Cálculo Numérico

Ramón Medina

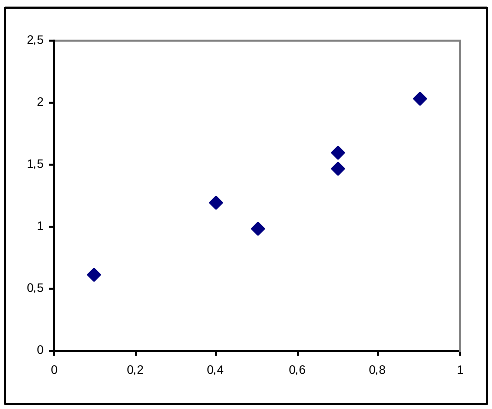
Contenido

1

Ajuste de Curvas

Introducción

Los datos que se obtienen mediante mediciones fluctúan debido a errores aleatorios del sistema de medición aplicado al comportamiento intrínsecamente estocástico del sistema en observación (ver figura 1). Si a partir de la información obtenida se desea caracterizar el comportamiento del fenómeno observado, la estrategia más apropiada es la de obtener una función aproximada que se ajuste "adecuadamente" al comportamiento o tendencia general de los datos, sin coincidir necesariamente con cada punto en particular.



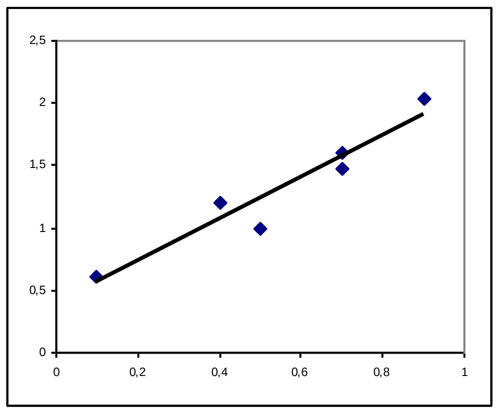


Figura 1 – Muestra de datos con error significativo y ajuste polinomial

En el caso que se muestra en la figura 1, el ajuste es realizado mediante una recta que tienen como propiedad, minimizar la suma de los cuadrados de los residuos.

Regresión Lineal

El ejemplo más simple de una aproximación por mínimos cuadrados es el ajuste de una línea recta a un conjunto de parejas de datos observados (x_1,y_1), $(x_2,y_2),\ldots$, (x_n,y_n). La expresión matemática de la recta es:

$$y=a_0+a_1x+E \qquad [1.1]$$

donde a_0 y a_1 son coeficientes que representan la intersección con el eje de las abscisas y la pendiente respectivamente, y E es el error o residuo entre el modelo y las observaciones, que se puede representar reorientando la ecuación (1.1) como:

$$E = y - a_0 - a_1 x \qquad [1.2]$$

Por lo tanto, el error es la diferencia entre el valor real y el aproximado predicho por la ecuación lineal.

Ajuste de una Recta utilizando Mínimos Cuadrados

Esta estrategia de regresión lineal consiste en minimizar la suma de los cuadrados de los errores:

$$S_r = \sum_{i=1}^{L} E_i^2 = \sum_{i=1}^{L} (y_i - a_0 - a_1 x_i)^2 \qquad [1.3]$$

Derivando la ecuación (1.3) con respecto a cada uno de los coeficientes se obtiene:

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_0} = -2\sum_{i=1}^{n} (y_i - a_0 - a_1 x) \qquad [1.4]$$

$$\frac{\partial S_r}{\partial a_1} = -2\sum_{i=1}^{n} \left[(y_i - a_0 - a_1 x_i) x_i \right]$$

[1.5]

Igualando las derivadas a cero (para minimizar) y resolviendo el sistema de ecuaciones resultante se obtiene que:

$$a_1 = \frac{n\sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n\sum x_i^2 - \left(\sum x_i\right)^2} \qquad [1.6]$$

$$a_0 = \bar{y} - a_1 \bar{x} \qquad [1.7]$$

<u>Ejemplo 1.1: Ajustar la línea recta a los valores *x* y *y* dados</u>

x_i	1	2	3	4	5	6	7
y_i	0,5	2,5	2,0	4,0	3,5	6,0	5,5

A partir de los datos de la tabla se obtienen las siguientes cantidades:

