Programa Cálculo numérico

1. EL PROBLEMA DE IDENTIFICACIÓN (16 horas).
   - INTERPOLACIÓN. (10 horas).
   - APROXIMACIÓN DE FUNCIONES. (6 horas).
2. PROBLEMA DIRECTO. (4 horas).
   - DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA. (2 horas).
   - INTEGRACIÓN NUMÉRICA. (2 horas).
3. PROBLEMA INVERSO. (20 horas).
   - ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS. (4 horas).
   - ECUACIONES DIFERENCIALES EN DERIVADAS PARCIALES. (2 horas).
   - EL PROBLEMA INVERSO LINEAL. (6 horas).
   - EL PROBLEMA INVERSO NO LINEAL. (6 horas).
   - CÁLCULO DE VALORES Y VECTORES PROPIOS DE UNA MATRIZ. (2 horas)

Comentarios al programa.

La matemática numérica o computacional estudia métodos para la resolución numérica y en general aproximada, de problemas propuestos matemáticamente. De un modo general se pueden distinguir dos aspectos distintos en la matemática numérica:

1. Metodología, que construye algoritmos específicos para cada problema, discute su efectividad y suministra las herramientas adecuadas para su tratamiento con el ordenador.

2. Análisis, que estudia los principios matemáticos que subyacen a los métodos, los teoremas de convergencia, las mayoraciones de los errores.

En la mayoría de los cursos de iniciación al cálculo numérico, se insiste fundamentalmente en la metodología exponiendo al alumno a una avalancha de métodos que aparentemente no tienen nada en común. La realidad es otra. La matemática numérica está fundamentada en unos pocos principios básicos, de modo que en la base de muchos algoritmos, aparentemente distintos, subyace el mismo principio. Entender ese principio ayuda a aclarar las ideas, lo que influye beneficiosamente en la búsqueda y construcción de nuevos métodos de resolución de problemas. Trataremos de mantener el equilibrio entre ambos aspectos:

1. Enunciaremos los teoremas más importantes omitiendo su demostración cuando ésta sea excesivamente larga o técnica.

2. Analizaremos de modo especial algunos de los algoritmos más importantes y suministraremos información sobre sus variantes y otros algoritmos menos importantes.

3. Propondremos problemas y ejercicios de aplicación, principalmente aquellos que hayan sido propuestos en exámenes de la asignatura.

El alumno que haya seguido las clases de segundo dispone del lenguaje básico que usaremos en el desarrollo de esta asignatura. Aquellos conceptos de análisis funcional y algebra lineal que sean indispensables en dicho desarrollo se suministrarán en notas.

El programa de cálculo numérico se desarrolla teniendo como motivo ordenador la siguiente clasificación, muy amplia, de los problemas que se suelen encontrar en matemática numérica.

Clasificación de los problemas en matemática numérica

Muchos de los problemas que surgen en matemática aplicada se pueden enunciar formalmente así :

Resolver la ecuacion

$$f(x) = y \tag{1}$$

donde $x \in E$ *e* $y \in F$*, con* E *y* F *espacios vectoriales reales o complejos, con estructura topológica compatible en general, y* $f : E \to F$ *es un operador, lineal o no, cualquiera.*

En el lenguaje de la ingeniería de sistemas x, y, f representan la entrada, la salida y el sistema en sí, respectivamente.

La observación de la ecuación [1] permite reconocer tres tipos de problemas distintos:

1. *El problema directo.* Dados f y x, hallar y. Se intenta determinar la salida de un sistema dado, producida por una entrada conocida. Un ejemplo sería el cálculo de una integral definida.

2. *El problema inverso.* Dados f e y, hallar x. Se busca la entrada que genera una salida conocida en un sistema dado. Ejemplos de problemas inversos son la resolución de sistemas de ecuaciones lineales o no lineales, así como la resolución de ecuaciones diferenciales tanto ordinarias como en derivadas parciales y la de ecuaciones integrales.

3. *El problema de identificacion.* Dados x e y, hallar f. Se buscan las leyes que gobiernan el sistema a partir del conocimiento de ciertas relaciones entre la entrada y la salida. En general, sólo se conoce un número finito de parejas (x_n, y_n) entrada-salida. En su forma más simple el problema de identificación es la teoría de aproximación de funciones. f es una función de una variable y se pide hallar *la* o *una* función cuya gráfica pasa por o pasa cerca de un conjunto de puntos (x_n, y_n).

Cada tipo de problemas plantea sus propias cuestiones específicas, genera sus propios algoritmos e incluso el éxito en desarrollar una teoría general varía dependiendo de cuál de ellos consideremos.

Los problemas directos se tratan con relativa facilidad, su ejemplo más importante, la integración numérica, es hoy un problema bien comprendido. Existen todavía problemas abiertos y dificultades, pero el problema es conceptualmente simple con una teoría general no muy complicada.

El problema inverso ocupa por su importancia un puesto central en análisis numérico. El caso lineal se ha estudiado extensamente y posee una teoría general bien desarrollada. El problema no lineal es más difícil, y con un cuerpo de teoría menos sattisfactorio.

