 1	0	1	2	3
y	– 37	– 13	– 3	– 1	– 1	3	17

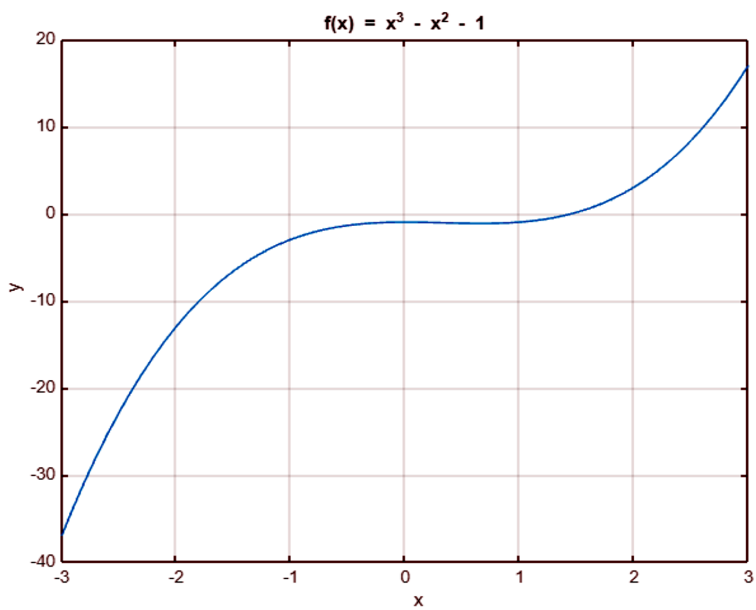


FIGURA 1. Raíz real entre 1 y 2.

Al realizar la gráfica se observa que la ecuación tiene sólo una raíz real.

La localización de una raíz se ubica entre 1 y 2, al mostrar cambio de signo de negativo a positivo. Esto es, como $f(1) = -1$ y $f(2) = 3$ se establece que la raíz está entre x = 1.0 y x = 2.0

Utilizando ahora el método de la bisección, se puede aproximar la raíz con mayor precisión. O en su defecto, para aproximarnos más a ella podemos dividir el intervalo en una cantidad definida de subintervalos. Se analiza cada uno de estos subintervalos para encontrar el cambio de signo. El proceso se repite y la aproximación a la raíz mejora cada vez más a medida que los subintervalos se hacen más pequeños.

Al analizar la función con datos entre 1. y 1.6 con separaciones en décimas, se obtiene.

x	1	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6
y	-1	-0.879	-0.712	-0.493	-0.216	0.125	0.536

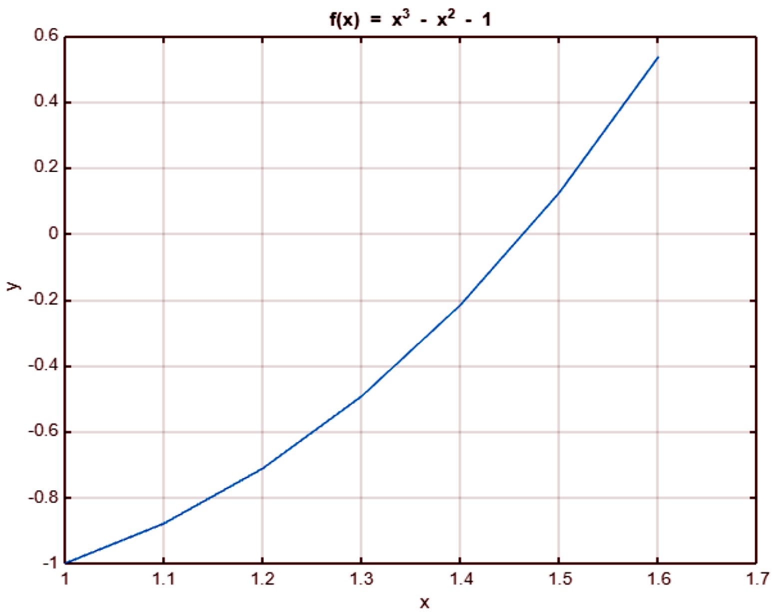


FIGURA 2. Raíz real entre 1.4 y 1.5.

Se aprecia una raíz en 1.46

Reduciendo el intervalo ahora en centésimas entre 1.45 y 1.50, se obtiene una nueva aproximación a la raíz real.

x	1.45	1.46	1.47	1.48	1.49	1.50	1.51
y	-0.053875	-0.019464	0.015623	0.051392	0.087849	0.125	0.162851

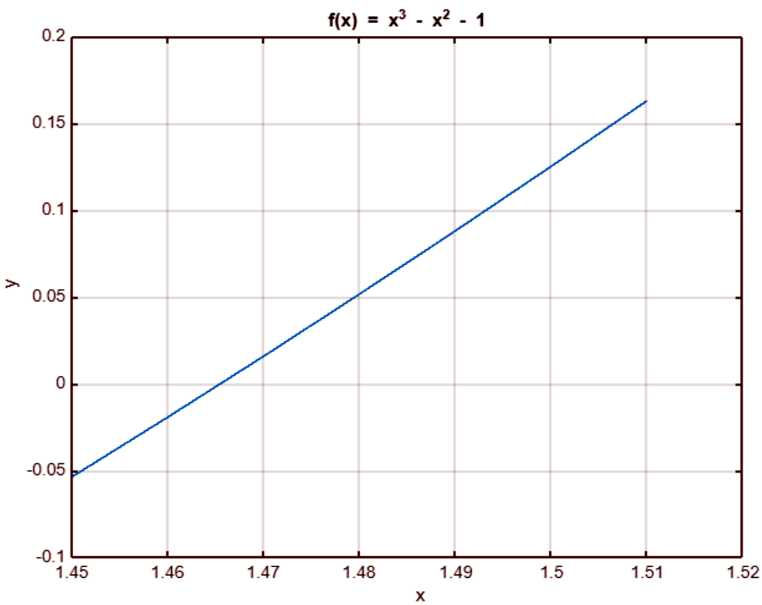


FIGURA 3. Raíz real entre 1.46 y 1.47.

Se aprecia que la raíz está muy próxima a 1.465.

El método gráfico proporciona conocimiento visual de las técnicas y, por otro lado, pueden ser útiles cuando otros métodos no funcionan.

A fin de establecer la raíz de una función por el método gráfico, se solicita que se grafique la función y se mencione al menos una raíz real de la función

$$f(x) = x^3 - 16.5x^2 + 77x - 91$$

Efectuando la gráfica de la función con valores de x entre 1 y 7 se pueden apreciar dos raíces reales cercanas en 2 y en 5.5 en la figura 4.

x	1	2	3	4	5	6
y	-29.5	5	18.5	17	6.5	-7

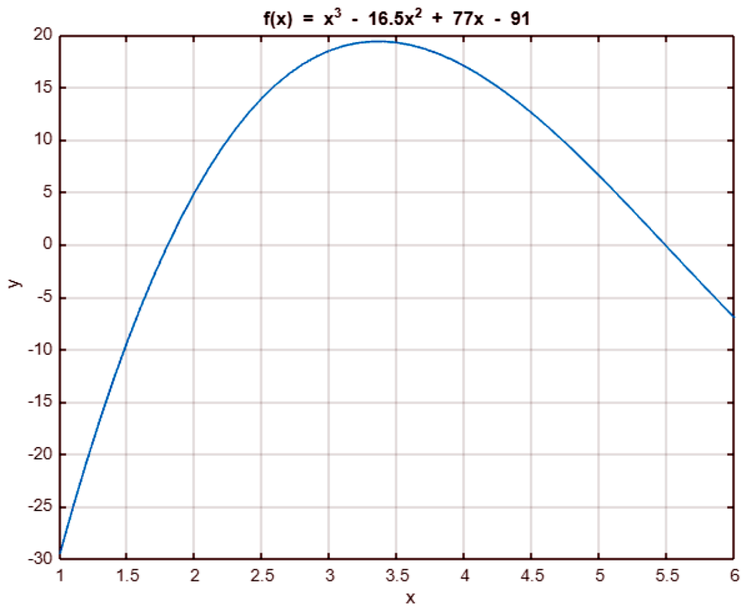


FIGURA 4. Se aprecian dos raíces reales.

El cambio de signo entre 1 y 2 indica que hay un cero entre ellos, también después se aprecia otro cambio de signo de positivo a negativo en 6, con lo que se intuye que hay otra raíz real entre 5 y 6.

Al ser una ecuación cúbica, hay una tercera raíz real entre 9 y 10. Sólo basta con ampliar el rango de búsqueda.

La solución a esta función cúbica es: $x1 = 1.80$, $x2 = 5.48$, $x3 = 9.21$

1.2 MÉTODO DE BISECCIÓN.

La mayoría de las técnicas para aproximar una raíz de una ecuación requieren que empiece con una estimación previa de la localización de la raíz. Del método gráfico visto previamente, se puede considerar el Teorema del Valor Intermedio que establece lo siguiente.

TEOREMA. Si f(x) es continua en el intervalo $a \le x \le b$, y si $f(a)$ y $f(b)$ tienen signos opuestos, entonces la ecuación f(x) = 0 tiene al menos una raíz real entre $x = a$ y $x = b$.

La interpretación geométrica de este teorema dice que si la función es continua y los puntos (-1, -3) y (1, –1) están ubicados en lados opuestos del eje x, entonces la gráfica de $f(x)$ debe cortar al eje x en algún lugar entre x = 1 y x = 2. Para una mejor comprensión, ver la gráfica siguiente.

x	-2	-1	0	1	2
y	-13	-3	-1	-1	3

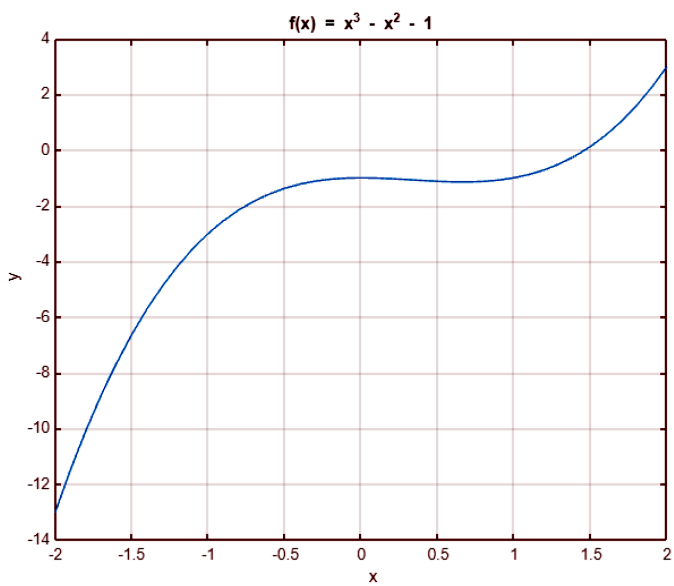


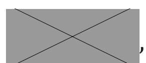
FIGURA 5. Intervalo de bisección en -2 y 2.

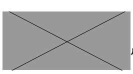
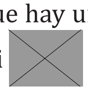
EL MÉTODO DE BISECCIÓN consiste en una partición en dos intervalos iguales. Es una técnica donde el intervalo se divide siempre en dos partes. Si la función cambia de signo sobre un intervalo, se evalúa el valor de la función en el punto medio donde está el cambio de signo. La posición de la raíz se determina procurando situarla en el punto medio del subintervalo dentro del cual ocurre el cambio de signo. El proceso se repite hasta obtener una mejor aproximación.

El método de bisección es una técnica perfectamente válida para determinar raíces aun cuando no sea tan eficiente como otro método. La ventaja en comparación con el método gráfico es que no es necesario graficar los puntos. Sin embargo, se entiende que, en cada etapa del procedimiento, el punto medio del intervalo aproxima la raíz cada vez que se va reduciendo el intervalo a 1/4, 1/8, 1/16 de su ancho original, hasta que se obtenga la raíz con la precisión que se requiera.

ALGORITMO DEL MÉTODO DE LA BISECCIÓN

Dada la ecuación f(x) = 0, y dados dos valores de x, a = 1 y b = 2, tales que a < b; y la función evaluada en estos puntos f(1)=-1, y f(2)=3 son de signos apuestos. Es fácil establecer que la multiplicación de ambas es negativa f(1) · f(2) < 0. Si la función f(x) es continua en el intervalo [1, 2] se garantiza que f(x) tiene por lo menos una raíz real en el intervalo.

1. Evaluar $f(x_m)$ en la mitad del intervalo , x = (1 + 2)/2 = 1.5, si la función es $f(x) = x^3 - x^2 - 1$, entonces $f(1.5) = 0.125$
2. Si $f(x_m) = 0$ la raíz real es x_m
3. Si $f(x_m) < 0$ (es decir, el mismo signo de f(a), hacer $a = x_m$, $f(a) = f(x_m)$ mantener el punto *b* inalterado e ir al paso 4.

   Si por el contrario $f(x_m) > 0$, hacer $b = x_m$, $f(b) = f(x_m)$ mantener *a* inalterado e ir al paso 4.
4. Hacer , si p es menor que cierta tolerancia *tol* dada de antemano, detener el proceso, considerando entonces que hay una aproximación a la raíz en x_m con una tolerancia o error de aproximación. Si  no es menor que la tolerancia, ir al paso 1.

La ventaja de este procedimiento es la sencillez de su aplicación.

Ejemplo 1.1. Emplear el método de la bisección para aproximar las raíces de la función cúbica $f(x) = x^3 - x^2 - 1 = 0$, con un error no mayor de 1/16.

Solución:

El objetivo es determinar las raíces de la ecuación f(x) = 0. Como analizamos anteriormente existe sólo una raíz, y como $f(1) = -1$ y $f(2) = 3$, entonces la raíz debe estar en el intervalo $1 \leq x \leq 2$. Iniciando con este intervalo.

Primera estimación

1. $a = 1$, $b = 2$, $f(a) = -1$, $f(b) = 3$, $xm = \dfrac{1+2}{2} = \dfrac{3}{2}$ f(xm) = f(1.5) = 0.125
2. La función evaluada en xm no es cero, por lo que se debe acortar el intervalo.
3. $f(xm) = 0.125$, al ser positiva se descarta el extremo derecho. a = 1, b = xm = 1.5, f(b) = 0.125
3. Hacer $p = \left|\frac{1-2}{2}\right|$, p < 0.0625, no se cumple por lo que hay que recalcular.

Segunda estimación

1. $x_m = \frac{1+1.5}{2} = \frac{5}{4} = 1.25$
2. ¿Es f(x) = 0 ?, NO, continuar. Se debe acortar el intervalo.

   $f(x_m = 1.25) = -0.6094$, entonces se descarta el lado izquierdo y se actualiza a = xm. El siguiente intervalo es $1.25 \leq x \leq 1.5$
3. Se cumple la tolerancia, $\left|\frac{1.5-1}{2}\right| = 0.25$, tol < 0.0625, No. Continuar con nueva aproximación.

Tercera aproximación.

1. $x_m = \frac{1.25 + 1.5}{2} = 1.375$
2. $f(x_m) = -0.2910$, el siguiente intervalo es $1.375 \leq x \leq 1.5$
3. es f(x) = 0 NO, continuar

4. comparando la tolerancia, $\left|\frac{1.25-1.5}{2}\right| = \frac{1}{8}$, $tol \leq 0.0625$, No

Cuarta aproximación

1. $x_m = \frac{1.375 + 1.5}{2} = 1.4375$

2. $f(x_m = 1.4375) = -0.09595$, el siguiente intervalo es $1.4375 \leq x \leq 1.5$

3. es f(x) = 0 NO, continuar

4. comparando la tolerancia $\left|\frac{1.375 - 1.5}{2}\right| = \frac{1}{16} = \frac{1}{16}$

Detenemos las aproximaciones con xm = 1.4375, que es la raíz con un error de aproximación de 0.0625 ó 1/16.

Resumiendo, en una tabla.

$x = a$	$x = b$	$x_m = \frac{a+b}{2}$	$f(x_m)$	$\left\|\frac{b-a}{2}\right\|$	$\varepsilon = 1/16$	Tol
1	2	1.5	0.125	0.5	½ > 0.0625	No
1	1.5	1.25	-0.6094	0.25	¼ >0.0625	No
1.25	1.5	11/8	-0.2910	1/8	1/8 >0.0625	No
11/8	1.5	1.4375	-0.09595	1/16	1/16 =0.0625	Si

La raíz o solución es x = 1.4375, valor con mejor precisión que el obtenido con el método gráfico.

Ejemplo 1.2. Emplear el método de la bisección para aproximar $\sqrt{5}$ con error no mayor de 1/16.

Solución:

Notar que $\sqrt{5}$ es la raíz de f(x) = 0, donde $f(x) = x^2 - 5$. Dado que f(2) < 0 y f(3) > 0; aplicamos el método iniciando con el intervalo $2 \leq x \leq 3$.

no.	$x = a$	$x = b$	$x_m = \frac{a+b}{2}$	$f(x_m)$	$\left\lvert\frac{b-a}{2}\right\rvert$	$\left\lvert\frac{b-a}{2}\right\rvert < \varepsilon = 1/16$
1ª	2	3	2.5	1.25	½	No
2ª	2	2.5	9/4	0.0625	¼	No
3ª	2	9/4	17/8	– 0.4844	1/8	No
4ª	17/8	9/4	35/16	– 0.09595	1/16	Si

Por lo tanto, $\sqrt{5}$ es aproximadamente: $x = \frac{35}{16} = 2.1875$.

Con un error no mayor de 0.00625.

La raíz es x = 2.2361.

La velocidad de convergencia es muy lenta. Por eso se prefieren otros métodos de aproximación para aumentar el ritmo de la convergencia.

xa	$f(a)$	xb	$f(b)$	x	$f(x)$	(b-a)/2	tol <= 0.0625
2	-1	3	4	2.5	1.25	0.5	no
2	-1	2.5	1.25	2.25	0.0625	0.25	no
2	-1	2.25	0.0625	2.125	-0.484375	0.125	no
2.125	-0.484375	2.25	0.0625	2.1875	-0.21484375	0.0625	no
2.1875	-0.214844	2.25	0.0625	2.21875	-0.07714844	0.03125	si

1.3 MÉTODO DE NEWTON-RAPHSON

Este método también recibe el nombre de Newton y de Raphson por desarrollar ambos matemáticos, de manera independiente, la misma técnica de rectas tangentes; es decir, cada uno por su lado llegaron a la misma fórmula. En la solución se requiere la función y la derivada de la función. La derivada de la función aumenta el ritmo de convergencia.

El concepto básico del método de Newton – Raphson se ilustra en la figura siguiente, en la que R es una raíz de la ecuación $f(x) = 0$, x1 es la primera aproximación a R y x2 es una mejor aproximación la cual se obtiene tomando la intersección de la recta que es tangente a la gráfica de $f(x)$ en el punto $(x1, f(x1))$.

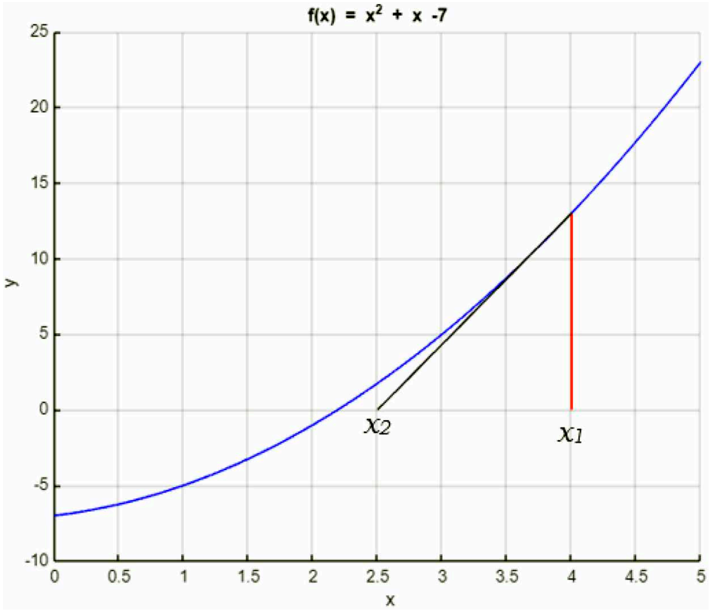


FIGURA 6. Aproximación de N-R.

Para determinar una fórmula para la aproximación mejorada x2, tenemos del cálculo diferencial que la pendiente de la recta tangente que pasa por (x1, fx1) es la derivada $f'(x1)$. Por consiguiente:

$$f'(x1) = \frac{f(x1) - 0}{x1 - x2}$$

de donde

$$x2 = x1 - \frac{f(x1)}{f'(x1)}$$

Si repetimos el procedimiento usando x3 como otra aproximación. Esta aproximación, x3, está relacionada con x2. En consecuencia

$$x3 = x2 - \frac{f(x2)}{f'(x2)}$$

El proceso puede continuarse hasta que se obtiene un mejor grado de precisión.

$$x_N = x_{N-1} - \frac{f(x_{N-1})}{f'(x_{N-1})}$$

La expresión recibe el nombre de fórmula de Newton – Raphson.

Ejemplo 1.3 Emplear tres iteraciones del Método de Newton – Raphson para aproximar $\sqrt{5}$.

Solución:

El objetivo es determinar la raíz de la ecuación f(x) = 0, y se requiere la función y derivada evaluada en un punto inicial. Se utilizará x1 = 4

donde $f(x) = x^2 - 5$

La derivada es: $f'(x) = 2x$

Sustituyendo f(x) y f ‘(x) en la fórmula

$$x_2 = x_1 - \frac{x^2 - 5}{2x}$$

$$x2 = x1 - \frac{f(x1)}{f'(x1)} = 4 - \frac{(4)^2 - 5}{2(4)} = 4 - \frac{11}{8} = 2.625$$

Se evalúa la función en la aproximación, $f(x = 2.625) = (2.625)^2 - 5 = 1.89$

Se requiere de otra aproximación, por lo tanto. Usando x = 2.625 se obtiene el valor de

$$x3 = x2 - \frac{f(x2)}{f'(x2)} = 2.625 - \frac{1.89}{2(2.625)} = 2.26488$$

$$f(x3) = 2.26488^2 - 5 = 0.129685$$

Usando x3 = 2.26488

$$x4 = x3 - \frac{f(x3)}{f'(x3)} = 2.26488 - \frac{0.129685}{2(2.26488)} = 2.23625$$

$$f(x4) = 2.23625^2 - 5 = 0.0008$$

De esta manera, $\sqrt{5}$ es aproximadamente 2.23625. Realmente, redondeando a seis cifras decimales, $\sqrt{5}$ = 2.236 068

La solución corresponde al valor calculado por el método de Newton – Raphson después de cinco iteraciones.

n	X	Y	D	r
1	4	11	8	2.625
2	2.625	1.890625	5.25	2.26488095
3	2.26488095	0.12968573	4.5297619	2.23625125
4	2.23625125	0.00081966	4.4725025	2.23606799
5	2.23606799	3.3587E-08	4.47213597	2.23606798

Ejemplo 1.4 Determinar las dos raíces cuadradas de 0.5, es decir x = $\sqrt{5}$

Solución. Si $x^2 = 0.5$ entonces $f(x) = x^2 - 0.5$

de donde f '(x) = 2 x

Sustituyendo en la fórmula de Newton y simplificando con valor inicial *xo = 0.6*

$$x_1 = \frac{(0.6)^2 - 0.5}{2(0.6)} = 0.7166$$

$$x_2 = \frac{(0.7166)^2 - 0.5}{2(0.7166)} = 0.7072$$

$$x_3 = \frac{(0.7072)^2 - 0.5}{2(0.7072)} = 0.7071$$

$$x_4 = \frac{(0.7071)^2 - 0.5}{2(0.7071)} = 0.7071$$

Usando cuatro cifras significativas, el valor de la raíz positivo en la tercera y cuarta iteraciones tienen el mismo valor, por lo que en esta aproximación el valor de la raíz será 0.7071. Para determinar la raíz negativa se empezará su conjugado, por lo que x = - 0.7071.

Por consiguiente: $\sqrt{5} \approx \pm 0.7071$

Una secuencia de cálculo que facilita la solución de la ecuación cuadrática es la siguiente.

Tomando los valores a, b, y c de la ecuación original se determina el valor de

$$s = b/(2a) \text{ y } t = s^2 - c/a$$

Dependiendo del valor de t se establece que si $t > 0$ las raíces son reales, si $t = 0$ las raíces son reales y repetidas y si $t < 0$ las raíces son complejas.

Las raíces se calculan como

$$x_1 = \sqrt{t} - s$$

$$x_2 = -\sqrt{t} - s$$

Ejemplo 1.5 Emplear el método de Newton – Raphson para determinar la raíz de $f(x) = exp(-x) - x$ empleando el valor inicial X = 0

Solución

La derivada es: : $f'(x) = -\exp(-x) - 1$

Sustituyendo

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

Iniciando con el valor Xo = 0, podemos aplicar la ecuación iterativa para evaluar.

Iteración, n	X
0	0
1	0.5000000
2	0.566311
3	0.567143165
4	0.567143290

De esta forma, el planteamiento converge rápidamente a la raíz real. Un análisis sistemático del error cometido en una aproximación por el método de Newton – Raphson presenta mayores dificultades que para el método de bisección. Sin embargo, existe una regla de uso simple, que nos dice que, si desea emplear el método de Newton – Raphson para aproximar una raíz hasta un número dado de cifras decimales, redondee todos los cálculos a una cifra decimal más y deténgase cuando no haya cambio de una aproximación a la siguiente.

1.4 MÉTODO DE PUNTO FIJO

Este método también recibe el nombre de Método de aproximaciones sucesivas. Consiste en arreglar la función de tal forma que la variable x quede del lado izquierdo de la ecuación. Esto es,

$$x = g(x) \tag{1}$$

La solución que se propone se basa en el hecho de que el valor de x calculado hace que la función sea cero. Al despejar la variable x de la función original f(x) se genera otra función g(x) de la cual se despeja x. Esto es,

Sea $f(x) = -x^3 + 2x^2 - x + 3$ una ecuación algebraica o trascendente, se pueden establecer tres funciones equivalentes:

$$g_1(x) = x = -x^3 + 2x^2 + 3$$

$$g_2(x) = x = \sqrt[2]{\frac{x^3 + x - 3}{2}}$$

$$g_3(x) = x = (2x^2 - x + 3)^{1/3}$$

donde x = A sea una raíz de ella. En consecuencia:

$$f(A) = 0 \text{ y } g(A) = x \tag{2}$$

Por lo tanto: la raíz de g(x) también es de f(x) (3)

Cualquier ecuación puede expresarse en la forma (1), siguiendo un proceso similar. Ahora, se debe evaluar con un valor inicial de x0 para cada función g(x) equivalente, y utilizando el nuevo valor calculado, repetir el cálculo hasta hallar la solución o convergencia de ella.

Si conforme *n* crece, x_n tiende a la raíz A, se dice que el método converge; en caso contrario, se dice que diverge.

Con ayuda de Excel se evalúan las tres propuestas con un valor inicial de x = 1.

Opción 1) $g1(x) = -x^3 + 2x^2 + 3$

Después de los primeros tres cálculos se observa que la propuesta diverge, es decir, se aleja de la solución.

n	x	g1(x)	f(x)
1	1	4	3
2	4	-29	-33
3	-29	26074	26103

Opción 2) $g2(x) = \sqrt[2]{\frac{x^3+x-3}{2}}$

Después del primer cálculo se observa que se produce un valor complejo al evaluar el discriminante negativo. Por tanto, tampoco es útil como propuesta de solución en los números reales. Utilizando como valor inicial a x = 3 se observa que no hay convergencia.

n	x	g2(x)	f(x)
1	3	3.6742	-3
2	3.6742	5.0138	-77.77
3	5.0138	8.0016	-389.25

Opción 3) $g3(x) = (2x^2 - x + 3)^{1/3}$

Después de cinco iteraciones se observa que la función se aproxima a cero y con ello la solución converge.

N	x	g3(x)	f(x)
1	1	1.58740105	-3
2	1.58740105	1.8616776	-2.45228315
3	1.8616776	2.00581718	-1.6177262
4	2.00581718	2.08322139	-0.97077856
5	2.08322139	2.12505154	-0.55561345
6	2.12505154	2.14770887	-0.3102352
7	2.14770887	2.15999299	-0.17096133

N	x	g3(x)	f(x)
8	2.15999299	2.16665603	-0.09354856
9	2.16665603	2.17027092	-0.0509942
10	2.17027092	2.17223232	-0.02774015

Luego de 15 iteraciones se puede establecer que una raíz está muy cerca de A = 2.1745

Comparando las expresiones dadas puede afirmarse que, si el método converge, la diferencia entre dos iteraciones sucesivas será cada vez más pequeña a medida que *n* aumenta, lo que proporciona un criterio de finalización de aplicación del método.

Ejemplo 1.6 Emplear iteración de punto fijo para localizar la raíz de

$$f(x) = exp(-x) - x = 0$$

Solución. Como describíamos, arreglamos la ecuación de tal forma que x quede del lado izquierdo de la ecuación

Aplicando (1), $x = exp(-x)$

Por lo tanto, la forma iterativa correspondiente es: $x_{n+1} = exp(-x_n)$

Comenzando con un valor inicial de x = 0, aplicamos la fórmula iterativa y evaluamos.

n	x	g(x)	f(x)
1	0	1	1
2	1	0.36787944	-0.63212056
3	0.36787944	0.69220063	0.32432119
4	0.69220063	0.5004735	-0.19172713
5	0.5004735	0.60624354	0.10577003
6	0.60624354	0.54539579	-0.06084775
7	0.54539579	0.57961234	0.03421655
8	0.57961234	0.56011546	-0.01949687
9	0.56011546	0.57114312	0.01102765
10	0.57114312	0.56487935	-0.00626377

A partir de la octava iteración se observa que la solución oscila entre 0.56 y 0.57, se tomara como solución cuando x = 0.5711

1.5 MÉTODO DE LA SECANTE

El principal problema al emplear el método de Newton – Raphson es que puede resultar difícil evaluar o hallar la derivada de la función. Cuando la función es polinomial, no hay dificultad y se opta más por utilizar el método de Newton.

Para otros casos, se recomienda utilizar el método de la secante que sustituye la derivada de la función con la siguiente aproximación.

$$f'(x) \approx \frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1}$$

Esta aproximación se puede sustituir en la fórmula de Newton para obtener la ecuación iterativa:

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)(x_2 - x_1)}{f(x_2) - f(x_1)}$$

Con el nuevo valor calculado de x se recorren cada equis y se vuelve a calcular la nueva aproximación. Esto es, x1 = x2 y x2 = x3. Gráficamente los puntos P y Q representan los puntos de la secante.

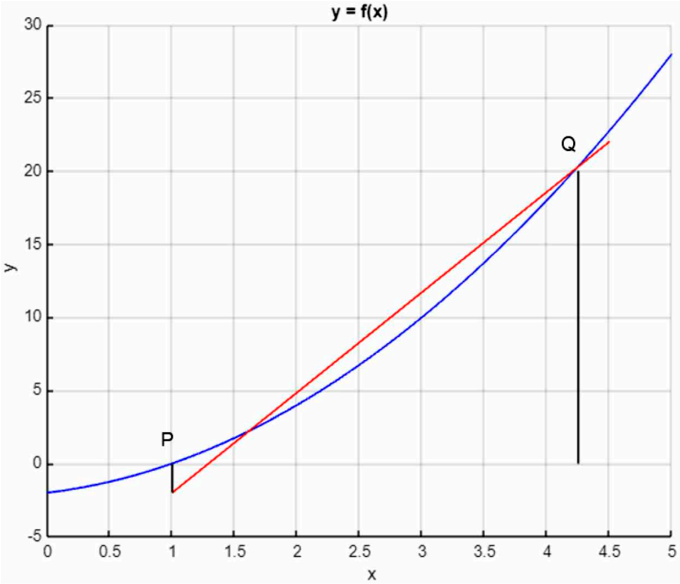


FIGURA 7. Recta secante de aproximación.

La ecuación resultante es la fórmula para el MÉTODO DE LA SECANTE. Ahora, en este método se requiere de dos valores iniciales en o cerca de un cambio de signo de la función para hallar más rápido la solución. Aunque, no se necesita que f(x) cambie de signo entre estos valores, si hay convergencia se llegará a la solución independientemente del intervalo de inicio, pero con un mayor número de cálculos.

Ejemplo 1.7 Emplear el método de la secante para determinar la raíz de

$$f(x) = exp(-x) - x = 0$$

Solución. Recordemos que la raíz real calculada anteriormente es 0.56714329, por lo que empezar los cálculos con los valores iniciales de x1 = 0 y x2 = 1.

Aplicando el método de la secante requiere la fórmula

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)(x_2 - x_1)}{f(x_2) - f(x_1)}$$

definiendo p(x) como el cociente

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

la fórmula queda como

$$x_3 = x_2 - p(x)$$

Primera iteración

x1 = 0, fx1 = 1, x2 = 1, fx2 = – 0.6321

Notar que las dos aproximaciones iniciales tienen valores opuestos, por lo tanto, la raíz se encuentre ellos.

$$p(x) = \frac{-0.6321(1 - 0)}{-0.6321 - 1} = 0.3873$$

$$x_3 = x_2 - p(x) = 1 - 0.3873 = 0.61269$$

Se evalúa la función en esta nueva aproximación y se determina si es cero la función.

$$f(0.61269) = \exp(-0.61269) - 0.61269 = -0.07081$$

Es muy cercano a cero, pero se realizará otro cálculo para mayor precisión.

Se reasignan valores, x1 = x2 y x2 = x3

Segunda iteración

x1 = 1, f(x1) = – 0.6321, x2 = 0.61269, f(x2) = – 0.07081

$$p(x) = \frac{-0.07081\ (0.61269 - 1)}{-0.07081 + 0.6321} = 0.04886$$

$$x_3 = x_2 - p(x) = 0.61269 - 0.4886 = 0.56383$$

$$f(0.56383) = \exp(-0.56383) - 0.56383 = 0.00518$$

Con lo cual hemos terminado, debido a que la función evaluada es muy próxima a cero. Más cálculos o iteraciones se muestran en la siguiente tabla.

n	x1	f1(x)	x2	f2(x)	p(x)	x3	f2(x)
1	0	1	1	-0.6321	0.3873	0.61269	- 0.0708
2	1	- 0.6321	0.61269	-0.0708	0.0488	0.56383	0.0051
3	0.61269	- 0.0708	0.56383	0.0051	- 0.0033	0.56717	- 4.2E-05
4	0.56383	0.0051	0.56717	- 4.2E-05	2.7E-05	0.56714	- 2.5E-08
5	0.56717	- 4.2E-05	0.56714	- 2.5E-08	1.6E-08	0.56714	1.2E-13
6	0.56714	- 2.5E-08	0.56714	1.2E-13	- 7.9E-14	0.56714	0

Por lo general, el método de la secante necesita unos cuantos pasos más que el de Newton – Raphson, pero ya que sólo es necesario calcular f(x) y no f ‘(x) en cada paso, con frecuencia el método puede resultar más económico en términos de tiempo de computadora.

Tiene las mismas desventajas que el método de Newton – Raphson en el sentido de que no es posible garantizar la convergencia a una raíz, específica, pero, sin embargo, es un poderoso método de aplicación general.

1.6 MÉTODO DE FALSA POSICIÓN

El método de la bisección explicado anteriormente es fácil de utilizar y tiene un error de análisis sencillo de medir, sin embargo, no es muy eficiente. Para la mayoría de las funciones, se puede mejorar con otra fórmula la tasa o rapidez a la cual converge a la raíz. Uno de tales métodos, es el método de falsa posición o regla falsa, en donde se combina el método de bisección con el método de la secante.

Supongamos que la función es lineal sobre el intervalo (x_1, x_2) de donde $f(x_1)$ y $f(x_2)$ son de signo opuesto.

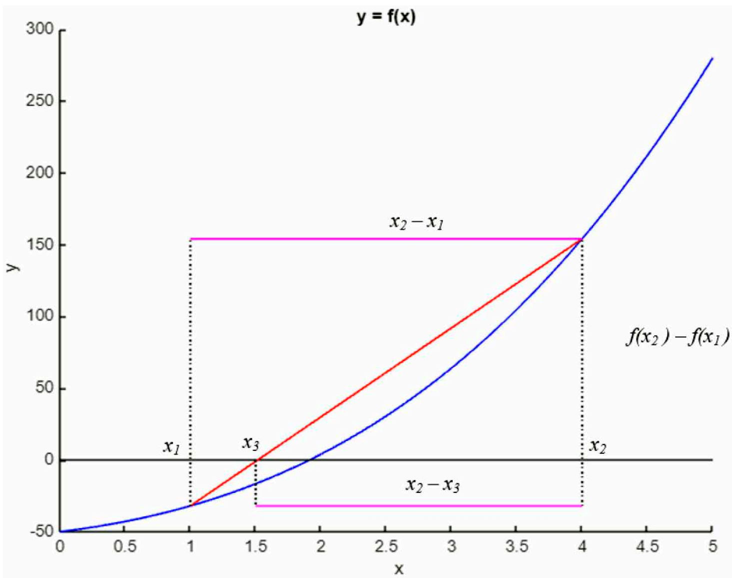


FIGURA 8. Aproximación lineal.

De la figura 8 se aprecian dos triángulos semejantes, de ellos se puede escribir.

$$\frac{x_2 - x_3}{x_2 - x_1} = \frac{f(x_2)}{f(x_2) - f(x_1)}$$

La línea que une $f(x_1)$ con $f(x\ )$ tiene la forma de la recta $y = mx + b$

Definiendo m como la pendiente

$$m = \frac{f(x2)}{x2 - x3} = \frac{f(x2) - f(x1)}{x2 - x1}$$

Resolviendo para x3

$$x2 - x3 = \frac{f(x2)}{m}$$

$$x3 = x2 - \frac{f(x2)}{m} = x2 - \frac{f(x2)(x2 - x1)}{f(x2) - f(x1)}$$

Por lo tanto, la nueva aproximación a la raíz es

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)(x_2 - x_1)}{f(x_2) - f(x_1)}$$

Entonces calculamos f(x_3) y si el valor no es cero, de nuevo interpolamos linealmente los valores entre los cuales la función cambia de signo dando un nuevo valor para x_3. La repetición de esto dará estimados mejorados de la raíz.

Después de varias iteraciones la recta de aproximación se va acercando a la solución como lo muestra la figura 9 siguiente.

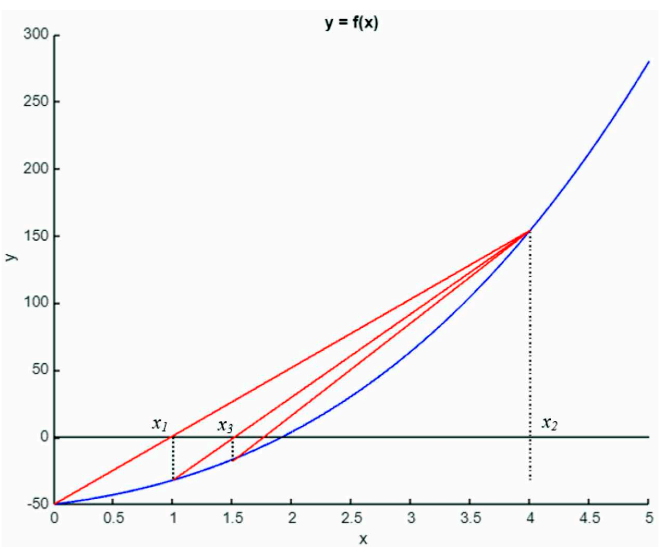


FIGURA 9. Aproximaciones sucesivas a la raíz.

Ejemplo 1.8 Hallar la solución para la función

$$x^3 - 10x^2 + 29x - 28$$

Solución. Explorando un cambio de signo en la función se aprecia que entre 5 y 6 hay un cero de la función.

x	0	1	2	3	4	5	6	7
$f(x)$	– 28	– 8	– 2	– 4	– 8	– 8	2	28

Se utilizará como valor inicial x1 = 5 y x2 = 6.

definamos

$$p(x) = \frac{f(x2)(x2 - x1)}{fx2 - fx1} = \frac{2(6-5)}{2+8} = 0.2$$

Primera iteración.

$$x3 = x2 - p(x) = 6 - 0.2 = 5.8$$

$$f(\text{x}3) = (5.8)^3 - 10(5.8)^2 + 29(5.8) - 28 = -1.088$$

Segunda iteración

$$x1 = 5.8, f(x1) = -1.088, x2 = 6, f(x2) = 2;$$

$$p(x) = \frac{f(x2)(x2 - x1)}{fx2 - fx1} = \frac{2(6-5)}{2+8} = 0.2$$

$$\text{x}3 = \text{x}2 - p(x) = 6 - 0.12953 = 5.87$$

$$p(x) = \frac{f(x2)(x2 - x1)}{fx2 - fx1} = \frac{2(6-5.8)}{2+1.088} = 0.12953$$

El método de la Interpolación lineal es algo más rápido que el método de la bisección de intervalos, obteniéndose la misma precisión después de tres iteraciones.

Una fórmula equivalente para la regla falsa es la siguiente.

$$x3 = \frac{f(x1)x2 - f(x2)x1}{f(x1) - f(x2)}$$

Se muestran los cálculos

n	x1	f1(x)	x2	f2(x)	x3	f3(x)
1	5	– 8	6	2	5.8	– 1.088
2	5.8	– 1.088	6	2	5.87	– 0.070
3	5.87	– 0.070	6	2	5.8748	– 0.004
4	5.8748	– 0.004	6	2	5.8751	– 0.002
5	5.8751	– 0.002	6	2	5.8751	– 0.002

Ejemplo 1.9. Utilizando la regla falsa encuentre la solución de la función.

$$f(x) = x^3 + x^2 - 3x - 3 = 0$$

Solución. Explorando cambio de signo de la función. Se encuentra que entre 1 y 2 hay una raíz.

x	0	1	2	3
fx	– 3	– 4	3	24

Aplicando la fórmula

$$x3 = \frac{f(x1)x2 - f(x2)x1}{f(x1) - f(x2)}$$

Después de cinco cálculos se obtiene la solución. La solución o raíz es x = 1.73195

n	x1	$f1(x)$	x2	$f2(x)$	x3	$f3(x)$
1	1	-4	2	3	1.57142	-1.3644
2	1.57142	-1.3644	2	3	1.70541	-0.2477
3	1.70541	-0.2477	2	3	1.72788	-0.0393
4	1.72788	-0.0393	2	3	1.73140	-0.0061
5	1.73140	-0.0061	2	3	1.73195	-0.0009

Ejemplo 1.10. Halle la raíz de la función

$$x^3 - 10x^2 + 29x - 28$$

Solución. Se empleará un código de programación en Matlab para la solución.

```
clear
clc
x1=0
x2=10
f = @(x) x.^3-10*x.^2+29*x-28
x=x1:0.1:x2;
plot(x,f(x),'b')
grid on
axis([-1 8 -10 10])
k=0
while k<100
    x3=x2-((x2-x1)/(f(x2)-f(x1)))*f(x2)
    if abs(f(x3))<0.01
        fprintf ('Una raiz en %f ',x3)
        break
    end
    k=k+1
      if f(x1)*f(x3)<0
                      x2=x3
      else
                      x1=x3
      end
end
```

Después de 65 iteraciones encuentra que la solución esta en x3 = 5.8746

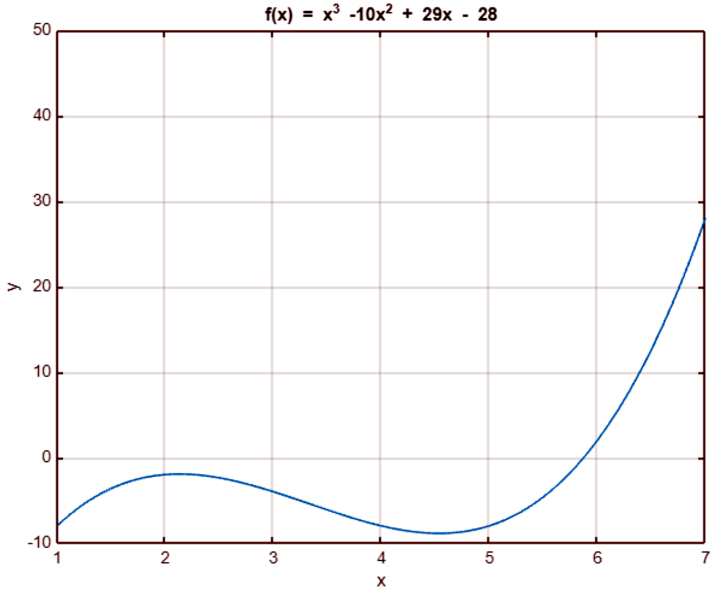


FIGURA 10. Trazo de la función cúbica.