$n = 7$ $\qquad \sum x_i y_i = 119{,}5$ $\qquad \sum x_i^2 = 140$

$\sum x_i = 28$ $\qquad \bar{x} = \frac{28}{7} = 4$

$\sum y_i = 24$ $\qquad \bar{y} = \frac{24}{7} = 3{,}428285714$

Utilizando las ecuaciones (1.6) y (1.7)

$$a_1 = \frac{7 \cdot 119{,}5 - 28 \cdot 24}{7 \cdot 140 - (28)^2} = 0{,}839285714$$

$$a_0 = 3{,}428571429 - 0{,}839285714 \cdot 4 = 0{,}07142857$$

Por lo tanto la ecuación de la resta para el ajuste con mínimos cuadrados es:

$$y = 0{,}07142857 + 0{,}839285714\, x$$

Cuantificación del Error en la Regresión Lineal

Cualquier línea recta diferente a la que se obtiene con los coeficientes en (1.6) y (1.7) genera una mayor suma de cuadrados de los residuos; por lo tanto, la línea es única y en términos del criterio escogido, “la mejor” línea a través de los puntos. A partir de este hecho es posible derivar algunas propiedades.

Para analizar una de estas propiedades, conviene revisar la ecuación (1.3). En esta los residuos representan el cuadrado de la distancia vertical entre los datos y otra medida de la tendencia central: la línea recta. Por otra parte, la ecuación (1.8) representa la diferencia entre los datos y una aproximación simple de la medida de la tendencia central: la media.

$$S_i = \sum \left(y_i - \bar{y}\right)^2 \qquad [1.8]$$

Y la desviación estándar se calcula como:

$$\rho = \sqrt{\frac{\sum \left(y_i - \bar{y}\right)^2}{(n-1)}}$$

Estas dos ecuaciones son análogas pudiendo extenderse para más casos en donde la dispersión de los puntos alrededor de la recta sean de magnitud similar a lo largo del rango entero de los datos y la distribución de estos puntos alrededor de la línea sea normal. Es posible demostrar que si este criterio se cumple, la regresión con mínimos cuadrados proporciona la mejor (más probable) aproximación [2] para a_0 y a_1. A esto se le conoce como principio de probabilidad máxima dentro de la estadística. Además, si este criterio se cumple, una “desviación estándar” de la línea de regresión se puede determinar mediante la ecuación:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{S_r}{L-2}}$$

Donde:

$$S_r = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a_0 - a_1 x_i\right)^2 \qquad [1.9]$$

$S_{y/x}$ se llama *error estándar de la aproximación*. La notación con subíndice *“y/x”* indica que el error es para un valor predicho de *y* correspondiente a un valor particular de *x*.

$S_{y/x}$ cuantifica la dispersión alrededor de la línea de regresión a diferencia de la desviación estándar convencional, que cuantifica la dispersión alrededor de la media.

Los conceptos anteriores se pueden emplear para cuantificar la "eficiencia" del ajuste; esto es particularmente útil cuando se compara el resultado de varias regresiones. Para hacerlo, se regresa a los datos originales y se determina la suma de los cuadrados alrededor de la media de la variable dependiente; a esto se le llama suma total de los cuadrados, S_t. Esta es la cantidad de dispersión en la variable dependiente que existe antes de la regresión. Después de llevar a cabo la regresión lineal, se puede calcular S_r, que es la suma de los cuadrados alrededor de la línea de regresión. La diferencia entre las dos cantidades (S_t – S_r), cuantifica la mejora en la reducción del error debido al modelo de la línea recta. Esta diferencia se puede normalizar al error total y obtener:

$$r^2 = \frac{S_t - S_r}{S_t} \qquad [1.10]$$

En donde r es el coeficiente de correlación y r^2 es el coeficiente de determinación. Para un ajuste perfecto, S_r debería ser igual a cero y r^2 igual a 1, indicando que la línea recta explica el cien por ciento de la variabilidad. Si r^2 es igual a cero, entonces el ajuste no representa mejoría. S_t se obtiene mediante la siguiente fórmula:

$$S_t = S_y^{\,2}(L-1)$$

<u>Ejemplo 1.2: Calcúlese la desviación estándar total, el error estándar de la aproximación y el coeficiente de correlación de los datos del ejemplo 1.1</u>

La desviación estándar total viene dada por:

$$S_y = \sqrt{\frac{22{,}7143}{7-1}} = 1{,}9457$$

Y el error estándar de la aproximación es:

$$S_{y/x} = \sqrt{\frac{2{,}9911}{7-2}} = 0{,}7735$$

Por ser $S_{y/x}$ menor que S_y, el modelo de regresión lineal es aceptable. El alcance de la mejoría se cuantifica mediante:

$$r^2 = \frac{22{,}7143 - 2{,}9911}{22.7143} = 0{,}868$$

$$r = \sqrt{0{,}868} = 0{,}932$$

El valor de r corrobora que existe una relación lineal en los datos de la muestra y r^2 permite indicar que el 86,8% de la incertidumbre original se explica mediante el modelo lineal.

