Estadística Aplicada y Cálculo Numérico (Grado en Química)

Valeri Makarov

Dept. de Matemática Aplicada, U.C.M.

10/02/2015 – 29/05/2015

F.CC. Matemáticas, Desp. 420
http://www.mat.ucm.es/∼vmakarov
e-mail: vmakarov@mat.ucm.es

Capítulo 1

1.1 Métodos numéricos: Análisis de errores

Errores relativos de truncado y redondeo

El error absoluto:

$$e_{\mathrm{abs}} = |x_{apr} - x^*|$$

donde x^* es el valor exacto, x_{apr} es el aproximado.

Ejemplo 1: $x^* = 22{,}43$ y $x_{apr} = 22{,}44$. Entonces el error absoluto:

$$e_{\mathrm{abs}} = 0{,}01$$

Ejemplo 2: $x^* = 0{,}0215$ y $x_{apr} = 0{,}0143$:

$$e_{\mathrm{abs}} = 0{,}0072$$

¿Qué representación es mejor?

El error relativo:

$$e_{\mathrm{rel}} = \left| \frac{x_{apr} - x^*}{x^*} \right|$$

Ejemplo 1: $x^* = 22{,}43$ y $x_{apr} = 22{,}44$.

$$e_{\mathrm{rel}} \approx 0{,}00045 = 0{,}045\,\% \qquad (e_{\mathrm{abs}} = 0{,}01)$$

Ejemplo 2: $x^* = 0{,}0215$ y $x_{apr} = 0{,}0143$:

$$e_{\mathrm{rel}} \approx 0{,}335 = 33{,}5\,\% \qquad (e_{\mathrm{abs}} = 0{,}0072)$$

Observación: El error relativo para aproximar 0 siempre es infinito.

Aproximación de funciones por series de Taylor

Supongamos que sabemos "todo" de una $f(x)$ suficientemente "buena" en un punto $x = a$.

¿Cómo podemos estimar su valor en otro punto $x = y$?.

La serie de Taylor:

$$f(y) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(y-a) + \frac{f''(a)}{2!}(y-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(y-a)^3 + \cdots$$

Problema 9: Para la función $y = \sqrt{x}$ estimar su valor en $x = 1{,}5$ usando la serie de Taylor centrada en $a = 1$ hasta el orden 3.

Resolución: (el valor exacto $\sqrt{1{,}5} = 1{,}2247$)

$$y(x) \approx y(a) + \frac{y'(a)}{1!}(x-a) + \frac{y''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{y'''(a)}{3!}(x-a)^3$$

Para $\sqrt{x}$:

$$(\sqrt{x})' = \frac{1}{2}x^{-1/2}; \quad (\sqrt{x})'' = -\frac{1}{4}x^{-3/2}; \quad (\sqrt{x})''' = \frac{3}{8}x^{-5/2}$$

$$\sqrt{x} \approx 1 + \frac{1}{2}(x-1) - \frac{1}{8}(x-1)^2 + \frac{1}{16}(x-1)^3$$

$$\sqrt{1{,}5} \approx 1 + \frac{1}{4} - \frac{1}{32} + \frac{1}{128} = 1{,}2266$$

Capítulo 1

1.2 Diferenciación numérica

Derivadas hacia adelante y atrás

La derivada:

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

vamos a llamar **la derivada hacia adelante**

De forma igual, desarrollando $f(x_0 - h)$

$$f'(x_0) = -\frac{f(x_0 - h) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(\eta)}{2}h$$

se obtiene **la derivada hacia atrás**

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}$$

Derivada central

Tenemos las fórmulas de Taylor:

$$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 + \frac{f'''(\eta)}{6}h^3$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 - \frac{f'''(\xi)}{6}h^3$$

Restándolas:

$$f(x_0+h) - f(x_0-h) = 2f'(x_0)h + \frac{h^3}{6}(f'''(\eta) + f'''(\xi))$$

obtenemos **la derivada central**

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}$$

cuyo error $|E| \leq Mh^2 \propto h^2$

Derivada de segundo orden

Las series de Taylor:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{6}h^3 + \frac{f^{(4)}(x_i)}{24}h^4 + \cdots$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2}h^2 - \frac{f'''(x_i)}{6}h^3 + \frac{f^{(4)}(x_i)}{24}h^4 + \cdots$$

Sumando las dos ecuaciones obtenemos:

$$f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}) = 2f(x_i) + f''(x_i)h^2 + \frac{f^{(4)}(x_i)}{12}h^4 + \cdots$$

Por lo tanto

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

c) La derivada $\sin'(x) = \cos(x)$. Entonces $f'(1) = 0{,}5403$ y $f'(0{,}96) = 0{,}5735$. De donde los errores son:

$E_1 = 0{,}5550 - 0{,}5403 = 0{,}0147 \qquad E_2 = 0{,}5725 - 0{,}5735 = -0{,}001$

d) Para la segunda derivada:

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

$$f''(0{,}96) = \frac{0{,}7956 - 2 * 0{,}8192 + 0{,}8414}{0{,}04^2} \approx -0{,}875$$

(el valor exacto es $-0{,}8192$)

Capítulo 1

1.3 Interpolación polinómica

Resumen

$$p_n(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + \cdots + y_n L_n(x)$$

donde

$$L_m(x) = \prod_{k \neq m}^{n} \frac{x - x_k}{x_m - x_k} \quad m = 0, 1, \ldots, n$$

Capítulo 1

1.4 Integración numérica

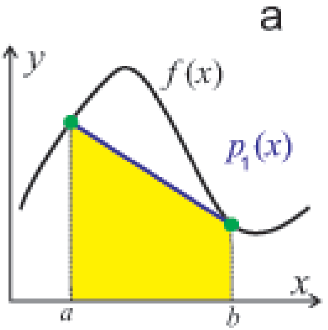
Fórmulas del Trapecio y de Simpson

Fórmula del trapecio

La integral se aproxima
por el área de trapecio

$$f(x) \approx p_1(x) = f_a + \frac{f_b - f_a}{b-a}(x-a)$$

y luego integramos

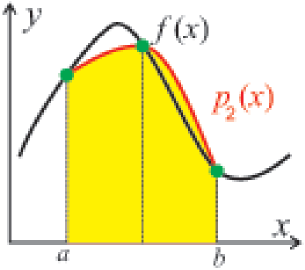


$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b p_1(x)dx = \frac{f_a + f_b}{2}(b-a) \qquad E = -f''(\eta)\frac{h^3}{12}$$

Fórmula de Simpson

Aproximamos $f(x)$ con $p_2(x)$. Usamos tres puntos:

$$x_0 = a \quad x_1 = \frac{a+b}{2} \quad x_2 = b; \quad h = \frac{b-a}{2}$$



$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b p_2(x)dx = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) \qquad E = -f^{(4)}(\eta)\frac{h^5}{90}$$

Capítulo 1

1.5 Resolución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias

Método de Euler

El PVI:

$$\frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t)), \qquad y(t_0) = y_0$$

En diferenciación numérica vimos (serie de Taylor o defunción de la derivada):

$$y'(t) \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h}$$

(la derivada hacia adelante). De donde obtenemos **La fórmula de Euler**:

$$y(t+h) \approx y(t) + hf(t, y(t))$$

Integrar el PVI: $y' = f(t, y), \quad y(0) = y_0$ en el intervalo $t \in [0, T]$.

1. Dividimos el intervalo en M subintervalos:

$$t_k = kh \qquad k = 0, 1, \ldots, M \qquad h = \frac{T}{M}$$

2. Aplicamos la fórmula de Euler M veces