1.7 MÉTODO DE MÜLLER

Los métodos considerados hasta aquí, en la búsqueda de la solución con raíces complejas, no están tan especializados como el método de Müller. Es verdad que el método de Newton trabaja satisfactoriamente siempre y cuando se comience con una estimación inicial que sea un valor complejo, pero cuando se realizan los trabajos con Excel, las operaciones se complican. No hay problema en un programa de computadora si existe aritmética compleja, pero la ejecución es más lenta. El método de Müller es usado para hallar tanto raíces reales como raíces complejas.

El algoritmo del método de Müller parte de tres valores iniciales, espaciados preferentemente a la misma distancia, puede o no contener la raíz o cambio de signo de la función.

Sea f(x) un polinomio.

1 Suponer 3 valores cercanos a la raíz; sean $x1$, $x2$ y $x3$ esos tres valores.

2 Evaluar $f(x1)$, $f(x2)$, $f(x3)$

3 Calcular $h1 = x2 - x1$, $h2 = x3 - x2$

4 Calcular

$$d1 = \frac{f(x2) - f(x1)}{h1}$$
$$d2 = \frac{f(x3) - f(x2)}{h2}$$

5 Calcular los coeficientes A, B, C de la parábola: $f(x) = Ax^2 + Bx + C$ con

$$A = (d2 - d1) / (h2 + h1)$$

$$B = A * h2 + d2$$

$$C = f(x3)$$

6 Calcular D: $D = \sqrt{B^2 - 4AC}$

7 Calcular D1 y D2; $D1 = B + D$, $D2 = B - D$

8 Tomar el valor mayor entre D1 y D2 (sea E ese valor),

$$E = \max(D1, D2)$$

entonces calcular el nuevo punto de aproximación

$$x4 = x3 - \frac{2C}{E}$$

9. Evaluar

a) si $f(x4) = 0$ entonces x_4 es la raíz buscada.

b) si $f(x4) \neq 0$ hacer x1 = x2, x2=x3, x3 = x4. Repetir todo el proceso hasta que la función sea muy cercana a cero o a una tolerancia establecida.

$$|f(x)| \leq tolerancia$$

Para facilitar los cálculos se recurre a la programación de Matlab.

```
f=inline('x^3-x-1')
x1 = 1
x2 = 2
x3 = 3
f1 = f(x1)
f2 = f(x2)
f3 = f(x3)
for i=1:5
h1 = x2 - x1;
h2 = x3 - x2;
d1 = (f(x2) - f(x1)) / h1;
d2 = (f(x3) - f(x2)) / h2;
A = (d2 - d1) / (h2 + h1);
B = A * h2 + d2;
C = f(x3);
raiz =sqrt(B * B - 4.0 * A * C);
   if (abs(B + raiz) > (B - raiz))
        d = B + raiz;
      else
        d = B - raiz;
   end
x4 = x3 - 2*C/d;
fprintf("\n x = " + x4 + " f(x) = " + f(x4));
      x1 = x2;
      x2 = x3;
      x3 = x4;
end
```

Ejemplo 1.11. Sea $f(x) = x^3 - x - 1$, error = 0.001

Esta función tiene una raíz real en el intervalo $x \in [1, 2]$, como se puede observar en la figura 11.

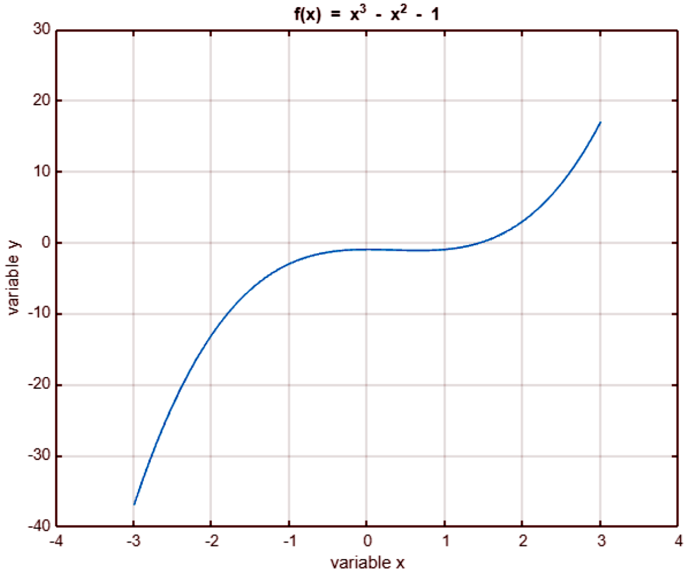


FIGURA 11. Trazo de la función cúbica.

Solución

Primera iteración.

1. $x_1 = 1$, $x_2 = 2$, $x_3 = 3$

2. $f(x_1) = -1$, $f(x_2) = 5$, $f(x_3) = 23$

3. $h_1 = 1$, $h_2 = 1$

4. d1 = 6, d2 = 18

5. A = 6, B = 24, C = 23

6. D = 4.899

7. $d_1 = 1.73205$, $d_2 = 1.73205$, por lo tanto, d = 28.899

8. $x_4 = 1.4082$

9. $f(x_4) = 0.38454$, como es diferente de cero y $f(x) > 0.001$ se recalcula con $x_1 = 2$, $x_2 = 3$, $x_3 = 1.4082$

<u>En la segunda Iteración.</u> $x_4 = 1.2899$, $f(x_4) = -0.14372$

se continua con otro calculo.

$x_1 = 3$, $x_2 = 1.4082$, $x_3 = 1.2899$

<u>Tercera Iteración</u>

En la tercera iteración $x_4 = 1.3259$, $f(x_4) = 0.0049$

La solución real está en $x = 1.3259$

Ejemplo 1.12. Encuentre la raíz de la función $f(x) = x^4 + 5x^2 + 6$

Solución. Al graficar la función se aprecia que no existe solución real, y las raíces son complejas.

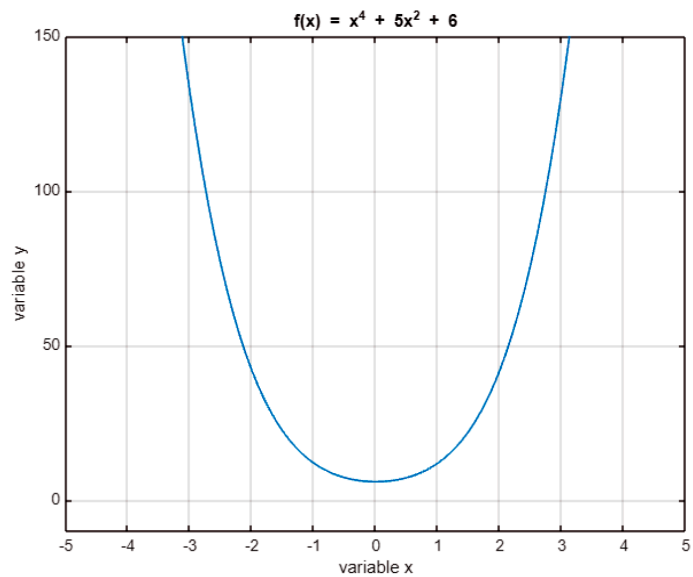


FIGURA 12. Trazo de la función cuártica

Utilizando el comando roots de Matlab se encuentran las cuatro raíces.

```
roots([1 0 5 0 6])
ans =
   -0.0000 + 1.7321i
   -0.0000 - 1.7321i
   -0.0000 + 1.4142i
   -0.0000 - 1.4142i
```

Una alternativa para hallar las raíces del polinomio es, con un cambio de variable adecuado:

$u = x^2$, $u^2 = x^4$, $u^2 + 5u + 6 = 0$ las raíces son:

$$r_1 = \sqrt{2}i, \quad r_2 = -\sqrt{2}i, \quad r_3 = \sqrt{3}i, \quad r_4 = -\sqrt{3}i$$

que coinciden con las halladas con roots.

Haciendo uso del algoritmo de Müller:

```
clear;clc;format compact;
f=inline('x.^4+5*x.^2+6')
x1 = i
x2 = 0
x3 = -i
f1 = f(x1)
f2 = f(x2)
f3 = f(x3)
for i=1:5
h1 = x2 - x1
h2 = x3 - x2
d1 = (f(x2) - f(x1)) / h1
d2 = (f(x3) - f(x2)) / h2
A = (d2 - d1) / (h2 + h1)
B = A * h2 + d2
C = f(x3)
raiz =sqrt(B * B - 4.0 * A * C)
   if (abs(B + raiz) > (B - raiz))
        d = B + raiz
      else
        d = B - raiz
   end
x4 = x3 - 2*C/d
fprintf("\n x = " + x4 + " f(x) = " + f(x4));
      x1 = x2
      x2 = x3
      x3 = x4
end
```

Los cálculos son:

1. $x_1 = -i$, $x_2 = 0$, $x_3 = i$
2. $f(x_1) = 2$, $f(x_2) = 6$, $f(x_3)= 2$
3. $h_1 = i$, $h_2 = i$
4. $d_1 = -4i$, $d_2 = 4i$
5. $A = 4$, $B = 8i$, $C = 2$
6. $d = 1.798\ i$
7. $x_4 = 1.224\ i$
8. $f(x_4) = 0.75$, como es diferente de cero. La segunda iteración es:

$x_1 = 0$, $x_2 = -i$, $x_3 = 1.224\ i$

La nueva aproximación es $x_4 = 1.3067\ i$ y $f(x4) = 0.3782$

Se sugiere utilizar el algoritmo código de programación Matlab y comprobar.

Las otras iteraciones son:

```
x4 = 0.0000 + 1.3852i, f(x) = 0.087707
x4 = 0.0000 + 1.4132i, f(x) = 0.0029862
x4 = 0.0000 + 1.4142i, f(x) = 1.7997e-05
```

1.8 PROBLEMAS UNIDAD I

1. Hallar la raíz de las siguientes ecuaciones por el método de la bisección utilizando un error de 0.001.

   a) $x = sen\ x + 1$

   b) $x = e^{-x}$; entre 0.5 y ln 2

   c) $2 + \cos(ex - 2) - e^x = 0$, entre 0.5 y 1.5

2. Usar el método de la Falsa posición para aproximar una solución de cada una de las siguientes ecuaciones (usar un error, e = 0.001)

   a) $x = (x + 1)^3$

   b) $x^3 = 5 - x$

   c) $x = \cos x$

   d) $f(x) = -x^3 - \cos x = 0$, usando $x = -1$

3. Resolver los siguientes problemas por el método de la secante, usando e = 0.005

   a) $x^2 = 2 \ln(x + 1)$

   b) $x^2 = e^x + 2$

   c) $x = \frac{1}{10} \, sen\, x + 1$

   d) $x^3 = -\frac{1}{2}x + 2$

4. La función $f(x) = \tan \pi x - 6$ tiene un cero en $(1/\pi)$ *arctan* $6 \approx 0.4474$. Sean x1 = 0 y x2 = 0.48, use diez iteraciones de cada uno de los siguientes métodos para aproximar esta raíz. ¿Cuál de ellos es más eficaz y por qué?

   a) Método de la bisección.

   b) Método de la regla falsa

   c) Método de la secante

5. Utilizar el método de punto fijo para hallar una raíz de las siguientes ecuaciones, usando e = 0.005.

   a) $sen\, x = 1 - x$

   b) $\sqrt{1 - x} = 3 + x$

   c) $x^2 = \cot x$, entre 0 y π

   d) $\sqrt{1 - x} = 3 + x$

   e) $1 - x^2 = \tan(x)$, entre 0 y $\pi/2$

6. Utilizar el método de Newton- Raphson para hallar una raíz del polinomio:

$$f(x) = 2x^3 - 11.7x^2 + 17.7x - 5$$

iniciando con x = – 1 y usando (e = 0.0001)

7. Hallar una raíz de las siguientes ecuaciones con el método de Newton-Raphson, usando e = 0.0001.

a) $sen(2x) = x^2 - 3x - 8$

b) $x = e - x$

8. Determine la raíz real más grande de:

$$f(x) = 2x^3 - 11.7x^2 + 17.7x - 5$$

con el método de Newton-Raphson (x = 3, e = 0.001).

9. Resuelva la siguiente ecuación utilizando el método de Newton-Raphson, usando e = 0.001.

$$e^x + 2^{-x} + 2\cos x - 6 = 0$$

10. Resolver los siguientes problemas con el método de Müller:

a) $f(x) = x^4 - 40x^3 + 487x^2 - 1632x - 2016$,

con x1 = 2, x2 = 4, x3=6

b) $f(x) = 16x^4 - 40x^3 + 5x^2 + 20x + 6$,

con x1 = 1, x2 = 2, x3 = 3

c) $f(x) = x^3 - 13x - 12$,

con x1 = 4.5, x2 = 5.5, x3 = 5

d) $f(x) = 2x^3 + 4x^2 - 2x - 5$,

con x1 = –1, x2 = 0, x3 = 1

Respuestas a problemas

1. a) 1.9345 b) 0.5671 c) 1.007624
2. a) 2.3247 b) 1.51598 c) 0.73908 d) −0.86547
3. a) 0, 1.2858 b) −1.4916 c) 1.0886 d) 1.12817
4. El método de la secante es más adecuado
5. a) 0.51097 b) −1.43284 c) 0.8952 d) 0.7429 e) 0.5833
6. −0.6702
7. a) 4.7041, −1.7582 b) 0.5671
8. 0.3651, 1.92174, 3.5631
9. 1.82936
10. a) −1, 9, 12, 20 b) 1.2417, 1.9704 c) −1, 4, −3
    d) −1.7627, −1.3155, 1.0781

1.9 PROBLEMAS DE APLICACIÓN 1

Problema 1. La velocidad (v) de un paracaidista que cae está dada por:

$$v = \frac{gm}{c}\left(1 - e^{-\left(\frac{c}{m}\right)t}\right)$$

donde g = 9.8 m/s^2. Para un paracaidista con coeficiente de arrastre de c = 15 kg/s, calcule la masa (m) de modo que la velocidad sea v = 35 m/s en t = 9s. Utilice cualquier método para determinar m con un nivel de error de 0.1%.

Resp: m= 59.75 kg

Problema 2. La siguiente ecuación permite calcular la concentración de una sustancia en un reactor químico donde se tiene una mezcla completa:

$$c = c_{ent}(1 - e^{-0.04t}) + c_0 e^{-0.04t}$$

si la concentración inicial es $c_o = 5$ y la concentración de entrada es $c_{ent} = 12$, calcule el tiempo requerido para que c sea el 85% de c_{ent}.

Resp. 33.9

Problema 3. Se quiere elaborar una caja sin tapa a partir de una hoja de cartón cuyas dimensiones son 20 in por 30 in, cortando cuadrados, de área x^2, en cada esquina doblando hacia arriba los lados. ¿Cuánto debe medir el lado, x de los cuadrados? Demuestre que se pueden diseñar dos cajas de diferentes dimensiones que tengan 1000 in^3. ¿Cuál de las dos cajas tienen la menor área superficial?

x1= 5 in, x2= 2.92 in

Amin(x=5 in)=500 in^2 **Amáx(2.92 in)=579 in^2**

Problema 4. Calcule el volumen molar de un gas mediante la ecuación de Van der Waals:

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{V^2}$$

donde P es la presión, V es el volumen molar, T es la temperatura, y **a** y **b** son las constantes. Si P = 3 atm, T = 300 K, R = 0.08205 atm L/gmol K, b = 1.98 l/gmol, a = 2.71 atm-l^2/$gmol^2$. Para facilitar la solución se recomienda establecer la función en términos del volumen. Esto es,

$$P = \frac{RTV^2 - \mathrm{a}(V-b)}{(V-b)V^2} = \frac{RTV^2 - \mathrm{a}V + ab}{V^3 - V^2}$$

$$PV^3 - PV^2 - RTV^2 + aV - ab = 0$$

$$V^3 - \left(b + \frac{RT}{P}\right)V^2 + \frac{\mathrm{a}V}{P} - \frac{\mathrm{a}b}{P}$$

Para determinar las constantes a y b para cualquier gas, se recurre a las propiedades críticas del gas.

$$\mathrm{a} = \frac{27}{64}\left(\frac{RT_c}{P_c}\right) \qquad b = \frac{RT_c}{8\,P_c}$$

El valor inicial se puede aproximar con el calculado por el volumen ideal

$$V = \frac{RT}{P} = \frac{0.08205(300)}{3} = 8.205\ L/gmol$$

Resp. 10.11 litros

Problema 5. Con las mismas condiciones (variables) del problema anterior, hallar el volumen molar para las diferentes ecuaciones de estado. Usar cualquier método numérico. e = 0.01

a) Redlich-Kwong

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{\mathrm{a}}{V(V+b)\sqrt{T}}$$

Se sugiere utilizar la ecuación cúbica para el volumen

$$V^3 - \frac{RT}{P}V^2 + \left(\frac{\mathrm{a}}{P\sqrt{T}} - b^2 - \frac{RTb}{P}\right)V - \frac{\mathrm{a}b}{P\sqrt{T}}$$

Resp. 10.18 litros/mol

b) Soave

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{\mathrm{a}\,\alpha}{V(V+b)}$$

Se sugiere utilizar la ecuación cúbica para el volumen

$$V^3 - \frac{RT}{P}V^2 + \left(\frac{\mathrm{a}\,\alpha}{P} - b^2 - \frac{RTb}{P}\right)V - \frac{\mathrm{a}\,\alpha\, b}{P}$$

considerar a constante = 0.5

Resp. 10.15 litros/mol

c) Pen-Robinson

$$P = \frac{RT}{V-b} - \frac{\text{a } \alpha}{V^2 + 2bV - b^2}$$

Se sugiere utilizar la ecuación cúbica para el volumen

$$V^3 + \left(b - \frac{RT}{P}\right)V^2 + \left(\frac{\text{a } \alpha}{P} - 3b^2 - \frac{2RTb}{P}\right)V + b^3 + \frac{RT}{P}b^2 - \frac{\text{a } \alpha\, b}{P}$$

considerar a constante = 0.8

Resp. 10.14 litros/mol

Problema 6. El factor de compresibilidad para el metano está dado por la ecuación

$$Z = 1 + BP + CP^2 + DP^3$$

P está en atmósferas, los valores de las constantes son:

T(K)	B	C	D
200	$-5.74\text{x}10^{-3}$	$6.86\text{ x}10^{-6}$	$180\text{ x}10^{-9}$
1000	$0.189\text{ x}10^{-3}$	$0.275\text{ x}10^{-6}$	$0.144\text{ x}10^{-9}$

a) Si Z = 8, para T = 200 K, hallar la presión.

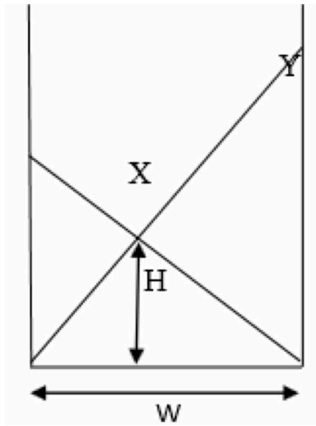
b) Si para Z = 1.3, y T = 1000 K, hallar P.

Usar cualquier método.

Resp. a) P=356 atm.

Resp. b) P=678 atm.

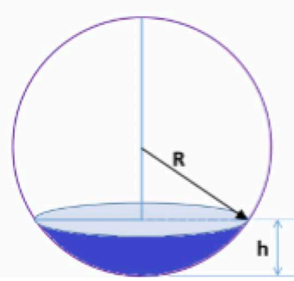
Problema 7. Dos escaleras se cruzan en un pasillo de ancho W. Cada una llega de la base de un muro a un punto en el muro de en frente. Las escaleras se cruzan a una altura H del pavimento. Dado que las longitudes de las escaleras son x = 20 ft y y = 30 ft y que H = 10 ft, calcular W.



Resp. 13.1 ft

Problema 8. Un ingeniero químico está diseñando un tanque esférico de almacenamiento de un poblado pequeño. El volumen, V (ft^3), del líquido que puede contener se calcula con:

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



R es el radio del tanque (ft), y h es la profundidad del agua en el tanque (ft).

Si R = 3 m ¿A qué profundidad, h, debe llenarse el tanque de modo que contenga 30 m^3?

Resp. 1.05 ft

Problema 9. El balance de masa de un cierto contaminante en un lago bien mezclado, se expresa así:

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

Resolviendo la ecuación diferencial se encuentra que: $c = \frac{W - k\,V\,\sqrt{c}}{Q}$

Dados los valores de parámetros: V = 1x10^6 m^3, Q=1x10^5 m^3/año y W=1x10^6 g/año y k=0.25 m$^{0.5}$/año, hallar la concentración, c, en estado estable, emplear el valor inicial c = 4 g/m^3, error = 0.5

Resp. 4.624

Problema 10. Determine la temperatura de burbuja a 10 atm de presión total de una mezcla cuya composición en fase líquida es: 45% mol de n-butano, 30% mol de n-pentano y 25% mol de n-hexano. Los valores de Ki a 10 atm son:

n-butano	$-0.17809 + 1.2479 \cdot 10^{-2}\, T + 3.37159 \cdot 10^{-5}\, T^2$
n-pentano	$0.13162 - 1.9367 \cdot 10^{-3}\, T + 7.1373 \cdot 10^{-5}\, T^2$
n-hexano	$0.13985 - 3.869 \cdot 10^{-3}\, T + 5.5604 \cdot 10^{-5}\, T^2$

Para el cálculo utilice la ecuación

$$f(T) = \sum_{1}^{3} K_i x_i - 1 = 0$$

Resp. T = 105.3 °C

UNIDAD 2
Sistema de ecuaciones lineales y no lineales

Entre los principales objetivos del análisis numérico está el determinar la solución de los sistemas de ecuaciones lineales; esto, debido a que en muchos problemas en la ingeniería química se reducen a un conjunto de dichas ecuaciones.

Los sistemas lineales pueden resolverse por medio de métodos exactos y de aproximaciones sucesivas.

A diferencia de la unidad anterior, en donde determinamos el valor de x que satisface a una sola ecuación , ahora se trata de hallar los valores X1, X2… Xn que satisfagan simultáneamente un conjunto de ecuaciones. Tales sistemas pueden ser tanto lineales como no lineales.

DEFINICIÓN

Un sistema de **m** ecuaciones lineales de **n** incógnitas x1, x2, ….xn es un conjunto de ecuaciones de la forma

$$
\begin{array}{lcl}
a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 + \cdots + a_{1n} x_n & = & b_1 \\
a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + a_{23} x_3 + \cdots + a_{2n} x_n & = & b_2 \\
\vdots & \vdots & \vdots \\
a_{m1} x_1 + a_{m2} x_2 + a_{m3} x_3 + \cdots + a_{mn} x_n & = & b_m
\end{array}
$$

donde los coeficientes a_{ij} y b_i pertenecen al conjunto de los números reales y son números dados. El sistema recibe el nombre de homogéneo cuando las constantes b_i son todas cero, de lo contrario se dice que no es homogéneo.

$2x - 3y + z = 6$	$x - y + z = 0$
$-x - y - z = 4$	$-x - 2y - z = 0$
$x + 2y - 2z = -5$	$2x + y + 3z = 0$
Sistema no homogéneo	Sistema homogéneo

Si consideramos un sistema de ecuaciones lineales, como los mostrados anteriormente, entonces la expresión del sistema de ecuaciones se puede escribir en forma matricial.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots a_{2n} \\ & & \vdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & a_{m3} & \cdots a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$$

O bien: AX = b

La matriz A se llama la matriz de los coeficientes del sistema para tres o más ecuaciones, la matriz X representa el vector de variables o incógnitas, y b representa al vector de términos independientes. La solución de estos sistemas se complica conforme aumenta el número de variables. En la mayoría de los casos se debe recurrir a programas de computadora para resolverlos.

En esta unidad se describen los métodos de solución para sistemas lineales.

Solución sistemas lineales

- Método de Cramer
- Método de Gauss
- Método de Gauss – Jordan
- Método de Gauss – Seidel
- Método Gauss – Zamora

Solución sistemas no lineales

- Método de Newton multivariable
- Método de Broyden

2.1 MÉTODO DE CRAMER

El método clásico para resolver un sistema de 2x2, dos ecuaciones con dos incógnitas, es el método de Cramer. Este consiste en resolver el sistema con ayuda de tres determinantes.

Determinante

Un determinante de una matriz es el valor escalar de multiplicar los elementos en diagonal de la matriz y restarle los elementos de la diagonal invertida. Esto es, para un arreglo de 2x2 se tiene cuatro elementos ordenados en 2 columnas y 2 renglones con la siguiente posición.

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}$$

La matriz A tiene cuatro elementos ordenados en dos renglones y dos columnas. Al ser una matriz cuadrada, se puede calcular su determinante como

$$d = \det(A) = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}$$

Asignando valores a cada elemento de A el resultado del determinante es

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 1 \\ 3 & -1 \end{bmatrix} \quad d = \det(A) = (5)(-1) - (3)(1) = -5 - 3 = -8$$

La expresión matemática de dos variables es

$$5x + y = 7$$
$$3x - y = 1$$

donde el vector de variables está conformado por x, y; el vector de términos independientes es b = (7 y 1).

Para hallar la solución del sistema se necesita establecer 3 determinantes:

1. El del sistema que vale, $\Delta s = -8$

$$\Delta s = \begin{vmatrix} 5 & 1 \\ 3 & -1 \end{vmatrix} = (5)(-1) - (3)(1) = -8$$

2. El de la variable x, Δx. Este se calcula sustituyendo los términos independientes en la columna de x.

$$\Delta x = \begin{vmatrix} 7 & 1 \\ 1 & -1 \end{vmatrix} = (7)(-1) - (1)(1) = -8$$

3. El de la variable y, Δy. Que se calcula sustituyendo los términos independientes en la columna de y.

$$\Delta y = \begin{vmatrix} 5 & 7 \\ 3 & 1 \end{vmatrix} = (5)(1) - (3)(7) = -16$$

La solución se obtiene así:

$$x = \frac{\Delta x}{\Delta s} = \frac{-8}{-8} = 1$$

$$y = \frac{\Delta y}{\Delta s} = \frac{-16}{-8} = 2$$

Comprobación

$$5x + y = 5(1) + 2 = 7$$
$$3x - y = 3(1) - 2 = 1$$

Sistema 3 x 3

Para un sistema de tres ecuaciones con tres incógnitas, todavía es factible emplear el método de Cramer, para ello se requiere del determinante del sistema y de un determinante para cada variable. Esto es, sea un sistema de ecuaciones de la forma

$$x + y + 2z = 3$$
$$x + 2y + 3z = 6$$
$$x + y + z = 2$$

El sistema de ecuaciones en forma matricial AX = b, se representa por:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}, \qquad b = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 2 \end{bmatrix}$$

La matriz A es una matriz de 3x3, X es un vector de 3x1, y b es un vector de 3x1.

La solución del sistema es calculada por determinantes de la siguiente manera.

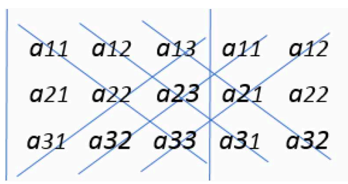
$$\Delta s = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{vmatrix},$$

$$\Delta x = \begin{vmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 6 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 1 \end{vmatrix}, \ \Delta y = \begin{vmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 1 & 6 & 3 \\ 1 & 2 & 1 \end{vmatrix}, \ \Delta z = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 6 \\ 1 & 1 & 2 \end{vmatrix}$$

Para facilitar las operaciones entre columnas y diagonales, se agregan dos columnas a la derecha y se repiten los elementos de ambas columnas. Así.

$$\Delta s = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

Ahora el determinante se obtiene al multiplicar en diagonal los coeficientes



Se obtienen dos sumas

$$a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32}$$

y

$$a_{31}a_{22}a_{13} + a_{32}a_{23}a_{11} + a_{33}a_{21}a_{12}$$

Sumando la primera y restando la segunda se obtiene el determinante del sistema. Esto es,

$$\Delta s = (1)(2)(1) + (1)(3)(1) + (2)(1)(1) - (1)(2)(2) - (1)(3)(1) - (1)(1)(1)$$

$$\Delta s = 2 + 3 + 2 - 4 - 3 - 1 = -1$$

El determinante es negativo y tiene solución. Si el determinante del sistema vale cero, el sistema no tiene solución.

Para cada variable se calcula el determinante de forma parecida.

$$\Delta x = (3)(2)(1) + (1)(3)(2) + (2)(6)(1) - (2)(2)(2) - (1)(3)(3) - (1)(6)(1)$$

$$\Delta x = 6 + 6 + 12 - 8 - 9 - 6 = 1$$

$$\Delta y = (1)(6)(1) + (3)(3)(1) + (2)(1)(2) - (1)(6)(2) - (2)(3)(1) - (1)(1)(3)$$

$$\Delta y = 6 + 9 + 4 - 12 - 6 - 3 = -2$$

$$\Delta z = (1)(2)(2) + (1)(6)(1) + (3)(1)(1) - (1)(2)(3) - (1)(6)(1) - (2)(1)(1)$$

$$\Delta z = 4 + 6 + 3 - 6 - 6 - 2 = -1$$

$$x = \frac{\Delta x}{\Delta s} = \frac{1}{-1} = -1$$

$$y = \frac{\Delta y}{\Delta s} = \frac{-2}{-1} = 2$$

$$z = \frac{\Delta z}{\Delta s} = \frac{-1}{-1} = 1$$

Comprobación

$$x + y + 2z = -1 + 2 + 2(1) = 3$$
$$x + 2y + 3z = -1 + 2(2) + 3(1) = 6$$
$$x + y + z = -1 + 2 + (1) = 2$$

Para sistemas de ecuaciones lineales mayores a tres ecuaciones ya no se recomienda utilizar este método debido al excesivo número de operaciones algebraicas. Para ello se recomienda utilizar el método de Gauss que consiste en reducir las variables con operaciones entre renglones.

Ejemplo 2.1. Resolver el sistema siguiente

$$x + y + z = 5.2$$
$$x + 2y + z = 7$$
$$x + y + 2z = 7.5$$

Solución. Se generan los 4 determinantes

$$\Delta s = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{vmatrix}$$

$$\Delta s = (1)(2)(2) + (1)(1)(1) + (1)(1)(1) - (1)(2)(1) -$$

$$(1)(1)(1) - (2)(1)(1) = 4 + 1 + 1 - 2 - 1 - 2 = 1$$

$$\Delta x = \begin{vmatrix} 5.2 & 1 & 1 \\ 7 & 2 & 1 \\ 7.5 & 1 & 2 \end{vmatrix}$$

$$\Delta x = (5.2)(2)(2) + (7)(1)(1) + (7.5)(1)(1) - (7.5)(2)(1) - (1)(1)(5.2) - (2)(7)(1) = 20.8 + 7 + 7.5 - 15 - 5.2 - 14 = 1.1$$

$$\Delta y = \begin{vmatrix} 1 & 5.2 & 1 \\ 1 & 7 & 1 \\ 1 & 7.5 & 2 \end{vmatrix}$$

$$\Delta y = (1)(7)(2) + (5.2)(1)(1) + (1)(1)(7.5) - (1)(7)(1) - (7.5)(1)(1) - (2)(1)(5.2) = 14 + 5.2 + 7.5 - 7 - 7.5 - 10.4 = 1.8$$

$$\Delta z = \begin{vmatrix} 1 & 1 & 5.2 \\ 1 & 2 & 7 \\ 1 & 1 & 7.5 \end{vmatrix}$$

$$\Delta z = (1)(2)(7.5) + (1)(7)(1) + (5.2)(1)(1) - (1)(2)(5.2) - (1)(7)(1) - (7.5)(1)(1) = 15 + 7 + 5.2 - 10.4 - 7 - 7.5 = 2.3$$

La solución del sistema es x = [1.1, 1.8, 2.3]

Comprobación

$$x + y + z = 1.1 + 1.8 + 2.3 = 5.2$$
$$x + 2y + z = 1.1 + 2(1.8) + 2.3 = 7$$
$$x + y + 2z = 1.1 + 1.8 + 2(2.3) = 7.5$$

2.2 MÉTODO DE GAUSS

También se le conoce como eliminación Gaussiana. Para resolver un sistema de ecuaciones empleando este método, es necesario aplicar las tres operaciones elementales de renglón. Estas operaciones son aplicables a la representación de un sistema de ecuaciones como una matriz aumentada.

La matriz aumentada se representa de la forma

$$[A \mid b] = \left[\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{array}\right]$$

En la matriz se representan la matriz de coeficientes A y la matriz de términos independientes, separados por una barra vertical.

Las operaciones elementales entre renglones son:

1. Intercambio de renglones. R1 ←→ R2
2. Multiplicación de un renglón por un escalar diferente de cero. 3R1
3. Sustitución de un renglón por su suma con un múltiplo escalar de otro renglón. R2 = R2 – 2R1

Con estas tres operaciones se puede reducir la matriz aumentada a una forma escalonada.

Para efectuar esta operación utilizamos el siguiente problema.

$$\begin{gathered} w - 2x - y + z = 4 \\ 2w + 4x + 2y - 3z = -1 \\ 3w + x + 2y - 2z = 8 \\ w - x + y + 2z = 9 \end{gathered}$$

La matriz aumentada se expresa como

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & -1 & 1 & 4 \\ 2 & 4 & 2 & -3 & -1 \\ 3 & 1 & 2 & -2 & 8 \\ 1 & -1 & 1 & 2 & 9 \end{vmatrix}$$

Para reducir la matriz aumentada tenemos que considerar la siguiente definición.

2.2.1 MATRIZ ESCALONADA

En álgebra lineal una matriz se dice que es escalonada por filas o que está en forma escalonada si: Todos los renglones cero están en la parte inferior de la matriz. El elemento delantero de cada renglón diferente de cero está a la derecha del elemento delantero diferente de cero del renglón anterior. La matriz escalonada de

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & -1 & 1 & 4 \\ 2 & 4 & 2 & -3 & -1 \\ 3 & 1 & 2 & -2 & 8 \\ 1 & -1 & 1 & 2 & 9 \end{vmatrix}$$

es

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & -1 & 1 & 4 \\ 0 & 8 & 4 & -5 & -9 \\ 0 & 0 & 1.5 & -0.625 & 3.875 \\ 0 & 0 & 0 & 2.25 & 2.25 \end{vmatrix}$$

Para pasar de la original a la forma escalonada se realizan operaciones algebraicas por renglón.

Sean R1, R2, R3 y R4 un vector renglón de la matriz del sistema de ecuaciones

$$R1 = [1\ -2\ -1\ \ 1\ \ 4]$$

$$R2 = [2\ \ 4\ \ 2\ -3\ -1]$$

$$R3 = [3\ \ 1\ \ 2\ -2\ \ 8]$$

$$R4 = [1\ -1\ \ 1\ \ 2\ \ 9]$$

Se puede obtener un nuevo vector R2 al restar R2 – 2*R1,

$$nR2 = [2\ \ 4\ \ 2\ -3\ -1] + [-2\ \ 4\ \ 2\ -2\ -8] = [0\ \ 8\ \ 4\ -5\ -9]$$

De manera similar, nR3 = R3 – 3*R1

$$nR3 = [3\ \ 1\ \ 2\ -2\ \ 8] + [-3\ \ 6\ \ 3\ -3\ -12] = [0\ \ 7\ \ 5\ -5\ -4]$$

y finalmente, nR4 = R4 – 1*R1

$$nR4 = [1\ -1\ \ 1\ \ 2\ \ 9] + [-1\ \ 2\ \ 1\ -1\ -4] = [0\ \ 1\ \ 2\ \ 1\ \ 5]$$

La nueva matriz escalonada en w queda como

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & -1 & 1 & 4 \\ 0 & 8 & 4 & -5 & -9 \\ 0 & 7 & 5 & -5 & -4 \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 5 \end{vmatrix}$$

Ahora se busca escalonar el tercer y cuarto renglón para la variable x. Esto es,

nR3 = R3 – 7R2/8 y nR4 = R4 – 1R2/8

$$nR3 = [0\quad 7\quad 5\quad -5\quad -4] - \frac{7}{8}[0\quad 8\quad 4\quad -5\quad -9]$$

$$= [0\quad 7\quad 5\quad -5\quad -4] + \left[0\quad -7\quad -\frac{28}{8}\quad \frac{35}{8}\quad \frac{63}{8}\right]$$

$$= [0\ \ 0\ \ 12/8\ -5/8\ \ 31/8]$$

$$nR4 = [0\quad 1\quad 2\quad 1\quad 5] - \frac{1}{8}[0\quad 8\quad 4\quad -5\quad -9]$$

$$= [0\ \ 1-8/8\ \ 2-4/8\ \ 1+5/8\ \ 5+9/8] = [0\ \ 0\ \ 12/8\ \ 13/8\ \ 49/8]$$

La nueva matriz escalonada en la variable x queda como

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & -1 & 1 & 4 \\ 0 & 8 & 4 & -5 & -9 \\ 0 & 0 & 1.5 & -0.625 & 3.875 \\ 0 & 0 & 1.5 & 1.625 & 6.125 \end{vmatrix}$$

Finalmente, se busca escalonar en y

nR4 = R4 – R3

$$nR4 = [0 \quad 0 \quad 1.5 \quad 1.625 \quad 6.125] + [\ 0 \quad 0 \ -1.5 \quad 0.625 \ -3.875]$$
$$= [0 \ -0 \ -0 \ -2.25 \ -2.25]$$

La resultante esta escalonada en la variable y se puede resolver el sistema de ecuaciones resultante

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & -1 & 1 & 4 \\ 0 & 8 & 4 & -5 & -9 \\ 0 & 0 & 1.5 & -0.625 & 3.875 \\ 0 & 0 & 0 & 2.25 & 2.25 \end{vmatrix}$$

2.2.2 SUSTITUCIÓN HACIA ATRÁS

El método de Gauss establece que una vez ordenada la matriz del sistema de ecuaciones en forma escalonada se procede a calcular cada una de las variables desde la última ecuación hacia la primera mediante una sustitución hacia atrás.

$$w - 2x - y + z = 4$$
$$8x + 4y - 5z = -9$$
$$1.5y - 0.625z = 3.875$$
$$2.25z = 2.25$$
$$z = \frac{2.25}{2.25} = 1$$
$$y = \frac{3.875 + 0.625(1)}{1.5} = 3$$
$$x = \frac{-9 + 5(1) - 4(3)}{8} = -2$$
$$w = 4 - 1 + 3 + 2(-2) = 2$$

El vector solución es $X = [2, -2, 3, 1]$

Se debe tener cuidado de no confundir el orden de las variables.

Para este tipo de cálculos es recomendable utilizar algún programa de cómputo. Enseguida se muestra un código de programación en Matlab.

```
clear; clc; format compact;
M1=[1 -2 -1 1 4;2 4 2 -3 -1;3 1 2 -2 8;1 -1 1 2 9];
 R1=M1(1,:);
 R2=M1(2,:);
 R3=M1(3,:);
 R4=M1(4,:);
% ('Matriz Escalonada w');
nR1=R1;
nR2=R2-R2(1,1)*R1;
nR3=R3-R3(1,1)*R1;
nR4=R4-R4(1,1)*R1;
nM1=[nR1;nR2;nR3;nR4];

% ('Matriz Escalonada x');
nR3=nR3-nR3(1,2)/nR2(1,2)*nR2;
nR4=nR4-nR4(1,2)/nR2(1,2)*nR2;
nM1=[nR1;nR2;nR3;nR4];

% ('Matriz Escalonada y');
nR4=nR4-nR4(1,3)/nR3(1,3)*nR3;
nM1=[nR1;nR2;nR3;nR4];
% Sustitución hacia atrás

z=nR4(1,5)/nR4(1,4);
y=(nR3(1,5)-nR3(1,4)*z)/nR3(1,3);
x=(nR2(1,5)-nR2(1,4)*z-nR2(1,3)*y)/nR2(1,2);
w=(nR1(1,5)-nR1(1,4)*z-nR1(1,3)*y-nR1(1,2)*x)/nR1(1,1);
disp('Matriz inicial ')
M1
disp('Matriz escalonada:')
nM1
fprintf('\n Solución: w = %6.3f ',w)
fprintf('\n Solución: x = %6.3f ',x)
fprintf('\n Solución: y = %6.3f ',y)
fprintf('\n Solución: z = %6.3f ',z)
```

Ejemplo 2.2. Resolver por el método de eliminación gausiana el sistema

$$2x_1 + x_2 + x_3 = 0$$

$$x_1 - x_2 + 5x_3 = 0$$

$$x_2 - x_3 = 4$$

Solución.

1. Se establece la matriz aumentada

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 5 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 4 \end{array}\right]$$

2. Aplicamos las operaciones elementales para escalonar en

$$nR1 = \frac{R1}{2} = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 & 0.5 & 0 \end{bmatrix}$$

$$nR2 = R2 - nR1 = [1\ -1\ \ 5\ \ 0] + [-1\ -0.5\ -0.5\ -0]$$

$$nR2 = [0\ -1.5\ \ 4.5\ \ 0]$$

el nuevo sistema es

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & -1.5 & 4.5 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 4 \end{array}\right]$$

se intercambian R2 con R3

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 4 \\ 0 & -1.5 & 4.5 & 0 \end{array}\right]$$

se reduce en el tercer renglón

$$nR3 = R3 + 1.5R2 = [0 + 0\ \ -1.5 + 1.5\ \ 4.5 - 1.5\ \ 0 + 6]$$

$$nR3 = [0\ \ 0\ \ 3\ \ 6]$$

3. Resolver con sustitución hacia atrás

$$x_3 = \frac{6}{3} = 2$$

$$x_2 = 4 + x_3 = 4 + 2 = 6$$

$$x_1 = -0.5x_3 - 0.5x_2 = -1 - 3 = -4$$

El vector solución es X = [– 4, 6, 2]

Este comportamiento se puede extender a grandes sistemas para eliminar incógnitas y sustituir hacia atrás.

2.3 MATRIZ ESCALONADA REDUCIDA

Para la matriz anterior, su forma escalonada reducida se logra al colocar en la diagonal principal entradas con valores unitarios, esto es, sólo unos.

Definición

Se dice que una matriz está en forma escalonada reducida si se satisfacen las cuatro condiciones que a continuación se detallan:

$$\begin{vmatrix} 1 & -2 & -1 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & 0.5 & -0.625 & -1.125 \\ 0 & 0 & 1 & -0.41666 & 2.58333 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{vmatrix}$$

1. Todos los renglones que consisten únicamente de ceros (si hay) aparecen en la parte inferior de la matriz. En cada renglón debajo del primero va aumentando el número de ceros.
2. El primer número en cualquier renglón que no consista en ceros es 1.
3. Si dos renglones sucesivos no consisten únicamente de ceros, entonces el primer 1 en el renglón inferior está más a la derecha que el primer 1 del renglón superior.
4. Cualquier columna que contenga el primer 1 de un renglón tendrá ceros en los demás lugares por debajo de él.
5. La principal ventaja radica en el hecho que en la sustitución hacia atrás se evitan las divisiones de la incógnita.

Este tipo de operaciones dan origen a otros métodos de solución que son variantes al método de Gauss.

El método de Eliminación Gaussiana consiste en reducir la matriz aumentada de coeficientes del sistema de ecuaciones lineales a la forma escalonada, resolver para la última incógnita y luego emplear sustitución hacia atrás para resolver las otras incógnitas. No es necesario buscar unos en la diagonal principal.

En la forma escalonada todos los números que están abajo del primer 1 de un renglón son cero, mientras que en la forma escalonada reducida todos los números que están arriba y abajo del primer 1 de un renglón son cero. Siempre podemos reducir la matriz a la forma escalonada realizando operaciones elementales de renglón.

Muchos sistemas de ecuaciones se pueden resolver con este método o empleando el de Gauss – Jordan, pero ambos tienen desventajas. Existen problemas cuando se presente división entre cero y cuando empleamos un conjunto pequeño de cifras significativas. Entre más cifras se empleen, el error es más pequeño. Regularmente si se utilizan fracciones en vez de decimales (se evitan errores de redondeo), la respuesta es exacta.

Recordemos que las microcomputadoras manejan sólo un número limitado de cifras significativas y, por lo tanto, pueden ocurrir errores de redondeo los cuales debemos considerar al evaluar los resultados. Un error en los primeros pasos tiende a propagarse, esto es, causa errores en los siguientes pasos del procedimiento.

2.4 MÉTODO DE ELIMINACIÓN DE GAUSS CON PIVOTE

Esta variante del método está diseñada para minimizar el efecto acumulativo de los errores de redondeo que se cometen inevitablemente al resolver sistemas de más de 3 ecuaciones. Este método, como es sugerido por su nombre, es una variante del método de eliminación de Gauss. Consiste en cambiar el orden de las variables al intercambiar renglones o columnas, y hacer que una entrada de una ecuación sirva como base para eliminarla de las otras ecuaciones.

Intentaremos explicar la naturaleza de este método con un ejemplo.