Ajuste de Curvas con Polinomios de Orden Superior

La regresión lineal explicada en la sección anterior funciona bien si los datos de la medición son intrínsecamente lineales o si el rango de las abscisas es pequeño. Sin embargo, para otros casos, es posible obtener mejores resultados ajustando un polinomio de orden superior al conjunto de datos.

El principio de los mínimos cuadrados se puede extender para ajustar un polinomio de cualquier orden a los datos de una medición. Primero se escribe un polinomio de orden *N* como:

$$g(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots a_N x^N \qquad [1.11]$$

La desviación de la curva de los puntos dados viene dada por:

$$r_i = y_i - g(x_i), \qquad i = 1,2,\ldots,L \qquad [1.12]$$

Donde *L* es el número de puntos dados. El total de los cuadrados de la desviación es:

$$R = \sum_{i=1}^{L} (r_i)^2 \qquad [1.13]$$

Se igualan a cero las derivadas parciales de *R* con respecto a los coeficientes del polinomio para minimizar a *R*:

$$\frac{\partial R}{\partial a_n} = 0, \qquad n = 0,1,2,\ldots,N \qquad [1.14]$$

O, en forma equivalente:

$$\sum_{n=0}^{N}\left[\sum_{i=1}^{L} x_i^{n+k}\right] a_n = \sum_{i=1}^{L} x_i^k y_i \qquad k = 0,1,2,\ldots,N \qquad [1.15]$$

Que se puede escribir en forma más explícita como:

$$\begin{bmatrix} L & \sum x_i & \sum x_i^2 & \cdots & \sum x_i^N \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \cdots & \sum x_i^{N+1} \\ & & & \cdots & \\ \sum x_i^N & \sum x_i^{N+1} & \sum x_i^{N+2} & \cdots & \sum x_i^{2N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum y_i \\ \sum x_i y_i \\ \\ \sum x_i^N y_i \end{bmatrix} \qquad [1.16]$$

Los coeficientes a_n, para n= 0,1,2,…,N se determinan resolviendo la ecuación (1.15)

Ejemplo 1.3: Ajustar un polinomio cuadrático a los valores *x* y *y* dados

i	1	2	3	4	5	6
x_i	0,1	0,4	0,5	0,7	0,7	0,9
y_i	0,61	0,92	0,99	1,52	1,47	2,03

La ecuación para los coeficientes, en notación matricial, viene dada por:

$$\begin{bmatrix} 6,0000 & 3,3000 & 2,2100 \\ 3,3000 & 2,2100 & 1,6050 \\ 2,2100 & 1,6050 & 1,2245 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7,5400 \\ 4,8440 \\ 3,5102 \end{bmatrix}$$

Los coeficientes de las potencias son:

a_1= 0,587114 a_2= 0,059102 a_3= 1,729537

El polinomio cuadrático es determinado por:

$$y = 0,587114 + 0,059102\,x + 1,729537\,x^2$$

La desviación estándar de los datos originales es:

S_y= 0,51293924

La suma de los cuadrados de los errores con respecto a la curva de ajuste es:

S_r= 0,0066457

Por lo tanto, el error estándar de la aproximación viene dada por:

$S_{x/y}$= 0,0407606 (menor que la desviación estándar)

El índice de determinación resultó en:

r^2= 0,65444381

Ajuste de Curvas mediante una Combinación Lineal de Funciones

Al ajustar una función a puntos dados, se puede utilizar una combinación lineal de cualesquiera funciones conocidas, en lugar de emplear polinomios. La curva ajustada a los puntos dados se puede escribir en ese caso como:

$$g(x) = a_1 f_1(x) + a_2 f_2(x) + a_3 f_3(x) + \cdots a_N f_N(x) = \sum_{n=1}^{N} a_n f_n(x) \qquad [1.17]$$

Donde f_1, f_2, … son funciones prescritas, a_1, a_2, … son coeficientes indeterminados y N es el número total de funciones prescritas. La desviación de la curva con respecto a cada punto dado se define como:

$$r_i = y_i - \sum_{n=1}^{N} a_n f_n(x_i), \quad i = 1,2,\ldots,L \qquad [1.18]$$

Donde L es el número de puntos dados. El total de los cuadrados de la desviación es:

$$R = \sum_{i=1}^{L} (r_i)^2 = \sum_{i=1}^{L} \left[y_i - \sum_{n=1}^{N} a_n f_n(x_i) \right]^2 \qquad [1.19]$$

Al igualar a cero las derivadas parciales de R con respecto a los coeficientes indeterminados se obtiene:

$$\sum_{m=1}^{N}\left[\sum_{I=1}^{L} f_m(x_i)\,f_n(x_i)\right]a_m = \sum_{i=1}^{L} y_i\,f_n(x_i), \qquad n = 1,2,\ldots,N \qquad [1.20]$$

La ecuación (1.20) tiene *N* ecuaciones con *N* incógnitas.

