

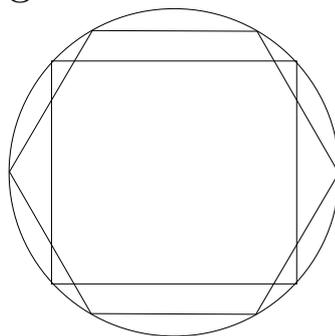
AMPLIACIÓN DE MATEMÁTICAS

INTRODUCCIÓN

Método Constructivo: Conjunto de instrucciones que permiten calcular la solución de un problema, bien en un número finito de pasos, bien en un proceso de paso al límite.

Ejemplos:

- Algoritmo de Euclides para el cálculo del máximo común divisor de dos enteros positivos.
- Resolución de un sistema lineal de n ecuaciones con n incógnitas.
- En el año 250 a.c., Arquímedes realizó una estimación del número π como sigue: Tomó una circunferencia de diámetro 1 y por tanto la longitud de la misma es π .



Al considerar varios polígonos regulares inscritos resulta:

$$\begin{aligned} \text{perímetro del cuadrado} &< \pi \\ \text{perímetro del octógono} &< \pi \\ \text{perímetro del 16-gono} &< \pi \\ &\vdots \\ \text{perímetro del 96-gono} &< \pi \end{aligned}$$

Realizando lo mismo para los polígonos circunscritos, probó que

$$3.1408\dots = \frac{223}{71} < \pi < \frac{22}{7} = 3.1428\dots$$

De una manera precisa, puede demostrarse que el perímetro de un polígono regular de 2^n lados inscrito en una circunferencia de diámetro unidad, p_n , viene dado por la fórmula

$$p_{n+1} = 2^n \sqrt{2 \left(1 - \sqrt{1 - \left(\frac{p_n}{2^n} \right)^2} \right)}, \quad p_2 = 2\sqrt{2}.$$

Además se tiene que $\lim_{n \rightarrow \infty} p_n = \pi$.

Pero en este proceso, **cuando paramos la iteración?**

En general dada una sucesión convergente $\{x_n\}_{n \geq 0}$ con $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x^*$, los criterios normalmente utilizados para detener la iteración son:

$$|x_{n+1} - x_n| \leq \text{TOL}, \quad \text{ERROR ABSOLUTO},$$

$$\frac{|x_{n+1} - x_n|}{|x_n|} \leq \text{TOL}, \quad \text{ERROR RELATIVO}, \quad x_n \neq 0, \quad \forall n,$$

$$\frac{|x_{n+1} - x_n|}{\max\{1, |x_n|\}} \leq \text{TOL}, \quad \text{ERROR MIXTO},$$

donde TOL es la tolerancia exigida. Si x_{n+1} y x_n tienen d cifras significativas iguales, entonces el error relativo en x_n es aproximadamente $\text{TOL} = 10^{-d}$.

MÉTODO NUMÉRICO o ALGORITMO: Cuando las instrucciones son realizables mediante un número finito de operaciones aritméticas y lógicas, su descripción está detallada y sin ambigüedades.

Nota: No incluye pasos al límite, pero puede repetirse un bloque de sentencias un número arbitrario de veces. Esto permite obtener, si no la solución exacta, si una aproximación con la precisión requerida.

CÁLCULO NUMÉRICO: Es la rama de las matemáticas que estudia y analiza los métodos constructivos que puedan implementarse “racionalmente” en un ordenador.

La aparición de los ordenadores revolucionó la matemática constructiva, permitiendo realizar en segundos los cálculos que antes llevaban mucho tiempo o eran impensables.

FUENTES DE ERROR

Las fuentes de error más usuales son:

- **Errores de Hardware:** usuales al principio de la aparición de los ordenadores e incluso hoy (error del Pentium).
- **Errores de programación:**
- **Errores experimentales:** Errores en los datos iniciales.
- **Errores en la construcción del modelo matemático:**
- **Errores de discretización:** Por ejemplo, al aproximar la derivada de $f(x)$, $f'(x)$ por el cociente incremental

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} \simeq f'(x).$$

- **Errores de redondeo:** En aritmética de coma flotante, la mayoría de los números no pueden representarse exactamente. Este error se llama de redondeo. Cuando un problema tenga la desafortunada característica que pequeños errores, como los de redondeo, provocan grandes cambios en la solución se dirá que el problema es **inestable** o que está **mal condicionado**.