Consideremos el siguiente sistema de ecuaciones lineales.

$$3x + 2y - z = 1$$

$$6x + 6y + 2z = 12$$

$$3x - 2y + z = 11$$

Cuya matriz aumentada es:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & -1 & 1 \\ 6 & 6 & 2 & 12 \\ 3 & -2 & 1 & 11 \end{array}\right)$$

Paso 1: Localizar la columna de la matriz aumentada más a la izquierda que no consista totalmente de ceros. Encontrar ahora en esta columna la entrada con mayor valor absoluto. Llamamos a este elemento o entrada "el primer pivote del sistema". El segundo renglón será seleccionado como pivote .

$$entrada\ pivote \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & 2 & -1 & 1 \\ 6 & 6 & 2 & 12 \\ 3 & -2 & 1 & 11 \end{array}\right)$$

La entrada pivote es la columna más a la izquierda que no consta totalmente de ceros.

Paso 2: Lleve a cabo un intercambio de renglones de tal suerte que el pivote encontrado en el paso anterior quede a la cabeza de la columna.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 6 & 6 & 2 & 12 \\ 3 & 2 & -1 & 1 \\ 3 & -2 & 1 & 11 \end{array}\right)$$

Paso 3: Si la entrada pivote no es igual a 1, multiplique el primer renglón de la matriz de paso 2 por $1/a_{11}$, siendo a_{11} la entrada del pivote. En el ejemplo a = 6. Multiplicando por 1/6 o dividiendo por 6.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1/3 & 2 \\ 3 & 2 & -1 & 1 \\ 3 & -2 & 1 & 11 \end{array}\right)$$

Paso 4. Sume múltiplos adecuados del primer renglón de la matriz del paso anterior a los restantes renglones de tal suerte que queden ceros debajo de la entrada $a_{11} = 1$.

$R2' = R2 - 3R1 =$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1/3 & 2 \\ 0 & -1 & -2 & -5 \\ 0 & -5 & 0 & 5 \end{array}\right)$$

Paso 5: De las entradas a la derecha de los ceros, la entrada de mayor valor absoluto es (−5); por ello, ahora se deben intercambiar las últimas filas. Esto es,

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1/3 & 2 \\ 0 & -5 & 0 & 5 \\ 0 & -1 & -2 & -5 \end{array}\right)$$

Se aplica el proceso de hacer uno en el pivote al dividir por $-a_{22}$, o multiplicar por $-1/a_{22}$. La aplicación del paso 3, nos permite obtener la matriz

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1/3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -2 & -5 \end{array}\right)$$

Continuando con el paso 4 obtenemos:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1/3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{array}\right)$$

El siguiente paso es identificar al siguiente pivote, quedando sólo $a_{33} = -2$. Se vuelve aplicar la división por el pivote. Es evidente que llegaremos a la matriz.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1/3 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{array}\right)$$

Hemos así escalonado la matriz original.

Paso 6. Resuelva el correspondiente sistema de ecuaciones por sustitución hacia atrás.

El correspondiente sistema de ecuaciones:

$$x + y + 1/3z = 2$$

$$y = -1$$

$$z = 3$$

Resolviendo por sustitución hacia atrás se llega a

$$x = 2 \qquad y = -1 \qquad z = 3$$

2.5 MÉTODO DE GAUSS-JORDAN

Es una variación de la eliminación Gaussiana y permite evitar la división por cero. También se recomienda cuando las operaciones numéricas propician el uso de varias cifras significativas que pueden provocar algunos errores de redondeo. La principal diferencia consiste en que en esta técnica cuando se elimina una incógnita no sólo se elimina de las variables en cada renglón siguiente, sino que se eliminan de todas las otras ecuaciones. Esto es, el proceso de eliminación genera una matriz identidad en lugar de una matriz triangular. En este caso, no es necesario usar la sustitución hacia atrás para obtener la solución.

Matriz identidad

Es una matriz cuadrada donde todos sus elementos son ceros menos los elementos de la diagonal principal que son unos. Debido a que sólo tiene unos en la diagonal, su determinante es 1.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Determinante = 1

Aplicando el método de Gauss Jordan al sistema de ecuaciones se genera una matriz aumentada en la que se muestra el resultado del sistema de ecuaciones con el valor correspondiente a cada una de las variables que dan solución al sistema.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & a \\ 0 & 1 & 0 & b \\ 0 & 0 & 1 & c \end{array}\right]$$

donde x = a, y = b z = c.

Ejemplo 2.3 Consideremos el sistema del problema anterior. Ahí obtuvimos la matriz escalonada, la cual es

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0.5 & 0.5 & 0 \\ 0 & 1 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{array}\right]$$

Ahora obtendremos la matriz escalonada reducida en forma de matriz identidad.

$$\begin{matrix} R1-0.5R3 \\ R2+3R3 \\ \\ \end{matrix}\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0.5 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{array}\right)$$

$$R1-0.5R2\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & -4 \\ 0 & 1 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{array}\right)$$

La solución única es: (x, y, z) = (– 4, 6, 2)

Ejemplo 2.4 Resolver el sistema de ecuaciones lineales

$$14x + 2y + 4z = -10$$

$$16x + 40y - 4z = 55$$

$$-2x + 4y - 16z = -38$$

Solución. Aplicando el método de Gauss – Jordan

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 14 & 2 & 4 & -10 \\ 16 & 40 & -4 & 55 \\ -2 & 4 & -16 & -38 \end{array}\right]$$

Paso1 . Hacer que a11 = 1 dividiendo por 14 el primer renglón, y con ello eliminar x de las otras ecuaciones

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2/14 & 4/14 & -10/14 \\ 16 & 40 & -4 & 55 \\ -2 & 4 & -16 & -38 \end{array}\right]$$

R2 = R2 – 16*R1, R3 = R3 + 2R1

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0.142857 & 0.285714 & -0.714285 \\ 0 & 37.714285 & -8.57142857 & 66.4285714 \\ 0 & 4.285714 & -15.42857 & -39.42857 \end{array}\right]$$

Paso 2. Dividir R2 por a22 y con ello, eliminar la variable y de la ecuación 1 y 3.

R1 = R1 – a12*R2, R3 = R3 – a32*R2

$$\begin{bmatrix} 1 & 0. & 0.318181 & -0.965909 \\ 0 & 1 & -0.227272 & 1.7613636 \\ 0 & 0. & -14.45454 & -46.97272 \end{bmatrix}$$

Paso 3. Dividir R3 por a33 y eliminar z de las otras ecuaciones.

R1 = R1 – a13*R3, R2 = R2 – a23*R3

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0. & 0. & -2. \\ 0. & 1 & 0. & 2.5 \\ 0. & 0. & 1 & 3.25 \end{array}\right]$$

La solución es $x = -2$, $y = 2.5$, $z = 3.25$

2.6 MÉTODO DE JACOBI

Este método no siempre funciona y por eso se emplea muy poco. Solo daremos algunos conceptos elementales y lo ilustraremos con un ejemplo. El método consiste en despejar del sistema x_1 de la primera ecuación, x_2 de la segunda, x_3 de la tercera, etc. Inmediatamente se considera la primera aproximación a la solución sustituyendo los valores en los términos del lado derecho de las ecuaciones. Con ello obtenemos una nueva aproximación, la cual a su vez se sustituye en los términos del lado derecho de las ecuaciones y así sucesivamente hasta llegar a la aproximación deseada.

Ejemplo 2.5 Resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales.

$$4x_1 - x_2 = 2$$

$$-x_1 + 4x_2 - x_3 = 6$$

$$-x_2 + 4x_3 = 2$$

Aplicando el método iterativo de Jacobi.

Paso 1. Despejar x1 de la primera ecuación, x2 de la segunda y x3 de la tercera:

$$x_1 = 0.50 + 0.25x_2$$

$$x_2 = 1.50 + 0.25x_3 + 0.25x_1$$

$$x_3 = 0.50 + 0.25x_2$$

Para un cálculo iterativo de estas ecuaciones las expresamos como

$$x_1^{(k+1)} = 0.50 + 0.25x_2^{(k)}$$

$$x_2^{(k+1)} = 1.50 + 0.25x_3^{(k)} + 0.25x_1^{(k)}$$

$$x_3^{(k+1)} = 0.50 + 0.25x_2^{(k)}$$

Paso 2. Realizar la primera aproximación con el vector Xo = {0,0,0}

Esto es $x_1^{(0)} = 0$, $x_2^{(0)} = 0$, $x_3^{(0)} = 0$

Los valores de esta primera aproximación pueden ser cualesquiera, pero entre más cercanos sean a los que buscamos como solución final, será más rápida la convergencia. Pero como no conocemos la solución final elegimos los componentes cero y de ahí en adelante. Sustituimos esos valores en el sistema iterativo, haciendo k = 1. Por lo tanto

$$x_1^{(1)} = 0.50 + 0.25(0) = 0.50$$

$$x_2^{(1)} = 1.50 + 0.25(0) + 0.25(0) = 1.50$$

$$x_3^{(1)} = 0.50 + 0.25(0) = 0.50$$

$$x_1 = \{0.5, 1.50, 0.50\}$$

Segunda aproximación

$$x_1^{(1)} = 0.50 + 0.25(0) = 0.50$$

$$x_2^{(1)} = 1.50 + 0.25(0) + 0.25(0) = 1.50$$

$$x_3^{(1)} = 0.50 + 0.25(0) = 0.50$$

$$x_1 = \{0.5, 1.50, 0.50\}$$

Continuando con el mismo proceso…

$$x_6 = \{0.998, 1.996, 0.998\}$$

$$x_7 = \{0.999, 1.999, 0.999\}$$

$$x_8 = \{1.0, 2.0, 1.0\}$$

En consecuencia, la solución del sistema es: $(x_1, x_2, x_3) = \{1, 2, 1\}$

Utilizando Excel se facilitan los cálculos

	A	B	C	D
1	k	x1	x2	x3
2		0	0	0
3	1	=0.5+0.25*C2	=1.5+0.25*D2+0.25*B2	=0.5+0.25*C2
4	2	=0.5+0.25*C3	=1.5+0.25*D3+0.25*B3	=0.5+0.25*C3

El resultado para 10 iteraciones son:

k	x1	x2	x3
	0	0	0
1	0.5	1.5	0.5
2	0.875	1.75	0.875
3	0.9375	1.9375	0.9375
4	0.984375	1.96875	0.984375
5	0.9921875	1.9921875	0.9921875
6	0.99804688	1.99609375	0.99804688
7	0.99902344	1.99902344	0.99902344
8	0.99975586	1.99951172	0.99975586
9	0.99987793	1.99987793	0.99987793
10	0.99996948	1.99993896	0.99996948

Si las ecuaciones lineales originales son escritas en orden diferente, es posible que el proceso iterativo de Jacobi sea divergente.

Utilizando otros valores iniciales, también converge a la solución.

k	x1	x2	x3
	5	4	6
1	1.5	4.25	1.5
2	1.5625	2.25	1.5625
3	1.0625	2.28125	1.0625
4	1.0703	2.03125	1.0703
5	1.0078	2.03515625	1.0078
6	1.0088	2.00390625	1.0088
7	1.001	2.00439453	1.001
8	1.0011	2.00048828	1.0011
9	1.0001	2.00054932	1.0001
10	1.0001	2.00006104	1.0001

Comprobación.

De (1)

$$x_1 = \frac{2 + x_2}{4}$$

De (3)

$$x_3 = \frac{2 + x_2}{4}$$

Sustituyendo en (2)

$$-\frac{2 + x_2}{4} + 4x_2 - \frac{2 + x_2}{4} = 6$$

$$-2 - x_2 + 16x_2 - 2 - x_2 = 24$$

$$14x_2 = 24 + 4$$

$$x_2 = \frac{28}{14} = 2$$

$$x_1 = \frac{2 + 2}{4} = 1$$

$$x_3 = \frac{2 + 2}{4} = 1$$

Ejemplo 2.6 Resolver el sistema de ecuaciones lineales.

$$14x + 2y + 4z = -10$$

$$16x + 40y - 4z = 55$$

$$-2x + 4y - 16z = -38$$

Solución

Aplicando el método iterativo de Jacobi. Despejando x de la primera ecuación, y de la segunda y z de la tercera:

$$x = \frac{-10 - 2y - 4z}{14}$$

$$y = \frac{55 - 16x + 4z}{40}$$

$$z = \frac{38 - 2x + 4y}{16}$$

Si elegimos una aproximación inicial $X^{(0)} = (1, 1, 1)$, entonces el proceso de convergencia sería de aproximadamente 24 iteraciones.

k	x1	x2	x3
1	1	1	1
1	-1.14285714	1.075	2.5
2	-1.58214286	2.08214286	2.78660714
3	-1.80790816	2.28651786	3.09330357
4	-1.92473214	2.40749362	3.17261798
5	-1.96467566	2.46215466	3.21746492
6	-1.98529779	2.48261675	3.23612312
7	-1.99355186	2.49273143	3.24381641
8	-1.99719489	2.49680238	3.24737684
9	-1.99879372	2.49861564	3.24884996
10	-1.99947365	2.49940248	3.24950313
11	-1.99977268	2.49973977	3.24978483
12	-1.99990135	2.49988755	3.24990653

k	x1	x2	x3
13	-1.99995723	2.49995119	3.24995956
14	-1.99998147	2.49997885	3.24998245
15	-1.99999196	2.49999083	3.2499924
16	-1.99999652	2.49999603	3.2499967
17	-1.99999849	2.49999828	3.24999857
18	-1.99999935	2.49999925	3.24999938
19	-1.99999972	2.49999968	3.24999973
20	-1.99999988	2.49999986	3.24999988
21	-1.99999995	2.49999994	3.24999995
22	-1.99999998	2.49999997	3.24999998
23	-1.99999999	2.49999999	3.24999999
24	-2	2.5	3.25

La aproximación a la solución fue obtenida en 10 iteraciones.

La solución exacta es: $x = -2, \quad y = 2.5, \quad z = 3.25$

Un código en programación Matlab también facilita los cálculos.

```
clear;clc;
% Método Gauss Jacobi
x=1
y=1
z=1
for i=1:25
xn=(-10-2*y-4*z)/14;
yn=(55+4*z-16*x)/40;
zn=(38 + 4*y -2*x)/16;
fprintf('Iteracion i = %2.0f\n x = %6.4f, y = %6.4f, z = %6.4f\n',i,
xn,yn,zn)
sol= 14*xn+2*yn+4*zn;
    if abs(sol+10)<0.0001
    fprintf('\n Solución: \n')
    fprintf('x = %6.4f, y = %6.4f, z = %6.4f\n',xn,yn,zn)
    xn;yn;zn;
    break
    end
    x=xn;y=yn;z=zn;
end
```

2.7 MÉTODO DE GAUSS-ZAMORA

Es otra variante de los métodos anteriores con la característica de primero hallar la primer variable y después las otras. La secuencia establece un orden que evita confundirlas al realizar la sustitución hacia atrás. Para facilitar la explicación se empleará un ejemplo de tres ecuaciones.

Ejemplo 2.7 Consideremos el sistema de tres variables de la forma.

$$3x - y - z = 8$$

$$x - y + 2z = 4$$

$$x + 2y + z = 2$$

Su arreglo matricial es

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

Paso 1. Hacer uno en la posición z de la primera ecuación.

R1 = R1/a13, y eliminar la variable z en las otras ecuaciones.

R2 = R2 – 2*R1, R3 = R3 – R1

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -3 & 1 & 1 & -8 \\ 7 & -3 & 0 & 20 \\ 4 & 1 & 0 & 10 \end{array}\right)$$

Paso 2. Hacer uno en a22, para eliminar la variable y de la tercera ecuación.

R3 = R3 – a32*R2

$$\left(\begin{array}{ccc|c} -3 & 1 & 1 & -8 \\ -7/3 & 1 & 0 & -20/3 \\ 19/3 & 0 & 0 & 50/3 \end{array}\right)$$

Paso 3. Hacer uno en a31 para conocer el valor de x, luego sustituir en las otras ecuaciones

$$x = \frac{50}{19} = 2.6316$$

$$y = -\frac{20}{3} + \frac{7(2.6316)}{3} = -0.5263$$

$$z = -8 + 3(2.6316) - (-0.5263) = 0.4211$$

La solución (x, y, z) = (2.6316, -0.5263, 0.4211)

Ejemplo 2.8 Resolver el sistema lineal

$$3x - 0.1y - 0.2z = 7.85$$

$$0.1x + 7y - 0.3z = -19.3$$

$$0.3x - 0.2y + 10z = 71.4$$

Solución.

Paso 1. Reordenar las ecuaciones colocando el mayor valor de z en la primera ecuación y dividir.

$$\begin{bmatrix} 0.03 & -0.02 & 1 & 7.14 \\ 0.1 & 7 & -0.3 & -19.3 \\ 3 & -0.1 & -0.2 & 7.85 \end{bmatrix}$$

Eliminar valores bajo z.

R2 = R2 + 0.3R1, R3 = R3 + 0.2R1

$$\begin{bmatrix} 0.03 & -0.02 & 1 & 7.14 \\ 0.109 & 6.994 & 0 & -17.158 \\ 3.006 & -0.104 & 0 & 9.278 \end{bmatrix}$$

Paso 2. Dividir R2 por a22 y eliminar y de la ecuación 3

R2 = R2/a22, R3 = R3 – a32*R2

$$\begin{bmatrix} 0.03 & -0.02 & 1 & 7.14 \\ 0.01558479 & 1 & 0 & -2.45324564 \\ 3.00762082 & 0 & 0 & 9.02286245 \end{bmatrix}$$

Paso 3. Dividir R3 por a31 para calcular x, luego y sustituir en R2 para calcular y

$$x = \frac{9.02286245}{3.00762082} = 3$$

$$y = -2.45324564 - 0.01558479(x) = -2.5$$

$$z = 7.14 - 0.03x + 0.02y = 7$$

Vector solución = {x, y, z} = {3, −2.5, 7}

Con Excel se puede simplificar las operaciones

	A	B	C	D
1	3	-0.1	-0.2	7.85
2	0.1	7	-0.3	-19.3
3	0.3	-0.2	10	71.4
4				
5	=A1/$C$1	=B1/$C$1	=C1/$C$1	=D1/$C$1
6	=A2-$C$2*A5	=B2-$C$2*B5	=C2-$C$2*C5	=D2-$C$2*D5
7	=A3-$C$3*A5	=B3-$C$3*B5	=C3-$C$3*C5	=D3-$C$3*D5
8				
9	=A5	=B5	=C5	=D5
10	=A6/$B$6	=B6/$B$6	=C6/$B$6	=D6/$B$6
11	=A7-$B$7*A10	=B7-$B$7*B10	=C7-$B$7*C10	=D7-$B$7*D10
12				
13	x =	=D11/A11		
14	y =	=D10-A10*B13		
15	z =	=D9-A9*B13-B9*B14		

2.8 MÉTODO DE GAUSS – SEIDEL

El método de Gauss – Seidel se utiliza en particular en grandes sistemas de ecuaciones lineales. Es un método de aproximaciones sucesivas, en las que en cada ecuación se despeja una variable y se van calculando las siguientes con los valores obtenidos. En los métodos de eliminación están presentes los errores de redondeo. Con este método el error se puede controlar mediante el número de iteraciones, los errores de redondeo no tienen que ver con esta técnica. Sin embargo, en ciertos casos puede ser que no converja a la respuesta correcta.

El método de Gauss – Seidel es el método iterativo más usado. Consideremos un conjunto en **m** ecuaciones lineales con **n** incógnitas (m = n), esto es, AX = b. Si los elementos de la diagonal son diferentes de cero, la primera ecuación se puede resolver para x_1, la segunda para x_2, este lo que conduce a:

$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \cdots - a_{1n}x_n}{a_{11}} \qquad (1)$$

$$x_2 = \frac{b_2 - a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \cdots - a_{2n}x_n}{a_{22}} \qquad (2)$$

$$x_m = \frac{b_m - a_{m2}x_2 - a_{m3}x_3 - \cdots - a_{m(n-1)}x_{n-1}}{a_{mn}} \qquad (3)$$

Ahora estamos en condiciones de iniciar el proceso de solución empleando un valor inicial para las incógnitas X.

La solución trivial puede servir de valor inicial, es decir, las x´s valen cero. Estos ceros se pueden sustituir en la ecuación (1) para calcular un nuevo valor de $x_1 = \frac{b_1}{a_{11}}$

Posteriormente, se sustituye el valor de x_1, con x_3,.... x_n, aún en cero, en la ecuación (2) con la cual se determina un nuevo valor de x_2. Este proceso se repite en cada una de las ecuaciones hasta llegar a la ecuación (n), la cual calcula un nuevo valor de xn. En seguida se regresa a la primera ecuación y se repite todo el proceso hasta que la solución converja lo suficiente a los valores reales.

Ejemplo 2.9 Resolver por el método de Gauss – Seidel

$$3x_1 - 0.1x_2 - 0.2x_3 = 7.85$$

$$0.1x_1 + 7x_2 - 0.3x_3 = -19.3$$

$$0.3x_1 - 0.2x_2 + 10x_3 = 71.4$$

Solución. Despejando cada una de las variables sobre la diagonal

$$x_1 = \frac{7.85 + 0.1x_2 + 0.2x_3}{3}$$
$$x_2 = \frac{-19.3 - 0.1x_1 + 0.3x_3}{7}$$
$$x_3 = \frac{71.4 - 0.3x_1 + 0.2x_2}{10}$$

Iniciando con $X_2 = X_3 = 0$, se evalúa la ecuación 1, $X_1 = 2.6166687$

Este valor, con X3 = 0, los sustituimos en la ecuación 2 y se obtiene

$X_2 = -2.7945238$

La primera iteración se completa sustituyendo los valores de X_1 y X_2, calculadas en la ecuación 3, obteniendo:

$X_3 = 7.00560952$

Para una segunda iteración, los valores de X_1, X_2 y X_3 obtenidos son:

$$X_1 = 2.9905, \quad X_2 = -2.4996, \quad X_3 = 7.0056$$

El método converge a la solución muy rápidamente.

Para mejorar la solución se deben aplicar algunas iteraciones más. Es factible utilizar Excel o un programa en Matlab para facilitar los cálculos.

En Excel

i	x1	x2	x3
	0	0	0
1	2.61666667	-2.79452381	7.00560952
2	2.99055651	-2.49962468	7.00029081
3	3.0000319	-2.49998799	6.99999928
4	3.00000035	-2.50000004	6.99999999
5	3	-2.5	7
6	3	-2.5	7

Fórmulas por celda

	X1	X2	X3
	E	F	G
1	0	0	0
2	=(7.85+0.1*F1+0.2*G1)/3	=(-19.3-0.1*E2+0.3*G1)/7	=(71.4-0.3*E2+0.2*F2)/10
3	=(7.85+0.1*F2+0.2*G2)/3	=(-19.3-0.1*E3+0.3*G2)/7	=(71.4-0.3*E3+0.2*F3)/10
4	=(7.85+0.1*F3+0.2*G3)/3	=(-19.3-0.1*E4+0.3*G3)/7	=(71.4-0.3*E4+0.2*F4)/10
5	=(7.85+0.1*F4+0.2*G4)/3	=(-19.3-0.1*E5+0.3*G4)/7	=(71.4-0.3*E5+0.2*F5)/10
6	=(7.85+0.1*F5+0.2*G5)/3	=(-19.3-0.1*E6+0.3*G5)/7	=(71.4-0.3*E6+0.2*F6)/10
7	=(7.85+0.1*F6+0.2*G6)/3	=(-19.3-0.1*E7+0.3*G6)/7	=(71.4-0.3*E7+0.2*F7)/10

Código Matlab

```
clear;clc;
% Gauss Seidel
x2=0
x3=0
for i=1:10
    x1= (7.85 + 0.1*x2 + 0.2*x3)/3;
    x2=(-19.3 - 0.1*x1 + 0.3*x3)/7;
    x3=(71.4 - 0.3*x1 + 0.2*x2)/10;
    x=[x1 x2 x3]
end
```

La solución exacta es

$$x_1 = 3, x_2 = -2.5, x_3 = 7$$

Ejemplo 2.10 Resolver el sistema siguiente por el método de Gauss – Seidel

$$14x_1 + 2x_2 + 4x_3 = -10$$

$$16x_1 + 40x_2 - 4x_3 = 55$$

$$-2x_1 + 4x_2 - 16x_3 = -38$$

Solución

$$x_1 = \frac{-10-2x_2-4x_3}{14} = -0.714 - 0.143x_2 - 0.286x_3$$

$$x_2 = \frac{55 - 16x_1 + 4x_3}{40} = 1.375 - 0.400x_1 + 0.100x_3$$

$$x_3 = \frac{-38 + 2x_1 - 4x_2}{-16} = 2.375 - 0.125x_1 + 0.250x_2$$

Iniciemos con la aproximación inicial $(x_1, x_2, x_3) = (0, 0, 0)$

En la siguiente tabla se muestran las primeras ocho aproximaciones.

Método Iterativo de Gauss Seidel

iteración	x	y	z
0	0	0	0
1	-0.71429	1.66071	2.87946
2	-1.77423	2.37264	3.18994
3	-1.96465	2.47985	3.24054
4	-1.99442	2.49682	3.24851
5	-1.99912	2.49950	3.24976
6	-1.99986	2.49992	3.24996
7	-1.99998	2.49999	3.24999
8	-2.00000	2.50000	3.25000

La solución exacta es:

$$x_1 = -2, x_2 = 2.5, x_3 = 3.25$$

MATRIZ DOMINANTE

Resulta importante señalar que este tipo de método iterativo no son aplicables a cualquier sistema dado. Se requiere que las entradas de la diagonal sean dominantes. De hecho, es un requisito para la aplicación de los métodos de Jacobi y Seidel la matriz dominante y garantizar la convergencia a la solución.

Definición. Una matriz cuadrada dominante

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Es “estrictamente dominante en sentido diagonal” si el valor absoluto de cada entrada de la diagonal es mayor que la suma de los restantes valores absolutos de las correspondientes entradas del mismo renglón; esto es,

$$|a_{11}| > |a_{12}| + |a_{13}| + \cdots + |a_{1n}|$$

$$|a_{22}| > |a_{21}| + |a_{23}| + \cdots + |a_{2n}|$$

$$\vdots$$

$$|a_{nn}| > |a_{n1}| + |a_{n2}| + \cdots + |a_{n(n-1)}|$$

Es fácil verificar que de las dos matrices siguientes.

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 5 & 3 \\ 3 & 2 & -5 \\ 4 & -10 & 3 \end{pmatrix} \qquad B = \begin{pmatrix} 10 & 3 & -1 \\ -5 & 7 & -1 \\ 7 & -3 & -12 \end{pmatrix}$$

Sólo la matriz B cumple con la definición anterior, por lo que, sólo este sistema garantiza solución por estos métodos iterativos. Sin embargo, se puede realizar un cambio de renglones de la matriz A, del tres al dos, y se puede resolver también. Esto es,

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 5 & 3 \\ 4 & -10 & 3 \\ 3 & 2 & -5 \end{pmatrix}$$

Teorema: Sea S un sistema con n ecuaciones en n incógnitas y A la matriz de coeficientes, si la matriz A es estrictamente diagonalmente dominante, entonces la solución del sistema dado puede alcanzarse por los métodos iterativos de Jacobi o de Gauss – Seidel.

La solución a las matrices anteriores es respectivamente.

$$\text{Matriz A} = \begin{bmatrix} 8 & 5 & 3 & 10 \\ 4 & -10 & 3 & 10 \\ 3 & 2 & -5 & 10 \end{bmatrix} \quad x1 = 1.9640, \; x2 = -0.5237, \; x3 = -1.0311$$

$$\text{Matriz B} = \begin{bmatrix} 10 & 3 & -1 & 10 \\ -5 & 7 & -1 & 10 \\ 7 & -3 & 12 & 10 \end{bmatrix} \quad x1 = 0.5184, \; x2 = 1.9442, \; x3 = 1.0169$$

2.9 MÉTODO DE CHOLESKY

Cholesky demostró que, si una matriz cuadrada A y todas sus submatrices cuadradas principales son no singulares, entonces:

$$A = LU \text{ .... } (1)$$

donde L y U son las matrices triangulares inferior y superior, respectivamente.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}$$

Este método de descomposición LU también recibe el nombre de Método de Crout. Es una técnica eficiente en la solución de algunos problemas.

L y U son esencialmente únicas y si se especifican los elementos diagonales de L (o bien de U). Lo interesante es que podemos obtener L y U sin resolver ecuaciones simultáneas.

Para resolver un sistema AX = b de n ecuaciones con n incógnitas, sustituimos (1) para obtener

$$L\,U\,X = b$$

y multiplicando por L^{-1} se tiene:

$$UX = Z, \text{ donde } Z = L^{-1} b \qquad (2)$$

y observa que ésta es la forma triangular del sistema.

primero se determina Z por medio de

$$L\,Z = b \qquad (3)$$

que proviene de (2). El siguiente paso es resolver

$$U\,X = Z \qquad (4)$$

para hallar la solución.

Ejemplo 2.11 Resolver por el método de Cholesky el sistema de ecuaciones:

$$x + 2y + 3z = 14$$

$$2x + 3y + 4z = 20$$

$$3x + 4y + z = 14$$

Solución. Si empleamos algún otro método podríamos determinar que este sistema tiene por solución: x = 1, y = 2, z = 3.

Ahora determinaremos la solución por el método de Cholesky.

Tenemos que $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix}$

Observamos que la matriz de los coeficientes es simétrica. En consecuencia

$$L = U^t$$

Y pueden determinarse los elementos de U a partir de

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 4 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}$$

Ahora empleamos la multiplicación de matrices e igualamos los elementos.

$$a_{11}a_{11} + 0(0) + 0(0) = 1$$
$$a_{21}a_{11} + a_{22}(0) + 0(0) = 2$$
$$a_{31}a_{11} + a_{32}(0) + a_{33}(0) = 3$$

$$a_{11}a_{12} + 0(a_{22}) + 0(0) = 2$$
$$a_{21}a_{12} + a_{22}(a_{22}) + 0(0) = 3$$
$$a_{31}a_{12} + a_{32}(a_{22}) + (a_{33})(0) = 4$$

$$a_{11}a_{13} + 0(a_{23}) + 0(a_{33}) = 3$$
$$a_{21}a_{13} + a_{22}\,(a_{23}) + (0)a_{33} = 4$$
$$a_{31}a_{13} + a_{32}(a_{23}) + a_{33}(a_{33}) = 1$$

$$a_{11}^2 = 1\text{, de donde } a_{11} = 1$$

$$a_{11}a_{12} = 2, \quad a_{12} = \frac{2}{1} = 2$$

$$a_{11}a_{13} = (1)a_{13} = 3,\ a_{13} = 3$$

$$a_{21}a_{11} = 2,\ a_{21} = 2$$

$$a_{21}a_{12} + a_{22}^2 = 3,\ (2)(2) + a_{22}^2 = 3,\ {a_{22}}^2 = 3 - 4$$

$$\Rightarrow \quad a_{22}^2 = -1 \quad \Rightarrow \quad a_{22} = \sqrt{-1} = i$$

Continuando con la multiplicación: $a_{21}a_{13} + a_{22}a_{23} = 2(3) + ia_{23} = 4$

de donde $a_{23} = \frac{-2}{i} = -2/i$ y, por último

$$a_{31}^2 = 3$$

$$a_{31}a_{12} + a_{32}a_{22} = 3(2) + a_{32}(i) = 4$$

$$a_{32} = \frac{4-6}{i} = -2/i$$

$$a_{31}a_{13} + a_{32}a_{23} + a_{33}a_{33} = (3)(3) + (-2/i)(-2/i) + a_{33}^2 = 1$$

$$a_{33}^2 = 1 - 5 = -4$$

$$\Rightarrow a_{33} = 2i$$

Por consiguiente, L la podemos escribir como:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & i & 0 \\ 3 & 2i & 2i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} z1 \\ z2 \\ z3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 20 \\ 14 \end{pmatrix} \text{ de donde } \begin{pmatrix} z1 \\ z2 \\ z3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 8i \\ 6i \end{pmatrix}$$

Para finalizar resolvemos

$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & i & 2i \\ 0 & 0 & 2i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 \\ 8i \\ 6i \end{pmatrix}$ para hallar: $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$ que corresponde a la solución del sistema

Comprobación

$$x + 2y + 3z = 1 + 2(2) + 3(3) = 14$$

$$2x + 3y + 4z = 2 + 6 + 12 = 20$$

$$3x + 4y + z = 3 + 8 + 3 = 14$$

Ejemplo 2.12 Resolver por el método de Cholesky el sistema de ecuaciones lineales:

$$4x + y + 2z = 1$$

$$x + 2y = 2$$

$$2x + 5z = 4$$

Solución. Escribimos este sistema empleando notación matricial.

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Notamos que la matriz es simétrica y positivamente definida. En consecuencia

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}$$

De la multiplicación de matrices se llega a

$a_{11}a_{11} = 4$, $a_{11}a_{12} = 1$, $a_{11}a_{13} = 2$

$a_{21}a_{11} = 1$, $a_{21}a_{12} + a_{22}a_{22} = 2$, $a_{21}a_{13} + a_{22}a_{23} = 0$

$a_{31}a_{11} = 2$, $a_{31}a_{12} + a_{32}a_{22} = 0$, $a_{31}a_{13}$ + a_32$a_{23} + a_{33}a_{33} = 5$

$a_{11} = 2$, $a_{12} = 0.5$, $a_{13} = 1$

$a_{21} = 0.5$, $a_{22} = \sqrt{1.75} = 1.3228$, $a_{23} = -0.3779$

$a_{31} = 1$ $a_{32} = -0.378$ $a_{33} = 1.9639$

Por consiguiente

$$L = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1.3228 & 0 \\ 1 & -0.3779 & 1.9639 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 0.5 & 1 \\ 0 & 1.3228 & -0.3779 \\ 0 & 0 & 1.9639 \end{pmatrix}$$

$$LZ = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0.5 & 1.3228 & 0 \\ 1 & -0.3779 & 1.9639 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ Z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$Z_1 = 0.5$$

$$Z_2 = 1.3228$$

$$Z_3 = 2.0367$$

Para finalizar resolvemos UX = Z para hallar la solución.

$$\begin{pmatrix} 2 & 0.5 & 1 \\ 0 & 1.3228 & -0.3779 \\ 0 & 0 & 1.9639 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.5 \\ 1.3228 \\ 2.0367 \end{pmatrix}$$

$x = -0.59259$
$y = 1.29629$
$z = 1.037$

Esto es $\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.59259 \\ 1.29629 \\ 1.037 \end{pmatrix}$

2.10 LOS VALORES Y VECTORES PROPIOS DE UNA MATRIZ

Sea A una matriz cuadrada. El escalar λ, es llamado un valor propio de la matriz A, si este satisface la siguiente ecuación

$$det(\lambda I - A) = 0 \qquad \text{(A)}$$

La ecuación misma que define los valores propios de la matriz A se conoce como la ecuación característica de A, ecuación (A). Este tipo de vectores propios son útiles para resolver sistemas de ecuaciones lineales homogéneas. El mejor método conocido es el de Faddeev-Leverrier.

Ejemplo 2.13 Hallar los valores propios de la matriz $A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$

$$det\left[\lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right] = 0$$

$$det\left[\begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\right] = 0$$

$$det\begin{bmatrix} \lambda - 3 & 0 - 2 \\ 0 + 1 & \lambda - 0 \end{bmatrix} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \begin{vmatrix} \lambda - 3 & -2 \\ 1 & \lambda \end{vmatrix}$$

$$(\lambda - 3)\lambda - (1)(-2) = \lambda 2 - 3\lambda + 2 = 0$$

$$(\lambda - 2)(\lambda - 1) = 0$$

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_2 = 2$$

Definición

Los vectores propios de A correspondientes al valor propio λ, son los vectores solución del sistema $(\lambda I - A)X = 0$

Ejemplo 2.14 Encuentre los vectores propios de la matriz del ejemplo anterior.

Solución. Dado que la matriz considerada tiene dos valores propios, tendremos que considerar dos casos:

Caso 1: $\lambda = 1$ El sistema correspondiente es $(1I - A)X = 0$

Que equivale a $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\begin{pmatrix} -2 & -2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{matrix} -2x - 2y = 0 \\ x + y = 0 \end{matrix}$$

Cuyas soluciones vienen dadas por $\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Teniendo con esto, que el conjunto de vectores propios de A correspondientes a $\lambda = 1$ es:

$$\left\{ \begin{matrix} t \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\ \text{donde } t \text{ es un real arbritario} \end{matrix} \right\}$$

Caso 2. El sistema correspondiente es $(2I - A)X = 0$

$$\begin{pmatrix} -1 & -2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{matrix} -x - 2y = 0 \\ x + 2y = 0 \end{matrix}$$

El que a su vez tiene por solución al conjunto de vectores

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = t \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Siendo t un real arbitrario.

Se tiene así que la colección de vectores propios de A correspondientes al valor propio de $\lambda = 2$ es

$$\left\{ \begin{array}{c} t\begin{pmatrix}-2\\1\end{pmatrix} \\ \text{donde } t \text{ es un real arbitrario} \end{array} \right\}$$

2.11 MÉTODO DE NEWTON PARA SISTEMAS NO LINEALES

Un sistema de ecuaciones no lineales tiene la forma:

$$\begin{array}{c} f_1(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n) = 0 \\ f_2(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ f_n(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_n) = 0 \end{array} \qquad \text{(I)}$$

Ahora, consideremos un sistema no lineal de 2 ecuaciones y 2 incógnitas de la forma,

$$\begin{array}{c} f_1(x, y) = 0 \\ f_2(x, y) = 0 \end{array} \qquad \text{(II)}$$

Desarrollaremos el método de Newton para el sistema (II). El resultado se puede extender a un sistema del tipo (I).

Según la serie de Taylor:

$$f_1(x,y) = f_1(x=a, y=b) + \frac{\partial f_1}{\partial x}(x-a) + \frac{\partial f_1}{\partial x}(y-b) +$$

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 f_1}{\partial x^2}(x-a)^2 + 2\frac{\partial^2 f_1}{\partial x \partial y}(x-a)(y-b) + \frac{\partial^2 f_1}{\partial y^2}(y-b)^2\right] +$$

$$\frac{1}{6}\left[\frac{\partial^3 f_1}{\partial x^3}(x-a)^3 + 3\frac{\partial^3 f_1}{\partial x^2 \partial y}(x-a)^2(y-b) + 3\frac{\partial^3 f_1}{\partial x \partial y^2}(x-a)(y-b)^2 + \frac{\partial^3 f_1}{\partial y^3}(y-b)^3\right] + \cdots$$

$$f_2(x,y) = f_2(x=a, y=b) + \frac{\partial f_2}{\partial x}(x-a) + \frac{\partial f_2}{\partial x}(y-b) +$$

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 f_2}{\partial x^2}(x-a)^2 + 2\frac{\partial^2 f_2}{\partial x \partial y}(x-a)(y-b) + \frac{\partial^2 f_2}{\partial y^2}(y-b)^2\right] +$$

$$\frac{1}{6}\left[\frac{\partial^3 f_2}{\partial x^3}(x-a)^3 + 3\frac{\partial^3 f_2}{\partial x^2 \partial y}(x-a)^2(y-b) + 3\frac{\partial^3 f_2}{\partial x \partial y^2}(x-a)(y-b)^2 + \frac{\partial^3 f_2}{\partial y^3}(y-b)^3\right] + \cdots$$

Si ahora despreciamos las derivadas parciales de orden mayor o igual a dos, y como $f_1(x,y) = 0$, $f_2(x,y) = 0$, entonces

$$0 \approx f_1(a,b) + \frac{\partial f_1}{\partial x}(x-a) + \frac{\partial f_1}{\partial y}(y-b)$$

$$0 \approx f_2(a,b) + \frac{\partial f_2}{\partial x}(x-a) + \frac{\partial f_2}{\partial y}(y-b)$$

Si a y b corresponden a un valor inicial de x y de y respectivamente, se puede establecer un valor cercano a la solución tal que $x = x_{n+1}$, y $y = y_{n+1}$. En términos de variables de desviación se definen dos variables h y k que tienden a cero en la solución del sistema de ecuaciones no lineales. Esto es,

$$0 \approx f_1(x_n, y_n) + \frac{\partial f_1}{\partial x}(x_{n+1} - x_n) + \frac{\partial f_1}{\partial y}(y_{n+1} - y_n)$$

$$0 \approx f_2(x_n, y_n) + \frac{\partial f_2}{\partial x}(x_{n+1} - x_n) + \frac{\partial f_2}{\partial y}(y_{n+1} - y_n)$$

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

$$-f_1(x_n, y_n) = \frac{\partial f_1}{\partial x}h + \frac{\partial f_1}{\partial y}k,$$

$$-f_2(x_n, y_n) = \frac{\partial f_2}{\partial x}h + \frac{\partial f_2}{\partial y}k$$

Finalmente, en forma matricial

$$\begin{pmatrix} -f_1(x_n, y_n) \\ -f_2(x_n, y_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} \qquad \text{(III)}$$

A la matriz $\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix}$ se le conoce como matriz jacobiana, y se representa

$$J = \left[\frac{f_1 f_2}{xy}\right]$$

A través de este arreglo puede establecerse un proceso iterativo para hallar la solución de un sistema de ecuaciones no lineales. El procedimiento se muestra con el siguiente ejemplo.