Ejemplo 1.4: Determinar los coeficientes de la función especificada, ajustada a los valores *x* y *y* dados

$$g(x) = a_1 + a_2 x + a_3 sen(x) + a_4 e^x$$

i	1	2	3	4	5	6
x_i	0,1	0,4	0,5	0,7	0,7	0,9
y_i	0,61	0,92	0,99	1,52	1,47	2,03

La ecuación para los coeficientes, en notación matricial, viene dada por:

$$\begin{bmatrix} 6{,}0000 & 3{,}3000 & 3{,}0404 & 10{,}7328 \\ 3{,}3000 & 2{,}2100 & 2{,}0124 & 6{,}5645 \\ 3{,}0404 & 2{,}0124 & 1{,}8351 & 6{,}0030 \\ 10{,}7328 & 6{,}5645 & 6{,}0030 & 20{,}3253 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7{,}5400 \\ 4{,}8440 \\ 4{,}4102 \\ 14{,}6930 \end{bmatrix}$$

Los coeficientes de las potencias son:

a_1= -5,58805398 a_2= -21,2451675

a_3= 14,6463867 a_4= 6,2095413

La función ajustada queda determinada por:

$$y = -5{,}58805398 - 21{,}2451675\, x + 14{,}6463867\, sen(x) + 6{,}2095413\, e^x$$

La desviación estándar de los datos originales es:

S_y= 0,51293924

La suma de los cuadrados de los errores con respecto a la curva de ajuste es:

S_r= 0,006745063

Por lo tanto, el error estándar de la aproximación viene dada por:

$S_{x/y}$= 0,04106417 (menor que la desviación estándar)

El índice de determinación resultó en:

r^2= 0,65439414

2

Soluciones Numéricas de los Sistemas de Ecuaciones No Lineales[1]

Introducción

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. Específicamente, la presión *p* para sumir una placa circular de radio *r* a un distancia *d* en un terreno blando, donde el terreno de base sólida se halla a una distancia *D* > *d* debajo de la superficie, puede aproximarse con una ecuación de la forma:

$$p = k_1 e^{k_2 r} + k_3 r \qquad [2.1]$$

donde k_1, k_2 y k_3 son constantes que dependen de *d* y de la consistencia del sueo, pero no del radio de la placa.

Si se quiere determinar el tamaño mínimo de la placa necesario para sostener una gran carga, se colocan tres placas pequeñas con radios distintos a la misma distancia. Esto general tres ecuaciones no lineales:

$$\begin{aligned} m_1 &= k_1 e^{k_2 r_1} + k_3 r_1 \\ m_2 &= k_1 e^{k_2 r_2} + k_3 r_2 \qquad [2.2] \\ m_3 &= k_1 e^{k_2 r_3} + k_3 r_3 \end{aligned}$$

con las incógnitas k_1, k_2 y k_3. para resolver los sistemas de ecuaciones cuando éstas son no lineales, por lo general se necesitan métodos de aproximación numérica.

Puntos Fijos para Funciones de Varias Variables

Un sistema de ecuaciones no lineales tiene la forma:

---

[1] Tomado de Burden-Faires (1998) Sexta Edición

$$
\begin{array}{lcl}
f_1(x_1, x_2, ..., x_n) & = & 0 \\
f_2(x_1, x_2, ..., x_n) & = & 0 \\
\vdots & & \vdots \\
f_n(x_1, x_2, ..., x_n) & = & 0
\end{array}
\qquad [2.3]
$$

Donde se puede considerar a roda función f_i como una mapeo de un vector $x=(x_1, x_2, \ldots, x_n)^t$ del espacio *n*-dimensional R^n en la recta real R. Este sistema de ecuaciones no lineales con *n* incógnitas puede representarse también mediante la definición de una función **F**, mapeando R^n en R^n por medio de:

$$F(x_1, x_2, ..., x_n) = (f_1(x_1, x_2, ..., x_n), f_2(x_1, x_2, ..., x_n), ..., f_n(x_1, x_2, ..., x_n))^t \qquad [2.4]$$

Si se emplea una notación vectorial para representar las variables $x_1, x_2, \ldots, x^n$, el sistema adopta la forma:

$$F(x) = 0 \qquad [2.5]$$

Las funciones $(f_1, f_2, \ldots, f_n)$ son, entonces, las funciones coordenadas de **F**.