INTRODUCCIÓN

RESOLUCIÓN DE SISTEMAS LINEALES

PROBLEMA Resolver el sistema lineal

$$Ax = b \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad x, b \in \mathbb{R}^n.$$

MÉTODOS

- **Directos:** Se obtiene la solución exacta en un número finito de operaciones (aritmética exacta).
- **Iterativos:** Se obtiene una sucesión de vectores que converge a la solución del sistema.

EFFECTIVIDAD DEL MÉTODO

- **Coste computacional:** Número de operaciones aritméticas empleadas.
- **Estabilidad:** Propagación de los errores.

TIPOS DE PROBLEMAS

- **Matrices “pequeñas” y llenas:**
 - Métodos directos.
 - Métodos iterativos.
- **Matrices “grandes” y huecas:**
 - Métodos iterativos.
 - Otro tipo de métodos.

TIPOS DE ERRORES.

- **Errores en los datos del problema.**
- **Errores de redondeo.**
- **Errores de convergencia.**

A continuación vamos a ver algunos ejemplos de matrices de distintos tamaños relacionadas con la Química.

Ejemplo: Dada la siguiente reacción química



el objetivo es construir las ecuaciones que nos den la conservación de cada elemento y de la carga Q

- $\text{Cu} := 2*a = d$
- $\text{S} := a = 8*f$
- $\text{H} := b = 2*g$
- $\text{N} := c = e$
- $\text{O} := 3*c = e+g$
- $Q := b-c = 2*d$

lo que da lugar al sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -8 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & -2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \\ g \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Ejemplo: La teoría molecular de Huckel (HMO) da una aproximación sencilla a la estructura electrónica de las moléculas, es decir

- 1) Los valores propios aproximan al espectro de energía
- 2) Los vectores propios aproximan los estados

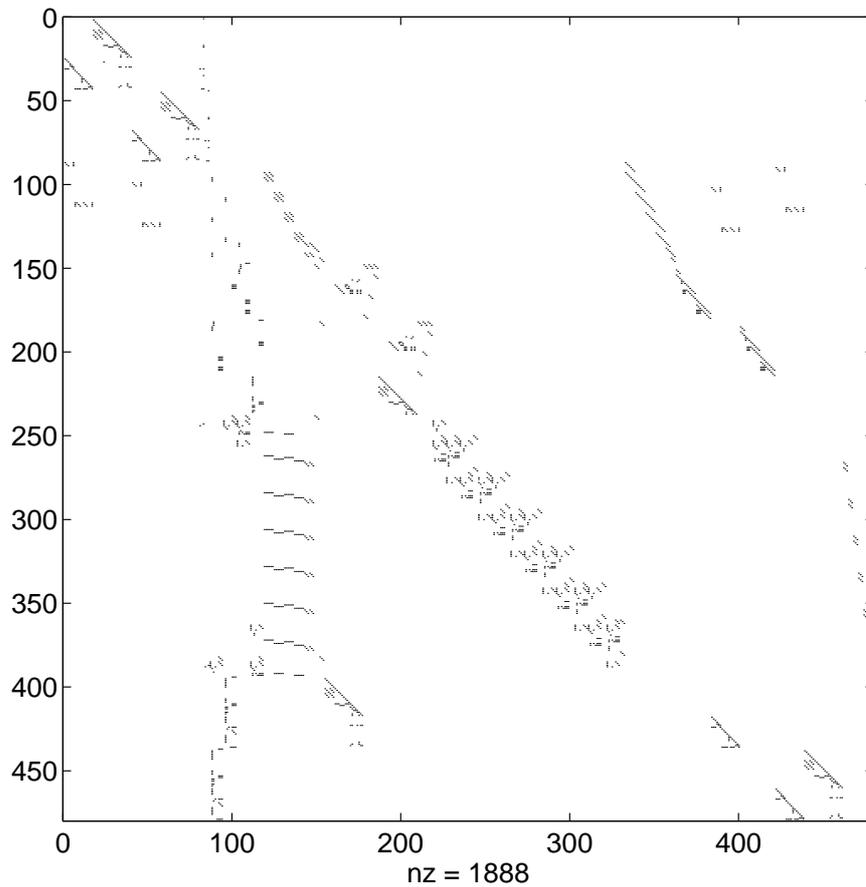
El HMO para el butadieno puede representarse por la siguiente matriz

$$\text{matrizButadieno} := \begin{bmatrix} a & b & 0 & 0 \\ b & a & b & 0 \\ 0 & b & a & b \\ 0 & 0 & b & a \end{bmatrix}$$

de manera análoga, el HMO para el naftaleno se representa por

$$\text{matrizNaftaleno} := \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & b & 0 \\ 0 & a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & 0 \\ 0 & b & a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b & a & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b & a & 0 & 0 & 0 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & b & 0 & 0 & b \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & a & b & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b & a & 0 & 0 \\ b & b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a & b \\ 0 & 0 & 0 & 0 & b & b & 0 & 0 & b & a \end{bmatrix}$$

Ejemplo: En cuanto a matrices de mayor dimensión, tenemos el siguiente dibujo que muestra una matriz *hueca* llamada *west0479*, que describe las conexiones en un modelo de una columna de difracción en una planta química.