Ejemplo 2.15. Resolver el sistema:

$$f_1(x, y) = x^2 - 8x + y^2 + 8.1875$$

$$f_2(x, y) = xy^2 + x - 8y + 6.1562$$

Iniciando la iteración con los valores (x, y) = (0,0)

$$-f_1\ (0, 0) = -8.1875 \qquad -f_2\ (0, 0) = -6.1562$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x-8 & 2y \\ y^2+1 & 2xy-8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -8 & 0 \\ 1 & -8 \end{pmatrix}$$

por lo tanto, sustituyendo en (III)

$$\begin{pmatrix} -8.1875 \\ -6.1562 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -8 & 0 \\ 1 & -8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}$$

por lo que, resolviendo para h y k

$$-8h = -8.1875$$

$$h - 8k = -6.1562$$

resolviendo, $h = 1.0234$, $k = 0.8975$

la nueva aproximación es

$$x_1 = x_0 + h = 0 + 1.0234$$

$$y_1 = y_0 + k = 0 + 0.8975$$

Segunda iteración, x = 1.0234, y = 0.8975

$$-f_1(1.0234, 0.8975) = -1.8528$$

$$-f_2(1.0234, 0.8975) = -0.8243$$

$$\begin{pmatrix} -1.8528 \\ -0.8243 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x-8 & 2y \\ y^2+1 & 2xy-8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5.9531 & 1.7949 \\ 1.8054 & -6.1630 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}$$

por lo tanto, resolviendo para h y k

$$-1.8528 = -5.9531h + 1.7949k$$

$$-0.8243 = 1.8054h - 6.1630k$$

reduciendo términos, $h = 0.3856$, $k = 0.2467$

por lo que

$$x_2 = x_1 + h = 1.0234 + 0.3856 = 1.4091$$

$$y_2 = y_1 + k = 0.8975 + 0.2467 = 1.1442$$

Sustituyendo en f1 y f2.

$$f_1(x, y) = 0.2096 \qquad f_1(x, y) = 0.2565$$

Tercera iteración

$$\begin{pmatrix} -0.2096 \\ -0.2565 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2x-8 & 2y \\ y^2+1 & 2xy-8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5.1819 & 2.2883 \\ 2.3091 & -4.7756 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h \\ k \end{pmatrix}$$

por lo tanto, resolviendo para h y k

$$h = 0.0816, k = 0.0932$$

por lo que

$$x_2 = x_1 + h = 1.4091 + 0.0816 = 1.4907$$

$$y_2 = y_1 + k = 1.1442 + 0.0932 = 1.2374$$

Sustituyendo en f1 y f2.

$$f_1(x, y) = 0.0153 \qquad f_2(x, y) = 0.0303$$

La solución exacta es x = 1.5, y = 1.25

Código de programación Matlab

```
clear;format compact;clc;
x=0
y=0
for i=1:5
    f1=x^2-8*x+y^2+8.1875
    f2=x*y^2+x-8*y+6.1562
    j=[2*x-8 2*y -f1;y^2+1 2*x*y-8 -f2]
    d=rref(j);
    h=d(5)
    k=d(6)
    fprintf('Nueva aproximación i = %2.0f \n',i+1)
    x=x+d(1,3)
    y=y+d(2,3)
end
```

Resultado de la corrida

```
x =  0, y =  0
f1 = 8.1875
f2 = 6.1562
j =
   -8.0000         0   -8.1875
    1.0000   -8.0000   -6.1562
h = 1.0234
k = 0.8975
Nueva aproximación i =  2
x = 1.0234
y = 0.8975
```

```
f1 = 1.8528
f2 = 0.8243
j =
   -5.9531    1.7949   -1.8528
    1.8054   -6.1630   -0.8243
h = 0.3856
k = 0.2467

Nueva aproximación i =  3
x = 1.4091
y = 1.1442
f1 = 0.2096
f2 = 0.2565
j =
   -5.1819    2.2883   -0.2096
    2.3091   -4.7756   -0.2565
h = 0.0816
k = 0.0932
Nueva aproximación i =  4
x = 1.4907
y = 1.2373
f1 = 0.0153
f2 = 0.0303
j =
   -5.0187    2.4747   -0.0153
    2.5310   -4.3111   -0.0303
h = 0.0092
k = 0.0124
Nueva aproximación i =  5
x = 1.4998
y = 1.2498
f1 =  2.3881e-04
f2 =  5.1414e-04
j =
   -5.0003    2.4995   -0.0002
    2.5619   -4.2511   -0.0005
h =   1.5487e-04
k =   2.1428e-04
Nueva aproximación i =  6
x =  1.5000
y =  1.2500
```

Ejemplo 2.16. Resuelva el sistema no lineal de tres variables.

$$x^2 - y^2 + z = 5$$

$$4x + y^3 + z = 7$$

$$x + y - z = 0$$

Solución. Establecer las funciones y el Jacobiano.

$$f_1(x, y, z) = x^2 - y^2 + z - 5$$

$$f_2(x, y, z) = 4x + y^3 + z - 7$$

$$f_3(x, y, z) = x + y - z$$

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x} & \frac{\partial f_1}{\partial y} & \frac{\partial f_1}{\partial z} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x} & \frac{\partial f_2}{\partial y} & \frac{\partial f_2}{\partial z} \\ \frac{\partial f_3}{\partial x} & \frac{\partial f_3}{\partial y} & \frac{\partial f_3}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x & -2y & 1 \\ 4 & 3y^2 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

Iniciando con X = (2, 2, 2)

$$f_1(x, y, z) = (2)^2 - (2)^2 + 2 - 5 = -3$$

$$f_2(x, y, z) = 4(2) + (2)^3 + 2 - 7 = 11$$

$$f_3(x, y, z) = 2 + 2 - 2 = 2$$

$$J = \begin{bmatrix} 2(2) & -2(2) & 1 \\ 4 & 3(2)^2 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -4 & 1 \\ 4 & 12 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$d = \begin{bmatrix} 4 & -4 & 1 & -f_1 \\ 4 & 12 & 1 & -f_2 \\ 1 & 1 & -1 & -f_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -4 & 1 & 3 \\ 4 & 12 & 1 & -11 \\ 1 & 1 & -1 & -2 \end{bmatrix}$$

Resolviendo por Gauss – Jordan

$$d = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -0.3250 \\ 0 & 1 & 0 & -0.8750 \\ 0 & 0 & 1 & 0.8000 \end{bmatrix}$$

h = –0.3250, k = –0.8750, l = 0.8000

x = x + h = 1.6750, y = y + k = 1.1250, z = z + l = 2.8000

Para facilitar el cálculo se emplea el código de Matlab

```
clear;format compact;clc;
x=2
y=2
z=2
for i=1:10
    f1=x^2-y^2+z-5
    f2=4*x+y^3+z-7
    f3=x+y-z
    f=[-f1;-f2;-f3]
    j=[2*x -2*y 1;4 3*y^2 1; 1 1 -1]
    jb=[j f]
    d=rref(jb)
    h=d(10)
    k=d(11)
    l=d(12)
    fprintf('Nueva aproximación i = %2.0f \n',i+1)
    x=x+h
    y=y+k
    z=z+l
end
```

Algunos datos obtenidos son los siguientes:

```
x = 2, y = 2, z = 2
f1 = -3, f2 = 11, f3 = 2
h = -0.3250, k =  -0.8750, l = 0.8000

Nueva aproximación i =  2
x = 1.6750, y = 1.1250, z = 2.8000
f1 = -0.6600, f2 = 3.9238, f3 = 0
h = -0.0641, k = -0.7512, l = -0.8153

Nueva aproximación i =  3
x = 1.6109,  y =  0.3738, z = 1.9847
f1 = -0.5601, f2 =  1.4805, f3 = 2.2204e-16
```

```
h =  0.2470, k = -1.9134, l = -1.6663

Nueva aproximación i =  4
x =  1.8579, y = -1.5395, z = 0.3184
f1 = -3.6000, f2 = -2.8989, f3 = -2.2204e-16
h =  0.9731, k =  -0.2425, l = 0.7306

Nueva aproximación i =  5
x =  2.8310, y = -1.7820, z =  1.0490
f1 =  0.8882, f2 = -0.2859, f3 =  0
h = -0.2252, k = 0.1341, l = -0.0911

Nueva aproximación i =  6
x = 2.6058, y = -1.6479, z = 0.9579
f1 =  0.0327, f2 = -0.0938, f3 =  0
h = -0.0199, k = 0.0211, l = 0.0012

Nueva aproximación i =  7
x =  2.5860, y = -1.6268, z = 0.9592
f1 = -5.0919e-05, f2 = -0.0022, f3 = -2.2204e-16
h = -2.6182e-04, k = 3.9187e-04, l = 1.3005e-04
```

Después de 7 iteraciones se alcanza la solución del sistema.

N	x	y	z	F1	F2	F3	h	k	l
1	2	2	2	–3	11	2	–0.325	–0.875	0.8
2	1.675	1.1250	2.8	–0.66	3.9238	0	–0.0641	–0.7512	–0.8153
3	1.6109	0.3738	1.9847	–0.5601	1.4805	0	0.247	–1.9134	–1.6663
4	1.8579	-1.539	0.3184	–3.6	-2.8989	0	0.9731	–0.2425	0.7306
5	2.8310	-1.782	1.0490	0.8882	-0.2859	0	–0.2252	0.1341	–0.0911
6	2.6058	-1.647	0.9579	0.0327	-0.0938	0	–0.0199	0.0211	0.0012
7	2.5860	-1.626	0.9292	0	-0.0022	0	0	0	0

Solución: $x = 2.586$, $y = -1.626$, $z = 0.9292$

2.12 MÉTODO DE BROYDEN

Este método se utiliza en lugar del Newton Multivariable cuando la derivada de la función es difícil de precisar. Se le conoce como método iterativo tipo cuasi-newton. Fue desarrollado por Charles G. Broyden y el procedimiento es el siguiente.

1. Partiendo de las funciones no lineales f1(x,y) y f2(x,y), se asignan valores iniciales para evaluar ambas funciones, X0.

2. Se define el jacobiano del sistema J y se obtiene su inversa A

3. Con el valor inicial y la inversa del jacobiano se obtiene una nueva aproximación X1.

$$X_1 = X_0 - AF_0$$

4. Se aplica la fórmula de Sherman-Morrison

$$A_1^{-1} = A_0^{-1} + \frac{[\,(X^1 - X^0) - A_0^{-1}Y_1](X^1 - X^0)A_0^{-1}}{(X^1 - X^0)A_0^{-1}Y_1}$$

5. Se evalúa la nueva aproximación.

Utilizaremos el ejemplo anterior para mostrar las operaciones necesarias de este método.

Sean $f_1(x,y) = x^2 - 8x + y^2 + 8.1875$ y $f_2(x,y) = xy^2 + x - 8y + 6.1562$ hallar una solución.

$$X0 = (0,0) \quad F = \begin{bmatrix} 0^2 - 8(0) + 0^2 + 8.1875 \\ 0(0)^2 + 0 - 8(0) + 6.1562 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8.1875 \\ 6.1562 \end{bmatrix}$$

$$J = \begin{bmatrix} 2x - 8 & 2y \\ y^2 + 1 & 2xy - 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -8 & 0 \\ 1 & -8 \end{bmatrix}$$

$$A = inv(J) = \begin{bmatrix} -0.125 & 0 \\ -0.015625 & -0.125 \end{bmatrix}$$

$$X_1 = X_0 - A_0F_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.125 & 0 \\ -0.015625 & -0.125 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 8.1875 \\ 6.1562 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0234375 \\ 0.897454 \end{bmatrix}$$

$$DX_1 = X_1 - X_0 = \begin{bmatrix} 1.0234375 \\ 0.897454 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0234375 \\ 0.897454 \end{bmatrix}$$

$$(DX_1)^T = [1.0234375 \quad 0.897454]$$

Segunda aproximación

X1 = (1.0234375, 0.897454)

$$F_1 = \begin{bmatrix} 1.0234375^2 - 8(1.234375) + 0.897454^2 + 8.1875 \\ 1.0234375(0.897454)^2 + 1.0234375 - 8(0.897454) + 6.1562 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.852849 \\ 0.8243 \end{bmatrix}$$

$$DF_1 = F_1 - F_0 = \begin{bmatrix} 1.852849 \\ 0.8243 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 8.1875 \\ 6.1562 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -6.33465 \\ -5.33189 \end{bmatrix}$$

$$DX_1 - A_0F_1 = \begin{bmatrix} 1.0234375 \\ 0.897454 \end{bmatrix} - \left\{ \begin{bmatrix} -0.125 & 0 \\ -0.015625 & -0.125 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -6.33465 \\ -5.33189 \end{bmatrix} \right\} = \begin{bmatrix} -0.42986 \\ -0.3934245 \end{bmatrix}$$

$$DX_1{}^T A_0 = \begin{bmatrix} 1.0234375 & 0.897454 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -0.125 & 0 \\ -0.015625 & -0.125 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.2370126 & -0.214646 \end{bmatrix}$$

$$DX_1{}^T A_0 DF_1 = \begin{bmatrix} 1.0234375 & 0.897454 \end{bmatrix} \left\{ \begin{bmatrix} -0.125 & 0 \\ -0.015625 & -0.125 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -6.33465 \\ -5.33189 \end{bmatrix} \right\}$$

$$= 2.6458648$$

$$B_1 = \frac{(DX_1 - A_0F_1)DX_1{}^T A_0}{DX_1{}^T A_0 DF_1} = \begin{bmatrix} 0.0385 & 0.0348 \\ 0.0352 & 0.0319 \end{bmatrix}$$

$$A_1 = A_0 + B_1 = \begin{bmatrix} -0.125 & 0 \\ -0.015625 & -0.125 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.0385 & 0.0348 \\ 0.0352 & 0.0319 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.14574 & -0.01878 \\ -0.01873 & -0.14606 \end{bmatrix}$$

$$X_2 = X_1 - A_1F_1 = \begin{bmatrix} 1.0234375 \\ 0.897454 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.14574 & -0.01878 \\ -0.01873 & -0.14606 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.852849 \\ 0.8243 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.308972 \\ 1.052563 \end{bmatrix}$$

Se evalúa el sistema

$$F_2 = \begin{bmatrix} 1.308972^2 - 8(1.308972) + 1.052563^2 + 8.1875 \\ 1.308972(1.052563)^2 + 1.308972 - 8(1.052563) + 6.1562 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.537 \\ 0.495 \end{bmatrix}$$

Repitiendo tres cálculos se encuentra una solución en x = 1.5 , y = 1.25

n	x	y	Fx1	Fx2
3	1.4663	1.2069	0.0637	0.103
4	1.4973	1.2463	0.004	0.0085
5	1.49997	1.2499	0	0

2.13 PROBLEMAS UNIDAD II

1. Utilizando la matriz A demostrar que

a) $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T$

b) $(A^2)^{-1} = (A^{-1})^2$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -3 & 4 \end{bmatrix}$$

2. Resolver los siguientes sistemas de ecuaciones simultáneas.

a)
$$2(2x + 8) - 3y = 27$$
$$x + 2y - \tfrac{1}{3}(3x - 2) = \tfrac{4}{3}$$

b)
$$x + 2y = 3z + 4$$
$$5y + 5x = 4z - 6$$
$$6x + 2y = 5z + 2$$

c)
$$2x - 6y - 1 = -38$$
$$-3x - y + 7z = -34$$
$$-8x + y - 2z = -20$$

Utilice cualquiera de los métodos de la unidad 2

3. Resolver los siguientes sistemas de ecuaciones por el método de LU (Cholesky):

a)
$$5x + 5y = 0$$
$$3x + 2y = -2$$

b)
$$2x + 3y + 2z = 6$$
$$4x + y + 4z = 2$$
$$3x + 6y + 2z = 14$$

c)
$$3x - y + z = 1$$
$$3x + 6y + 2z = 0$$
$$3x + 3y + 7z = 4$$

4. Aplicar el método de Jacobi y Gauss-Seidel para resolver los siguientes sistemas de ecuaciones lineales

a)
$$\begin{aligned} 10x - y &= 9 \\ -x + 10y - 2z &= 7 \\ -2y + 10z &= 6 \end{aligned}$$

b)
$$\begin{aligned} 10x_1 + 5x_2 &= 6 \\ 5x_1 + 10x_2 - 4x_3 &= 25 \\ -4x_2 + 8x_3 - x_4 &= -11 \\ -x_3 + 5x_4 &= -11 \end{aligned}$$

c)
$$\begin{aligned} \pi x + y - z &= 0 \\ x + \sqrt{2}y &= 2 \\ 2x - y + 3ez &= -3 \end{aligned}$$

5. Realizar cinco iteraciones para los siguientes sistemas no lineales. Usando newton multivariable (NMV)

Utilice valores iniciales de x = y = 1.2

a)
$$\begin{aligned} 4x^2 - 20y + \tfrac{1}{4}y^2 + 8 &= 0 \\ \tfrac{1}{2}xy^2 + 2x - 5y + 8 &= 0 \end{aligned}$$

b)
$$\begin{aligned} y &= x^2 - x - 5.45 \\ x^2 - y &- 5xy + 48.8 \end{aligned}$$

6. Determine las raíces del siguiente sistema no lineal, usando el método de Newton Multivariable o Método de Broyden. Use x = 1, y = 0 y un error = 0.001

$$f_1 = 4x^2 - 20y + y^2 + 32$$

$$f_2 = 0.5yx^2 + 2yx^3 - \frac{1}{x^3} - 4$$

Respuestas a problemas

1. a) $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T = \begin{bmatrix} 0.4 & 0.3 \\ -0.2 & 0.1 \end{bmatrix}$ b) $(A^2)^{-1} = (A^{-1})^2 = \begin{bmatrix} 0.1 & -0.1 \\ 0.15 & -0.05 \end{bmatrix}$

2. a) x = 3, y = 1/3

   b) x = 1.733, y = –2.133, z = –3.333

   c) x = 4, y = 8, z = –2

3. a) x = –2, y = 2

   b) x = 2, y = 2, z = –2

   c) x = 0.0351, y = –0.2368, z = 0.6579

4. a) x = 0.9958, y = 0.9579, z = 0.7916

   b) x_1 = –0.7976, x_2 = 2.7953, x_3 = -0.2588, x_4 =-2.2518

   c) x = –0.5815, y = 1.8254, z = -0.0014

5. a) x =-1.5214, y = 0.8643

   b) x =3.5, y = 3.3

6. a) x =1, y = 2

2.14 PROBLEMAS DE APLICACIÓN 2

Problema 1. Un ingeniero químico tiene soluciones que contienen un cierto ácido. La primera contiene 10% de ácido, la segunda 30% y la tercera 50%. Desea utilizar las tres soluciones para obtener una mezcla de 25 kg que contenga 40% de ácido empleando dos veces más de la solución del 50% que de la de 30% ¿Cuántos kg deberán emplearse en cada solución?

R. x = 2.5 kg, y = 7.5 kg, z = 15 kg

Problema 2. Un ingeniero químico debe preparar 20 ml de unas gotas para los ojos para un paciente de glaucoma. La solución de las gotas debe contener 4% de un ingrediente activo pero el farmacéutico solo tiene una solución al 12% y la otra al 2% en su almacén, ¿Qué cantidad de cada tipo de solución debe usar para preparar la receta?

R. A = 4 ml, B = 16 ml

Problema 3. ¿Cuánto estaño y cuanto plomo deben añadirse a 600g de una aleación que contiene 50% de estaño y 25% de plomo, para lograr una aleación con 60% de estaño y 20% de plomo?

R. Estaño = 150 g, Plomo = 0 g

Problema 4. Un hombre tiene 110 animales entre vacas, caballos y borregos; 1/8 del número de vacas más 1/9 del número de caballos más 1/5 del número de borregos equivalen a 15; y la suma del número de borregos con el de vacas es 65. ¿Cuántos animales de cada clase tiene?

R. Vacas = 40, Caballo = 45, Borregos = 25

Problema 5. Una tienda se especializa en mezclas de café para exigentes. El dueño desea preparar bolsas de una libra que se vendan en $8.50, combinando granos de Colombia, Brasil y Kenia. El costo por libra de estos cafés es $10, $6 y $8, respectivamente. La cantidad del café de Colombia debe triplicar al de Brasil, ¿Qué cantidad de cada tipo de café da la mezcla?

R. Colombia = 3/8 lb, Brasil = 1/8 lb, Kenia = 1/2 lb

Problema 6. Un proveedor de productos para jardinería cuenta con tres tipos de fertilizantes para pasto, G1, G2 y G3, que tienen un contenido de nitrógeno de 30, 15 y 20 por ciento. El proveedor piensa mezclarlos y obtener 600 libras de fertilizantes con un contenido de nitrógeno de 25 por ciento. La mezcla ha de contener 100 libras más del tipo G3, que del tipo G2, ¿Cuánto de cada tipo debe usar?

R. G1 = 340 lb, G2 = 80 lb, G3 = 180 lb

Problema 7. La presión que se requiere para sumir un objeto grande y pesado en un suelo blando y homogéneo situado arriba de un terreno de base dura, puede predecirse mediante la presión que se requiere para introducir objetos más pequeños en el mismo terreno. Para sumir una placa circular r a una distancia d en el terreno blando, puede aproximarse con una ecuación de la forma:

$$p = k_1 e^{k_2 r} + k_3 r$$

k1, k2 y k3 son constantes. Si queremos determinar el tamaño mínimo de una placa de radio r para sostener una gran carga, se meten tres placas pequeñas. Esto genera las tres ecuaciones no lineales.

$$p_1 = k_1 e^{k_2 r} + k_3 r$$

$$p_2 = k_1 e^{k_2 r} + k_3 r$$

$$p_3 = k_1 e^{k_2 r} + k_3 r$$

Calcular k1 k2 y k3 si: r1=1plg, p1=10 lb/plg^2; r2= 2plg, p2=12 lb/plg^2; r3=3 plg, p3=15 lb/plg^2

R. k1 = -1.5809 x 10^{-6}, k2 = 7.6189, k3 = 10.0041

Problema 8. Se va a construir una mesa en forma de rectángulo con dos semicírculos, en los extremos para una sala de conferencias. Debe tener un perímetro de 40 ft y el área de la porción rectangular tiene que ser el doble de la suma de las áreas de los extremos, encuentra la longitud l y el ancho w de la porción rectangular

R. l = 10 ft, w = 6.37 ft

Problema 9. Encontrar una ecuación del círculo de la forma:

$$f(x) = x^2 + y^2 + ax + by + c = 0$$

que pase por los puntos:

a) P(2, 1), Q(−1, −4), R(3, 0)

b) P(−5, 5), Q(−2, −4), R(2 ,4)

c) R. a) a = −1, b = 3, c = −6. b) a = 3.0769, b = −8.4615, c = 7.6923

Problema 10. Encuentra ecuaciones a fin de hallar las alturas del triángulo con vértices A(-3,2), B(5,4) y C(3,-8), además el punto en que las alturas se cortan.

R. $\boldsymbol{y - 3 = -\frac{11}{4}(x - 1), \quad y - 4 = \frac{8}{5}(x - 5), \quad y + 2 = -\frac{7}{4}(x - 4),}$

$\boldsymbol{M(x, y) = (5/3, -2/3)}$

UNIDAD 3
Interpolación y ajuste

En las Unidades 1 y 2 se analizó el problema: "Dada una función no lineal de una variable independiente *x*, ¿cuál es el valor de *x* correspondiente a cierto valor de la función ?". En la Unidad I, *x* era una sola variable. En la Unidad 2, *x* era un vector. Ahora se considerará una pregunta a la inversa: Dados los valores de una función desconocida correspondiente a ciertos valores de *x*, ¿cuál es el comportamiento de la función?, ¿Cuál es la función?

El objetivo, entonces, es determinar el comportamiento de la función, tal como se evidencie por las muestras de los pares de datos $(x, f(x))$. La estrategia por utilizar para aproximarse a los valores desconocidos de la función es directa. Se encontrará un polinomio que satisfaga un conjunto de puntos seleccionados $(xi, f(xi))$ y, se supondrá que el polinomio y la función se comportan casi de la misma manera, sobre el intervalo en cuestión. Entonces los valores de los polinomios, deben ser estimaciones razonables de los valores de la función desconocida.

Algunas funciones de aproximación fundamentales son de tres tipos:

a) Polinomial

b) Funciones de Fourier

c) Funciones exponenciales

La gran ventaja de aproximar información discreta o de funciones complicadas con funciones analíticas sencillas, radica en su mayor facilidad de evaluación y manipulación.

De los tres tipos de aproximaciones mencionadas, el de aproximaciones polinomiales es el que más se emplea por su facilidad de manejo en evaluaciones, derivaciones, integraciones, etc.

Para aproximar a $f(x)$ por medio de un polinomio, se aplica alguno de los criterios siguientes: el de mínimos cuadrados y el de ajuste exacto.

Cuando los datos no son muy precisos, es necesario crear una curva simple que represente el comportamiento general de los datos. Expresado en otras palabras, el problema consiste en determinar un polinomio que pase entre los puntos y que satisfaga la condición de minimizar la suma de las desviaciones elevadas al cuadrado. Este método recibe el nombre de “mínimos cuadrados”.

Donde se conoce que los datos son muy exactos, el proceso es ajustar una curva o una serie de curvas que pasen exactamente por cada uno de los puntos. Estos datos generalmente se derivan de tablas. En esto consiste el “ajuste exacto”. El polinomio de interpolación pasa exactamente por cada uno de los puntos coocidos.

Interpolación

A la estimación de valores entre puntos discretos conocidos recibe el nombre de interpolación.

La fórmula general de un polinomio de n-ésimo grado es

$$f(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + a_{n-2} x^{n-2} + \cdots + a_1 x + \mathrm{a}_0 \qquad (1)$$

Para n+1 puntos, existe uno y sólo un polinomio de n-ésimo grado o menor que pasa a través de todos los puntos.

Si se desea aproximar una función con un polinomio de grado n, se requieren n+1 puntos, que sustituidos en la ecuación polinomial de grado n dada por (1) genera un sistema de n+1 ecuaciones lineales en las incógnitas: an, an-1, an-2, ….a0.

Una vez resuelto el sistema se sustituyen los valores de ai en la ecuación (1), con lo cual se obtiene el polinomio de aproximación. Esta es la aproximación polinomial.

Existe sólo una línea recta que conecta dos puntos. Existe solo una parábola (un polinomio de segundo grado) que conecta tres puntos. Un polinomio de tercer grado conecta a cuatro puntos.

El polinomio de interpolación consiste en determinar el único polinomio de n ésimo grado que se ajusta a los n+1 puntos dados. Este polinomio proporciona una fórmula para determinar los valores intermedios.

Aunque existe uno y sólo un polinomio de n-ésimo grado que se ajusta a los n+1 puntos, existen una gran variedad de métodos numéricos mediante los cuales se puede expresar este polinomio. En esta Unidad desarrollaremos varios de esos métodos.

Lista de Métodos

1. Método de Mínimos Cuadrados
2. Polinomio simple
3. Polinomio de Lagrange
4. Método de Newton – Gregory
5. Método lineal de Aitken

3.1 MÉTODO DE MÍNIMOS CUADRADOS

Este método desarrolla ecuaciones polinomiales para obtener "el mejor ajuste" que sea intuitivamente razonable, que sea objetivo, y que bajo ciertas condiciones produzca la mejor predicción de $f(x)$ para un valor dado de x.

El principio de los mínimos cuadrados se puede enunciar en la forma siguiente. Tómese como la recta (o curva) de "mejor ajuste" aquella que minimiza la suma de los cuadrados de las desviaciones de los valores observados de y a los valores esperados por $f(x)$. Expresado matemáticamente, deseamos escoger minimizar

$$pe = \sum_{i=1}^{n}(y_i - y)^2 \qquad (2)$$

El símbolo pe representa la suma de los cuadrados de las desviaciones, o como se le llama comúnmente, la "suma de los cuadrados del error". yi (i = 1, 2, 3, ... n) es el conjunto de las ordenadas, y Y es el polinomio $f(x)$ de mejor ajuste. Esto es,

$$Y = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + a_{n-2}x^{n-2} + \cdots + a_1 x + a_0$$

1er caso. Polinomio de grado cero (Y = a0)

$$pe = \sum_{i=1}^{n}(y_i - y)^2$$

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

Minimizando pe, es decir, derivando:

$$\frac{d(pe)}{da_0} = \frac{\partial}{\partial a_0}\left[\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0)^2\right] = 2\sum(y_i - a_0)(-1)$$

Igualando a cero y resolviendo para a0

$$\sum y_i - na_0 = 0$$

finalmente

$$a_0 = \frac{\sum y_i}{n}$$

$$Y = a_0$$

Es decir, el mejor ajuste para Y = ao, es la media aritmética del conjunto de valores Yi. El polinomio de grado 0, quedaría

$$Y = a_0$$

2º. Caso. Polinomio de grado 1 ($y = a_1x + a_0$)

Sustituyendo y en (2): $pe = \sum_{i=1}^{n}(y_i - a_0 - a_1x)^2$

Derivando parcialmente respecto a1 y a0

$$\frac{\partial}{\partial a_1}\left[\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_1x - a_0)^2\right] = 2\sum(y_i - a_1x - a_0)(-x)$$

$$\frac{\partial}{\partial a_0}\left[\sum_{i=1}^{n}(y_i - a_1x - a_0)^2\right] = 2\sum(y_i - a_1x - a_0)(-1)$$

Igualando a cero $\frac{\partial pe}{\partial a_0}$ y $\frac{\partial pe}{\partial a_1}$, llegamos a

$$\sum xy - a_1\sum x^2 - a_0\sum x = 0$$

$$\sum y - a_1 \sum x - \sum a_0 = 0$$

Finalmente,

$$\sum xy = a_1 \sum x^2 + a_0 \sum x$$
$$\sum y = a_1 \sum x + na_0$$

En forma matricial

$$\begin{pmatrix} n & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y \\ \sum xy \end{pmatrix}$$

Resolviendo el sistema para a1 y a0, encontramos el polinomio que mejor ajusta, de grado 1.

$$y = a_1 x + a_0$$

donde

el determinante del sistema se expresa como

$$ds = \begin{pmatrix} n & \sum x \\ \sum x & \sum x^2 \end{pmatrix} = n \sum x^2 - \left(\sum x\right)^2$$

Los determinantes de la matriz de coeficientes para hallar los términos de a_0 y a_1.

$$da0 = \begin{pmatrix} \sum y & \sum x \\ \sum xy & \sum x^2 \end{pmatrix} = \sum y \sum x^2 - \sum xy \sum x$$

$$da1 = \begin{pmatrix} n & \sum y \\ \sum x & \sum xy \end{pmatrix} = n \sum xy - \sum x \sum y$$

$$a_0 = \frac{da0}{ds}$$

$$a_1 = \frac{da1}{ds}$$

Ejemplo 3.1 Ajustar los datos a un polinomio de segundo grado.

X	2	4	6	8	10
Y	8	20	50	80	120

Solución. Efectuando las operaciones y sumas

	x	y	x^2	xy
	2	8	4	16
	4	20	16	80
	6	50	36	300
	8	80	64	640
	10	120	100	1200
sumas	30	278	220	2236

n = 5

sx = 2 + 4 + 6 + 8 + 10 = 30

sy = 8 + 20 + 50 + 80 + 120 = 278

sx2 = 4 + 16 + 36 + 64 + 100 = 220

sxy = 16 + 80 + 300 + 640 + 1200 = 2236

ds = n (sx2) – (sx)^2 = 5 (220) – (30)^2 = 200

da0 = sy (sx2) – sxy (sx) = (278)(2236) – 220(30) = – 5920

da1 = n (sxy) – sx (sy) = 5 (2236) – (30)(278) = 2840

$$a_0 = \frac{da0}{ds} = \frac{-5920}{200} = -29.6$$

$$a_1 = \frac{da1}{ds} = \frac{2840}{200} = 14.2$$

Polinomio de ajuste lineal

$$P(x) = 14.2x - 29.6$$

Comparación

x	y	P(x)
2	8	– 1.2
4	20	27.2
6	50	55.6
8	80	84
10	120	112.4

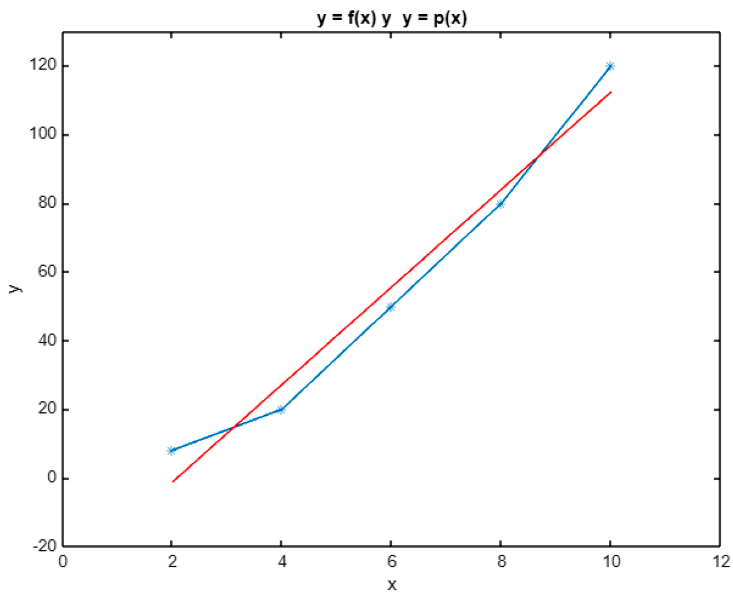


FIGURA 13. Comparación con polinomio lineal.

El ajuste lineal no es perfecto por lo que, se puede probar con el modelo cuadrático o de segundo grado.

Código Matlab

```
% Minimos cuadrados Lineal
n=5
x=[2 4 6 8 10]
y=[8 20 50 80 120]
sx=sum(x)
sy=sum(y)
sx2=sum(x.^2)
sxy=sum(x.*y)
ds=n*(sx2)-(sx)^2
da0=sy*(sx2)-sxy*(sx)
da1=n*(sxy)-sx*(sy)
a0=da0/ds
a1=da1/ds
px=[a1 a0]
p1=polyval(px,x)
plot(x,y,'x',x,p1)
```

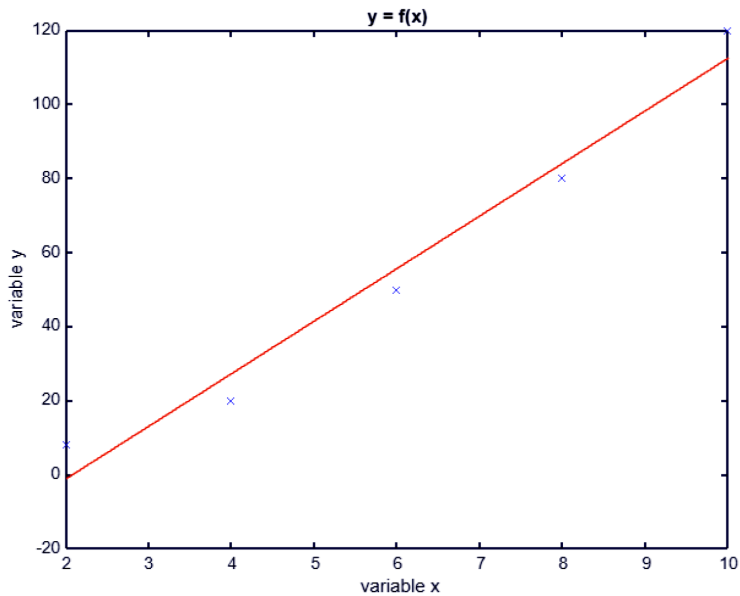


FIGURA 14. Ajuste lineal generado por el programa y por mínimos cuadrados.

Caso 3. Polinomio de grado 2. ($y = a_2x^2 + a_1x + a_0$)

A partir de este caso, dejamos el ejercicio para los estudiantes, los valores de a2, a1 y a0, se encuentran resolviendo el sistema:

$$\begin{pmatrix} n & \sum x & \sum x^2 \\ \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 \\ \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y \\ \sum xy \\ \sum x^2 y \end{pmatrix}$$

El polinomio de ajuste es

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

Ejemplo 3.2 Utilizando los datos del ejemplo anterior, realice el ajuste para el polinomio de segundo grado.

Solución.

x	y	x^2	xy	x^3	x^4	x^2y
2	8	4	16	8	16	32
4	20	16	80	64	256	320
6	50	36	300	216	1296	1800
8	80	64	640	512	4096	5120
10	120	100	1200	1000	10000	12000
30	278	220	2236	1800	15664	19272

El sistema por resolver es

$$\begin{aligned} 5a_2 + 30a_1 + 220a_0 &= 278 \\ 30a_2 + 220a_1 + 180a_0 &= 2236 \\ 220a_2 + 180a_1 + 15664a_0 &= 19272 \end{aligned} \quad \text{o} \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 5 & 30 & 220 & 278 \\ 30 & 220 & 1800 & 2236 \\ 220 & 1800 & 15664 & 19272 \end{array}\right]$$

Utilizando método de Gauss

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 5 & 30 & 220 & 278 \\ 30 & 220 & 1800 & 2236 \\ 220 & 1800 & 15664 & 19272 \end{array}\right]$$

R1 entre 5 y eliminando en R2 y R3

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 6 & 44 & 55.6 \\ 0 & 40 & 480 & 568 \\ 0 & 480 & 5984 & 7040 \end{array}\right]$$

R2 entre 40 y eliminando en R3

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 6 & 44 & 55.6 \\ 0 & 1 & 12 & 14.2 \\ 0 & 0 & 224 & 224 \end{array}\right]$$

$$a_2 = \frac{224}{224} = 1$$

$$a_1 = 14.2 - 12(1) = 2.2$$

$$a_0 = 55.6 - 44(1) - 6(2.2) = -1.6$$

Polinomio de ajuste

$$P(x) = x^2 + 2.2x - 1.6$$

Comparación

x	y	P(x)
2	8	6.8
4	20	23.2
6	50	47.6
8	80	80
10	120	120.4

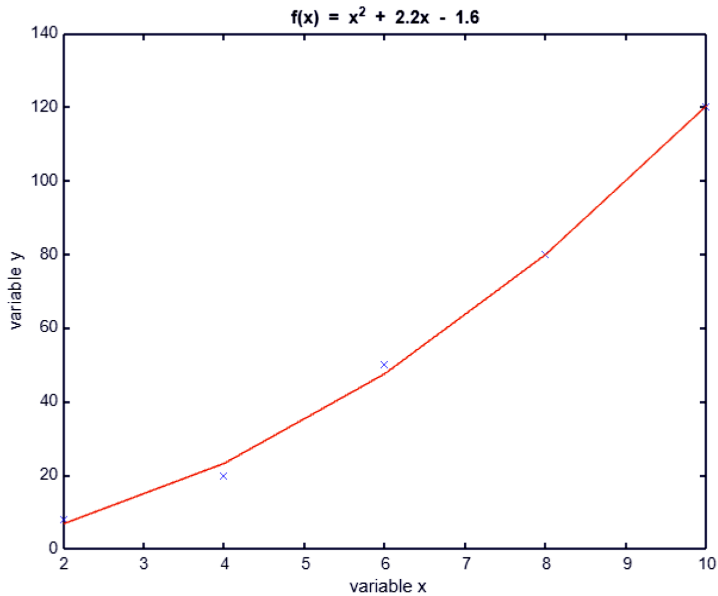


FIGURA 15. Ajuste cuadrático.

El ajuste cuadrático es mejor que el ajuste lineal.

Caso 4. Polinomio de grado 3, ($y = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$)

Los valores de a3, a2, a1 y a0, se encuentran resolviendo el sistema:

$$\begin{pmatrix} n & \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 \\ \sum x & \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 \\ \sum x^2 & \sum x^3 & \sum x^4 & \sum x^5 \\ \sum x^3 & \sum x^4 & \sum x^5 & \sum x^6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum y \\ \sum xy \\ \sum x^2 y \\ \sum x^3 y \end{pmatrix}$$

El polinomio de ajuste cúbico es

$$y = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$$

Solución con Excel

1. Obtener las sumatorias de los datos

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
1	AJUSTE CÚBICO POR MINIMOS CUADRADOS										
2											
3		x	y	x2	x3	x4	x5	x6	xy	x2y	x3y
4		2	8	4	8	16	32	64	16	32	64
5		4	20	16	64	256	1024	4096	80	320	1280
6		6	50	36	216	1296	7776	46656	300	1800	10800
7		8	80	64	512	4096	32768	262144	640	5120	40960
8		10	120	100	1000	10000	100000	1000000	1200	12000	120000
9	sumas	**30**	**278**	**220**	**1800**	**15664**	**141600**	**1312960**	**2236**	**19272**	**173104**

2. Establecer la matriz cuadrada y el vector b

MATRIZ CUADRADA					VECTOR
5	30	220	1800		278
30	220	1800	15664		2236
220	1800	15664	141600		19272
1800	15664	1E+05	1E+06		173104

3. Obtener la inversa con la función Minversa

17					
18	Matriz inversa	=MINVERSA(B12:E15)			-0.146
19		-15.42	10.337	-1.897	0.1024
20		2.75	-1.897	0.356	-0.02
21		-0.146	0.1024	-0.02	0.0011

4. Multiplicar la inversa y el vector b

		MATRIZ CUADRADA			VECTOR
	5	30	220	1800	278
	30	220	1800	15664	2236
	220	1800	15664	141600	19272
	1800	15664	1E+05	1E+06	173104
Matriz inversa	24.2	-15.42	2.75	-0.146	
	-15.42	10.337	-1.897	0.1024	
	2.75	-1.897	0.356	-0.02	
	-0.146	0.1024	-0.02	0.0011	
Solución	a0	=MMULT(B18:E21,G12:G15)			
	a1	-5.667			
	a2	2.5			
	a3	-0.083			

5. Generar el polinomio de interpolación

Y calc
=$C$26*B4^3+$C$25*B4^2+$C$24*B4+$C$23
21.6
47.6
81.6
119.6

Ejemplo 3.3 Con los datos siguientes, determine el polinomio de interpolación para la tabla de datos.

x	y
1	-2
2	2
3	14
4	40
5	86
6	158

Solución. Se generan las sumatorias para evaluar un polinomio cúbico de ajuste.

	x	y	x2	x3	x4	x5	x6	xy	x2y	x3y
	1	-2	1	1	1	1	1	-2	-2	-2
	2	2	4	8	16	32	64	4	8	16
	3	14	9	27	81	243	729	42	126	378
	4	40	16	64	256	1024	4096	160	640	2560
	5	86	25	125	625	3125	15625	430	2150	10750
	6	158	36	216	1296	7776	46656	948	5688	34128
suma	21	298	91	441	2275	12201	67171	1582	8610	47830

Se genera y resuelve el sistema de ecuaciones

n	sx	sx2	sx3	sy
sx	sx2	sx3	sx4	sxy
sx2	sx3	sx4	sx5	sx2y
sx3	sx4	sx5	sx6	sx3y

6	21	91	441	298
21	91	441	2275	1582
91	441	2275	12201	8610
441	2275	12201	67171	47830

Aplicando método de Gauss – Zamora en Excel

6/441	21/441	91/441	441/441	298/441
21-2275*6/441	91-2275*21/441	441-2275*91/441	2275-2275*441/441	1582-2275*298/441
91-12201*6/441	441-12201*21/441	2275-12201*91/441	12201-12201*441/441	8610-12201*298/441
441-67171*6/441	2275-67171*21/441	12201-67171*91/441	67171-67171*441/441	47830-67171*298/441

0.01360544	0.04761905	0.20634921	1	0.67573696
-9.95238095	-17.3333333	-28.4444444	0	44.6984127
-75	-140	-242.666667	0	365.333333
-472.891156	-923.619048	-1659.68254	0	2440.07256

0.34988839	0.609375	1	0	-1.57142857
9.90625	7.875	0	0	-16
107.8125	87.75	0	0	-168

1.25793651	1	0	0	-2.03174603
-2.57142857	0	0	0	10.2857143
1	0	0	0	-4

		a0 =	-4	
		a1 =	3	
		a2 =	-2	
		a3 =	1	

Polinomio de ajuste $P(x) = x^3 - 2x^2 + 3x - 4$

Comprobación

x	y	% error
1	-2	
2	2	0.0
3	14	6.7
4	40	0.0
5	86	-1.2
6	158	1.3

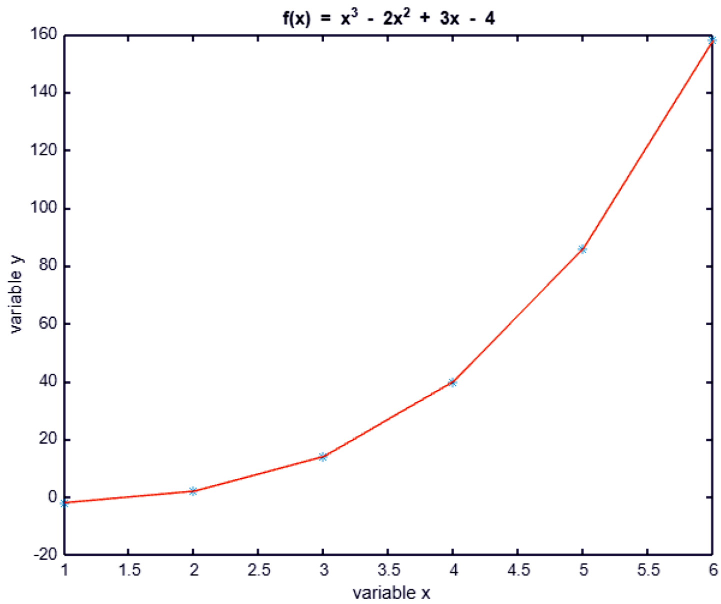


FIGURA 16. Ajuste cúbico mejor aproximación.

```
% Minimos cuadrados 3er grado
clear;clc;
n=6
x=[1 2 3 4 5 6]
y=[-2 2 14 40 86 158]
sx=sum(x)
sy=sum(y)
sx2=sum(x.^2)
sx3=sum(x.^3)
sx4=sum(x.^4)
sx5=sum(x.^5)
sx6=sum(x.^6)
sxy=sum(x.*y)
sx2y=sum(x.^2.*y)
sx3y=sum(x.^3.*y)
A=[n sx sx2 sx3 sy;sx sx2 sx3 sx4 sxy;sx2 sx3 sx4 sx5 sx2y; sx3 sx4 sx5
sx6 sx3y]
a=rref(A)
a0=a(17)
```

```
a1=a(18)
a2=a(19)
a3=a(20)
px=[a3 a2 a1 a0]
p3=polyval(px,x)
plot(x,y,'*',x,p3)
```

3.2 POLINOMIO SIMPLE

Este método permite un ajuste exacto, cuando los datos que se conocen son muy cercanos entre sí. Se pueden realizar aproximaciones con polinomios de segundo y tercer grado. Así, cada curva pasa exactamente por cada uno de los puntos. Estos datos generalmente se derivan de tablas.

Para ajustar a un polinomio de grado n del tipo

$$y = f(x) = a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + a_{n-2}x^{n-2} + \cdots + a_1 x + a_0$$

se deben tomar n+1 puntos de la tabla y sustituirlos en el polinomio de ajuste. Se tendrá un sistema de n+1 de ecuaciones de n+1 incógnitas.