<u>Ejemplo 2.1: Representación de un Sistema no Lineal de 3 x 3</u>

El sistema no lineal de 3 x 3

$$
\begin{array}{r}
3x_1 - \cos(x_2 x_3) - \dfrac{1}{2} = 0, \\
x_1^2 - 81(x_2 + 0{,}1)^2 + \operatorname{sen}(x_3) + 1{,}06 = 0, \\
e^{-x_1 x_2} + 20x_3 + \dfrac{10\pi - 3}{2} = 0
\end{array}
\qquad [2.6]
$$

puede ser expresado en la forma (2.5) definiendo las tres funciones f_1, f_2 y f_3 de R^3 en R como

$$
\begin{array}{l}
f_1(x_1, x_2, x_3) = 3x_1 - \cos(x_2 x_3) - \dfrac{1}{2}, \\
f_2(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 - 81(x_2 + 0{,}1)^2 + \operatorname{sen}(x_3) + 1{,}06, \\
f_3(x_1, x_2, x_3) = e^{-x_1 x_2} + 20x_3 + \dfrac{10\pi - 3}{2}
\end{array}
\qquad [2.7]
$$

y **F** de $R^3 \rightarrow R^3$ por

$$
\begin{array}{l}
F(x) = F(x_1, x_2, x_3) \\
\quad = (f_1(x_1, x_2, x_3), f_2(x_1, x_2, x_3), f_3(x_1, x_2, x_3))^t \\
\quad = \left(3x_1 - \cos(x_2 x_3) - \dfrac{1}{2}, x_1^2 - 81(x_2 + 0{,}1)^2 + \operatorname{sen}(x_3) + 1{,}06, e^{-x_1 x_2} + 20x_3 + \dfrac{10\pi - 3}{2}\right)
\end{array}
\qquad [2.8]
$$

Ejemplo 2.2: Solución de un Sistema no Lineal de 3x3

Considérese el sistema no lineal del ejemplo 2.1:

$$
\begin{aligned}
3x_1 - \cos(x_2 x_3) - \frac{1}{2} &= 0, \\
x_1^2 - 81(x_2 + 0{,}1)^2 + \operatorname{sen}(x_3) + 1{,}06 &= 0, \\
e^{-x_1 x_2} + 20x_3 + \frac{10\pi - 3}{2} &= 0
\end{aligned}
$$

Si se resuelve la *i*-ésima ecuación para x_i, el sistema se transforma en un problema de punto fijo

$$
\begin{aligned}
x_1 &= \frac{1}{3}\cos(x_2 x_3) + \frac{1}{6}, \\
x_2 &= \frac{1}{9}\sqrt{x_1^2 + \operatorname{sen}(x_3) + 1{,}06} - 0{,}1, \\
x_3 &= -\frac{1}{20}e^{-x_1 x_2} + \frac{10\pi - 3}{60}
\end{aligned} \qquad [2.9]
$$

Suponiendo que **G**: $R^3 \rightarrow R^3$ está definida por $G(x)=(g_1(x), g_2(x), g_3(x))^t$, donde

$$
\begin{aligned}
g_1(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{3}\cos(x_2 x_3) + \frac{1}{6}, \\
g_2(x_1, x_2, x_3) &= \frac{1}{9}\sqrt{x_1^2 + \operatorname{sen}(x_3) + 1{,}06} - 0{,}1, \\
g_3(x_1, x_2, x_3) &= -\frac{1}{20}e^{-x_1 x_2} + \frac{10\pi - 3}{60}
\end{aligned} \qquad [2.10]
$$

Referencias Bibliográficas

1. Shoiciro Nakamura (1992). Métodos Numéricos Aplicados con Software. Prentice Hall Hispanoamérica.

2. Steven Chapra y Raymond Canale (1988). Métodos Numéricos para Ingenieros. McGraw-Hill

3. Burden Richard y Faires Douglas (1998). Análisis Numérico. International Thomson Editores, S.A. de C.V.

4. Curtis Gerald (1991). Análisis Numérico. Addison Wesley Publishing Company, Inc.

5. McCracken Daniel y Dorn William (1980). Métodos Numéricos y Programación Fortran. Editorial Limusa