MÉTODOS DIRECTOS

REGLA DE CRAMER

Dado el sistema lineal $Ax = b$, con $\det(A) \neq 0$, la solución viene dada por

$$x_1 = \frac{|b|a_2|\dots|a_n|}{|A|}, x_2 = \frac{|a_1|b|\dots|a_n|}{|A|}, \dots, x_n = \frac{|a_1|a_2|\dots|b|}{|A|},$$

donde a_i representa la i -ésima columna de la matriz A .

Coste Computacional:

$$\left\{ \begin{array}{l} n + 1 \text{ determinantes} \\ n \text{ divisiones} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} n!(n - 1) \text{ productos} \\ n! - 1 \text{ sumas} \end{array} \right.$$

El total de operaciones es $= n!(n^2 + n) - 1$. Si $n = 10$ hay que hacer del orden de 4×10^8 operaciones.

Este método es válido para sistemas de dimensión baja, y es el que está implementado en los manipuladores algebraicos usuales para $(n \leq 4)$.

SISTEMAS TRIANGULARES

Considerar el sistema lineal ($a_{ii} \neq 0$):

$$\begin{aligned}a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1, \\a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2, \\&\vdots \\a_{nn}x_n &= b_n,\end{aligned}$$

El algoritmo de resolución es bastante simple y viene dado por

$$x_n = b_n/a_{nn}$$

Para $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$

$$x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j \right) / a_{ii}$$

Fin i

El número de operaciones es:

- * Sumas y productos $\sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n 1 = n(n-1)/2$.
- * Divisiones n .

Nota: Normalmente interesa solamente calcular la potencia mayor de n . Por tanto

$$\text{Coste total} \simeq \frac{n^2}{2} \text{ operaciones.}$$

Eliminación Gaussiana.

Genéricamente, el proceso de eliminación Gaussiana consiste en pasar de la matriz original A a otra triangular superior U realizando operaciones elementales por filas.

Las operaciones que pueden efectuarse son:

- 1) La i -ésima fila puede multiplicarse por una constante no nula α y sumarla a la j -ésima fila.

$$(F_j + \alpha F_i) \longrightarrow (F_j).$$

- 2) La i -ésima fila puede permutarse por la j -ésima fila.

$$(F_i) \longleftrightarrow (F_j).$$

Ejemplo: Para el sistema $\begin{cases} x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 6 \\ 2x_1 + x_2 = 3 \\ 3x_1 - 3x_2 + 2x_3 = 2 \end{cases}$, tenemos

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 2 & 1 & 0 & 3 \\ 3 & -3 & 2 & 2 \end{array} \right] \begin{array}{l} (-2F_1 + F_2) \rightarrow (F_2) \\ (-3F_1 + F_3) \rightarrow (F_3) \end{array} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 0 & -3 & -6 & -9 \\ 0 & -9 & -7 & -16 \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 0 & -3 & -6 & -9 \\ 0 & -9 & -7 & -16 \end{array} \right] (-3F_2 + F_3) \rightarrow (F_3) \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 6 \\ 0 & -3 & -6 & -9 \\ 0 & 0 & 11 & 11 \end{array} \right]$$

- **1, -3, 11** son los pivotes de la eliminación.
- En el caso de que un pivote sea nulo, es preciso un intercambio de filas.

Las operaciones elementales anteriores pueden describirse en forma matricial de una manera sencilla:

1)

$$j \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & \alpha & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

2)

$$i \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 0 & 1 & & \\ & & 1 & 0 & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} j$$

matriz identidad con las filas i y j permutadas.

El procedimiento es como sigue:

Partiendo de $A^{(0)} = A$, calcular $A^{(k)}$ a partir de $A^{(k-1)}$, donde $A^{(k)}$ es de la forma:

$$A^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(k)} & a_{12}^{(k)} & a_{13}^{(k)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(k)} \\ 0 & a_{22}^{(k)} & a_{23}^{(k)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(k)} \\ 0 & 0 & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & a_{kk}^{(k)} & \dots & a_{kn}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & & a_{nk}^{(k)} & \dots & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix}$$

En la etapa final, $A^{(n-1)} = U$, matriz triangular superior.