Ejemplo 3.4. Ajustar el siguiente conjunto de datos para un polinomio de grado 2.

x	3	4	1
y	1	3	−2

Solución. Sea $f(x) = y = a_2x^2 + a_1x + a_0$. Sustituyendo, X y Y en f(x)

$$9a_2 + 3a_1 + a_0 = 1$$

$$16a_2 + 4a_1 + a_0 = 3$$

$$a_2 + a_1 + a_0 = -2$$

Resolviendo el sistema se llega a $a_2 = \frac{1}{6}, \quad a_1 = \frac{5}{6}, \quad a_0 = -3$

Por lo que el polinomio de interpolación es: $f(x) = \frac{1}{6}x^2 + \frac{5}{6}x - 3$

x	y	P(x)
1	-2	1/6(1)^2 + 5/6(1) – 3 = – 2
3	1	1/6(3)^2 + 5/6(3) – 3 = 1
4	3	1/6(4)^2 + 5/6(4) – 3 = 3

$$1/6 + 5/6 - 18/6 = -12/6 = -2$$

$$9/6 + 15/6 - 18/6 = 6/6 = 1$$

$$16/6 + 20/6 - 18/6 = 18/6 = 3$$

Ejemplo 3.5. Determine el polinomio de interpolación de tercer grado para los datos que se proporcionan.

x	0	1	2	3
y	1	2	7	22

Solución. Sea $p(x) = a_3x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0$ el polinomio de ajuste se establece el sistema de ecuaciones.

$$0a_3 + 0a_2 + 0a_1 + a_0 = 1$$

$$1a_3 + 1a_2 + 1a_1 + a_0 = 2$$

$$8a_3 + 4a_2 + 2a_1 + a_0 = 7$$

$$27a_3 + 9a_2 + 3a_1 + a_0 = 22$$

Resolviendo para a0 = 1, el sistema resultante es

$$a_3 + a_2 + a_1 = 1$$

$$8a_3 + 4a_2 + 2a_1 = 6$$

$$27a_3 + 9a_2 + 3a_1 = 21$$

La solución del sistema es

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 8 & 4 & 2 & 6 \\ 27 & 9 & 3 & 21 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & -4 & -6 & -2 \\ 0 & -18 & -24 & -6 \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 3/2 & 1/2 \\ 0 & 0 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

$$a_3 = \frac{3}{3} = 1$$

$$a_2 = \frac{1}{2} - \frac{3}{2}(1) = -1$$

$$a_1 = 1 - 1(1) - 1(-1) = 1$$

Por lo tanto, $P(x) = x^3 - x^2 + x + 1$

Una tabla de interpolación de 0 a 3 con espaciado de 0.5 es

x	y
0	1
0.5	1.375
1	2
1.5	3.625
2	7
2.5	12.875
3	22

Su representación gráfica es

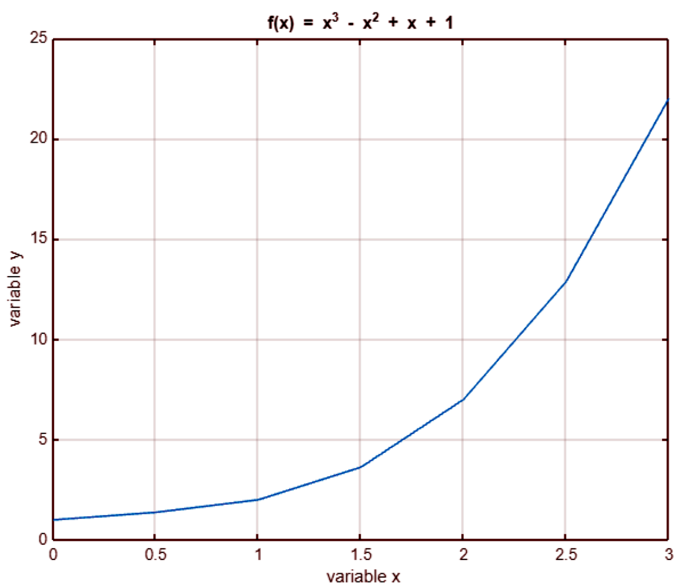


FIGURA 17. Ajuste cúbico por polinomio simple.

3.3 POLINOMIOS DE LAGRANGE

El proceso para la generación del polinomio de ajuste consiste en utilizar a través de un conjunto de datos un polinomio de menor grado al número de datos proporcionados. Esto es, con dos datos se genera un polinomio de grado 1, y con tres datos se genera un polinomio de segundo grado.

Caso 1. Polinomio lineal o de primer grado.

Para un par de datos

x	y
280	4.87
310	5.02

El polinomio de interpolación de primer grado se forma con

$$P(x) = L_0(y_0) + L_1(y_1)$$

donde

$$L_0 = \frac{x - x_2}{x_1 - x_2} = \frac{x - 310}{280 - 310} = \frac{x}{-30} + \frac{310}{30}$$

y

$$L_1 = \frac{x - x_1}{x_2 - x_1} = \frac{x - 280}{310 - 280} = \frac{x}{30} - \frac{280}{30}$$

Con lo que el polinomio de ajuste es

$$P(x) = (-0.0333x + 10.333)(4.87) + (0.0333x - 9.333)(5.02)$$

$$P(x) = -0.1623x + 50.3233 + 0.16733x - 46.8533$$

$$P(x) = 0.005x + 3.47$$

Con este polinomio se puede interpolar cualquier valor entre los datos iniciales.

x	*P(x)*	*y*
280	$P(280) = 0.005(280) + 3.47$	*4.87*
290	$P(290) = 0.005(290) + 3.47$	*4.92*
300	$P(300) = 0.005(300) + 3.47$	*4.97*
310	$P(310) = 0.005(310) + 3.47$	*5.02*

En los extremos hay un ajuste exacto.

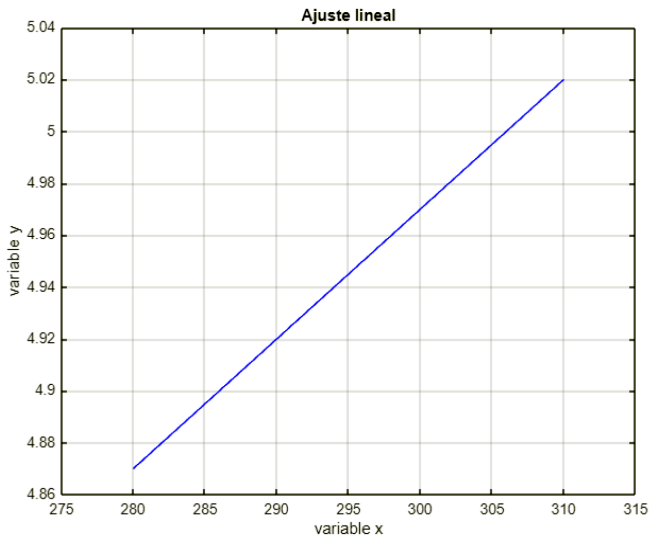


FIGURA 18. Ajuste polinomio lineal por Lagrange.

En una notación compacta y generalizada se tiene

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

donde

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

Recordando que representa el operador "producto".

Caso 2. Polinomio de segundo grado.

Para la versión de segundo grado P2(x) tenemos:

$$P_2(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f(x_1) + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f(x_2) + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f(x_3)$$

$$P_2(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2)$$

¿Cómo quedaría el polinomio de Lagrange de grado 3?

Ejemplo 3.6. Emplear la fórmula de Lagrange para determinar el polinomio de interpolación de segundo grado que pasa a través de los puntos que se indican en la siguiente tabla:

i	*xi*	*f*(*xi*)
1	0	-5
2	1	1
3	3	25

Solución:

$$L_0(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} = \frac{(x-1)(x-3)}{(0-1)(0-3)} = \frac{1}{3}(x^2-4x+3)$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} = \frac{(x-0)(x-3)}{(1-0)(1-3)} = \frac{-1}{2}(x^2+3x)$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} = \frac{(x-0)(x-1)}{(3-0)(3-1)} = \frac{1}{6}(x^2-x)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{3}(x^2-4x+3)f(x_0) + \frac{-1}{2}(x^2+3x)f(x_1) + \frac{1}{6}(x^2-x)f(x_2)$$

$$P_2(x) = \frac{1}{3}(x^2-4x+3)(-5) + \frac{-1}{2}(x^2+3x)(1) + \frac{1}{6}(x^2-x)(25)$$

Finalmente:

$$P_2(x) = 2x^2 + 4x - 5$$

Lo cual concuerda perfectamente con el polinomio original que da origen a la tabla.

x	*P(x)*	*y*
0	$P(0) = 2(0)^2 + 4(0) - 5$	*– 5*
1	$P(1)= 2(1)^2 + 4(1) - 5$	*1*
3	$P(3) = 2(3)^2 + 4(3) - 5$	*25*

Código Matlab

```
% Polinomio Lagrange 2do grado
clear;clc; format compact;
x = [0 1 3]
y = [-5 1 25]
x1=x(1);x2=x(2);x3=x(3);
L1 = [1 -x2-x3 x2*x3]
L2 = [1 -x1-x3 x1*x3]
L3 = [1 -x1-x2 x1*x2]
d1=(x1-x2)*(x1-x3)
d2=(x2-x1)*(x2-x3)
d3=(x3-x1)*(x3-x2)
p1= L1*y(1)/d1
p2= L2*y(2)/d2
p3= L3*y(3)/d3
p=p1+p2+p3
yc=polyval(p,x)
```

Respuesta

```
x = 0    1   3
y = -5   1   25
L1 = 1  -4   3
L2 = 1  -3  0
L3 = 1  -1  0
d1 = 3
d2 = -2
d3 = 6
p1 = - 1.6667   6.6667    -5.0000
p2 = - 0.5000   1.5000       0
p3 =  4.1667   -4.1667       0
p  =  2.0000    4.0000    -5.0000
yc = -5.0000    1.0000    25.0000
```

Ejemplo 3.7. Hallar el valor de f(x) para x = 2 dada la siguiente tabla:

x	$f(x)$
0	2
1	3
4	18
6	38

Solución. En la tabla observamos que tenemos cuatro puntos. La fórmula de interpolación de Lagrange se reduce a la versión de tercer orden.

$$P_3(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)(x_1-x_4)}f(x_1) + \frac{(x-x_1)(x-x_3)(x-x_4)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)(x_2-x_4)}f(x_2) +$$
$$\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_4)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)(x_3-x_4)}f(x_3) + \frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_4-x_1)(x_4-x_2)(x_4-x_3)}f(x_4)$$

Sustituyendo los valores de la tabla, se obtiene con x = 2:

$$P(x=2) = \frac{(2-1)(2-4)(2-6)}{(0-1)(0-4)(0-6)}(2) + \frac{(2-0)(2-4)(2-6)}{(1-0)(1-4)(1-6)}(3) +$$
$$\frac{(2-0)(2-1)(2-6)}{(4-0)(4-1)(4-6)}(18) + \frac{(2-0)(2-1)(2-4)}{(6-0)(6-1)(6-4)}(38)$$

$P_3(x) = 6$

entonces para x = 2, f(2) = 6

Una ventaja en comparación con los ejemplos anteriores es que no se requiere obtener los polinomios individuales y se interpola directamente con los multiplicadores individuales.

Código Matlab para polinomio cúbico

```
x=[2 3 4 5]
y=[2 14 40 86]
x1=x(1);x2=x(2);x3=x(3);x4=x(4);
L1 = [1 -x2-x3-x4 x2*x3+x2*x4+x3*x4 -x2*x3*x4]
L2 = [1 -x1-x3-x4 x1*x3+x1*x4+x3*x4 -x1*x3*x4]
L3 = [1 -x1-x2-x4 x1*x2+x1*x4+x2*x4 -x1*x2*x4]
L4 = [1 -x1-x2-x3 x2*x1+x2*x3+x1*x3 -x1*x2*x3]
d1=(x1-x2)*(x1-x3)*(x1-x4);
d2=(x2-x1)*(x2-x3)*(x2-x4);
d3=(x3-x1)*(x3-x2)*(x3-x4);
d4=(x4-x1)*(x4-x2)*(x4-x3);
p1= L1*y(1)/d1;
p2= L2*y(2)/d2;
p3= L3*y(3)/d3;
p4= L4*y(4)/d4;
```

```
p=p1+p2+p3+p4
yc=polyval(p,x)
x=x(1):0.1:x(4);
yc=polyval(p,x)
plot(x,yc,'b')
```

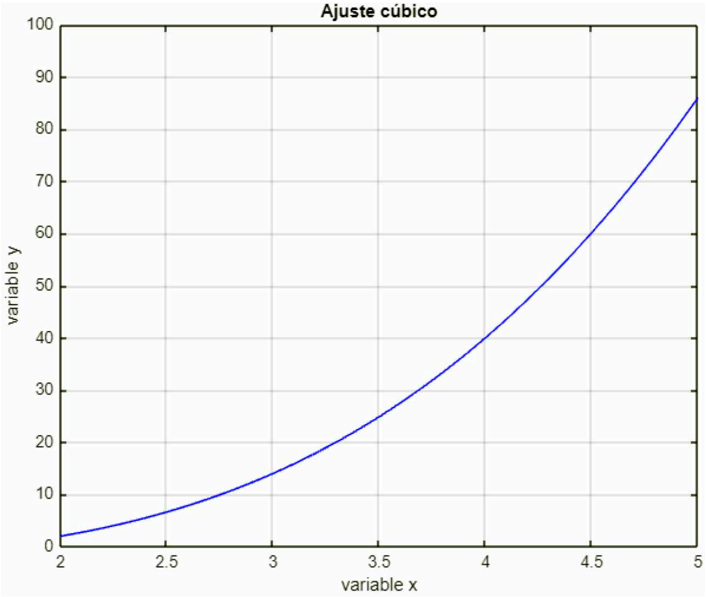


FIGURA 19. Ajuste polinomio cúbico Lagrange.

3.4 MÉTODO DE NEWTON – GREGORY

Este método de interpolación basa su técnica en el empleo de diferencias finitas de los datos iniciales. Las diferencias finitas han llamado poderosamente la atención de los matemáticos durante siglos. Isaac Newton fue quien más la utilizó y gran parte de esta teoría fue originada por él. En diversos cursos de matemáticas se emplean funciones dadas por $y = f(x)$, donde se conoce la expresión matemática que define a la función, y luego de evaluarla en diversos puntos se obtiene una tabla de datos y con ello se procede a determinar sus derivadas y el valor de integrales definidas.

Las diferencias finitas.

Las diferencias finitas intervienen en diversas áreas del análisis numérico, tales como:

1. Interpolación
2. Tablas de comprobación
3. Aproximación
4. Derivación
5. Integración
6. Solución de ecuaciones diferenciales.

Consideremos una función f(x) definida en forma tabular, es decir, tenemos una tabla de valores numéricos donde desconocemos la expresión analítica de la función f(x). Supongamos que para los valores x_0, x_1, x_2, hasta xn son puntos igualmente espaciados entre sí de la variable independiente x, se conocen los correspondientes valores y_0, y_1, y_2, hasta y_n de las variables dependiente *y*. Los incrementos de h deben ser positivos y fijos, tal que $h = x2 - x1$.

Los valores de *y* también pueden ser el resultado de experimentos. Si $y_0, y_1, y_2, \ldots y_n$ representan un conjunto de valores de cualquier función, entonces, la diferencia entre datos se puede expresar como: $y_1 - y_0, y_2 - y_1, y_3 - y_2$, hasta $y_n - y_{n-1}$.

Estos primeros cálculos reciben el nombre de primeras diferencias representándose con delta y o delta f (Δy ó Δf), es decir:

$$\Delta y_0 = y_1 - y_0$$
$$\Delta y_1 = y_2 - y_1$$
$$\Delta y_2 = y_3 - y_2$$
$$\vdots$$
$$\Delta y_{n-1} = y_n - y_{n-1}$$
$$\Delta y_n = y_{n+1} - y_n$$

Las diferencias aplicadas a estas primeras diferencias reciben el nombre de segundas diferencias las cuales se representan por $\Delta^2 y_0, \Delta^2 y_1, \Delta^2 y_2, \ldots$ de donde,

$$\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0$$
$$\Delta^2 y_1 = \Delta y_2 - \Delta y_1$$

De forma similar, las terceras diferencias son:

$$\Delta^3 y_0 = \Delta y^2{}_1 - \Delta y^2{}_0$$

$$\Delta^3 y_1 = \Delta y^3{}_2 - \Delta y^3{}_1, \ldots$$

El polinomio de interpolación de Newton – Gregory hace uso de una tabla de diferencias finitas y el polinomio interpolante de avance es:

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!\,h^2}(x - x_0)(x - x_1) + \frac{\Delta^3 y_0}{3!\,h^3}(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

donde:

x es el valor que se desea interpolar, x_0 es el valor inmediatamente anterior a x. h es el tamaño de paso, que es constante, y y_i es el valor de la ordenada en la posición i.

También se puede expresar como

$$P_n(x) = y_0 + \Delta y_0 S + \Delta^2 y_0 S \frac{(x - x_2)}{h} + \Delta^3 y_0 S \frac{(x - x_2)(x - x_3)}{2h} + \cdots$$

En la siguiente tabla se muestran las diferencias de tres órdenes.

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$
x_0	y_0			
		Δy_0		
x_1	y_1		$\Delta^2 y_0$	
		Δy_1		$\Delta^3 y_0$
x_2	y_2		$\Delta^2 y_1$	
		Δy_2		$\Delta^3 y_1$
x_3	y_3		$\Delta^2 y_2$	
		Δy_3		$\Delta^3 y_2$
x_4	y_4		$\Delta^2 y_3$	
		Δy_4		$\Delta^3 y_3$
x_5	y_5		$\Delta^2 y_4$	
		Δy_5		$\Delta^3 y_4$
x_6	y_6		$\Delta^2 y_5$	
		Δy_6		
x_7	y_7			

Ejemplo 3.8. Con el siguiente conjunto de datos determinar el valor de *y* cuando *x=0.8*

x	y
0.1	0.09983
0.5	0.47943
0.9	0.78333
1.3	0.96356
1.7	0.99166

Solución. Como x = 0.8, entonces, $x_0 = 0.5$, $x_1 = 0.9$, $x_2 = 1.3$, $x_3 = 1.7$, similarmente las y_i corresponden a los datos de la tabla en el mismo orden. Las diferencias quedan como lo muestra la tabla siguiente.

x	y	Δy	Δ^2y	Δ^3y
0.1	0.09983			
		0.3796		
0.5	0.47943		-0.0757	
		0.3039		-0.04797
0.9	0.78333		-0.12367	
		0.18023		-0.02846
1.3	0.96356		-0.15213	
		0.0281		
1.7	0.99166			

En este caso

$$h = x1 - x0 = 0.5 - 0.1 = 0.4$$

El polinomio interpolante se construye como

$$P_n(x) = y_0 + \Delta y_0 \binom{S}{1} + \Delta^2 y_0 \binom{S}{2} + \Delta^3 y_0 \binom{S}{3} + \cdots$$

donde $\binom{S}{n}$ representa la combinación

$$S = \frac{x - x_0}{h} = \frac{0.8 \;-\; 0.5}{0.4} = 0.75$$

x = 0.8 es el punto a interpolar

Sustituyendo y_0, Δy_0, $\Delta^2 y_0$, $\Delta^3 y_0$, S en (1)

$$P_n(0.8) = 0.47943 + (0.3039)\binom{0.75}{1} + (-0.12367)\binom{0.75}{2} + (-0.02846)\binom{0.75}{3}$$

Resolviendo las operaciones,

$$\binom{0.75}{1} = \frac{0.75(0.75-1)!}{(0.75-1)!} = 0.75$$

$$\binom{0.75}{2} = \frac{0.75(0.75-1)(0.75-2)!}{(0.75-2)!\,2} = \frac{0.75(-0.25)}{2} = -0.1875$$

$$\binom{0.75}{3} = \frac{0.75(0.75-1)(0.75-2)(0.75-3)!}{(0.75-3)!\,3} = \frac{0.75(-0.25)(-1.25)}{3} = 0.078125$$

Ajuste lineal

$$P_1(0.8) = 0.47943 + 0.3039(0.75) = 0.707355$$

Ajuste cuadrático

$$P_2(0.8) = 0.47943 + (0.3039)(0.75) + (-0.12367)(-0.1875) = 0.73054$$

Ajuste cúbico

$$P_3(0.8) = 0.47943 + (0.3039)(0.75) + (-0.12367)(-0.1875) + (-0.02846)(0.078125)$$

$$P_3(0.8) = 0.47943 + 0.227925 + 0.11594 - 0.00222 = 0.71783$$

Otra forma de obtener el polinomio es

$$P_3(0.8) = 0.47943 + (0.3039)\frac{(x-0.5)}{0.4} + (-0.12367)\frac{(x-0.5)}{0.4}\,\frac{(x-0.9)}{0.4}$$

$$+ (-0.02846)\frac{(x-0.5)}{0.4}\frac{(x-0.9)}{0.4}\frac{(x-1.3)}{0.4}$$

Al sustituir x = 0.8

$$= 0.47943 + 0.227925 + 0.00695 - 0.00667$$

$$= 0.7076$$

$$P_n(x = 0.8) = 0.7076$$

El polinomio de interpolación de tercer grado para cualquier dato se obtiene con el siguiente cálculo.

$$P_n(x) = y_0 + \frac{y_1(x - x_0)}{h} + \frac{y_2(x - x_0)}{h} * \frac{(x - x_1)}{h} + \frac{y_3(x - x_0)}{h} * \frac{(x - x_1)}{h} * \frac{(x - x_2)}{h} + \cdots$$

$$P_n(x) = y_0 + \frac{y_1(x - x_0)}{h} + \frac{y_2(x - x_0)(x - x_1)}{2h} + \frac{y_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{3h} + \cdots$$

$$P_n(x) = y_0 + \frac{y_1(x - x_0)}{h} + \frac{y_2(x - x_0)(x - x_1)}{2h} + \frac{y_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)}{3h} + \cdots$$

$$P_n(x) = y_0 + \frac{y_1(x - x_0)}{h} + \frac{y_2[x^2 - (x_0 + x_1)(x) + x_0x_1]}{2h}$$
$$+ \frac{y_3(x^3 - (x_0 + x_1 + x_2)x^2 + (x_0x_1 + x_0x_2 + x_1x_2)x - x_0x_1x_2)}{3h}$$

$$P_n(x) = y_0 + y_1G_1 + y_2G_2 + y_3G_3$$

con

$$G_1 = \frac{(x - x_0)}{h}$$

$$G_2 = \frac{x^2 - (x_0 + x_1)(x) + x_0x_1}{2h}$$

$$G_3 = \frac{x^3 - (x_0 + x_1 + x_2)x^2 + (x_0x_1 + x_0x_2 + x_1x_2)x - x_0x_1x_2}{3h}$$

3.5 MÉTODO DE AITKEN

En algunas ocasiones, se puede tener necesidad de hacer una interpolación rápida entre dos valores x1 y xo en los que el intervalo no sea muy grande. Si este es el caso, se puede considerar que entre dos puntos (xo, fo) y (x1 f1) existe una relación aproximadamente lineal, entonces se puede interpolar un valor de f para un valor de x tal que $x_0 < x < x_1$, con la ecuación de Aitken, a saber.

$$f(x) = \frac{\begin{vmatrix} f_0 & x_0 - x \\ f_1 & x_1 - x \end{vmatrix}}{x_1 - x_0}$$

donde

x = valor a interpolar

x_0 = valor anterior a x

x_1 = valor posterior a x

f_0 = valor de la ordenada correspondiente a x_0

f_1 = valor de la ordenada correspondiente a x_1

Ejemplo 3.9. Haciendo uso de la tabla obtener el valor de (y) cuando x = 0.8.

x	y
0.1	0.09983
0.5	0.47943
0.9	0.78333
1.3	0.96356
1.7	0.99166

Solución.

x = 0.8 $\quad x_0 = 0.5 \quad x_1 = 0.9$

$$f(0.8) = \frac{\begin{vmatrix} 0.47943 & 0.5 - 0.8 \\ 0.78333 & 0.9 - 0.8 \end{vmatrix}}{0.9 - 0.5} = \frac{0.47943(0.1) - 0.78333(-0.3)}{0.4}$$

$$f(0.8)=\frac{0.047943+0.23499}{0.4}=0.70735$$

Ejemplo 3.10. Con los datos de la tabla obtener el valor de (y) cuando x = 7.

x	y
1	56.5
2	78.6
5	113
10	144.5

Solución.

$x = 7 \qquad x_0 = 5 \qquad x_1 = 10$

$$f(7)=\frac{\begin{vmatrix}113 & 5-7\\ 144.5 & 10-7\end{vmatrix}}{10-5}=\frac{113(3)-144.5(-2)}{5}$$

$$f(7)=\frac{339+289}{5}=125.6$$

3.6 PROBLEMAS UNIDAD III

1. Minimizando la función error (mínimos cuadrados) del ajuste polinomial de primer grado, se llega a un sistema de ecuaciones de la siguiente forma:

$$\sum_1^n xy=a\sum_1^n x^2+b\sum_1^n x$$

$$\sum_1^n y=a\sum_1^n x+nb$$

Usar el álgebra para determinar los valores de a y b, para encontrar el polinomio de ajuste para los datos

x	1	2	3	4	5
y	3	6	11	18	27

Solución.

x	y	xy	x^2
1	3	3	1
2	6	12	4
3	11	33	9
4	18	72	16
5	27	135	25
15	65	255	55

n = 5

El sistema por resolver es

$$255 = 55a + 15b$$

$$65 = 15a + 5b$$

de la segunda ecuación se despeja b

$$b = \frac{65 - 15a}{5} = 13 - 3a$$

$$b = \bar{y} - a\bar{x}$$

sustituyendo en la primera ecuación

$$255 = 55a + 15(13 - 3a) = 55a + 195 - 45a$$

resolviendo para a

$$(55 - 45)a = 255 - 195$$

$$a = \frac{60}{10} = 6$$

evaluando b

$$b = 13 - 3(6) = 13 - 18 = -5$$

El polinomio de ajuste es

$$y = ax + b = 6x - 5$$

x	y = 6x - 5
1	6(1) – 5 = 1
2	6(2) – 5 = 7
3	6(3) – 5 = 13
4	6(4) – 5 = 19
5	6(5) – 5 = 25

2. Usar el método de Mínimos Cuadrados para hallar un polinomio de segundo grado que ajuste los siguientes datos.

x	0.2	0.5	0.8	1.1	1.4
y	500	700	1000	1100	1800

Solución.

El modelo a resolver es

$$\begin{gathered} n + \sum x + \sum x^2 = \sum y \\ \sum x + \sum x^2 + \sum x^3 = \sum xy \\ \sum x^2 + \sum x^3 + \sum x^4 = \sum x^2 y \end{gathered}$$

Construir la tabla con cada una de las sumatorias

x	y	x^2	x^3	x^4	xy	x^2y
0.2	500	0.04	0.008	0.0016	100	20
0.5	700	0.25	0.125	0.0625	350	175
0.8	1000	0.64	0.512	0.4096	800	640
1.1	1100	1.21	1.331	1.4641	1210	1331
1.4	1800	1.96	2.744	3.8416	2520	3528
4	5100	4.1	4.72	5.7794	4980	5694

El sistema de ecuaciones a resolver es

$$5a + 4b + 4.1c = 5100$$

$$4a + 4.1b + 4.72c = 4980$$

$$4.1a + 4.72b + 5.7794c = 5694$$

La solución al sistema es

$$a = 512.063,\ b = -15.873,\ c = 634.92$$

El polinomio de ajuste es, por tanto

$$P(x) = 512.063 - 15.873x + 634.92x^2$$

Tabla comparativa entre los datos

x	y	y cal
0.2	500	534.28
0.5	700	662.85
0.8	1000	905.71
1.1	1100	1262.85
1.4	1800	1734.28

3. Un agrónomo desea evaluar cuál es la producción de maíz de diferentes condiciones de fertilización del terreno. Debido a que tiene fondos limitados dispone de un sólo fertilizante, el cual aplica a diferentes concentraciones. El agrónomo realiza siete observaciones experimentales que a continuación se muestran:

Fertilizante	100	200	300	400	500	600	700
Producción	40	45	50	65	70	70	80

Obtener la ecuación lineal por mínimos cuadrados para estos datos y calcular la producción cuando se aumente la cantidad de fertilizante a 800 $libras/Ha$

Solución.

Con la tabla de datos se establece el sistema a resolver.

F	P	xy	x^2
100	40	4000	10000
200	45	9000	40000
300	50	15000	90000
400	65	26000	160000
500	70	35000	250000
600	70	42000	360000
700	80	56000	490000
2800	420	187000	1400000

$$7a + 2800b = 420$$

$$2800a + 1400000b = 187000$$

Resolviendo para a y b

$$a = 32.857,\ b = 0.06785$$

$$producción = 32.857 + 0.06785F$$

Tabla comparativa entre los datos

F	P	P cal
100	40	39.64
200	45	46.43
300	50	53.21
400	65	60.00
500	70	66.79
600	70	73.57
700	80	80.36

4. A continuación, se presentan las presiones de vapor del cloruro de magnesio:

T(°C)	930	988	1050	1088	1142	1223	1316	1418
P(mmHg)	10	20	40	60	100	300	500	800

Proponga el mejor modelo $P = f(T)$ que ajuste los datos y mediante éste prediga el valor de la presión para una temperatura de 1000°C.

Solución. Para determinar el mejor ajuste se recurre a la tabla de diferencias finitas.

T	P	DP	D2P	D3P	D4P
930	10				
		0.17241379			
988	20		0.00125139		
		0.32258065		4.97444E-06	
1050	40		0.002037351		-1.44789E-08
		0.52631579		1.9049E-06	
1088	60		0.002330706		2.49482E-07
		0.74074074		6.05331E-05	
1142	100		0.012802926		-4.68861E-07
		2.4691358		-6.4184E-05	
1223	300		-0.00183102		2.59117E-07
		2.15053763		2.13246E-05	
1316	500		0.004054558		
		2.94117647			
1418	800				

Los valores calculados permiten establecer que no se requiere de un polinomio de grado cuarto o quinto.

Se aprecia que el término cuartico y cúbico no contribuyen, por lo que el ajuste de segundo grado es adecuado.

Resolviendo el sistema se encuentra el polinomio

$$P(x) = 0.00383362x^2 - 7.363953x + 3542.89$$

$$P(1000) = 0.00383362(1000)^2 - 7.363953(1000) + 3542.89 = 12.56$$

A pesar de obtener un valor interpolado, se aprecia que el resultado no es congruente con los datos de la tabla. Por lo que, será más conveniente sólo utilizar los primeros tres datos (9330, 988 y 1050) para realizar un mejor ajuste.

T	P	T^2	T^3	T^4	TP	T^2P
930	10	864900	804357000	7.48052E+11	9300	8649000
988	20	976144	964430272	9.52857E+11	19760	19522880
1050	40	1102500	1157625000	1.21551E+12	42000	44100000
Sumas 2968	70	2943544	2926412272	2.91642E+12	71060	72271880

El polinomio de ajuste calculado es

$$f(P) = 0.00125139T^2 - 2.2277531T + 999.4827$$

$$f(1000) = 23.12 \text{ mmHg}$$

Este dato es una mejor aproximación a los datos experimentales.

Sólo como un ejercicio adicional, se puede emplear un ajuste de mínimos cuadrados de cuarto grado y comparar resultados.

$$\begin{gathered}
n + \sum x + \sum x^2 + \sum x^3 + \sum x^4 = \sum y \\
\sum x + \sum x^2 + \sum x^3 + \sum x^4 + \sum x^5 = \sum xy \\
\sum x^2 + \sum x^3 + \sum x^4 + \sum x^5 + \sum x^6 = \sum x^2y \\
\sum x^3 + \sum x^4 + \sum x^5 + \sum x^6 + \sum x^7 = \sum x^3y \\
\sum x^4 + \sum x^5 + \sum x^6 + \sum x^7 + \sum x^8 = \sum x^4y
\end{gathered}$$

5. Usar los siguientes valores para construir un polinomio de Lagrange de tercer grado y aproximar (1.09). La función que va a ser aproximada es $(x) = log(tanx)$; conociendo esto, calcular el porcentaje del error relativo.

$$\begin{aligned}
(1) &= 0.1924 \\
(1.05) &= 0.2414 \\
(1.1) &= 0.2933 \\
(1.15) &= 0.3492
\end{aligned}$$

Solución. El ajuste cúbico de Lagrange es de la forma

$$P_3(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1) + L_2(x)f(x_2) + L_3(x)f(x_3)$$

Se calculan los multiplicadores L(x)

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)}{(x_0-x_1)}\frac{(x-x_2)}{(x_0-x_2)}\frac{(x-x_3)}{(x_0-x_3)}$$

$$L_0(x) = \frac{(1.09-1.05)}{(1-1.05)}\frac{(1.09-1.1)}{(1-1.1)}\frac{(1.09-1.15)}{(1-1.15)} = -0.032$$

$$L_1(x) = \frac{(x-x_0)}{(x_1-x_0)}\frac{(x-x_2)}{(x_1-x_2)}\frac{(x-x_3)}{(x_1-x_3)}$$

$$L_1(x) = \frac{(x-1)}{(1.05-1)}\frac{(x-1.1)}{(1.05-1.1)}\frac{(x-1.15)}{(1.05-1.15)} = 0.216$$

$$L_2(x) = \frac{(x-x_0)}{(x_2-x_0)}\frac{(x-x_1)}{(x_2-x_1)}\frac{(x-x_3)}{(x_2-x_3)}$$

$$L_2(x) = \frac{(x-1)}{(1.1-1)}\frac{(x-1.05)}{(1.1-1.05)}\frac{(x-1.15)}{(1.1-1.15)} = 0.864$$

$$L_3(x) = \frac{(x-x_0)}{(x_3-x_0)}\frac{(x-x_1)}{(x_3-x_1)}\frac{(x-x_2)}{(x_3-x_2)}$$

$$L_3(x) = \frac{(x-1)}{(1.15-1)}\frac{(x-1.1)}{(1.15-1.1)}\frac{(x-1.15)}{(1.15-1.15)} = -0.048$$

$$P_3(1.09)$$

$$= (-0.032)(0.1924) + (0.216)(0.2414) + (0.864)(0.2933)$$

$$+ (-0.048)(0.3492) = 0.28264$$

$$P_3(1.09) = 0.28264$$

6. Dados los datos.

x	1	2	3	5	7	8
f(x)	3	6	19	99	291	444

Calcule $f(4)$, $f(10)$, $f(100)$, $f(300)$ con un polinomio de ajuste.

Solución. En virtud de que son cuatro valores para interpolar se recomienda utilizar mínimos cuadrados.

x	f(x)	x^2	x^3	x^4	xy	x^2y
1	3	1	1	1	3	3
2	6	4	8	16	12	24
3	19	9	27	81	57	171
5	99	25	125	625	495	2475
7	291	49	343	2401	2037	14259
8	444	64	512	4096	3552	28416
26	862	152	1016	7220	6156	45348

El sistema por resolver es

$$6a + 26b + 152c = 862$$

$$26a + 152b + 1016c = 6156$$

$$152a + 1016b + 7220c = 45348$$

El polinomio de interpolación es

$P(x) = 50.284 - 50.643x + 12.348x^2$

x	P(x) = 50.2843 - 50.643x + 12.348x^2
4	45.2925
10	778.7305
100	118473.59
300	1096245.82

7. Con los siguientes datos ajustar a un polinomio de grado 3 por mínimos cuadrados, por Lagrange y por sustitución directa, y calcular $f(\pi/4)$.

x	0	π/2	π	3π/2	2π
$f(x)$	0	1	0	-1	0

Si el valor exacto es $1/\sqrt{2}$, calcular el error relativo para cada método.

Solución. Debido a que hay 3 parejas en el que la ordenada es 0, es un caso excepcional; en los tres métodos sugeridos, el polinomio de 3er grado que se obtiene es el mismo, a saber:

$f(x) = 0.086x^3 - 0.8106x^2 + 1.6977x + 0$. De la misma manera, para los 3 casos y el error es alto, 23 %

$f\left(x = \frac{\pi}{4}\right)$ =0.875 para los 3 casos y el error es alto, 23 %

8. Desarrollando la función *cos x* con la serie de Mc Laurin, se obtiene el siguiente polinomio: $\cos x \approx 1 - \frac{1}{2}x^2$. Con la siguiente tabla, cuya función es $(x) = \cos x$, hallar un polinomio de segundo grado por mínimos cuadrados.

x	0.1	0.5	0.9	1.3
$f(x)$	0.9950	0.8775	0.6216	0.2674

Evaluar $f(x = \pi/4)$ con el polinomio de Mc Laurin y con el obtenido por mínimos cuadrados.

Solución.

$f(x) = -0.3698x^2 - 0.0919x + 1.0099$ (por mínimos cuadrados)

$f(x = \pi/4) = 0.7096$ (con mínimos cuadrados)

$f(x = \pi/4) = 0.6916$ (con la Serie de Mac Laurin)

9. Se considera que el rendimiento de un proceso químico es función de la cantidad de catalizador agregada a la reacción. Se realiza un experimento y se obtienen los siguientes datos:

Catalizador (lb)	60.54	63.86	63.76	60.15	66.66	71.66	70.81	65.72
Rendimiento(%)	0.9	1.4	1.6	1.7	1.8	2.0	2.1	2.3

Hacer una regresión lineal y calcular el rendimiento esperado cuando la cantidad de catalizador es de 83 libras.

Solución.

$R(C) = 0.0702C - 2.8670$

$R(C = 83) = 2.9612\%$

10. Aproximar $f(0.5)$ mediante los siguientes datos usando la fórmula de diferencias divididas progresivas de Newton Gregory.

x	0.0	0.2	0.4	0.6	0.8
$f(x)$	1.000	1.2214	1.49182	1.82212	2.2554

Solución

$$\boldsymbol{p(x) = f_o + C_1^s \Delta f_o + C_1^s \Delta f_o^2 + \ldots}$$

x	$F(x)$	Δf	$\Delta^2 f$
0.0	1.00000	0.2214	0.04902
0.2	1.22140	0.27042	0.05988
0.4	1.49182	0.3303	0.07312
0.6	1.82212	0.40342	
0.8	2.22554		

$$S = \frac{x - x_o}{h} = \frac{0.5 - 0.4}{0.2} = 0.5$$

$$p(x = 0.5) = 1.49182 + C_1^{0.5}\, 0.3303 + C_2^{s}\, 0.07312 = 1.64783$$

Respuestas a problemas

1. $y = 6x - 5$
2. $P(x) = 512.063 - 15.873x + 634.92x^2$
3. $P(F) = 32.857 + 0.06785F$
4. $P(1000) = 3653.98$
5. $P(1.09) = 0.28264$
6. $50.284 - 50.643x + 12.348x^2$
7. $f(x) = 0.086x^3 - 0.8106x^2 + 1.6977x + 0$
8. $f(x) = -0.3698x^2 - 0.0919x + 1.0099$
9. $R(C) = 0.0702C - 2.8670$
10. $p(x = 0.5) = 1.49182 + C_1^{0.5}\, 0.3303 + C_2^{s}\, 0.07312 = 1.64783$

3.7 PROBLEMAS DE APLICACIÓN 3

Problema 1. El calor especifico Cp (cal/K gmol) del Mn_3O_4 varía con la temperatura de acuerdo con la siguiente tabla

T(K)	*280*	*650*	*1000*	*1200*	*1500*	*1700*
Cp	32.7	45.4	5215	53.7	52.9	50.3

donde el cp está en cal/ K gmol

¿Cuál es el Cp del Mn_3O_4 a una temperatura de 700°C?

Resp. 46.67

Problema 2. Cada 10 años se levanta un censo de población en Estados Unidos (como en México). En la siguiente tabla se incluyen datos de la población estadunidense, en miles de habitantes, de 1940 a 1990.

Año	*1940*	*1950*	*1960*	*1970*	*1980*	*1990*
Pob.	132,165	151,326	179,323	203,302	226,542	249,633

La población está en miles de habitantes. Si consideramos un crecimiento lineal, ¿Aproximadamente cuántos habitantes hay en EEUU actualmente? Usar el método que prefieras.

Resp. 326687887 hab. (2022)

Problema 3. Un ingeniero químico lleva a cabo experimentos y determina los valores siguientes de capacidad calorífica c a distintas temperaturas T para un gas:

T	*– 50*	*– 30*	*0*	*60*	*90*	*110*
C	1270	1280	1350	1480	1580	1700

Use regresión para determinar un modelo para predecir c como función de T.

Resp. $c = 0.0127\ T^2 + 1.816\ T + 1330.9$.

Problema 4. Se sabe que el esfuerzo a la tensión de un plástico se incrementa como función del tiempo que recibe tratamiento a base de calor. Se obtuvieron los datos siguientes:

Tiempo	10	15	20	25	40	50	55	60	75
Esfuerzo a la tensión	5	20	18	40	33	54	70	60	78

Ajuste una línea recta a estos datos y utilice la ecuación para determinar el esfuerzo a la tensión en un tiempo de 32 min

Resp. ET= 1.059 T + 0.818, ET (T=32) = 34.7

Problema 5. El volumen específico de un vapor sobrecalentado se enlista en tablas de vapor para distintas temperaturas. Por ejemplo, a una presión absoluta de 3 000 lb/in^2:

T, °F	700	720	740	760	780
v, ft3/lbm	0.0977	0.12184	0.14060	0.15509	0.16643

Determine v con T = 750ºF

Resp. $\boldsymbol{v\ (T=750\ ^{o}F) = 0.14486\ ft^3/lbm}$

Problema 6. Una empresa tiene la siguiente función de producción, P.

$$P = A\,k^a\,L^b$$

donde: k es el capital, L es el trabajo, A es la tecnología.

Se tienen los siguientes datos para P, k y L.

P	225	240	278	212	199	297	242	155	215	160
K	10	12	10	14	12	16	16	20	8	8
L	20	22	26	18	16	24	20	14	20	14

a) Realizar la optimización de la función objetivo para las variables K y L, por mínimos cuadrados.

b) Hallar los valores a y b.

Resp. a) $\boldsymbol{a = 0.1931,\ b = 0.8784,\ A = 10.2729,\ P = 10.2729\ k^{0.1931}\ L^{0.8784}}$

b) $\boldsymbol{P(K = 15, L = 20) = 10.2729\ (15)^{0.1931}\ (20)^{0.8784} = 240.78}$

Problema 7. La siguiente tabla representa el tipo de cambio, pesos (mexicanos) por dólar de EEUU (cotización bancaria).

Año, A	2015	2016	2017	2018	2019	2020	2021
Cotización al cierre del año, C	17.24	20.61	19.66	19.65	18.86	19.90	20.46

Realizar una interpolación, ¿qué cotización se espera que cierre el año 2022?

Resp. C = 0.2657 A - 516.7286, C(A=2022) = 20.54 pesos/dólar

Problema 8. La historia de la población en México es la siguiente:

Año, t	1960	1970	1980	1990	2000	2010	2020
Población, en millones de hab.	37.19	50.72	66.94	83.16	98.19	113.28	128.25

Predecir el número de habitantes de México para el año 2030.

Resp. 143.771 millones de habitantes

Problema 9. A continuación se presenta la relación entre la altitud en relación a la presión atmosférica:

Altitud, msnm	0	250	500	1000	1250	1500	2000
Presión atmosférica, atm	1	0.971	0.942	0.887	0.86	0.834	0.785

¿Qué presión atmosférica hay en la Cd Mx que está a una altitud promedio de 2240 msnm (metros sobre el nivel del mar)?

Resp. 0.756 atm.

Problema 10. En Murcia la temperatura de ebullición del agua es de 100ºC; en el Everest, de 86ºC y a 19,000 m. de altura, es de 37ºC. Murcia está a 43 msnm, El Everest está a 8840 msnm. ¿A qué temperatura hierve el agua en la Cd Mx?

Resp. 98.97ºC

UNIDAD 4
Derivación e integración numéricas

La derivación e integración de funciones son operaciones matemáticas importantes, el estudiante aprende las fórmulas que le permiten expresar la derivada de una función, dado el enunciado de la función, como una expresión de x. Sin embargo, a veces la función no es conocida como una expresión explícita en términos de x, sino sólo como una tabulación de valores. En esta unidad se estudian técnicas numéricas que permiten el cálculo de los valores de la derivada de una función tabulada.

Con frecuencia es necesario integrar una función, cuando sólo es conocida la tabulación de los datos. Los métodos numéricos nos permiten hacer esto. Es más aún cuando la función es conocida explícitamente, las computadoras usan técnicas de integración.

DERIVADAS

Si una función es razonablemente bien aproximada por medio de un polinomio interpolante, debe esperarse que la pendiente de la función también sea aproximada por las pendientes del polinomio.

Se comienza con el polinomio de avance de Newton – Gregory:

$$P(x_s) = f_0 + \binom{S}{1}\Delta f_0 + \binom{S}{2}\Delta^2 f_0 + \binom{S}{3}\Delta^3 f_0 + \cdots + \binom{S}{n}\Delta^n f_0 + error \qquad (1)$$

El término error en la ecuación es el siguiente término:

$$\text{Error de } (x_s) = \binom{S}{n+1} h^{n+1} f^{n+1}(\xi) \qquad x_0 < \xi < x_n \qquad (2)$$

Al diferenciar la ecuación (1), recordamos que f_0 y todos los términos Δ son constantes (sólo son números de la tabla de diferencias), y se obtiene (3).

$$f'(x_s) = P'_n(x) = \frac{d}{dx}(P(x_s)) = \frac{d}{dx}(P(x_s))\frac{ds}{dx} = \frac{d}{dx}(P(x_s))\frac{1}{h}$$
$$= \frac{1}{h}\left\{\Delta f_0 + \frac{1}{2}(S-1+S)\Delta^2 f_0 + \frac{1}{6}[(S-1)(S-2)+S(S-2)+S(S-1)\Delta^3 f_0] + \cdots\right\} \quad (3)$$

Las derivadas de las factoriales de S se hacen con rapidez complicadas algebraicamente. Sin embargo, alcanzando una simplificación considerable si se permite que S = 0, dándonos la derivada correspondiente a x_0. si se supone que S = 0, la ecuación (3) queda:

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\left\{\Delta f_0 - \frac{1}{2}\Delta^2 f_0 + \frac{1}{3}\Delta^3 f_0 - \frac{1}{4}\Delta^4 f_0 + \cdots \pm -\frac{1}{n}\Delta^n f_0\right\} \quad (4)$$

En esta ecuación, el valor derivado aproximando a la derivada de la función, es la derivada de un polinomio de enésimo grado que pasa por el punto (x_0, f(x_0)), y n puntos adicionales a su derecha, evaluados en x = x_0.

Ejemplo 4.1. Los datos de la tabla para estimar la derivada de y en x = 1.7, emplee h = 0.2 y calcúlese utilizando uno, dos, tres o cuatro términos de la fórmula.

x	1.3	1.5	1.7	1.9	2.1	2.3	2.5
y	3.669	4.482	5.474	6.686	8.166	9.974	12.183

Solución. Hallando las diferencias, Δy, se obtiene

x	y	Δy	Δ^2y	Δ^3y	Δ^4y
1.3	3.669				
1.5	4.482	0.813			
1.7	5.474	0.992	0.179		
1.9	6.686	1.212	0.22	0.041	
2.1	8.166	1.48	0.268	0.048	0.007
2.3	9.974	1.808	0.328	0.06	0.012
2.5	12.183	2.209	0.401	0.073	0.013

Con un término: $y'(1.7) = \frac{1}{0.2}(1.212) = 6.060$

Con dos términos: $y'(1.7) = \frac{1}{0.2}[1.212 - \frac{1}{2}(0.268)] = 5.390$

Con tres términos: $y'(1.7) = \frac{1}{0.2}\left[1.212 - \frac{1}{2}(0.268) + \frac{1}{3}(0.060)\right] = 5.490$

Con cuatro términos:

$$y'(1.7) = \frac{1}{0.2}\left[1.212 - \frac{1}{2}(0.268) + \frac{1}{3}(0.060) - \frac{1}{4}(0.013)\right] = 5.475$$

Los datos de la tabla son para $y = exp(x)$, redondeados a tres decimales. Puesto que la derivada de $exp(x)$ también es $exp(x)$, se ve que el error de la derivada es más pequeño con cuatro términos, alrededor de 0.019%

Otras fórmulas para calcular derivadas, a partir de un conjunto de datos son:

Fórmulas para la primera derivada

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_0}{h} + \xi$$

$$f'(x_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + \xi$$ diferencia central

$$f'(x_0) = \frac{-f_2 + 4f_1 - 3f_0}{2h} + \xi$$

$$f'(x_0) = \frac{-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}}{12h} + \xi$$ diferencia central

Ejemplo 4.2. A partir de los datos de la tabla determine la primera derivada en el punto x = 1.7 con cada una de las fórmulas para primera derivada.

Solución

$$x_0 = 1.7 \quad f_0 = 5.474,\ f_1 = 6.686,\ f_2 = 8.166,\ f_{-2} = 3.669,\ f_{-1} = 4.482$$

$$f'(1.7) = \frac{6.686 - 5.474}{0.2} = 6.06$$

$$f'(1.7) = \frac{6.686 - 4.482}{2(0.2)} = 5.51$$

$$f'(1.7) = \frac{-8.166 + 4(6.686) - 3(5.474)}{2(0.2)} = 5.39$$

$$f'(1.7) = \frac{-8.166 + 8(6.686) - 8(4.482) + 3.669}{12(0.2)} = 5.4729$$

Fórmulas para la segunda derivada

$$f''(x_0) = \frac{f_2 - 2f_1 - f_0}{h^2} + \xi$$

$$f''(x_0) = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} + \xi \qquad \text{diferencia central}$$

$$f''(x_0) = \frac{-f_3 + 4f_2 - 5f_1 + 2f_0}{h^2} + \xi$$

$$f''(x_0) = \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2} + \xi \qquad \text{diferencia central}$$

Fórmulas para la tercera derivada

$$f'''(x_0) = \frac{f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0}{h^3} + \xi$$

$$f'''(x_0) = \frac{f_2 - 2f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{2h^3} + \xi \qquad \text{diferencia central}$$

Fórmulas para la cuarta derivada

$$f^{iv}(x_0) = \frac{f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 - f_0}{h^4} + \xi$$

$$f^{iv}(x_0) = \frac{f_2 - 4f_1 + 6f_0 - 4f_{-1} - f_{-2}}{h^4} + \xi \qquad \text{diferencia central}$$

Otra opción, es obtener el polinomio de interpolación y derivar. Para el ejemplo 4.1 el polinomio de interpolación es

$$P(x) = 1.1458x^3 - 3.08x^2 + 5.9772x - 1.4157$$

Cuya derivada evaluada en el punto 1.7 es

$$P'(1.7) = 3(1.1458)(1.7)^2 - 2(3.08)(1.7) + 5.9772 = 5.4394$$

4.1 INTEGRACIÓN NUMÉRICA

En esta sección describiremos algunos métodos que se pueden emplear para aproximar integrales definidas.

Existen dos casos en los que es imposible hallar el valor exacto de la integral definida.

1. Porque para evaluar una integral definida con el teorema fundamental del cálculo, necesitamos conocer una primitiva o antiderivada de la función. El problema consiste en que en ocasiones es difícil o hasta imposible determinar esa primitiva. Por ejemplo, es imposible evaluar con exactitud las siguientes integrales.

$$\int_0^1 exp(x^2)dx \qquad \int_{-1}^1 \sqrt{1+x^3}dx$$

2. Se presenta cuando la función se determina con un experimento empleando las medidas de instrumentos. Puede no existir fórmula para la función.

El objetivo de la integración numérica es la evaluación numérica de la integral definida.

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

donde a y b son los límites de integración y f(x) es una función dada analíticamente mediante una ecuación empíricamente por medio de una tabla de valores.

En los cursos de cálculo integral, se describe que si f(x) es tal que puede hallarse una función diferenciable F cuya derivada es f, entonces puede evaluarse (1) de la siguiente manera:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a), \qquad F'(x) = f(x)$$

o por medio de las tablas de integrales.

En integración analítica existen serias dificultades puesto que estamos muy limitados. Solo podemos resolver integrales satisfactoriamente de casos conocidos tales como: polinomios, funciones racionales, funciones trigonométricas y exponenciales directas e inversas y combinaciones entre éstas.

Cuando los resultados que buscamos no requieren de una gran aproximación, estos problemas se resuelven, generalmente, usando técnicas gráficas mediante la construcción de tangentes a las curvas trazadas en forma aproximada o estimando áreas bajo la misma.

Sin embargo, existen muchos casos en los que se requiere de una aproximación alta y para éstos hay varios métodos numéricos. Estos métodos consisten, básicamente, en sustituir la función determinada por datos experimentales, o por una expresión matemática complicada, o por una función que se aproxime a los puntos que la definen. Generalmente, se emplean funciones racionales enteras (polinomios) de primero, segundo y tercer grado.

De esta manera nuestra labor es describir las fórmulas matemáticas que se usan para efectuar una integración numérica. La mayor parte de los métodos numéricos para dicha integración se pueden interpretar desde una perspectiva gráfica.

En resumen, la función a integrarse puede ser de una de las tres formas siguientes:

1) Una función elemental y continua tal como un polinomio, una función exponencial o una función trigonométrica. En estos casos se pueden evaluar usando métodos analíticos del cálculo.
2) Una función complicada y continua que es difícil o imposible de integrar directamente. (Métodos aproximados)
3) Una función tabulada en donde los valores de x y f(x) se dan en un conjunto de puntos discretos, como en el caso, con frecuencia, de los datos experimentales. (Métodos aproximados).

Aproximación por Rectángulos.

Si f(x) es positiva sobre el intervalo $a \leq x \leq b$, la integral definida (1) es igual al área bajo la curva de f entre x = a y x=b. Como se ve en los estudios de cálculo integral, un camino para aproximar esta área es emplear n rectángulos. El proceso consiste en dividir el intervalo $a \leq x \leq b$ en n subintervalos iguales de longitud $\Delta x = \frac{b-a}{n}$ y considerando xj el extremo de la izquierda del j-ésimo rectángulo es el j-ésimo subintervalo y su altura es f(xj). En consecuencia, el área del j-ésimo rectángulo es f(xj)Δx. La suma de las áreas de los n rectángulos es la aproximación al área bajo la curva y por lo tanto una aproximación a la correspondiente integral definida. De esta manera:

$$\int_a^b f(x)\mathrm{dx} \approx f(x_1)\Delta x + f(x_2)\Delta x + \cdots f(x_n)\Delta x$$

Esta aproximación aumenta cuando el número de rectángulos crece, y puede estimar la integral con cualquier grado de precisión deseado tomando n lo suficientemente grande. Sin embargo, como habitualmente se requieren valores muy grandes de n para alcanzar una precisión razonable, la aproximación por rectángulos es usada raramente en la práctica.

En términos más formales, la integral definida es el límite de las sumas de Riemann:

$$\lim_{\Delta x \to 0} \sum_{j=1}^{n} f(x_j)\Delta x = \int_a^b f(x)dx$$

En especial el caso que estamos describiendo, es el que definimos una partición de [a, b] en n subintervalos de igual longitud Δx. Entonces.

$$\int_a^b f(x)dx \cong \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\Delta x$$

Ejemplo 4.3. Determine la integral por suma de rectángulos del siguiente conjunto de datos:

X	0.0	0.25	0.50	0.75	1.00
Y	1.0	0.94	0.80	0.64	0.50

Solución. Aplicando la fórmula o suma de rectángulos, se tiene

$$\sum_{i=1}^{n} f(x_i)\Delta x = 0.25[1 + 0.94 + 0.80 + 0.64 + 0.50] = 0.97$$

Ejemplo 4.4. Partiendo de la función $(x) = x^2$ determine la integral por el método de suma de rectángulos de 0 a 2. Compare los resultados con h = 0.5 y h = 0.2

Solución

La integral de la función cuadrática es una función cúbica.

$$I = \int_0^2 x^2 dx = \frac{1}{3}x^3\Big|_0^2$$

$$I = \frac{1}{3}[2^3 - 0^3] = \frac{8}{3} = 2.66$$

Para hallar la integral se asignan valores a la función con un tamaño de paso h = 0.5, y h = 0.2

X	Y
0	0
0.5	0.25
1.0	1.0
1.5	2.25
2.0	4.0

h = 0.5

[0 + 0.25 + 1.0 + 2.25 + 4.0]

I= 3.75

$$\% \, error = \left|\frac{2.66-3.75}{2.66}\right| 100 = 40.97\%$$

Con h = 0.2

X	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0	1.2	1.4	1.6	1.8	2.0
y	0	0.04	0.16	0.36	0.64	1.0	1.44	1.96	2.56	3.24	4.0

I = 0.2 (0 + 0.04 + 0.16 + 0.36 + 0.64 + 1 + 1.44 + 1.96 + 2.56 + 3.24 + 4) = 3.08

$$\% \, error = \left|\frac{2.66-3.08}{2.66}\right| 100 = 15.79\%$$

En ambas determinaciones se halla un alto error de aproximación, en la primera un 41%, y en la segunda 16%.

Con un tamaño de paso de h = 0.1 se obtiene una mejor aproximación, de 7.89% pero aún así es preferible utilizar otro método.

En la figura 20 se muestra que cada triángulo junto a la curva es la suma de errores al aproximar la integral por rectángulos.

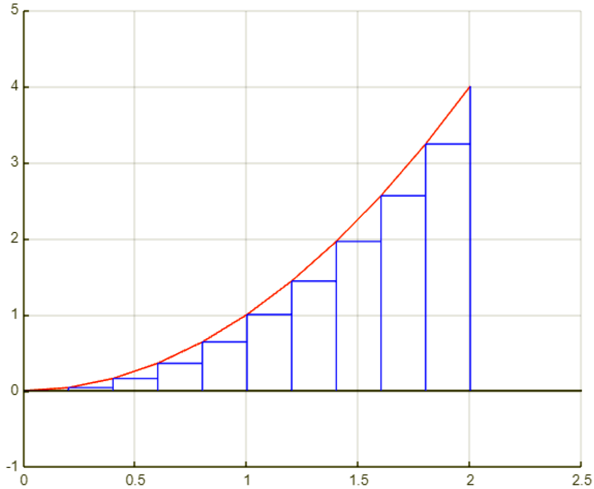


FIGURA 20. Función y aproximación por rectángulos con error en cada uno.

4.2 MÉTODO DE NEWTON-COTES

Son las técnicas más empleadas dentro de la integración numérica. Para estimar la integral definida, los métodos de Newton –Cotes funcionan en general bajo dos condiciones:

1) Se divide el intervalo [a, b] en n subintervalos de igual longitud.
2) Se aproxima la función f(x) por un polinomio de grado n, representado por el polinomio $P_n(x)$ y se integra para obtener la aproximación de la integral definida. En otras palabras, se basan en la estrategia de reemplazar una función complicada o un conjunto de datos tabulares con alguna función aproximada que sea más fácil de integrar, esto, es $f_n(x)$ por $P_n(x)$.

A pesar del error cometido, se puede emplear un polinomio de primer grado, es decir, una línea recta como aproximación o bien una parábola. Lo recomendable es utilizar el polinomio que mejor ajuste a los datos proporcionados. Los polinomios cúbicos ofrecen mejores aproximaciones.

La integral definida se puede aproximar empleando una serie de polinomios aplicados por partes a la función o a los datos sobre intervalos de longitud constante. Hemos mencionado que en los cursos de cálculo ordinario empleamos rectángulos. En estos casos los polinomios que se utilizan son polinomios de grado cero, esto es, constantes para aproximar la integral.

En el método de Newton-Cotes, se dispone de las formas abiertas y cerradas. Las formas cerradas son aquellas en donde los puntos al principio y al final de los límites de integración se conocen. Las formas abiertas tienen los límites de integración extendidos más allá del rango de los datos. Las fórmulas abiertas de Newton Cotes, en general, no se usan en la integración definida. Sin embargo, se emplean extensamente en la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias.

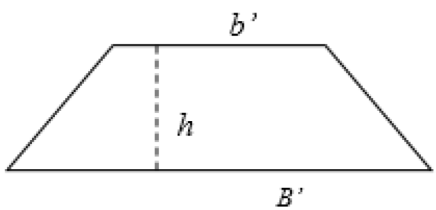
Fórmulas cerradas: Regla del Trapecio y Reglas de Simpson.

Fórmulas abiertas: Integración de Riemann.

4.3 REGLA DEL TRAPECIO O REGLA TRAPEZOIDAL

La regla del trapecio es la primera de las fórmulas cerradas de Newton – Cotes. La precisión de la aproximación crece significamente si se usan trapecios en lugar de rectángulos.

El área de un trapecio, A, es: $A = \left(\frac{B\prime+b\prime}{2}\right)h$;; B'=base mayor, b'= base menor, h = altura



Para la siguiente figura.

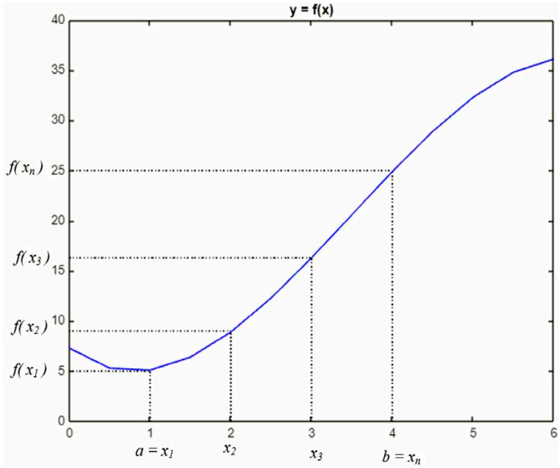


FIGURA 21. Suma de área por trapecios.

La suma de las áreas de los n trapecios es una aproximación a la correspondiente integral definida. De esta manera:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{1}{2}[f(x_1)+f(x_2)]\Delta x + \frac{1}{2}[f(x_2)+f(x_3)]\Delta x \ldots + \frac{1}{2}[f(x_n)+f(x_{n+1})]\Delta x$$

Para aproximar el área correspondiente bajo la curva. Hacer lo mismo con los restantes pares de subintervalos y usar la suma de las áreas resultantes para aproximar el área total bajo la curva.

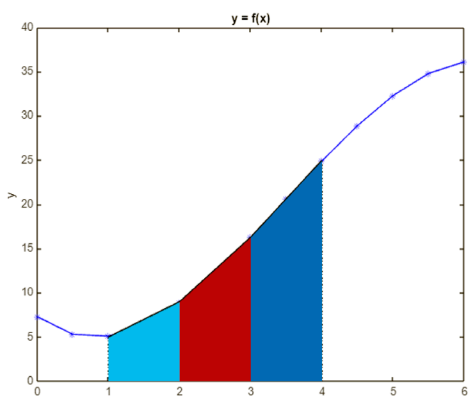


FIGURA 22. Aproximación del área por trapecios.

El área bajo la línea recta es una aproximación de la integral f(x) entre los límites de a y b.

$$I = \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \right] dx$$

El resultado de la integración es

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

que se denomina regla del trapecio.

Ejemplo 4.3. Con la tabla de datos siguientes efectúe la integración de ellos.

x	0	1	2	3
y	– 1	3	9	17

Solución. Empleando la fórmula de integración para un trapecio.

$$I = (3 - 0)\left[\frac{17 + 1}{2}\right] = 3(8.5) = 25.5$$

para cada segmento se emplea la suma de Riemann para tres rectángulos.

$$I = (1 - 0)\left[\frac{3 - 1}{2}\right] + (2 - 1)\left[\frac{9 + 3}{2}\right] + (3 - 2)\left[\frac{17 + 9}{2}\right] = 1 + 6 + 13 = 20$$

Para tres trapecios

$$I_3 = \frac{1}{2}(-1 + 3)(1) + \frac{1}{2}(3 + 9)(1) + \frac{1}{2}(9 + 17)(1) = 20$$

Con los datos se puede establecer el polinomio y luego integral analíticamente.

Usando mínimos cuadrados se obtienen los siguientes valores

x	y	x²	x³	x⁴	xy	x2y
0	-1	0	0	0	0	0
1	3	1	1	1	3	3
2	9	4	8	16	18	36
3	17	9	27	81	51	153
sumas 6	28	14	36	98	72	192

El polinomio obtenido es $P(x) = x^2 + 3x - 1$

Cuya integral analítica es

$$\int_0^3 (x^2+3x-1)dx = \frac{x^3}{3} + 3\frac{x^2}{2} - x\bigg|_0^3 = 9 + 13.5 - 3 = 19.5$$

$$\% \text{ error 1 trapecio} = \left|\frac{19.5-25.5}{19.5}\right| 100 = 30.7\ \%, \quad \% \text{ error 3 trapecios} = \left|\frac{19.5-20.5}{19.5}\right| 100 = 2.5\ \%$$

Ejemplo 4.4. Determine la integral de la función entre 1 y 2 por el método del trapecio.

Solución.

La integración por método analítico es

$$\int_1^2 3x^2 dx = 3\left[\frac{x^3}{3}\right]_1^2 = 3\left[\frac{2^3}{3} - \frac{1^3}{3}\right] = 8 - 1 = 7$$

Empleando el método de trapecio en el intervalo de 1 a 2 proporciona una aproximación a la integral real, esto es:

$$f(1) = 3(1)^2 = 3$$

$$f(2) = 3(2)^2 = 12$$

$$I = \frac{3+12}{2} = 7.5$$

$$\%\ error = \frac{7.5-7}{7} * 100 = 7.14$$

Se puede establecer un tamaño de paso reducido para incrementar el número de trapecios con el propósito de conseguir una mejor aproximación.

La tabla de valores de la función de 1 a 2 con separaciones de 0.1 son:

x	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
$y = 3x^2$	3.0	3.63	4.32	5.07	5.88	6.75	7.68	8.67	9.72	10.83	12.0

a) Utilizando dos trapecios

Se requieren tres datos

x	y
1	3
1.5	6.75
2	12

La gráfica adquiere la siguiente forma:

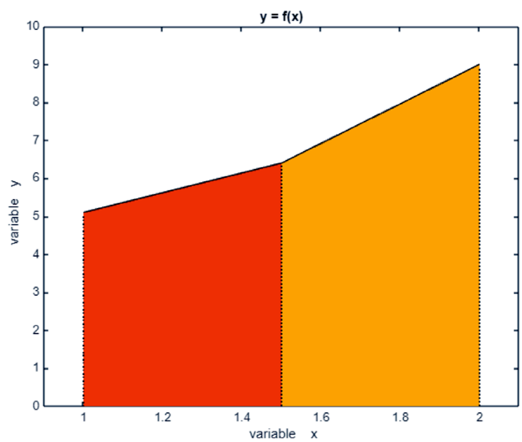


FIGURA 23. Aproximación con dos trapecios.

El cálculo de la integral es

$$I_1 = \frac{3 + 6.75}{2} = \frac{9.75}{2} = 4.875$$

$$I_2 = \frac{6.75 + 12}{2} = \frac{18.75}{2} = 9.375$$

$$\sum I = I_1 + I_2 = 4.875 + 9.375 = 14.25$$

$$Integral = \frac{\sum I}{n} = \frac{14.25}{2} = 7.125$$

$$\%\,error = \frac{7.125 - 7}{7} * 100 = 1.78$$

b) Utilizando cinco trapecios

Se requieren seis datos

x	y
1	3
1.2	4.32
1.4	5.88
1.6	7.68
1.8	9.72
2	12

La gráfica adquiere la siguiente forma:

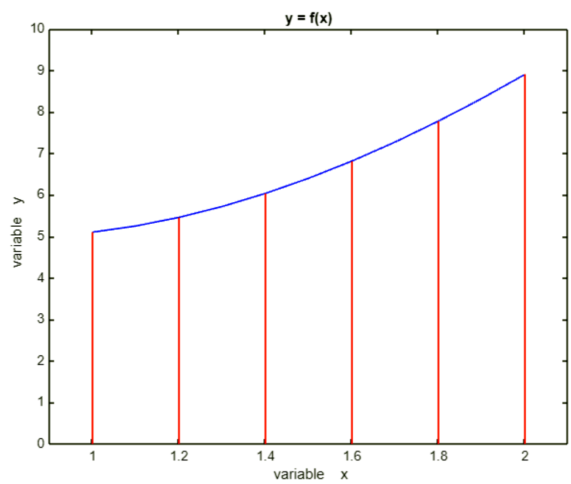


FIGURA 24. Aproximación con cinco trapecios.

El cálculo de la integral es

$$I_1 = \frac{3 + 4.32}{2} = 3.66$$

$$I_2 = \frac{4.32 + 5.88}{2} = 5.1$$

$$I_3 = \frac{5.88 + 7.68}{2} = 6.78$$

$$I_4 = \frac{7.68 + 9.72}{2} = 8.7$$

$$I_5 = \frac{9.72 + 12}{2} = 10.86$$

$$\sum I = I_1 + I_2 + I_3 + I_4 + I_5 = 35.1$$

$$I = \frac{\sum I}{n} = \frac{35.1}{5} = 7.02$$

$$\%\, error = \frac{7.02 - 7}{7} * 100 = 0.28$$

Se puede utilizar programación Matlab para facilitar las operaciones.

```
% programa trap1
% Determinar la integral por trapecios
clear;format compact;clc;
% ingresar datos entre parentesis x=input('Datos x ? ')
x=[1 1.1 1.2 1.3 1.4 1.5 1.6 1.7 1.8 1.9 2]
% ingresar datos entre parentesis y=input('Datos y ? ')
y=[3 3.63 4.32 5.07 5.88 6.75 7.68 8.67 9.72 10.83 12]
n=size(x)-1;
n=n(2);
sum=y(1)
% dex=(x(n+1)-x(1))/n
for i=2:n
    sum=sum+2*y(i)
end
sum=sum+y(n+1)
area=sum/(2*n)
```

4.4 REGLA DE SIMPSON 1/3

Se puede demostrar que esta elaboración se lleva al siguiente resultado de aproximación conocido como Regla de Simpson 1/3.

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{\Delta x}{3}[f(x_1) + 4f(x_2) + 2f(x_3) + 4f(x_4) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + 4f(x_n) + f(x_{n+1})]$$

La demostración de la Regla de Simpson 1/3 está basada en el hecho de que la ecuación de una parábola es un polinomio de la forma:

$$y = Ax^2 + Bx + C$$

Para cada par de subintervalos se usan los tres puntos dados para hallar los coeficientes A, B, y C, y se integra entonces el polinomio resultante para obtener el área correspondiente.

Para este método, al igual que el del trapecio, se requiere tomar una partición de [a, b] con n subintervalos de igual longitud.

$$\Delta x = \frac{b-a}{n}$$

Pero esta vez necesitamos que n sea un número par. Entonces en cada par consecutivo de intervalos, aproximamos la curva y= f(x) por medio de una parábola, esto es, empleamos segmentos parabólicos en lugar de segmentos de recta.

Ejemplo 4.5. Emplear la Regla de Simpson1/3 con n = 10 para aproximar

$$\int_1^2 \frac{1}{x}dx$$

Solución. Como en el ejemplo del trapecio, $\Delta x = 0.1$ y por tanto, el intervalo $1 \leq x \leq 2$ se divide en los 10 subintervalos por medio de:

$$x_1 = 1, x_2 = 1.1, x_3 = 1.2, x_4 = 1.3, x_5 = 1.4, x_6 = 1.5, x_7 = 1.6,$$

$$x_8 = 1.7, x_9 = 1.8, x_{10} = 1.9, x_{11} = 2.0$$

Entonces, aplicando la Regla de Simpson1/3:

$$\int_1^2 \frac{1}{x}dx \cong \frac{0.1}{3}\left[\frac{1}{1}+\frac{4}{1.1}+\frac{2}{1.2}+\frac{4}{1.3}+\frac{2}{1.4}+\frac{4}{1.5}+\frac{2}{1.6}+\frac{4}{1.7}+\frac{2}{1.8}+\frac{4}{1.9}+\frac{1}{2}\right] = 0.69315$$

Esta es una excelente aproximación al verdadero valor: *ln* 2 = 0.693147...

Ejemplo 4.6. Emplear Simpson1/3 con n = 10, para hallar, aproximadamente la integral

$$\int_0^1 exp(\,x^2)dx$$

Solución. Si n = 10, entonces, Δx = 0.1, y

X	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
F(x)	1.0	1.0101	1.0408	1.0942	1.1735	1.284	1.433	4.632	1.896	2.2479	2.7183

Por lo tanto

$$\int_0^1 e^{x^2}dx \cong \frac{0.1}{3}[e^0 + 4e^{0.01} + 2e^{0.04} + 4e^{0.09} + \ldots + 2e^{0.64} + 4e^{0.81} + e]$$

= 1.462681

Cabe mencionar que esta integral no se puede resolver por métodos analíticos.

Ejemplo 4.7. Emplear Simpson 1/3 con n = 4 y n = 5, para hallar la integral

$$\int_0^1 x^2 dx$$

Compare y decida cuál proporciona la mejor aproximación al valor real.

Solución. Con 4 intervalos y los límites de integración de 0 a 1, se obtiene

$$\Delta x = \frac{1-0}{4} = 0.25$$

x	y
0.00	0.00
0.25	0.0625
0.50	0.25
0.75	0.5625
1.00	1.00

$$I \;= \frac{0.25}{3}\,[y_1 + 4y_2 + 2y_3 + 4y_4 + y_5]$$

$$I = \frac{0.25}{3}(0 + 4(0.0625) + 2(0.25) + 4(0.5625) + 1) = 0.3333$$

$$\%\,error \;= \frac{0.333 - 0.333}{0.333}100 = 0\,\%$$

Con 5 intervalos se generan seis datos, y con los límites de integración de 0 a 1, se obtiene

$$\Delta x = \frac{1-0}{5} = 0.20$$

x	y
0.00	0.00
0.20	0.04
0.40	0.16
0.60	0.36
0.80	0.64
1.00	1.00

$$I \;= \frac{0.2}{3}\,[y_1 + 4y_2 + 2y_3 + 4y_4 + 2y_5 \;+\; y_6]$$

$$= \frac{0.20}{3}(0 + 4(0.04) + 2(0.16) + 4(0.36) + 2(0.64) + 1) = 0.2933$$

$$\%\,error \;= \frac{0.333 - 0.2933}{0.333}100 = 11.9\%$$

Se comprueba que para aplicar la integración de Simpson 1/3 se debe emplear n par o número de datos impares (5, 7 , 9, ...)

4.5 REGLA DE SIMPSON 3/8

De manera similar a la derivación de la regla del trapecio y a la Regla de Simpson 1/3, se pueden ajustar polinomios de tercer grado a cuatro puntos (intervalos múltiples de 3). La fórmula de esta Regla para n = múltiplo de 3 es:

$$\int_a^b f(x)dx \cong \frac{3\Delta x}{8}\begin{bmatrix} f(x_1) + 3f(x_2) + 3f(x_3) + 2f(x_4) + 3f(x_5) + 3f(x_6) + \cdots \\ +2f(x_{n-2}) + 3f(x_{n-1}) + 3f(x_n) + f(x_n) \end{bmatrix}$$

Ejemplo 4.8. Aproximar por Simpson 3/8 con n = 6, la integral

$$\int_0^{\pi/4} sec^3\, x\, dx$$

de acuerdo con que a = 0, b = π/4, entonces $\Delta x = \frac{b-a}{n} = \frac{\pi/4 - 0}{6} = \frac{\pi}{24}$, por lo que la tabla de valores quedaría:

x	f(x)
0	1
π/24	1.0261
π/12	1.1096
π/8	1.2681
π/6	1.5439
5π/24	2.0026
π/4	2.8284

Sustituyendo en la fórmula de Simpson 3/8:

$$\int_0^{\pi/4} sec^3\, x\, dx \cong \frac{3\pi}{8(24)}[1 + 3(1.10261) + 3(1.1096) + 2(1.2681) + \cdots 2.8284] = 1.149197$$

El valor real es 1.147778, por lo que se tiene un error relativo de 0.096%

A continuación, se muestran dos programas en Matlab para el cálculo de la integral por el método de Simpson.

```
% programa simpson1
% Determinar la integral por Simpson 1/3
% usar tamaño de paso constante en x
clear;format compact;clc;
sum1=0;sum2=0;
% ingresar datos entre paréntesis x=input('Datos x ? ')
x=[0 0.2 0.4 0.6 0.8 1]
% ingresar datos entre paréntesis y=input('Datos y ? ')
y=[0 0.06 0.25 0.36 0.64 1]
n=size(x)-1;
n=n(2)
sum=y(1)
dex=x(2)-x(1)
for i=2:2:n
    sum1=sum1+4*y(i)
end
for i=3:2:n
    sum2=sum2+2*y(i)
end
sum=sum++sum1+sum2+y(n+1)
area=sum*dex/3

% programa simpson2
% Determina la integral por Simpson 3/8
% usar tamaño de paso constante en x
clear;format compact;clc;
sum1=0;sum2=0;
% ingresar datos entre paréntesis x=input('Datos x ? ')
x=[0 pi()/24 pi()/12 pi()/8 pi()/6 5*pi()/24 pi()/4]
% ingresar datos entre paréntesis y=input('Datos y ? ')
y=[1 1.0261 1.1096 1.2681 1.5439 2.0026 2.8284 ]
n=size(x)-1;
n=n(2)
dex=x(2)-x(1)
sum1=y(1)+y(n+1)
sum2=3*y(2)+3*y(3)+2*y(4)+3*y(5)+3*y(6)
sum=sum1+sum2
area=3*dex*sum/8
```

4.6 CUADRATURA GAUSSIANA

Las fórmulas de Newton – Cotes se derivaron integrando los polinomios interpolantes de primero, segundo o tercer grado.

En todas estas fórmulas se emplean valores de la función en puntos equidistantes. Esta práctica es adecuada cuando las fórmulas se combinan para formar las reglas compuestas; pero esta restricción puede afectar considerablemente la exactitud de la aproximación. Por ejemplo, tomemos el caso de la regla del trapecio con la que se determinan las integrales de las funciones de la figura 25.

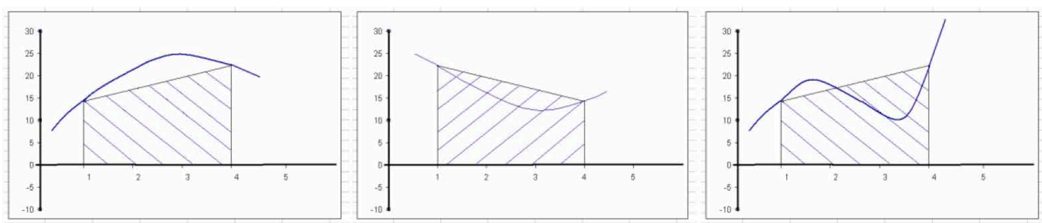


FIGURA 25. Aproximación a la curva por trapecio.

La regla del trapecio aproxima la integral de la función lineal que une los extremos de la gráfica de la función. Pero ésta no es la mejor línea para aproximar la integral. Las líneas como las que se muestran en la figura 26 seguramente producirán, en la generalidad de los casos, mejores aproximaciones.

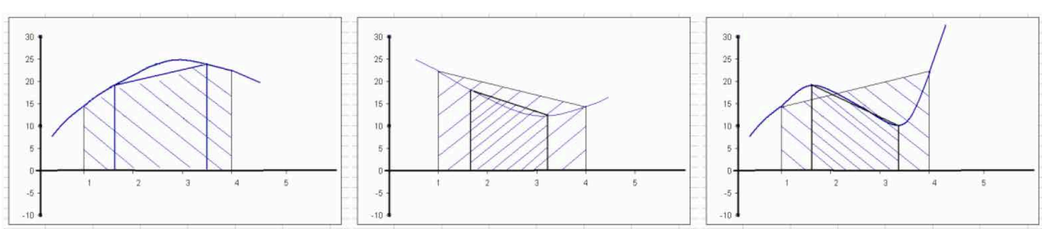


FIGURA 26. Mejores aproximaciones con trapecios pequeños.

La cuadratura gaussiana selecciona los puntos de la evaluación de manera óptima y no en forma igualmente espaciada. Se escogen los nodos X1, X2,... Xn en el intervalo [a,b] y los coeficientes C_1, C_2....C_n para reducir en lo posible el error esperado que se obtiene al efectuar la aproximación.

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} C_i f(x_i)$$

Cuando n = 2 y cuando el intervalo de integración es [-1, 1], el procedimiento es el siguiente.

Supóngase que queremos determinar C1, C2, X1 y X2 de modo que la fórmula de integración

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2)$$

Dé el resultado exacto siempre que f(x) sea un polinomio de grado (2), (2) – 1 ó menor, es decir, cuando

$$f(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$

Para algún conjunto de constantes a_0, a_1, a_2, a_3. Dado que

$$\int (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3)\, dx = a_0 \int dx + a_1 \int x dx + a_2 \int x^2 dx + a_3 \int x^3 dx$$

Esto equivale a demostrar que la fórmula produce resultados exactos cuando f(x) es 1, x, x^2, x^3. Por tanto, necesitamos c1, c2, x1, x2 de modo que

$$c_1 \cdot 1 + c_2 \cdot 1 = \int_{-1}^{1} 1dx = 2 \qquad c_1 \cdot x_1 + c_2 \cdot x_2 = \int_{-1}^{1} xdx = 0$$

$$c_1 \cdot x_1^2 + c_2 \cdot x_2^2 = \int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{2}{3} \qquad c_1 \cdot x_1^3 + c_2 \cdot x_2^3 = \int_{-1}^{1} x^3 dx = 0$$

Con unas cuantas operaciones algebraicas demostramos que este sistema de ecuaciones tiene solución única con que se obtiene la fórmula de aproximación.

$$c_1 = 1, \quad c_2 = 1, \quad x_1 = \frac{-\sqrt{3}}{3}, \quad x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

Esta fórmula tiene un grado de precisión tres, esto es, produce el resultado exacto con cada polinomio de grado tres o menor.

Una integral $\int_a^b f(x)dx$ en un intervalo arbitrario [a, b] se puede transformar en otra en [-1, 1] usando el cambio de variables (ver figura 27).

$$t = \frac{1}{2}[(b-a)t + a + b]$$

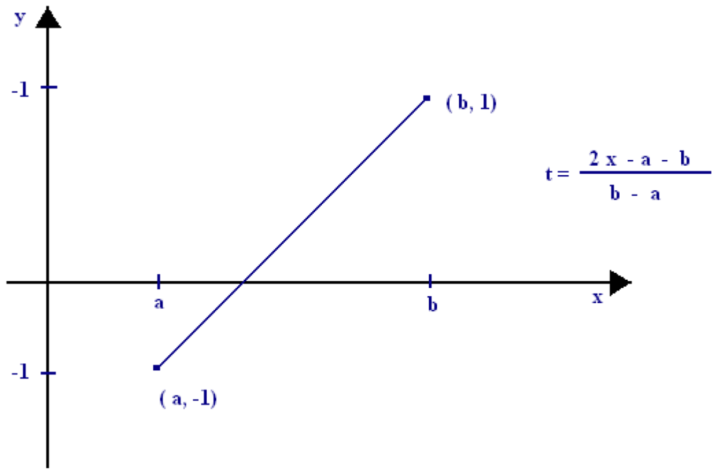


FIGURA 27. Aproximaciones por cambio de variable.

Esto nos permite aplicar la cuadratura gaussiana a

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^{1} f\left[\frac{(b-a)t + (b+a)}{2}\right]\frac{b-a}{2}dt$$

Como a y b son constantes, se tiene la cuadratura gaussiana para n=2.

$$\frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left[\frac{(b-a)t + (b+a)}{2}\right]dt = \frac{b-a}{2}[f(t = -0.5773) + f(t = 0.5773)]$$

Ejemplo 4.9. Resolver la integral $\int_0^{\pi/4} sec^3\, x\, dx$

Solución. a = 0, b= π /4, por lo tanto

$$\int_0^{\pi/4} sec^3\, x\, dx = \frac{b-a}{2}[f(t = -0.5773) + f(t = 0.5773)]$$

$$x=\frac{(b-a)t+b+a}{2}; \qquad x=\frac{\pi t/4+\pi/4}{2}=\frac{\pi}{8}t+\frac{\pi}{8}$$

$$f(t)=sec^3\left[\frac{(b-a)t+b+a}{2}\right]$$

$$\int_{-1}^{1} sec^3\left[\frac{\pi}{8}t+\frac{\pi}{8}\right]dt=\frac{\pi}{8}\left\{sec^3\left[\frac{\pi/4(-0.5773)+\pi/4}{2}\right]+sec^3\left[\frac{\pi/4(0.5773)+\pi/4}{2}\right]\right\}$$

$$=\frac{\pi}{8}[1.042396277+1.852539]=1.136838$$

El valor exacto 1.147778.

Ejemplo 4.10. Resolver $\int_0^1 xe^x dx$

Resolución. Analíticamente se resuelve por partes.

$$\int_0^1 xe^x dx=xe^x-\int_0^1 xe^x dx=xe^x-e^x \quad |_0^1=1$$

Con la cuadratura de Gauss

$$\int_0^1 xe^x dx=\int_{-1}^{1} f(t)dt$$

$$x=\frac{(b-a)t+b+a}{2}; \qquad x=\frac{1}{2}(t+1); \quad dx=\frac{1}{2}dt$$

Por lo tanto,

$$\int_0^1 xe^x dx=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\left(\frac{t+1}{2}\right)e^{\left(\frac{t+1}{2}\right)}=\frac{1}{2}\left[\left(\frac{-0.5773+1}{2}\right)e^{\left(\frac{-0.5773+1}{2}\right)}+\left(\frac{0.5773+1}{2}\right)e^{\left(\frac{0.5773+1}{2}\right)}\right]$$

= 0.99824.

Error relativo de 0.176 %

4.7 INTEGRALES MÚLTIPLES

Podemos modificar abiertamente los métodos aplicados anteriormente y utilizarlos para aproximar integrales múltiples. Consideraremos la integral doble.

$$\iint_R f(x,y)dA$$

donde R es una región rectangular en el plano:

$$R = \left\{\frac{x,y}{a} \leq x \leq b, c \leq y \leq d\right\}$$

Para algunas constantes a, b, c, d. Para dar un ejemplo del método de aproximación, emplearemos la regla compuesta de Simpson 1/3, aunque se podría utilizar otra regla.

Dividimos la región R fraccionando [a, b] y [c, d] en un número par de intervalos. Para simplificar la notación escogemos los enteros n y m y las particiones [a, b] y [c, d] con los puntos de red uniformemente espaciados: x_0, x_1, x_2, ... x_{2n}, y y_0, y_1, y_2, y_3, ... y_{2m}, respectivamente. Estas subdivisiones determinan los tamaños del paso h = (b-a)/2n y L=(d-c)/2m. Al escribir la integral doble como integral iterada.

$$\iint_R f(x,y)dA = \int_a^b \left(\int_c^d f(x,y)dy\right)dx$$

Primero aplicamos la regla compuesta de Simpson 1/3 para $\int_c^d f(x,y)dy$ de la siguiente manera (donde x es constante):

$$\int_{y_1}^{y_{m+1}} f(x,y)dy = \frac{k}{3}[f(x,y_1) + 4f(x,y_2) + 2f(x,y_3) + 4f(x,y_4) + \ldots$$

$$+ 2f(x,y_{m-1}) + 4f(x,y_m) + f(x,y_{m+1})]$$

entonces

$$\int_{x_1}^{x_{n+1}} \left[\int_{y_1}^{y_{m+1}} f(x,y)\,dy\right] dx$$

$$= \frac{k}{3}\left\{\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x,y_1)dx + 4\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x,y_2)dx + 2\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x,y_3)dx\right.$$

$$+4\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x,y_4)dx + \ldots$$

$$+2\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x,y_{m-1})dx + 4\int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x,y_m)dx + \int_{x_1}^{x_{n+1}} f(x,y_{m+1})dx\Big\}$$

desarrollando cada integral con la regla de simpson 1/3.

$$\int_a^b\int_c^d f(x,y)dydx = \frac{k}{3}\left\{\frac{h}{3}[f(x_1,y_1)+4f(x_2,y_1)+2f(x_3,y_1)+\ldots+4f(x_n,y_1)+f(x_{n+1},y_1)]+\right.$$

$$+4\frac{h}{3}[f(x_1,y_2)+4f(x_2,y_2)+2f(x_3,y_2)+\ldots+4f(x_n,y_2)+f(x_{n+1},y_2)]$$

$$+2\frac{h}{3}[f(x_1,y_3)+4f(x_2,y_3)+2f(x_3,y_3)+\ldots+4f(x_n,y_3)+f(x_{n+1},y_3)]+\ldots$$

$$\left.+\frac{h}{3}[f(x_1,y_{m+1})+4f(x_2,y_{m+1})+2f(x_3,y_{m+1})+\ldots+4f(x_n,y_{m+1})+f(x_{n+1},y_{m+1})]\right\}$$

Ejemplo 4.11. Resolver $\int_{x=0}^{1}\int_{y=0}^{1} xe^y dydx$ para 4 intervalos.

$$f(x,y) = xe^y \qquad h = 0.25 = \Delta x, \qquad k = 0.25 = \Delta y$$

$$\int_{x=0}^{1}\int_{y=0}^{1} xe^y dydx = \frac{0.25}{3}\left\{\frac{0.25}{3}[f(0,0)+4f(0.25,0)+2f(0.5,0)+4f0.75,0)+f(1,0)]+\right.$$

$$4\frac{0.25}{3}[f(0,0.25)+4f(0.25,0.25)+2f(0.50,0.25)+4f(0.75,0.25)+f(1,0.25)]+$$

$$2\frac{0.25}{3}[f(0,0.50)+4f(0.25,0.50)+2f(0.50,0.50)+4f(0.75,0.50)+f(1,0.50)]+$$

$$4\frac{0.25}{3}[f(0,0.75)+4f(0.25,0.75)+2f(0.50,0.75)+4f(0.75,0.75)+f(1,0.75)]+$$

$$\left.\frac{0.25}{3}[f(0,1.0)+4f(0.25,1.0)+2f(0.50,1.0)+4f(0.75,1.0)+f(1.0,1.0)]\right\}$$

$$\int_{x=0}^{1}\int_{y=0}^{1} xe^y dydx = 0.859159$$

el valor exacto es 0.85914

El uso de las funciones de Matlab puede facilitar el cálculo de las integrales. Con el programa Matlab se pueden resolver algunas integrales, las funciones que se utilizan son: Integral(fun,a,b) y trapz(x,y)

La función **integral** evalúa la integral numéricamente utilizando una aproximación por cuadratura, requiere declarar la función y los límites de integración. El código necesario es el siguiente:

```
% Solución a integrales
disp('a) ')
f1= @(x) log(sqrt(x))
q1=integral(f1,2,4)
```

Para el uso de **trapz** se deben proporcionar los datos en forma tabular, mientras más valores se proporcionen mejor será la aproximación por el método del trapecio.