El paso de $A^{(k-1)} \rightarrow A^{(k)}$ puede escribirse

$$A^{(k)} = M^{(k)} A^{(k-1)}, \quad k = 1, \dots, n-1,$$

donde

$$M^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1 k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{n k} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad l_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad i = k+1, \dots, n$$

A los elementos l_{ik} se les llama multiplicadores de la eliminación.

Para la inversa de la matriz $M^{(k)}$ se cambian de signo a los multiplicadores.

Para el ejemplo anterior $A^{(0)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -3 & 2 \end{bmatrix},$

$$A^{(1)} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -3 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{M^{(1)}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -3 & 2 \end{bmatrix}}_{A^{(0)}} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & -9 & -7 \end{bmatrix},$$

$$A^{(2)} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -3 & 1 \end{bmatrix}}_{M^{(2)}} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & -9 & -7 \end{bmatrix}}_{A^{(1)}} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -3 & -6 \\ 0 & 0 & 11 \end{bmatrix} = U.$$

En este caso

$$M^{(2)} \begin{bmatrix} M^{(1)} & A \end{bmatrix} = M^{(2)} A^{(1)} = A^{(2)} = U,$$

y así

$$A = \begin{bmatrix} M^{(1)} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} M^{(2)} \end{bmatrix}^{-1} U = L U.$$

Notar que

$$\begin{bmatrix} M^{(1)} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} M^{(2)} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 1 \end{bmatrix}$$

y

$$L = \begin{bmatrix} M^{(1)} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} M^{(2)} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} M^{(2)} M^{(1)} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 3 & 1 \end{bmatrix}.$$

En general tenemos que

$$M^{(n-1)} M^{(n-2)} \dots M^{(1)} A = U,$$

$$A = [M^{(1)}]^{-1} [M^{(2)}]^{-1} \dots [M^{(n-1)}]^{-1} U = L U.$$

- Hemos obtenido una factorización LU de la matriz A , donde

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

- Si en alguna etapa de la eliminación aparece un pivote nulo, es preciso permutar filas para que el nuevo pivote sea no nulo. Esto se extiende al caso de pivotes muy pequeños en valor absoluto. En general, en cada etapa del proceso de eliminación se toma como pivote el que mayor valor absoluto tenga. Por ejemplo, si

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 2 & 3 & 1 \\ -3 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

entonces el primer pivote es nulo y es preciso un intercambio de filas. La matriz de permutación que intercambia las filas primera y tercera es

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

y entonces a la matriz PA ya se le puede aplicar el proceso

$$PA = \begin{bmatrix} -3 & 4 & 5 \\ 2 & 3 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \end{bmatrix}.$$

- Notar que $\det(A) = \det(L)\det(U) = \prod_{i=1}^n a_{ii}^{(n-1)}$, es decir es el producto de los pivotes.
- Para resolver el sistema lineal $Ax_i = b_i$, se factoriza previamente la matriz $A = LU$, y se resuelven los sistemas $Ly_i = b_i$, $Ux_i = y_i$.
- Notar que la diagonal de L está formada por unos. Se puede fijar el valor de la diagonal de forma arbitraria. Así

$$A = LU = (LD)(D^{-1}U),$$

siendo D matriz diagonal regular, es decir sin ningún elemento nulo.

- Si queremos que tanto la diagonal de L como la de U tengan unos, podemos poner

$$A = L D \bar{U} \text{ con } D = \text{diagonal}(u_{11}, \dots, u_{nn}),$$

siendo u_{ii} los pivotes de la eliminación y

$$U = \begin{bmatrix} 1 & u_{12}/u_{11} & u_{13}/u_{11} & \dots & u_{1n}/u_{11} \\ & 1 & u_{23}/u_{22} & & u_{2n}/u_{22} \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Por tanto, si A es simétrica, entonces

$$\bar{U} = L^T, \quad A = L D L^T \quad \text{Crout.}$$

- Si además, A es simétrica y todos los elementos $u_{ii} > 0$ (pivotes de la factorización), entonces la matriz se llama definida positiva. Así,

$$A = L D^{1/2} D^{1/2} L^T = (L D^{1/2})(L D^{1/2})^T = \hat{L} \hat{L}^T$$

que es la factorización de **Cholesky**.