Su código de programación es:

```
x1=2:0.5:4
y1=f1(x1)
t1=trapz(x1,y1)
```

El resultado coincide ampliamente.

4.8 PROBLEMAS UNIDAD IV

1. Resolver las siguientes integrales, analíticamente, y por todos los métodos numéricos: La Regla del trapecio, Simpson 1/3, Simpson 3/8 y la Cuadratura de Gauss. Si consideramos que el método analítico es el valor exacto de la integral, calcular el error relativo de los métodos numéricos.

a) $\int_2^4 \ln\sqrt{x}\,dx$

b) $\int_0^{\pi} sen^3 x\,dx$

c) $\int_0^1 e^{-x}x^3\,dx$

d) $\int_0^9 x^2(x^3-1)^{10}dx$

e) $\int_0^4 (1-e^{-2x})dx$

f) $\int_0^{\pi/2} (6+3\cos x)dx$

g) $\int_{-2}^4 (1-x-4x^3+2x^5)\,dx$

h) $\int_{-3}^5 (4x-3)^3 dx$

i) $\int_0^3 x^2e^x dx$

j) $\int_{0.5}^{1.5} 14^{2x}dx$

k) $\int_0^3 (5+3\cos x\,)\,dx$

l) $\int_0^{\pi/4} sen\,x\,dx$

2. Resolver las siguientes integrales dobles (analítica y numéricamente):

a) $\int_0^1 \int_0^1 y e^x \, dxdy$

b) $\int_0^1 \int_0^{\pi} \sqrt{y}\, cosx \, dxdy$

c) $\int_0^{0.5} \int_0^{0.5} e^{y-x} \, dydx$

d) $\int_{2.1}^{2.5} \int_{1.2}^{1.4} x\, y^2 \, dydx$

e) $\int_0^{\pi} \int_0^{x} \cos x \, dydx$

f) $\int_1^{e} \int_1^{x} \ln xy \, dydx$

3. Para el siguiente conjunto de datos:

x	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3
y	1/2	1/3	1/4	1/5	1/6	1/7	1/8	1/9	1/10

Hallar $f'(x=0), f''(x=2), f'(x=-2)$

4. Para el siguiente conjunto de datos:

x	-1	-0.8	-0.6	-0.4	-0.2	0	0.2
y	2	1.844	1.673	1.483	1.265	1	0.632

Hallar $f'(x=0.4), f''(x=0.4), f'''(x=0.4)$ usando $h=0.2$

5. Resolver usando el método de diferencias divididas de Newton:

x	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3
y	1/2	1/3	1/4	1/5	1/6	1/7	1/8	1/9	1/10

Hallar $f'(x=0)$

6. Para el siguiente conjunto de datos:

x	-1	-0.8	-0.6	-0.4	-0.2	0	0.2
y	2	1.844	1.673	1.483	1.265	1	0.632

Hallar $f'(x=-0.4)$

Respuestas a problemas

1. a) 1.079 b) 4/3 c) 0.1139 d) $9x10^{29}$

   e) 3.5 f) 12.42 g) 1104 h) 2056 i) 98.43

   j) 517.23 k) 15.42 l) 0.2928

2. a) 0.8591 b) 0 c) 0.2552 d) 0.3116 e) –2 f) 1.718

3. $f'(x=0) = -1/48$, $f''(x=2) = 1/360$, $f'(x=-2) = 1/60$

4. $f'(x=-0.4) = -1.02$, $f''(x=-0.4) = -0.7$, $f'''(x=-0.4) = 5.375$

5. $f'(x=0) = 1.019$

6. $f'(x=-0.4) = -1.03$

4.9 PROBLEMAS DE APLICACIÓN 4

Problema 1. Para el siguiente conjunto de valores, hallar la integral por tres métodos numéricos diferentes (si el valor de la integral exacta es , calcular el error relativo de los métodos numéricos usados).

x	y
-2	1/2
-1	1/3
0	1/4
1	1/5
2	1/6
3	1/7
4	1/8
5	1/9
6	1/10
7	1/11

Resp. A=1.7244 (trapecio), A=1.8948 (S3/8)

Error: Trapecio: 1.15%, S3/8: 0.15%

Problema 2. En los cursos de cálculo de varias variables y de estadística se demuestra que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2}\, dx = 1$$

Para cualquier σ positiva, la función:

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2}$$

Es la función de densidad normal con media $\mu = 0$ y desviación estándar σ. La probabilidad de que un valor aleatoriamente seleccionado descrito por esta distribución se encuentre en $[a,b]$ está dada por

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

Aproximar la probabilidad de que un valor seleccionado al azar descrito por esta distribución se encuentre entre:

a) $[-\sigma, \sigma]$ Resp. 0.6827

b) $[-2\sigma, 2\sigma]$ Resp. 0.9545

c) $[-3\sigma, 3\sigma]$ Resp. 0.9973

Problema 3. Un automóvil recorre una pista de carreras en 84 segundos. Su velocidad en cada intervalo de 6 segundos se determina mediante una pistola de radar y está dada, en ft/s, desde el principio del recorrido, por los datos de la tabla siguiente:

Tiempo	0	6	12	16	24	30	36	42	48	54	60	66	72	78	84
velocidad	124	134	148	156	147	133	121	109	99	85	78	89	104	116	123

¿Qué longitud tiene la pista?

Nota d = (velocidad)(tiempo)

Resp. 5700 ft

Problema 4. Se construye una hoja acanalada para techado, usando una máquina que comprime una hoja plana, de aluminio, y la transforma en una hoja cuya sección transversal tiene la forma de onda de la función seno.

Se necesita una hoja corrugada de 4 ft de largo cuyas ondas tienen una altura de 1 pulgada (1 in), desde la línea central, y cada onda tiene aproximadamente un período de 2π in. El problema de calcular la longitud de la primera hoja plana consiste en determinar la longitud de la onda dada por

$$f(x) = sen\ x$$

de x=0 a x=48 in. Por el cálculo sabemos que esta longitud es:

$$L = \int_0^{48} \sqrt{1 + (f'(x))^2}\, dx = \int_0^{48} \sqrt{1 + (\cos x)^2}\, dx$$

Resolver la integral.

Resp. 74.93

Problema 5. El trabajo producido por un proceso termodinámico a temperatura, presión y volumen constantes se calcula por medio de:

$$W = \int p\, dV$$

donde W es el trabajo, p la presión, y V el volumen. Con el empleo de una combinación de la regla del trapecio, la de Simpson 1/3, y la de Simpson 3/8, utilice los datos siguientes para calcular el trabajo en kJ (1kJ =1 kN · m):

Presión (kPa)	Volumen (m^3)
336	0.5
294.4	2
266.4	3
260.8	4
260.5	6
249.6	8
193.6	10
165.6	11

Resp. 2.530 kJ

UNIDAD 5
Ecuaciones diferenciales ordinarias

La solución de estas ecuaciones es de gran importancia debido a que representan el comportamiento de crecimiento y decrecimiento de sustancias o especies químicas. Se ubican principalmente en las reacciones químicas. Por lo general, la solución se encuentra numéricamente a través de una serie de datos obtenidos a lo largo del tiempo.

La solución de ecuaciones diferenciales de primer orden

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

Regularmente se obtiene en forma tabular. Los métodos requieren inicialmente conocer el valor de y_n para calcular y_{n+1}. A estos métodos se les conoce como métodos de arranque o de escalón.

Los métodos que hacen uso de mayores datos que los indicados anteriormente como y_n, y_{n-1}, y_{n-2} para determinar y_{n+1}, son conocidos como métodos continuos o predictor – corrector.

En cualquiera de los métodos, el principal interés es determinar y_{n+1}, y conociéndolo determinar y_{n+2} y así sucesivamente hasta y_n.

En general estos métodos se utilizan cuando la solución analítica de la ecuación diferencial es difícil de calcular. Por ello, se recurre a analizar la función sobre un intervalo de estudio, I = [a, b]. Se acostumbra que este intervalo sea subdividido en n subintervalos o pasos. El valor de la variable Y en la solución real o verdadera se aproxima mejor cuando la variable X es pequeña, lo cual implica mayor cantidad de operaciones.

El tamaño de paso o espaciado (h) se recomienda que sea menor a 1.

$$h = \frac{b-a}{n} < 1$$

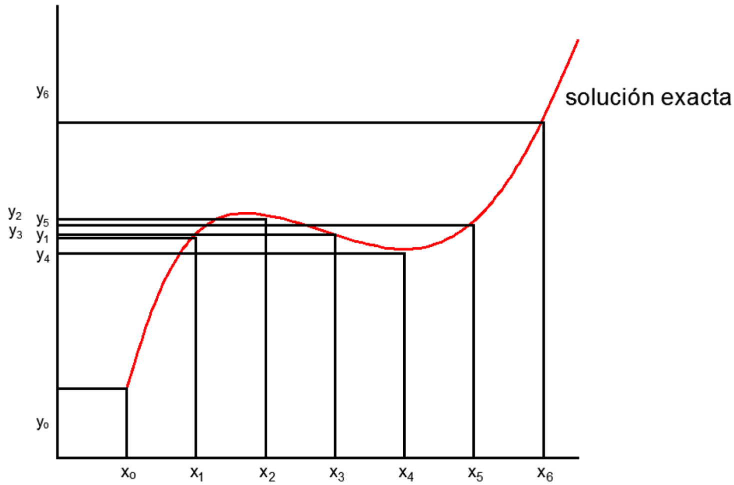


FIGURA 28. Aproximación discreta a la ecuación diferencial.

Entre más pequeño sea h, se encontrará una mejor solución. Por lo tanto, la solución estará en forma tabular con valores discretos de x como puntos de aproximación a la solución real o verdadera.

$$x_i = x_o + h$$

En esta unidad consideramos los métodos numéricos mediante los cuales podemos obtener, en forma tabular la solución de una ecuación diferencial dada sujeta a condiciones iniciales conocidas. Por ejemplo, una tabla de valores de la función exponencial $y = e^x$ que es la solución del problema con valores iniciales

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

Representaría una solución numérica de este problema. Aquí se tratará con ecuaciones diferenciales de primer orden del tipo

$$y' = f(x, y) \qquad (2)$$

con la condición inicial. $y(x_0) = y_0$ (3)

Suponemos que el problema (2) – (3) satisface las condiciones de existencia y unicidad para la solución de este.

En algunos casos, f(x,y) es tan simple, que la ecuación (2) puede integrarse directamente. Sin embargo, en muchos problemas científicos y de ingeniería se presenta ecuaciones más complejas, y entonces se deben resolver por procedimientos numéricos para obtener una solución aproximada al problema. En otros casos, puede resultar, que aun cuando la ecuación diferencial (2) pueda integrarse directamente, la solución así obtenida, presente serias dificultades para ser evaluada.

En esta unidad se describen los métodos numéricos para resolver una ecuación diferencial.

A. Método de la serie de Taylor
B. Método de Euler
C. Método de Runge – Kutta

En términos generales, la secuencia de cálculo es

1. Establecer la ecuación diferencial y sus valores iniciales,

$$f(x,y) = \frac{dy}{dx}, \quad x_0, \quad y_0$$

2. Escoger el tamaño de paso, h
3. Calcular el siguiente valor de y
4. Incrementar x

5.1 MÉTODO DE LA SERIE DE TAYLOR

El primer método que se estudiará no es estrictamente un método numérico, pero en algunas ocasiones se utiliza en conjunto con esquemas numéricos, es de aplicabilidad general y sirve como introducción a otras técnicas que se estudiarán.

Por ejemplo:

$$\frac{dy}{dx} = x + y, \qquad y(0) = 1 \qquad \text{(A)}$$

Se desarrolla la relación entre Y y X encontrando los coeficientes de la Serie de Taylor, en la cual Y se desarrolla alrededor del punto $x = x_0$.

$$y(x) = y(x_0) + y'(x_0)(x - x_0) + \frac{y''(x_0)(x - x_0)^2}{2!} + \frac{y'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \ldots$$

Si se hace $x - x_0 = h$, se puede escribir la serie como:

$$y(x) = y(x_0) + y'(x_0)h + \frac{y''(x_0)}{2!}h^2 + \frac{y'''(x_0)}{3!}h^3 + \ldots$$

Puesto que $y(x_0)$ es la condición inicial, el primer término se conoce a partir de la condición inicial $y(0) = 1$. (Debido a que el desarrollo es alrededor del punto $x = 0$, en este ejemplo la serie de Taylor es una serie de Maclaurin.) El coeficiente del segundo término se obtiene sustituyendo a $x = 0$, $y = 1$ en la ecuación para la primera derivada, ecuación (A)

$$y'(x_0) = x_0 + y = 0 + 1 = 1$$

Se obtiene la ecuación para la segunda derivada y las de mayor orden diferenciando sucesivamente la ecuación para la primera derivada. Cada una de estas se evalúa correspondiendo a $x = 0$ para obtener los diversos coeficientes:

$y''(x) = 1 + y'$	$y''(0) = 1 + 1 = 2$
$y'''(x) = y''$	$y'''(0) = 2$
$y^{iv}(x) = y'''$	$y^{iv}(0) = 2$
etc.	$y^{n}(0) = 2$

Luego se escribe la serie solución para Y, haciendo a $x = h$ el valor en el cual se desea determinar Y:

$$y(h) = 1 + h + h^2 + \frac{1}{3}h^3 + \frac{1}{12}h^4 + error$$

La solución a la ecuación diferencial es $\frac{dy}{dx} = x + y,\ y(0) = 1$, se da en la tabla 1

X	Y	Y analítica
0	1.0000	1.0000
0.1	1.1106	1.1103
0.2	1.2428	1.2428
0.3	1.3997	1.3997
0.4	1.3825	1.5836
0.5	1.7469	1.7474

Cuando una serie de Taylor convergente se trunca, el error se expresa fácilmente. Simplemente se toma el siguiente término y se evalúa la derivada en el punto ξ, con 0<ξ<h, en lugar de hacerlo en el punto $x = x_0$.

Al análisis numérico algunas veces se le llega a considera un arte en lugar de una ciencia debido a que, en casos como éste, el número de los términos de la serie Taylor a puede establecer arbitrariamente, por lo que, se convierte en un asunto de juicio y experiencia. En términos generales, la serie se trunca en el tercer término.

La serie de Taylor se aplica con facilidad a una ecuación de mayor orden. Por ejemplo, si se da una ecuación diferencial del tipo $y'' = 3 + x + y,\ \ y(0) = 1,\ \ y'(0) = -2$

Se pueden encontrar los términos obtenidos en la serie de Taylor como sigue:

$y(0), y'(0)$ vienen dados por las condiciones iniciales.

$y''(0)$, resulta por la sustitución en la ecuación diferencial de $y(0), y'(0)$. $y'''(0)$, ... se encuentran diferenciando la ecuación del anterior orden de la derivada y sustituyendo en los valores calculados recientemente. Con ejemplos se puede apreciar mejor esta explicación.

Ejemplo 5.1. Resuelva la ecuación diferencial $y' = 3x^2$ sujeto a $x = 1$ y = 1 utilizando el método de Taylor.

Solución.

Esta ecuación diferencial se resuelve fácilmente analíticamente por separación de variables. Para la ecuación diferencial

$$\frac{dy}{dx} = 3x^2$$

La solución analítica es

$$dy = 3x^2 dx$$

$$\int dy = 3\int x^2\, dx$$

$$y = 3\left(\frac{1}{3}\right)x^3 + c = x^3 + c$$

Aplicando la condición inicial se evalúa la constante, obteniendo finalmente

$$1 = 1^3 + c, \qquad c = 0$$

$$y = x^3$$

El comportamiento de la ecuación diferencial gráficamente se muestra en la siguiente figura.

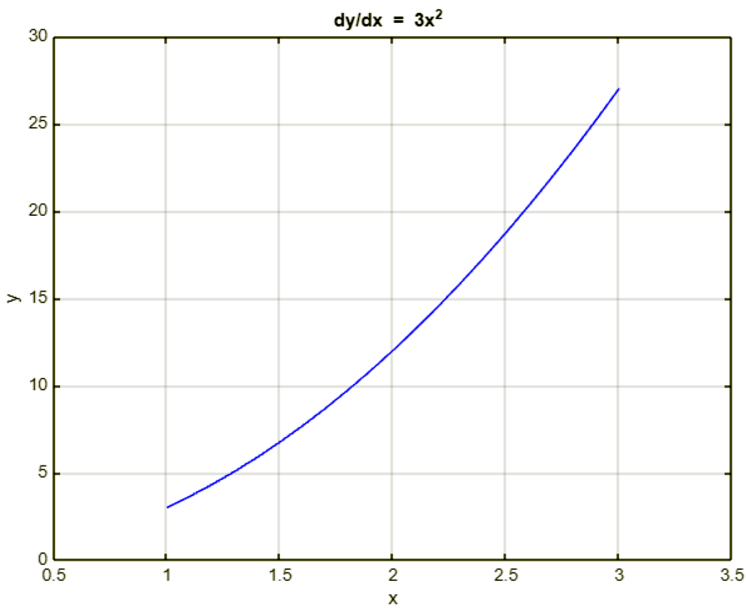


FIGURA 29. Solución analítica de la ecuación diferencial.

La solución por el método de Taylor es

$$g(x) = f(x0) + (x - x0)\frac{dy}{dx} + \frac{(x - x0)^2}{2!}\frac{d^2y}{dx^2} + \frac{(x - x0)^3}{3!}\frac{d^3y}{dx^3}$$

donde

$$\frac{dy}{dx} = 3x^2, \qquad \frac{d^2y}{dx^2} = 6x, \qquad \frac{d^3y}{dx^3} = 6$$

sustituyendo

$$g(x) = 1 + (x - x_0)(3{x_0}^2) + \frac{(x - x_0)^2}{2}(6x_0) + \frac{(x - x_0)^3}{6}(6)$$

para $x_0 = 1$

$$g(x) = 1 + (x - 1)(3) + \frac{(x - 1)^2}{2}(6) + \frac{(x - 1)^3}{6}(6)$$

$$g(x) = 1 + 3x - 3 + 3x^2 - 6x + 3 + (x - 1)^3$$

$$g(x) = x^3 - 3x^2 + 3x - 1 + 1 - 3x + 3x^2 - 6x + 3$$

$$g(x) = x^3$$

Evaluando el polinomio para cada valor de x desde 1 hasta 2, tenemos

x	$g(x) = 1 + 3(x - xo) + 3(x - x0)^2 + (x - xo)^3$	
1.0	$g(1.0) = 1 + 3(0.0) + 3(0.0)^2 + (0.0)^3$	1.000
1.1	$g(1.1) = 1 + 3(0.1) + 3(0.1)^2 + (0.1)^3$	1.331
1.2	$g(1.2) = 1 + 3(0.2) + 3(0.2)^2 + (0.2)^3$	1.728
1.3	$g(1.3) = 1 + 3(0.3) + 3(0.3)^2 + (0.3)^3$	2.197
1.4	$g(1.4) = 1 + 3(0.4) + 3(0.4)^2 + (0.4)^3$	2.744
1.5	$g(1.5) = 1 + 3(0.5) + 3(0.5)^2 + (0.5)^3$	3.375
1.6	$g(1.6) = 1 + 3(0.6) + 3(0.6)^2 + (0.6)^3$	4.096
1.7	$g(1.7) = 1 + 3(0.7) + 3(0.7)^2 + (0.7)^3$	4.913
1.8	$g(1.8) = 1 + 3(0.8) + 3(0.8)^2 + (0.8)^3$	5.832
1.9	$g(1.9) = 1 + 3(0.9) + 3(0.9)^2 + (0.9)^3$	6.859
2.0	$g(2.0) = 1 + 3(1.0) + 3(1.0)^2 + (1.0)^3$	8.000

La gráfica que ilustra su comportamiento se aprecia en la figura 30.

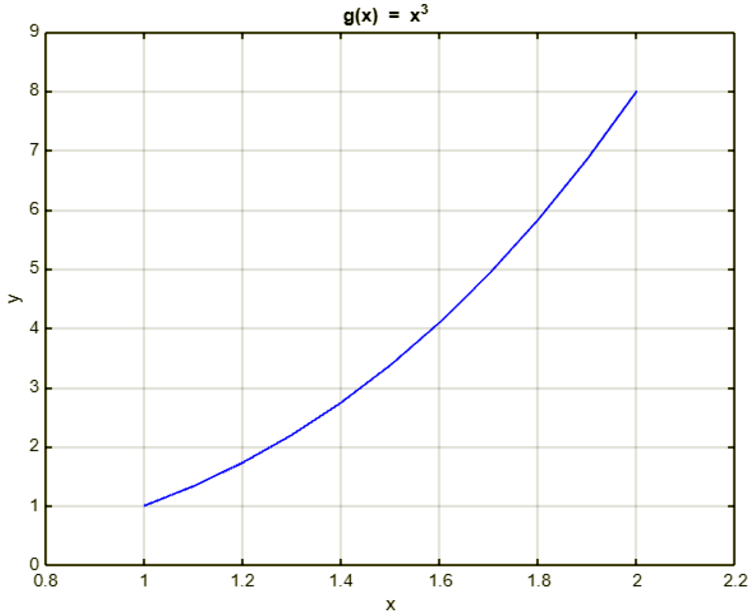


FIGURA 30. Ecuación diferencial por el método de Taylor.

Al comparar los valores, se aprecia que coinciden al 100%.

Ejemplo 5.2 Resolver la ecuación diferencial

$$y' = x + 2xy$$

Con la condición inicial $y(0.5) = 1$

Solución. $x = 0.5$ $y = 1$

$$g(x) = f(x0) + (x - x0)y' + \frac{(x - x0)^2}{2!}y'' + \frac{(x - x0)^3}{3!}y'''$$

donde

$$y' = x_0 + 2x_0y(x_0), \quad y'' = x_0 + 2x_0y'(x_0) + 2y(x_0), \quad y''' = 2x_0y''(x_0) + 4y'(x_0)$$

$$y' = x_0 + 2x_0y(x_0) = 0.5 + 2(0.5)(1) = 1.50$$

$$y'' = x_0 + 2x_0y'(x_0) + 2y(x_0) = 0.5 + 2(0.5)(1.5) + 2(1) = 4.5$$

$$y''' = 2x_0y''(x_0) + 4y'(x_0) = 2(0.5)(4.5) + 4(4.5) = 10.5$$

al sustituir

$$g(x) = 1 + (x - 0.5)(1.5) + \frac{(x-0.5)^2}{2}(4.5) + \frac{(x-0.5)^3}{6}(10.5)$$

$$g(x) = 1 + 1.5x - 0.75 + 2.25x^2 - 2.25x + 0.5625 + 1.75(x^3 - 1.5x^2 + 0.75x - 0.125)$$

$$g(x) = 1.75x^3 - 0.375x^2 + 0.5625x + 0.59375$$

Evaluando el polinomio para cada valor de x desde 0.5 hasta 1.5, tenemos

x	g(x)
0.5	1
0.6	1.17425
0.7	1.404
0.8	1.69975
0.9	2.072
1	2.53125
1.1	3.088
1.2	3.75275
1.3	4.536
1.4	5.44825
1.5	6.5

Comparando con la solución analítica

$$y = 1.1682e^{x^2} - 0.5$$

Se obtienen buena aproximación en los primeros cálculos

x	Solución analítica
0.5	0.99999849
0.6	1.17441542
0.7	1.40687181
0.8	1.71546896
0.9	2.12600611
1	2.67549683
1.1	3.41754077
1.2	4.43061685
1.3	5.83103736
1.4	7.79343388
1.5	10.583573

Utilizando un tamaño de paso menor como h = 0.05 se logran mejores resultados.

5.2 MÉTODO DE EULER Y EULER MODIFICADO

El método de la serie de Taylor es un poco engorroso de aplicar principalmente con derivadas complicadas, como se mostró con el ejemplo 5.2. Sin embargo, se logran buenas aproximaciones con tamaños de paso mínimos. Esto es, el error se reduce si el tamaño de paso h es pequeño. De hecho, si es lo suficientemente pequeño, sólo son necesarios pocos términos para lograr una buena precisión.

Otra opción, es considerar el método de Euler para las ecuaciones diferenciales de primer orden. Supóngase que se escoge h lo suficientemente pequeño de manera que, se pueda truncar la serie de Taylor al segundo término, después del término de la primera derivada. Entonces

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{y''(\xi)}{2}h^2$$

Al usar esta ecuación, el valor de y(xo) está dado por la condición inicial y el valor y'(xo) es evaluado de f(xo, yo), dados por la ecuación diferencial dy/dx = f(x,y). Será necesario utilizar este método iterativamente para in avanzando hacia la solución con cada incremento de x. Así, x = xo + 2h después de que se ha encontrado y(xo+h), y después a x = xo + 3h, etc. Adoptando una notación de subíndices para los valores y sucesivos y representando el error por la relación de orden, se escribe el algoritmo del método de Euler como:

$$y_{n+1} = y_n + hy' + 0(h^2) \quad (4)$$

Tomando la fórmula anterior resuelva la ecuación diferencial por el método de Euler pero ahora con h = 0.02 con x = [0, 0.10]

$$\frac{dy}{dx} = x + y$$

Los resultados se muestran en la Tabla 2.

Comparando el último resultado con la respuesta analítica y(0.10) = 1.1103, se puede ver que sólo se tiene una precisión de dos lugares decimales, aun cuando solo se ha avanzado la solución cinco pasos.

TABLA 2

x_n	y_n	y'_n	hy'_n
0	1.0000	1.0000	0.0200
0.02	1.0200	1.0400	0.0208
0.04	1.0408	1.0808	0.0216
0.06	1.0624	1.1224	0.0224
0.08	1.0848	1.1648	0.02333
0.10	1.1081		

Puesto que el error global es proporcional a h, se necesita reducir el paso de 22 veces hasta < 0.004.

La dificultad con este método más sencillo es la falta de precisión, requiriendo de un tamaño de paso extremadamente pequeño.

Ejemplo 5.3. Con la condición inicial Y(0) = 1 y con un tamaño de paso de 0.1 resuelva la siguiente ecuación diferencial hasta x = 1.0

$$\frac{dy}{dx} = 1 - x + 4y$$

Solución.

$$f(x0, y0) = 1 - 0 + 4(1) = 5$$

Se emplea la fórmula de Euler para cada aproximación

$$y_{n+1} = y_n + hf'(x_n, y_n)$$

n	x	Fórmula de Euler	$f'(x, y)$
0	0.0	1	= 1 – 0 + 4(1) = 5
1	0.1	1 + (0.1)(5) = 1.5	= 1 – 0.1 + 4(1.5) = 6.9
2	0.2	1 + (0.1)(6.9) = 2.19	= 1 – 0.2 + 4(2.19) = 9.56
3	0.3	1 + (0.1)(9.56) = 3.146	= 1 – 0.3 + 4(3.146) = 13.284
4	0.4	1 + (0.1)(13.284) = 4.4744	= 1 – 0.4 + 4(13.284) = 18.4976
5	0.5	1 + (0.1)(18.4976) = 6.32416	= 1 – 0.5 + 4(18.4976) = 25.7966

n	x	y	$f'(x, y)$
0	0	1	5
1	0.1	1.5	6.9
2	0.2	2.19	9.56
3	0.3	3.146	13.284
4	0.4	4.4744	18.4976
5	0.5	6.32416	25.79664
6	0.6	8.903824	36.015296
7	0.7	12.5053536	50.3214144
8	0.8	17.537495	70.3499802
9	0.9	24.5724931	98.3899722
10	1	34.4114903	137.645961

Para facilitar el cálculo se puede recurrir a la programación con Matlab.

```
% Programa euler1
clc;clear;format compact;
f=inline('1-x+4*y')
a=0;
y0=1;
b=1;
h=0.1;
n=(b-a)/h;
```

```
x=(a+h:h:b);
y(1)=y0+h*feval(f,a,y0);
for i=2:n
    y(i)=y(i-1)+h*feval(f,x(i-1),y(i-1));
end
edo=feval(f,x,y);
disp= ('  x        y       f''(x,y) ')
resultados =[x' y' edo']
```

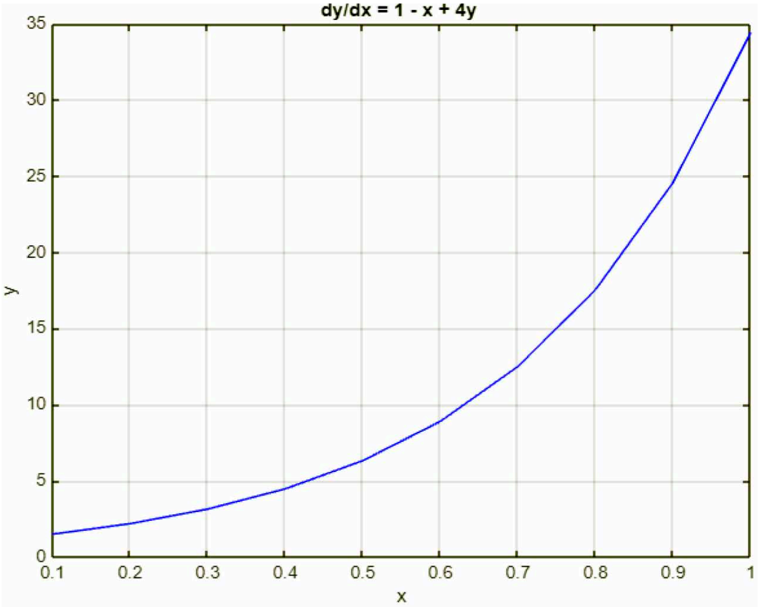


FIGURA 31. Representación gráfica de la ecuación diferencial.

Euler Modificado

El método de Euler simple, usa la tangente al principio del intervalo y'n para determinar el incremento de la función. Esto siempre es incorrecto. Después de todo si la pendiente de la función fuera constante, la solución es una relación obviamente lineal, no cual raramente es así. Se necesita utilizar una pendiente promedio sobre el intervalo, si se quiere estimar los cambios en y con precisión.

Si se utiliza la media aritmética de las pendientes, al principio y al final del intervalo. La fórmula se modifica a

$$y_{n+1} = y_n + h\frac{y'_n + y'_{n+1}}{2}$$

Esta propuesta dará una mejor estimación para y en x_{n+1}. Sin embargo, no se está capacitado para utilizar la ecuación anterior inmediatamente, debido a que la derivada es una función tanto de x como de y, y no se puede evaluar y'_{n+1} si se desconoce y_{n+1}. El método de Euler modificado supera la dificultad, estimando o "prediciendo" un valor de y_{n+1} obtenido por la relación de Euler simple, ecuación (4), y utiliza este valor para calcular y'_{n+1} dando una mejor estimación o valor corregido de y_{n+1}.

Puesto que el valor de y'_{n+1} se calculó utilizando el valor pronosticado de menor precisión, se está tentado a corregir el valor de y_{n+1} tantas veces como sea para que la diferencia sea insignificante. Si se requieren más de dos o tres correcciones, resulta más eficiente reducir el tamaño de paso.

Fórmulas de Euler Modificado

$$y_{i+1} = y_i + h\left[\frac{f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y^*_{i+1})}{2}\right]$$

donde $y^*_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i)$

Ejemplo 5.4. Se ilustrará el método de Euler modificado al que también se le ha llamado método predictor-corrector, para ello se solicita dar solución a la ecuación diferencial

$$\frac{dy}{dx} = 2xy$$

Sujeto a y(1) = 1 con un tamaño de paso h = 0.1

Solución.

Primera aproximación:

$$y' = 2xy \qquad y(1) = 1 \qquad h = 0.1$$

$$y_1^* = y_0 + (0.1)(2x_0, y_0) = 1 + (0.1)(2 * 1 * 1) = 1.2$$

$$y_1 = y_0 + h\left[\frac{2\,x_0 y_0 + 2x_1 y_1^*}{2}\right] = 1 + (0.1)\left[\frac{2(1)(1) + 2(1.1)(1.2)}{2}\right] = 1.232$$

Segunda aproximación:

$$y' = 2xy \qquad y(1.1) = 1.232 \qquad h = 0.1$$

$$y_2^* = y_1 + (0.1)(2x_1, y_1) = 1232 + (0.1)(2(1.1)(1.232) = 1.50304$$

$$y_2 = y_1 + h\left[\frac{2\,x_1 y_1 + 2x_2 y_2^*}{2}\right] = 1.232 + (0.1)\left[\frac{2(1.1)(1.232) + 2(1.2)(1.50304)}{2}\right] = 1.54788$$

tercera aproximación:

$$x = 1.3 \qquad y = 1.54788 \qquad h = 0.1$$

$$y_3^* = 1.54788 + (0.1)(2)(1.2)(1.54788) = 1.9194$$

$$y_3 = 1.54788 + (0.1)\left[\frac{2(1.2)(1.54788) + 2(1.3)(1.9194)}{2}\right] = 1.9832$$

Siguiendo el mismo procedimiento se completa la tabla hasta x = 2

x_n	y_n	Real	error	%error	x_n	y_n	real	%error
1.00	1.0	1.0	0.	0.0	1.60	4.6863	4.7588	1.52
1.10	1.232	1.2337	0.0017	0.14	1.70	6.4878	6.6193	1.98
1.20	1.5479	1.5527	0.0048	0.31	1.80	9.1555	9.3933	2.53
1.30	1.9832	1.9937	0.0106	0.53	1.90	13.1693	13.599	3.16
1.40	2.5908	2.6117	0.0209	0.80	2.00	19.3063	20.085	3.88
1.50	3.4509	3.4904	0.0394	1.13				

Resultados obtenidos con hoja de cálculo (Excel). **Euler modificado**

x	y mod	real	% error	e abs
1	1	1	0	0.0000
1.1	1.232	1.23367806	0.1360209	0.0017
1.2	1.5479	1.55270722	0.30960238	0.0048

x	y mod	real	% error	e abs
1.3	1.9832	1.99371553	0.52743398	0.0105
1.4	2.5908	2.61169647	0.8001111	0.0209
1.5	3.4509	3.49034296	1.13005965	0.0394
1.6	4.6863	4.75882125	1.52393295	0.0725
1.7	6.4878	6.61936868	1.98763186	0.1316
1.8	9.1555	9.39333129	2.53191632	0.2378
1.9	13.1693	13.5990509	3.16015328	0.4298
2.0	19.3063	20.0855369	3.8795922	0.7792

Ejemplo 5.5. Ahora se propone resolver la ecuación diferencial tratada anteriormente utilizando el método de Euler modificado.

$$\frac{dy}{dx} = x + y,$$

Sujeto a $y(0) = 1$, $h = 0.02$

En la siguiente tabla se presentan los cálculos.

x_n	y_n	y'_n	hy'_n	y_{n+1} *	y'_{n+1}	y'_{prom}	hy_{prom}
0.00	1.0000	1.0000	0.0200	1.0200	1.0400	1.0200	0.0204
				1.0204	1.0404	1.0202	0.0204
0.02	1.0204	1.0404	0.0208	1.0412	1.0812	1.0608	0.0212
				1.0416	1.0816	1.0610	0.0212
0.04	1.0416	1.0816	0.0216	1.0632	1.1232	1.1024	0.0220
				1.0637	1.1237	1.1027	0.0221
0.06	4.0637	1.1237	0.0225	1.0862	1.1662	1.1419	0.0229
				1.0866	1.1666	1.1451	0.0229
0.08	1.0866	1.1666	0.0233	1.1099	1.2099	1.1883	0.0238
				1.1104	1.2104	1.1885	0.0238
0.10	1.1104						

* Los datos de la columna cinco se utilizan para corregir y predecir valores.

La primera entrada en cualquier fila x es el valor pronosticado. Los valores corregidos y rectificados siguen. En este ejemplo, fue necesario rectificar solo cuando x = 0.04. Todos los otros cálculos indican que no hay necesidad de rectificar los valores de y_{n+1}.

El valor analítico es 1.1103

Con este ejemplo es claro mostrar que se requiere el empleo de algún programa de computación o el empleo de Excel.

5.3 MÉTODO DE RUNGE - KUTTA

Un mejor método (obteniendo la mayor precisión por unidad de esfuerzo de cómputo), se asegura con los métodos de los alemanes Carle Runge y Martin Kutta. Los métodos son ampliamente usados en las soluciones de ecuaciones diferenciales por computadora. El método más empleado es el de cuarto orden. Su algoritmo es el siguiente.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}[k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4]$$

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = h\ f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_1)$$

$$k_3 = h\ f(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{2}k_2)$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3)$$

Como un ejemplo, de nuevo se resuelve $\frac{dy}{dx} = x + y$, $y(0) = 1$, $h = 0.1$

$$k_1 = 0.1\ (0 + 1) = 0.1$$

$$k_2 = 0.1\ (0.05 + 1.05) = 0.11$$

$$k_3 = 0.1\ (0.05 + 1.055) = 0.1105$$

$$k_4 = 0.1\ (0.1 + 1.1105) = 0.12105$$

$$y_1 = 1.0 + \frac{1}{6}[0.1 + 0.11 + 0.1105 + 0.12105] = 1.11034$$

Este resultado coincide hasta con cinco decimales con el resultado analítico, e implica una ganancia más en la precisión con menor esfuerzo que con los métodos anteriores. Los resultados comparativos se muestran en la siguiente tabla.

Tabla comparativa				
Método	h	Resultado	Error	Evaluaciones de la función
Euler	0.02	1.1081	0.0022	5
Euler modificado	0.02	1.1104	0.0001	12
Runge-Kutta	0.1	1.1103	0.0000	4

Es fácil ver por qué la técnica de R-K es tan popular. Puede pensarse si sería conveniente utilizar una fórmula de quinto orden, pero la conclusión general de la mayoría de los expertos es que la precisión adicional es más que compensada por el esfuerzo de cálculo también adicional. Es decir, no hay una mejoría significativa que justifique el número de cálculos adicionales a la eficiencia de esquemas de cuarto orden.

Ejemplo 5.6. Resuelva la siguiente ecuación diferencial utilizando el método de Runge – Kutta de cuarto orden sujeto a y(1) = 1 y h = 0.1

$$\frac{dy}{dx} = 2xy$$

Solución.

$$y' = 2xy \qquad y(1) = 1 \qquad h = 0.1$$

Primera aproximación: n = 1   x = 1.0   y = 1.0

$K_1 = (h)(2x_0y_0) = (0.1)(2)(1)(1) = 0.2$

$K_2 = (0.1)\, f[x_0 + ½\,(0.1), y_0 + ½\,(0.2)] = 0.1\,[2(1+0.05)(1+0.1)] = 0.231$

$K_3 = (0.1)\, f[x_0 + ½\,(0.1), y_0 + ½\,(0.231)] = 0.1\,[2(1.05)(1.1155)] = 0.234255$

$K_4 = (0.1)\, f[x_0 + 0.1, y_0 + 0.234255] = 0.1\,[2(1.1)(1.234255)] = 0.2715361$

$K = \frac{1}{6}\,[K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4] = \frac{1}{6}\,[0.2 + 2(0.231) + 2(0.234255) + 0.2715361)]$

$K = 0.23367435$

$$x_1 = x + h = 1 + 0.1 = 1.1$$

$y_1 = y_0 + K = 1 + 0.23367435 = 1.23367435$

Segunda aproximación: n = 2 $x_1 = 1.1$ $y_1 = 1.23367435$

$K_1 = (h)(2x_1y_1) = (0.1)(2)(1.1)(1.23367435) = 0.27140836$

$K_2 = 0.1[2(1.15)(1.36937853)] = 0.314957061555$

$K_3 = 0.1[2(1.15)(1.391152880778)] = 0.3199651625788$

$K_4 = (0.1)[2(1.2)(1.553639512578)] = 0.3728734830187$

$K = \frac{1}{6}[0.27141 + 2(0.31496) + 2(0.31997) + 0.37287)] = 0.31902$

$y_2 = y_1 + K = 1.23367435 + 0.31902 = 1.55269$

Tercer cálculo: n = 3 $x_2 = 1.2$ $y_2 = 1.55269$

$K_1 = (h)(2x_2y_2) = (0.1)(2)(1.2)(1.55269) = 0.3726469$

$K_2 = 0.1[2(1.25)(1.73901345)] = 0.43475471$

$K_3 = 0.1[2(1.25)(1.77006668125)] = 0.44251819$

$K_4 = (0.1)[2(1.3)(1.99520819)] = 0.51875553$

$y_2 = y_1 + K = 1.55269 + 0.44099 = 1.99369$

Resolviendo con hoja de cálculo

x	*y*	*K1*	*K2*	*K3*	*K4*	*K*
1.0	1	0.2	0.231	0.234255	0.2715361	0.23367435
1.1	1.23367435	0.27140836	0.31495706	0.31996516	0.37287348	0.31902105
1.2	1.5526954	0.3726469	0.43475471	0.44251819	0.51875553	0.44099137
1.3	1.99368677	0.51835856	0.60827383	0.6204124	0.73194777	0.61794646
1.4	2.61163323	0.73125731	0.86340595	0.8825675	1.04826022	0.8785774
1.5	3.49021064	1.04706319	1.24426009	1.27482561	1.5248116	1.26834103
1.6	4.75855167	1.52273653	1.82157358	1.87088169	2.25400734	1.86027574
1.7	6.61882741	2.25040132	2.71040982	2.79091131	3.38750594	2.77342492
1.8	9.39225233	3.38121084	4.10065737	4.23375497	5.17788277	4.20465305
1.9	13.5969054	5.16682404	6.31032378	6.53330623	8.05208464	6.48436145
2.0	20.0812668	8.03250673	9.87998328	10.258716	12.7427928	10.1754497

El error es mínimo cuando se compara con la solución analítica, ver siguiente tabla. Por lo tanto, el método de Runge-Kutta es adecuado para resolver la ecuación diferencial.

x	y	real	% error
1.0	1	1	0
1.1	1.23367435	1.23367806	0.00030072
1.2	1.5526954	1.55270722	0.00076128
1.3	1.99368677	1.99371553	0.00144273
1.4	2.61163323	2.61169647	0.00242142
1.5	3.49021064	3.49034296	0.00379106
1.6	4.75855167	4.75882125	0.00566476
1.7	6.61882741	6.61936868	0.00817715
1.8	9.39225233	9.39333129	0.01148646
1.9	13.5969054	13.5990509	0.01577667
2.0	20.0812668	20.0855369	0.02125956

Ejemplo 5.7. Un tanque contiene 100 galones de agua pura; una solución que contiene 1.5 libras de sal por galón entra al tanque a razón de 1galón/minuto, y la solución perfectamente mezclada sale con el mismo flujo (1 gal/min). La entrada de la solución hace variar la concentración de sal dentro del tanque en cada instante.

Determinar:

a) La ecuación diferencial que gobierna el fenómeno físico.

b) Resolver el problema, analíticamente, por Euler, por la serie de Taylor y Runge Kutta.

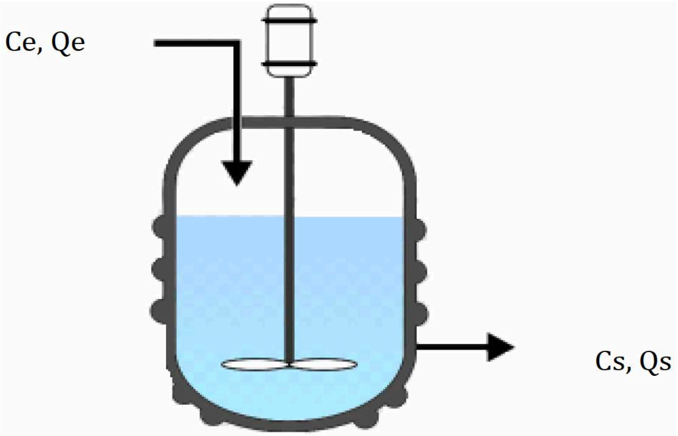
c) Realizar el perfil de cantidad de sal en el tiempo, de todos los métodos

Indicar con claridad qué se debe observar en el fenómeno presentado.

Solución.

<u>Método Analítico.</u>

Sea Ce y Qe, la concentración y el flujo volumétrico respectivamente, de la corriente de entrada; así como Cs y Qs la concentración y flujo volumétrico respectivamente, de la corriente de salida.



a) Ecuación Diferencial:

$$\frac{dx}{dt} = (Ce)(Qe) - (Cs)(Qs)$$

$$\frac{dx}{dt} = \left(\frac{1.5 lbsal}{gal}\right)\left(1\frac{gal}{min}\right) - (x\frac{lb\ sal}{100\ gal})(1\frac{gal}{min})$$

$$\frac{dx}{dt} = 1.5 - \frac{x}{100}$$

$$\frac{dx}{dt} [=]\ lb\frac{sal}{min}$$

Solución analítica:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{150 - x}{100}$$

$$\frac{dx}{150 - x} = \frac{dt}{100}$$

$$\int \frac{dx}{150 - x} = \int \frac{dt}{100}$$

$$-\ln(150 - x) = \frac{t}{100} + c$$

$$-\ln(150 - 0) = \frac{0}{100} + c$$

$$c = -\ln 150$$

$$-\ln(150-x)=\frac{t}{100}-\ln 150$$

$$ln150-\ln(150-x)=\frac{t}{100}$$

$$\ln\left(\frac{150}{150-x}\right)=\frac{t}{100}$$

$$-\ln\left(\frac{150}{150-x}\right)=-\frac{t}{100}$$

$$\ln\left(\frac{150-x}{150}\right)=-\frac{t}{100}$$

$$\frac{150-x}{150}=e^{-\frac{t}{100}}$$

$$\boxed{\boldsymbol{x=150\left(1-e^{-\frac{t}{100}}\right)}}$$

Método de Euler.

Ecuación Diferencial:

$$\frac{dx}{dt}=x'=1.5-\frac{x}{100}$$

Ecuación de Euler:

$$x_{n+1}=x_n+h\quad x'(t_n,x_n)$$

Cálculos, con h=0.1 y condiciones iniciales, x(t=0)=0.

$$x_1=x_0+h\,x'(t_0,x_0)=x_1=0+0.1\quad x'(0,0)=0+0.1(1.5)=0.15$$

$$x_2=x_1+h\,x'(t_1,x_1)=0.15+0.1\quad x'(0.1,0.15)=0.15+0.1(1.4985)=0.29985$$

$$x_3=x_2+h\,x'(t_2,x_2)=0.29985+0.1\quad x'(0.2,0.29985)=0.44955$$

$$x_4=x_3+h\,x'(t_3,x_3)=0.44955+0.1\quad x'(0.3,0.44955)=0.5991$$

Método de la Serie de Taylor.

Ecuación Diferencial:

$$\frac{dx}{dt} = x' = 1.5 - \frac{x}{100}$$

Serie de Taylor:

$$x(t) = x(t=0) + \ x'(0)t + \frac{1}{2}x''(0)t^2 + \frac{1}{6}x'''^{(0)}\ t^3 + \frac{1}{24}x^{iv}(0)\ \ t^4 + \cdots$$

Hallamos hasta la tercera derivada… y evaluamos en las condiciones iniciales, x(=0)=0

$$x' = 1.5 - \frac{x}{100} = 1.5 - \frac{0}{100} = 1.5$$

$$x'' = -\frac{x'}{100} = -\frac{1.5}{100} = -0.015$$

$$x''' = -\frac{x''}{100} = -\left(-\frac{0.015}{100}\right) = 1.5\ * 10^{-4}$$

$$x^{iv} = -\frac{x'''}{100} = -1.5\frac{10^{-4}}{100} = -1.5\ * 10^{-6}$$

Tomamos la serie de Taylor y sustituimos:

$$x(t) = x(t=0) + \ x'(0)t + \frac{1}{2}x''(0)t^2 + \frac{1}{6}x'''(0)\ t^3 + \frac{1}{24}x^{iv}(0)\ \ t^4 + \cdots$$

$$\boldsymbol{x(t) = 0 + \ 1.5\,t + \frac{1}{2}(-0.015)\ t^2 + \frac{1}{6}(1.5\ * 10^{-4})\ t^3 + \frac{1}{24}(-1.5\ * 10^{-6}\ )\ t^4 + \cdots}$$

La tabla de resultados

t	x
0	0
0.1	0.1499
0.2	0.2997
0.3	0.4493
0.4	0.5988
0.5	0.7481
0.6	0.8973
0.7	1.0463
0.8	1.1952
0.9	1.3439
1	1.4925

Método de Runge-Kutta (R-K).

Ecuación Diferencial:

$$\frac{dx}{dt} = x' = 1.5 - \frac{x}{100}$$

Ecuación de R-K:

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6} \left(k_1 + 2\,k_2 + 2\,k_3 + k_4\right)$$

Donde:

$$k_1 = h \;\; x'(t_n, x_n)$$

$$k_2 = h \;\; x'\left(t_n + \frac{1}{2}h,\; x_n + \frac{1}{2}k_1\right)$$

$$k_3 = h \;\; x'\left(t_n + \frac{1}{2}h, x_n + \frac{1}{2}k_2\right)$$

$$k_4 = h \;\; x'(t_n + h, x_n + k_3)$$

Hacemos el primer cálculo a manera de muestra, con h=0.1 y condiciones iniciales $x(t_0 = 0) = 0$

$$k_1 = h \;\; x'(t_0, x_0) = 0.1x'(0, 0) = 0.1[1.5] = 0.15$$

$$k_2 \;= h \;\; x\,'\left(t_0 + \frac{1}{2}h,\; x_0 + \frac{1}{2}k_1\right) = 0.1 \;\; x\,'\left(0 + \frac{1}{2}(0.1), 0 + \frac{1}{2}(0.15)\right) = 0.149925$$

$$k_3 \;= h\, x\,'\left(t_n + \frac{1}{2}h, x_n + \frac{1}{2}k_2\right) = 0.1\, x\,'\left(0 + \frac{1}{2}(0.1), 0 + \frac{1}{2}(0.149925)\right) = 0.14992$$

$$k_4 = h \;\; x'(t_n + h, x_n + k_3) = 0.1\, x'(0 + 0.1,\, 0 + 0.14992) = 0.14985$$

Sustituyendo las ks en la ecuación de R-K:

$$x_1 = x_0 + \frac{1}{6} \;\; (k_1 \; + 2\, k_2 + 2\, k_3 \; + k_4\,)$$

$$x_1 = 0 + \frac{1}{6} \;\; (0.15 + 2(0.149925) + 2(0.14992) + 0.14985\,) = 0.14992$$

La tabla de resultados

t	x
0	0
0.1	0.1499
0.2	0.2997
0.3	0.4493
0.4	0.5988
0.5	0.7481
0.6	0.8973
0.7	1.0463

Comparación de Resultados:

TABLA 1. Comparación de resultados de los diferentes métodos.

Tiempo (min)	X Analítica (lb sal)	X Euler (lb sal)	X Serie de Taylor (lb sal)	X Runge-Kutta (lb sal)
0	0	0	0	0
0.1000	0.1499	0.1500	0.1499	0.1499
0.2000	0.2997	0.2999	0.2997	0.2997
0.3000	0.4493	0.4496	0.4493	0.4493
0.4000	0.5988	0.5991	0.5988	0.5988
0.5000	0.7481	0.7485	0.7481	0.7481
0.6000	0.8973	0.8978	0.8973	0.8973
0.7000	1.0463	1.0469	1.0463	1.0463
0.8000	1.1952	1.1958	1.1952	1.1952
0.9000	1.3439	1.3446	1.3439	1.3439
1.0000	1.4925	1.4933	1.4925	1.4925

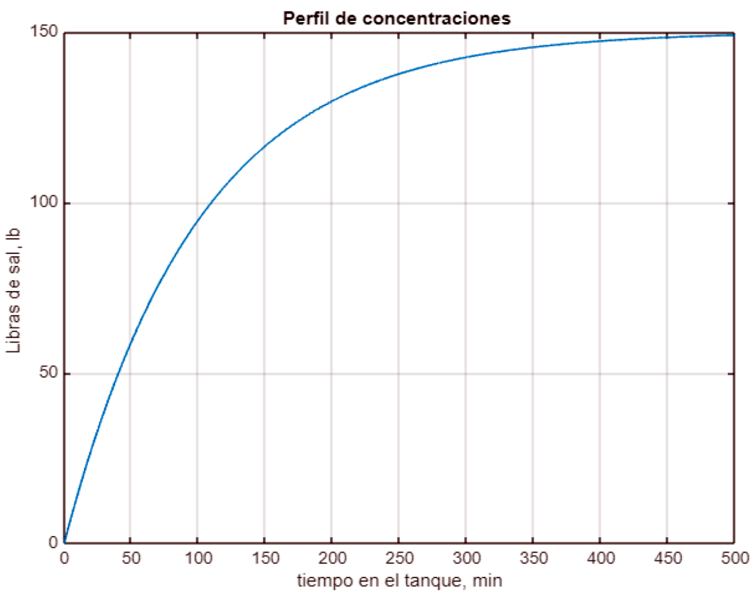


FIGURA 32. Tiempo vs Cantidad de sal.

5.4 ECUACIONES DIFERENCIALES SIMULTÁNEAS

En varios problemas de ingeniería, principalmente en reacciones químicas, se requiere conocer el comportamiento de varias especies químicas a través del tiempo. Para ello se necesita evaluar simultáneamente las ecuaciones diferenciales y puede emplearse cualquiera de los métodos propuestos. Para ilustrar su uso lo haremos a través del siguiente ejemplo.

Ejemplo 5.8. Resuelva el sistema de ecuaciones diferenciales.

$$\frac{dy_1}{dx} = -0.5y_1$$

$$\frac{dy_2}{dx} = 4 - 0.3y_2 - 0.1y_1$$

con $x = 0$, $y_1 = 4$, $y_2 = 6$

$x_{max} = 2$ $h = 0.5$

Solución. Empleando Euler simple.

Euler Simple

$n = 1$ $h = 0.5$ $x_0 = 0.5$ $y_1 = 4$ $y_2 = 6$

$y_1^1 = y_1^0 + h\phi_1 = 4 + [-0.5(4)]\ 0.5 = 3$

$y_2^1 = y_2^0 + h\phi_2 = 6 + [4 - 0.3\ (6) - 0.1\ (4)\ ]\ 0.5 = 6.9$

$n = 2$ $h = 0.5$ $x_1 = 1$ $y_1 = 3$ $y_2 = 6.9$

$y_1^2 = y_1^1 + h\phi_1 = 3 + [-0.5\ (3)]\ 0.5 = 2.25$

$y_2^2 = y_2^1 + h\phi_2 = 6.9 + [4 - 0.3\ (6.9) - 0.1\ (3)\ ]\ 0.5 = 7.715$

$n = 3$ $h = 0.5$ $x_1 = 1.5$ $y_1 = 2.25$ $y_2 = 7.715$

$y_1^3 = y_1^2 + h\phi_1 = 2.25 + [-0.5\ (2.25)]\ 0.5 = 1.6875$

$y_2^3 = y_2^2 + h\phi_2 = 7.715 + [4 - 0.3\ (7.715) - 0.1\ (2.25)\ ]\ 0.5 = 8.44525$

$n = 4 \qquad h = 0.5 \qquad x_1 = 2.0 \qquad y_1 = 1.6875 \qquad y_2 = 8.44525$

$y_1^4 = y_1^3 + h\phi_1 = 1.6875 + [-0.5\ (1.6875)]\ 0.5 = 1.265625$

$y_2^4 = y_2^3 + h\phi_2 = 8.44525 + [4 - 0.3\ (8.44525) - 0.1\ (1.6875)\ ]\ 0.5 = 9.094087$

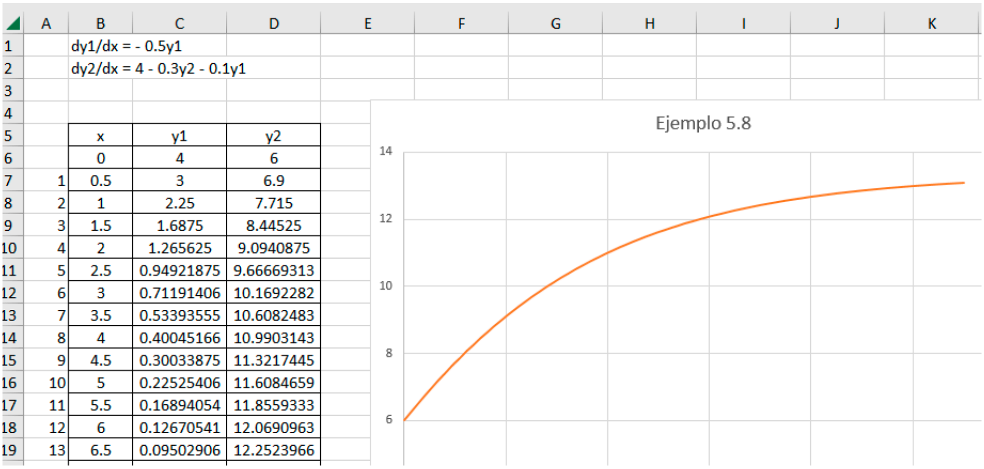
Tabla de resultados

n	x	y1	y2
0	0	4	6
1	0.5	3	6.9
2	1.0	2.25	7.715
3	1.5	1.6875	8.44525
4	2.0	1.265625	9.0940875
5	2.5	0.94921875	9.66669313
6	3.0	0.71191406	10.1692282
7	3.5	0.53393555	10.6082483
8	4.0	0.40045166	10.9903143
9	4.5	0.30033875	11.3217445
10	5.0	0.22525406	11.6084659
11	5.5	0.16894054	11.8559333
12	6.0	0.12670541	12.0690963
13	6.5	0.09502906	12.2523966
14	7.0	0.07127179	12.4097856
15	7.5	0.05345384	12.5447542

Utilizando Excel para la solución se deben expresar las siguientes celdas.

n	x	y1	y2
0	0	4	6
1	0.5	= C6 + (0.5) * (-0.5 * C6)	= D6 + 0.5 * (4 - 0.3 * D6 - 0.1 * C6)
2	1.0	= C7 + (0.5) * (-0.5 * C7)	= D7 + 0.5 * (4 - 0.3 * D7 - 0.1 * C7)
3	1.5	= C8 + (0.5) * (-0.5 * C8)	= D8 + 0.5 * (4 - 0.3 * D8 - 0.1 * C8)
4	2.0	= C9 + (0.5) * (-0.5 * C9)	= D9 + 0.5 * (4 - 0.3 * D9 - 0.1 * C9)

El resultado del archivo es el siguiente



	A	B	C	D
1		dy1/dx = - 0.5y1		
2		dy2/dx = 4 - 0.3y2 - 0.1y1		
3				
4				
5		x	y1	y2
6		0	4	6
7	1	0.5	3	6.9
8	2	1	2.25	7.715
9	3	1.5	1.6875	8.44525
10	4	2	1.265625	9.0940875
11	5	2.5	0.94921875	9.66669313
12	6	3	0.71191406	10.1692282
13	7	3.5	0.53393555	10.6082483
14	8	4	0.40045166	10.9903143
15	9	4.5	0.30033875	11.3217445
16	10	5	0.22525406	11.6084659
17	11	5.5	0.16894054	11.8559333
18	12	6	0.12670541	12.0690963
19	13	6.5	0.09502906	12.2523966

FIGURA 33. Hoja de cálculo de Excel.

El código de programación en Matlab es

```
x=0;
h=0.5;
y1=4;
y2=6;
for i=1:10
    x=x+h;
    y1=y1+h*(-0.5*y1);
    y2=y2+h*(4-0.3*y2-0.1*y1);
    t(i)=x;
    cy1(i)=y1;
    cy2(i)=y2;
end

plot(t,cy1,t,cy2)
grid on
ylabel('Concentración, lb/ft ')
xlabel('tiempo, min')
title('Perfil de concentraciones ')
```

La figura 34 muestra la distribución de las ecuaciones diferenciales

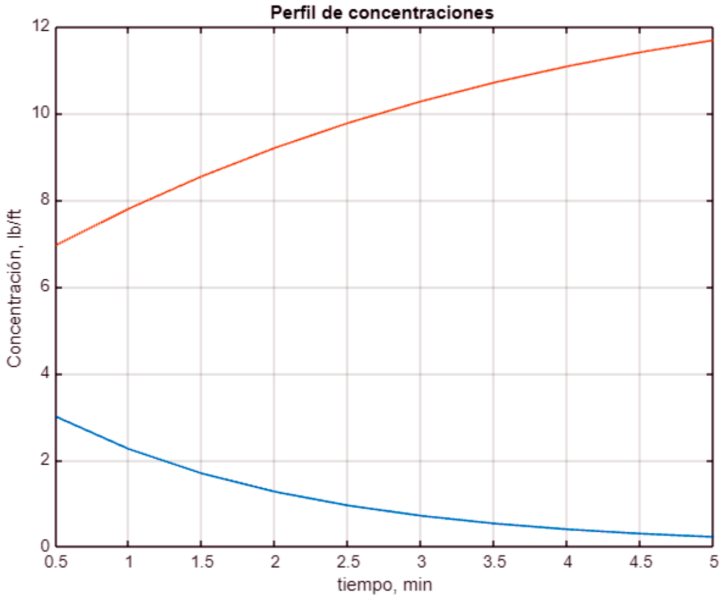


FIGURA 34. Ecuaciones diferenciales simultáneas.

Solución con el método de Runge Kutta

Primer cálculo:

$K_{11} = f\,(0,4,6) \;= -0.5\,(4) = -2$

$K_{12} = f\,(0,4,6) \;= 4 - 0.3\,(6) - 0.1\,(4) \;= 1.8$

$y_1 + ½\, h\, K_{11} = 4 + ½\,(0.5)(-2) = 3.5$

$y_2 + ½\, h\, K_{12} = 6 + ½\,(0.5)(1.8) = 6.45$

$K_{21} = f(0.25, 3.5, 6.45) = -0.5\,(3.5) = -1.75$

$K_{22} = f(0.25, 3.5, 6.45) = 4 - 0.3(6.45) - 0.1(3.5) = 1.715$

$y_1 + ½\, h\, K_{21} = 4 + ½\,(0.5)(-1.75) = 3.5625$

$y_2 + ½\, h\, K_{22} = 6 + ½\,(0.5)(1.715) = 6.42875$

$K_{31} = f(0.25, 3.5625, 6.42875) = -0.5\ (3.5625) = -1.78125$

$K_{32} = f(0.25, 3.5625, 6.42875) = 4 - 0.3(6.42875) - 0.1(3.5625) = 1.715125$

$y_1 + h\ K_{31} = 4 + (0.5)(-1.78125) = 3.109375$

$y_2 + h\ K_{32} = 6 + (0.5)(1.715125) = 6.8575625$

$K_{41} = f(0.25, 3.109375, 6.8575625) = -0.5(3.109375) = -1.5546875$

$K_{42} = f(0.25, 3.109375, 6.8575625) = 4 -0.3(6.8575625)-0.1(3.109375) = 1.63179375$

$F_i = 1/6\ (K_1 + 2\ K_2 + 2\ K_3 + K_4)$

$y_1\ (0.5) = 4 + 1/6\ [-2 + 2\ (-1.75 - 1.78125) - 1.55468]\ 0.5 = 3.11523438$

$y_2\ (0.5) = 6 + 1/6\ [1.8 + 2(1.715 + 1.715125) + 1.63179375]\ 0.5 = 6.85767032$

Tabla de resultados

n	x	y1	y2
0	0	4	6
1	0.5	3.11523438	6.85767031
2	1	2.4261713	7.63210567
3	1.5	1.88952306	8.32688598
4	2	1.4715768	8.9468651
5	2.5	1.14607666	9.49760136
6	3	0.89257435	9.98495402
7	3.5	0.69514457	10.4148036
8	4	0.54138457	10.7928635
9	4.5	0.42163495	11.1245594
10	5	0.32837293	11.4149567
11	5.5	0.25573966	11.6687232
12	6	0.19917224	11.8901166
13	6.5	0.15511705	12.0829881
14	7	0.12080649	12.2507984
15	7.5	0.09408514	12.3966392

Por la cantidad de operaciones que se deben realizar, es conveniente emplear un código de programación o una hoja de datos. Un código en Matlab se muestra enseguida.

```
n=0;clc;clear;
x=0;
dx=0;
h=0.5;
y1=4;
y2=6;
t(1)=x
f1(1)=y1
f2(1)=y2
for i=2:10
    k11=-0.5*y1
    k12=4-0.3*y2-0.1*y1
    y11=y1+1/2*h*k11
    y12=y2+1/2*h*k12
    k21=-0.5*y11
    k22=4-0.3*y12-0.1*y11
    y21=y1+1/2*h*k21
    y22=y2+1/2*h*k22
    k31=-0.5*y21
    k32=4-0.3*y22-0.1*y21
    y31=y1+h*k31
    y32=y2+h*k32
    k41=-0.5*y31
    k42=4-0.3*y32-0.1*y31
y1=y1+1/6*h*(k11+2*k21+2*k31+k41)
y2=y2+1/6*h*(k12+2*k22+2*k32+k42)
dx=dx+h
t(i)=dx
f1(i)=y1
f2(i)=y2
end

plot(t,f1,t,f2)
grid on
ylabel('Concentración, lb/ft ')
xlabel('tiempo, min')
title('Perfil de concentraciones ')
```

El gráfico que se obtiene se muestra en la figura 35.

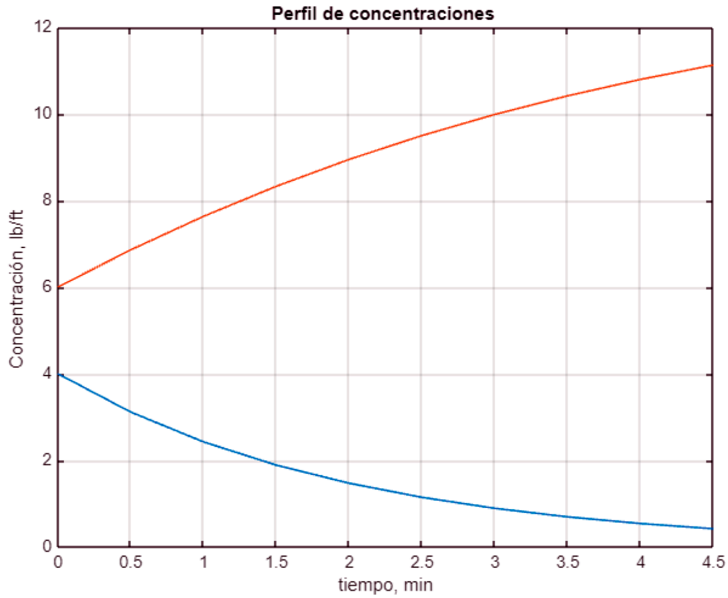


FIGURA 35. Solución de ecuaciones por Runge Kutta.

5.5 PROBLEMAS UNIDAD V

1. Resolver las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias por los métodos de la serie de Taylor, de Euler y de Runge- Kutta, con y (0) = 1. Realizar una tabla comparativa con los cuatro métodos y calcular el error relativo (considerando que la solución exacta es la analítica), en el intervalo 0<x<0.2, h=0.1

a) $y' = e^{x-y}$

b) $y' = \dfrac{x+y}{2y}$

c) $y' + y\,sec^2 x = sec^2 x \tan x$

d) $y' = y \tan x + sen\, x$

2. Resolver la siguiente ecuación diferencial por la Serie de Taylor , Euler y Runge-Kutta en el intervalo 0<x<0.3. Hacer tabla comparativa.

$$y' = y(xy^3 - 1); \qquad y(0) = 1, \qquad h = 0.1$$

3. Resolver la siguiente ecuación diferencial por Runge- Kutta, para un intervalo de 0<x< 0.4, h=0.2.

$$y' = \frac{x + y^2}{y} \qquad y(0) = -1$$

4. Resolver las siguientes ecuaciones diferenciales por el método de Euler y Runge-Kutta.

$$y' = 1 + y^2, \qquad y(0) = 2; \qquad y(0.5)$$

$$y' = 4x - 2y, \qquad y(0) = 2; \qquad y(0.5)$$

$$y' = xy + \sqrt{y}\,, \qquad y(0) = 1; \qquad y(0.5)$$

5. Resolver los siguientes sistemas de ecuaciones por Serie de Taylor y Runge-Kutta. Para todos los sistemas, usar $x(0) = 0$, $y(0) = 0$, h=0.1

a) $x' = 2x - 3y + 2\,sen\,t$

$y' = x - 2y - cos\,t$

b) $x' = -y + x - e^t$

$y' = 3x - y + T$

c) $x' = -\,4x + 3y + 6$

$y' = -2.4x - 1.6y + 3.6$

d) $x' = 3x + 2y - (2t^2 + 1)^{e2t}$

$y' = 4x + y + (t^2 + 2t - 4)^{e2t}$

Respuestas a problemas

1. a)

x	Y Euler	Y Serie de Taylor	Y Runge -Kutta	Y Analítico
0	1	1	1	1
0.1	1.0904 (5% error)	1.038 (0% error)	1.0380 (0% error)	1.0379
0.2	1.1276 (4.5% error)	1.0783 (0% error)	1.0783 (0% error)	1.0783

d)

x	Y Euler	Y Serie de Taylor	Y Runge -Kutta	Y Analítico
0	1	1	1	1
0.1	1 (0.9% error)	1.1 (8.9% err.)	1.0100 (0% error)	1.0100
0.2	1 (4.3% error)	1.2 (14.8 % err.)	1.0405 (0% error)	1.0405

2.

x	Y Euler	Y Serie de Taylor	Y Runge -Kutta	Y Analítico
0	1	1	1	1
0.1	0.92 (1.2% error)	0.9123 (0.4% err.)	0.9086 (0% error)	0.9086
0.2	0.87 (4.8% error)	0.85866 (3.4 % err.)	0.8301 (0% error)	0.8301
0.3	0.86 (13% error)	0.853 (12 % err.)	0.7645 (0.5% err.)	0.76055

3. La solución se facilita con un programa en Matlab

```
% RUNGE KUTTA
% EC DIF, y'=(x+y^2)/yn, y(x=0)=-1
format short, clear a, clc, format compact
h=0.2; x0=0; y0=-1
xn=x0; yn=y0; ED=(xn+yn^2)/yn; k1=h*ED;
xn=x0+h/2; yn=y0+k1/2; ED=(xn+yn^2)/yn; k2=h*ED;
xn=x0+h/2; yn=y0+k2/2; ED=(xn+yn^2)/yn; k3=h*ED;
xn=x0+h; yn=y0+k3; ED=(xn+yn^2)/yn; k4=h*ED;
y1=y0+(k1+2*k2+2*k3+k4)/6
%2a. Iteración:
x0=x0+h; y0=y1;
xn=x0; yn=y0; ED=(xn+yn^2)/yn; k1=h*ED;
xn=x0+h/2; yn=y0+k1/2; ED=(xn+yn^2)/yn; k2=h*ED;
xn=x0+h/2; yn=y0+k2/2; ED=(xn+yn^2)/yn; k3=h*ED;
xn=x0+h; yn=y0+k3; ED=(xn+yn^2)/yn; k4=h*ED;
```

```
y2=y0+(k1+2*k2+2*k3+k4)/6
% 3a. Iteración:
x0=x0+h; y0=y2;
xn=x0; yn=y0; ED=(xn+yn^2)/yn; k1=h*ED;
xn=x0+h/2; yn=y0+k1/2; ED=(xn+yn^2)/yn; k2=h*ED;
xn=x0+h/2; yn=y0+k2/2; ED=(xn+yn^2)/yn; k3=h*ED;
xn=x0+h; yn=y0+k3; ED=(xn+yn^2)/yn; k4=h*ED;
y3=y0+(k1+2*k2+2*k3+k4)/6
```

x	Y analítica	Y Serie de Taylor
0	-1	-1
0.2	-1.2400	-1.2400 (0 % error)
0.4	-1.5615	-1.5615 (0 % error)
0.6	-1.9698	-1.9698 (0 % error)

5. a)

t	x analítica	y analítica	x Serie de Taylor	Y Serie de Taylor
0	0	0	0	0
0.1	0.0251	-0.085	0.0455	-0.089
0.2	0.1013	-0.14	0.1829	-0.1525
0.3	0.2295	-0.165	0.4106	-0.1861

5. c)

t	x analítica	y analítica	x Runge -Kutta	y Runge -Kutta
0	0	0	0	0
0.1	0.5111	0.2529	0.5336	0.2695
0.2	0.9049	0.3715	0.9380	0.3957
0.3	1.1911	0.4009	1.2268	0.4270

5.6 PROBLEMAS DE APLICACIÓN 5

Problema 1. Para la siguiente reacción química Irreversible:

$$A \xrightarrow{k} B$$

donde: k es la constante de velocidad de A a B = 0.01, Con condiciones iniciales:

CA (t=0) = 5 gmol, CB (t=0) = 0 gmol,

a) Plantear las ecuaciones diferenciales de la velocidad de reacción de cada sustancia (A, B)

b) Resolver el sistema de ecuaciones.

c) Completar la siguiente tabla:

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Total, Ca + Cb
0			
3			
6			
9			

Resp.

a) $\frac{dCa}{dt} = -kCa,\quad \frac{dCb}{dt} = kCa$

c)

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Total, Ca + Cb
0	5	0	5
3	4.85	0.15	5
6	4.71	0.29	5
9	4.57	0.43	5

Problema 2. Para la siguiente reacción química reversible:

$$A \xleftrightarrow{k1,\quad k2} B$$

donde: k1 es la constante de velocidad de A a B = 0.01, k2 es la constante de velocidad de B a A=0.02

Con condiciones iniciales:

CA (t=0) = 5 gmol, CB (t=0) = 0 gmol,

Plantear las ecuaciones diferenciales de la velocidad de reacción de cada sustancia (A, B) y resolver el sistema de ecuaciones.

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Total, Ca + Cb
0			
3			
6			
9			

Resp.

a) $\frac{dCa}{dt} = -k1Ca + k2Cb$, $\frac{dCb}{dt} = k1Ca - k2Cb$

c)

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Total, Ca + Cb
0	5	0	5
3	4.86	0.14	5
6	4.72	0.28	5
9	4.61	0.39	5

Problema 3. Resolver el problema 2, sólo que ahora, CB (t=0) = 5 gmol.

Resp.

a) $\frac{dCa}{dt} = -k1Ca + k2Cb$, $\frac{dCb}{dt} = k1Ca - k2Cb$

c)

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Total, Ca + Cb
0	5	5	10
3	5.14	4.86	10
6	5.27	4.73	10
9	5.39	4.61	10

Problema 4. Para la siguiente reacción química:

$$A \overset{k1}{\rightarrow} B \overset{k2}{\rightarrow} C$$

donde: k1 es la constante de velocidad de A a B = 0.01 k2 es la constante de velocidad de B a C= 0.02,

Con condiciones iníciales: CA (t=0) = CB (t=0) = CC (t=0) =5 gmol,

a) Plantear las ecuaciones diferenciales de la velocidad de reacción de cada sustancia (A, B, C),

b) Resolver el sistema de ecuaciones.

c) Completar la siguiente tabla:

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Cc, g	Total, Ca + Cb +Cc
0				
3				
6				
9				

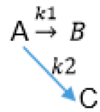
Resp.

a) $\frac{dCa}{dt} = -k1Ca, \quad \frac{dCb}{dt} = k1Ca - k2Cb, \frac{dCc}{dt} = k2Cb$

c)

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Cc, g	Total, Ca + Cb +Cc
0	5	5	5	15
3	4.85	4.85	5.29	15
6	4.71	4.71	5.58	15
9	4.57	4.57	5.86	15

Problema 5. Para la siguiente reacción química:



donde: k1 es la constante de velocidad de A a B = 0.01; k2 es la constante de velocidad de B a C = 0.02,

Con condiciones iníciales: CA (t=0) = CB (t=0) = CC (t=0) =5 gmol,

a) Plantear las ecuaciones diferenciales de la velocidad de reacción de cada sustancia (A, B, C),

b) Resolver el sistema de ecuaciones.

c) Completar la siguiente tabla

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Cc, g	Total, Ca + Cb +Cc
0				
3				
6				
9				

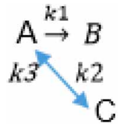
Resp.

a) $\frac{dCa}{dt} = -k1Ca - k2Ca, \quad \frac{dCb}{dt} = k1Ca, \frac{dCc}{dt} = k2Ca$

c)

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Cc, g	Total, Ca + Cb +Cc
0	5	5	5	15
3	4.57	5.14	5.27	15
6	4.18	5.27	5.55	15
9	3.82	5.39	5.79	15

Problema 6. Para la siguiente reacción química:



donde: k1 es la constante de velocidad de A a B = 0.01 k2 es la constante de velocidad de B a C= 0.02,

Con condiciones iníciales: CA (t=0) = CB (t=0) = CC (t=0) =5 gmol,

a) Plantear las ecuaciones diferenciales de la velocidad de reacción de cada sustancia (A, B, C),

b) Resolver el sistema de ecuaciones.

c) Completar la siguiente tabla:

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Cc, g	Total, Ca + Cb +Cc
0				
3				
6				
9				

Resp.

a) $\frac{dCa}{dt} = -k1Ca + k3Cc - k2Ca, \quad \frac{dCb}{dt} = k1Ca, \frac{dCc}{dt} = k2Ca - k3Cc$

c)

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Cc, g	Total, Ca + Cb +Cc
0	5	5	5	15
3	5.0255	5.1171	4.8574	15
6	5.0368	5.2352	4.7281	15
9	5.0360	5.3538	4.6102	15

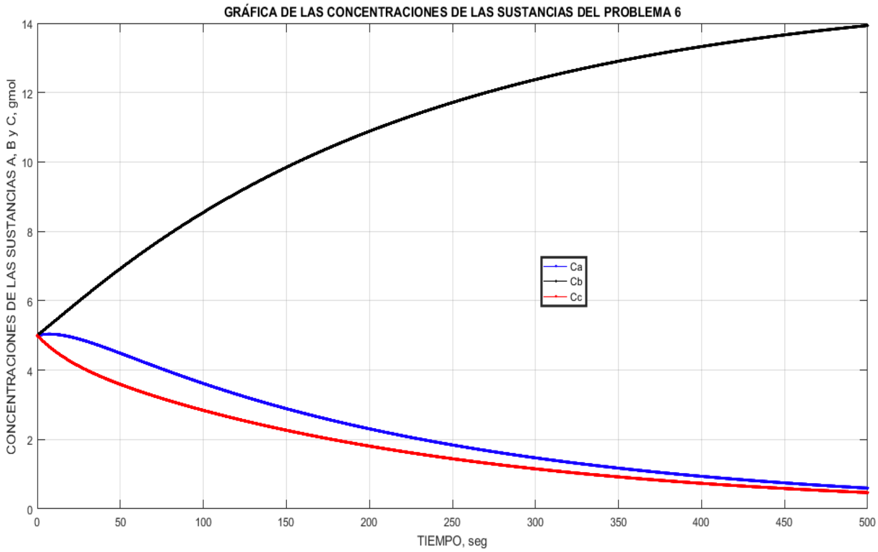


FIGURA 36. Concentraciones del problema.

Problema 7. Para la siguiente reacción química:

$$A \xrightarrow{k1} B \underset{k3}{\overset{k2}{\rightleftharpoons}} C \xrightarrow{k4} D$$

donde: k1 es la constante de velocidad de A a B = 0.01 k2 es la constante de velocidad de B a C= 0.02, k3 es la constante de velocidad de C a B = 0.03 k4 es la constante de velocidad de C a D= 0.01,

Con condiciones iníciales: CA (0) = 5 gmol, CB (0) = CC (0) = CD (0) = 0 gmol

Plantear las ecuaciones diferenciales de la velocidad de reacción de cada sustancia (A, B, C y D) y resolver el sistema de ecuaciones.

Resp.

a) $\frac{dCa}{dt} = -k1Ca, \quad \frac{dCb}{dt} = k1Ca - k2Cb + k3Cc, \frac{dCc}{dt} = k2Cb - k3Cc - 4Cc,$

$$\frac{dCd}{dt} = k4Cc$$

c)

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Cc, g	Cd, g	Total, Ca + Cb +Cc +Cd
0	5	0	0	0	5
3	4.85	0.15	0	0	5
6	4.71	0.28	0.01	0	5
20	4.09	0.77	0.13	0.01	5

Problema 8. Si una masa oscila en el extremo de un resorte, y está sujeta a una resistencia de fricción proporcional a su rapidez, la ecuación de movimiento se puede expresar como:

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + r\frac{dx}{dt} + sx = 0$$

donde x es el desplazamiento con respecto a la posición de equilibrio, en el tiempo t. Resolver la ecuación diferencial en términos de t, m, s, r, x.

Resp.

Si $(\frac{k}{m})^2 - \frac{4s}{m} = 0$, entonces: $\quad x = c1e^{\left(-\frac{k}{2m}\right)t} + c2\ t\ e^{(-\frac{k}{2m})t}$,

Si $(\frac{k}{m})^2 - \frac{4s}{m} > 0$, entonces: $\quad x = c1e^{At} + c2\ \ e^{Bt}$,

Donde: $A = \frac{1}{2}\left(-\frac{k}{m} + \sqrt{\left(\frac{k}{m}\right)^2 - \frac{4s}{m}}\right)$, $B = \frac{1}{2}\left(-\frac{k}{m} - \sqrt{\left(\frac{k}{m}\right)^2 - \frac{4s}{m}}\right)$

Si $\left(\frac{k}{m}\right)^2 - \frac{4s}{m} < 0$, entonces: $x = e^{Ct}(c1sen(Dt) + c2\cos(Dt))$

Donde: $C = -k/2m$, $D = \left(\frac{k}{m}\right)^2 - \frac{4s}{m}$

Problema 9. Una sustancia radiactiva R1 decae dentro de una sustancia R2 que también es radiactiva. En el tiempo t, Hay N1 átomos de R1 y N2 átomos de R2, los cuales están relacionados mediante las ecuaciones:

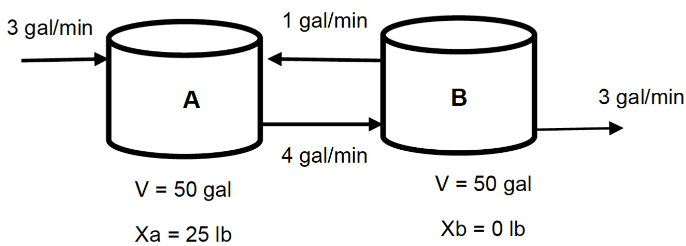
$$\frac{dN_1}{dt} = -\gamma_1 N_1 \qquad \frac{dN_2}{dt} = \gamma_1 N_1 - \gamma_2 N_2$$

sujetas a las condiciones de que N1= N0 y N2=0, cuando t=0. Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, obteniendo N1 y N2 en función de t, ($\gamma 1$ y $\gamma 2$ son constantes).

Resp.

$$N1 = N0e^{-\gamma_1 t}, \quad N2 = \frac{N0\,\gamma_1}{\gamma_2-\gamma_1}\left[e^{t(\gamma_1-\gamma_2)/\gamma_2} - e^{-t\,\gamma_2}\right]$$

Problema 10. Se tienen dos tanques de mezclado en serie. El primer tanque (A) contiene 50 gal de agua, en el cual se disuelven 25 lb de sal. El segundo tanque (B) contiene 50 gal de agua pura. Se bombea líquido hacia y desde los tanques en las proporciones indicadas en la figura



a) Plantear las ecuaciones diferenciales de la cantidad de sal en cada tanque (A, B),

b) Resolver el sistema de ecuaciones.

c) Completar la siguiente tabla

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g	Total, Ca + Cb
0			
3			
6			
9			

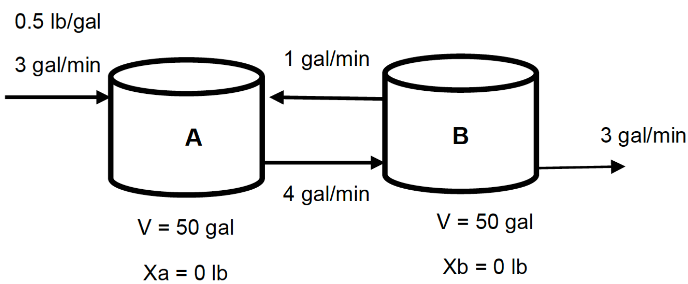
Resp. a) $\frac{dxa}{dt} = \frac{xb}{50} - \frac{4xa}{50}$, $\qquad \frac{dxb}{dt} = \frac{4xa}{50} - \frac{4xb}{50}$

b) $xa = \frac{25}{2}e^{-\frac{3t}{25}} + \frac{25}{2}e^{-\frac{t}{25}}$, $\qquad xb = -25e^{-\frac{3t}{25}} + 25e^{-\frac{t}{25}}$

c)

Tiempo t, min	Xa, lb	xb, lb
0	25	0
3	19.8	4.73
6	15.92	7.49
9	12.97	8.95

Problema 11. Se tienen dos tanques de mezclado en serie. Los tanques (A y B) contienen 50 gal de agua pura cada uno. Se bombea líquido hacia y desde los tanques en las proporciones indicadas en la figura.



a) Plantear las ecuaciones diferenciales de la cantidad de sal en cada tanque (A, B),

b) Resolver el sistema de ecuaciones.

c) Completar la siguiente tabla

Tiempo t, min	Ca, g	Cb, g
0		
3		
6		
9		

Resp. a) $\frac{dxa}{dt} = 1.5 + \frac{xb}{50} - \frac{4xa}{50}$, $\frac{dxb}{dt} = \frac{4xa}{50} - \frac{4xb}{50}$

b) $xa = -6.25e^{-0.12t} - 18.75e^{-0.04t} + 25$, $xb = 12.5e^{-0.12t} - 37.5e^{-0.04t} + 25$

c)

Tiempo t, min	Xa, lb	xb, lb
0	0	0
3	4.01	0.46
6	7.21	1.59
9	9.80	3.08

Problema 12. La Ley de enfriamiento de Newton establece que la velocidad de enfriamiento de un cuerpo en el aire es proporcional a la diferencia entre la temperatura T del cuerpo y la temperatura Ta del aire (constante). Si la temperatura del aire es de 20 °C y un pastel que se saca del horno, a 100 °C, hallar el perfil de temperaturas para el intervalo de tiempo, $t \in [0,20]$, $h = 4$.

Plantear la ecuación diferencial y resolverla por Series. La constante de proporcionalidad es:

$$k = \frac{\ln 0.5}{20}$$

Resp.

$$\frac{dT}{dt} = k(T - Ta) = k(T - 20)$$

$$T(t) = 100 + 80kt + \frac{1}{2}80\,k^2t^2 + \frac{1}{6}80k^3t^3$$

Donde:

$$k = \frac{\ln 0.5}{20}$$

Tiempo t, min	T, ºC
0	100
4	89.64
8	80.61
12	72.68
16	65.66
20	59.32

Bibliografía

Burden, R. (2002). *Análisis Numérico.* México: Thompson.

Chapra, S. (2010). *Numerical methods for engineers.* USA: McGraw Hill.

Conte, S. (1979). *Análisis numérico.* México: McGrawHill.

Dechaumphai, P. (2011). *Numerical Methods in Engineering.* Oxford, U.K.: Alpha Science International.

Gerard, C. e. (1999). *Applied numerical analysis.* USA: Addison Wesley.

Griffiths, D. V. (2006). *Numerical methods for engineers.* USA: CRC press.

Iriarte, V. B. (1990). *Métodos Numéricos.* México: Trillas.

Kiusalaas, J. (2013). *Numerical methods in engineering with Python 3.* USA: Cambridge University Press.

Mathews, J. (2000). *Métodos numéricos con Matlab.* México: Prentice Hall.

Mathews, J. H. (1992). *Numerical Methods for mathematics, science and engineering.* USA: Prentice Hall International.

Moler. (2004). *Numerical computing with Matlab.* USA: ACM.

Nakamura, S. (1997). *Análisis numérico y visualización gráfica con Matlab.* México: Prentice Hall Hispanoamericana.

Prawda, W. (2000). *Métodos y modelos de investigación de operaciones.* México: Limusa.

La solución con Métodos Numéricos

Genaro Altamirano García • José Antonio Zamora Plata

El libro contiene suficiente información para cubrir el programa de estudios de la asignatura de métodos numéricos, debe ser un referente de estudio para los estudiantes que cursan por primera vez la materia, y un material de consulta para los estudiantes de otros semestres.

Se ha establecido una secuencia lógica de aprendizaje que facilita la compresión de cada concepto, también se complementa con ejemplos y ejercicios utilizando las herramientas de computación como Excel y Matlab para agilizar la solución de problemas.
Tomando en cuenta que muchos de los métodos se utilizan en asignaturas posteriores al cuarto semestre, se recomienda elaborar una colección de programas y hojas de cálculo para utilizarlos principalmente en materias como Flujo de Fluidos, Transferencia de Calor y Termodinámica.

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU
FES ZARAGOZA

Facultad de Estudios Superiores Zaragoza,
Campus I. Av. Guelatao No. 66 Col. Ejército de Oriente,
Campus II. Batalla 5 de Mayo s/n Esq. Fuerte de Loreto.
Col. Ejército de Oriente.
Iztapalapa, C.P. 09230 Ciudad de México.
Campus III. Ex fábrica de San Manuel s/n,
Col. San Manuel entre Corregidora y Camino a Zautla,
San Miguel Contla, Santa Cruz Tlaxcala.

http://www.zaragoza.unam.mx

9 786073 090711