El problema de identificación en su marco más general es bastante difícil. Pretender descifrar las leyes que gobiernan un proceso desconocido del conocimiento de un número finito de observaciones es generalmente imposible si no se tiene además algún tipo de información de la estructura del proceso. El problema ya citado de la aproximación de un operador de una variable conociendo un número finito de parejas (x_n, y_n) carece en general de solución única salvo que restrinjamos la clase de las funciones admisibles eligiendo una forma conveniente de f dependiente de ciertos parámetros que se calculen de modo que expliquen mejor las observaciones entrada-salida efectuadas.

El linde entre los problemas directo e inverso es difuso, en ciertos casos, el problema inverso se puede transformar en un problema directo. Si f posee inversa conocida f^{-1}, pasaríamos de [1] a $x = f^{-1}(y)$, por ejemplo el problema de Cauchy:

$$\frac{dx}{dt} = \zeta(t)x, \quad x(0) = 1$$

se puede expresar mediante separación de variables en la forma:

$$x(t) = e^{\left(\int_0^t \zeta(s)ds\right)}$$

Para un matemático, el problema estaría resuelto aunque desde un punto de vista estrictamente numérico, sea más conveniente resolver el problema en su forma original.

Esta observación es bastante general, la determinación explícita de la inversa no ayuda numéricamente aunque su conocimiento sea valioso por la información cualitativa que puede suministrar sobre el comportamiento de la solución que no se podría obtener de ningún otro modo.

Puede parecer que la formulación [1] es muy restrictiva porque a veces no sólo se tiene una ecuación que resolver sino que también hay condiciones adicionales, iniciales o de contorno, que satisfacer, pero ello no es cierto. Usando el concepto de espacio producto podemos incluir esas condiciones como veremos en el siguiente ejemplo:

$$\frac{dx}{dt} = \zeta(t, x), \quad 0 \leq t \leq 1$$

con la condición inicial $x(0) = \alpha$

. Sea $F = C[0,1] \times I\!R$. Definamos $f : C^1[0,1] \to F$ poniendo

$$f(x) = \left(\frac{dx}{dt} - \zeta(t, x), x(0)\right)$$

el problema planteado se puede escribir en la forma

$$f(x) = (0, \alpha)$$

El análisis numérico de un problema es la aproximación real al mismo. Todos los modelos exactos de la realidad duran muy poco, y hay que hacer aproximaciones con mayor o menor éxito. Esta asignatura es muy importante, y hacerla bien os deja en una posición ventajosa para muchos retos futuros. Ejemplos abundantes encontraréis en la realización de vuestro proyecto fin de carrera interpolando datos para hacer estimaciones razonables de valores desconocidos, o integrando numéricamente curvas para sacar pares adrizantes, o usando un paquete de cálculo de estructuras por elementos finitos integrando las ecuaciones de la dinámica de medios continuos para chequear una parte delicada de la estructura, y muchas otras cosas que usáis sin daros cuenta pero que están escondidas en los programas de arquitectura naval o de cad que uséis. En la vida profesional abordaréis en algunos casos problemas similares. En otros jamás tendréis que escribir un número, y en muchos, la teoría que recibís aquí tendréis que completarla.

En cuanto al engarce de esta asignatura con otras de cursos inferiores, pues la verdad es que ha habido gente que sin tener todas las de primero aprobadas, ha conseguido aprobarla. No es lo normal. Suele ser muy útil el tener un buen nivel de algebra matricial y análisis en espacios normados, así como de ecuaciones diferenciales.

Me parece importante comentar a los alumnos que están cursando de nuevo la asignatura, que ésta cambia un poco cada año, y que deben conseguir el material nuevo de este año. Caso de no hacerlo así, es posible que en el examen se encuentren con un problema que no tengan ni idea de cómo coger, como ya ha pasado muchas veces.

En cuanto a las tutorías, éstas serán los martes y miércoles de 17h30m a 20h30m. Se me localiza en el canal (tlf. 3367156). Para cualquier duda, la dirección de correo electrónico es asouto@etsin.upm.es .

Daremos una pequeña bibliografía comentada que si fuese necesario completaríamos en cada tema. Agradecería que me comentaséis si alguno de los libros que necesitéis no estuviese en la biblioteca para pedirlo, y también si sabéis de otros libros interesantes que puedan ser buenos como textos de apoyo en la asignatura. Asimismo, si tenéis algún comentario de cualquier tipo sobre estos libros, como por ejemplo su precio, o si están agotados, o lo que se os ocurra que pueda ser interesante, pues me lo contáis y lo escribiré en el siguiente programa.

Bibliografía

[1] Aubanell, A., Benseny, A., Delshams, A. Útiles básicos de cálculo numérico. Labor, 1993.

Libro con problemas muy interesantes.

[2] Burden, R.L., Faires, J.D. Análisis numérico. Grupo Editorial Iberoamerica. México.

Libro muy bueno, con muchos ejemplos. Trata muy bien la parte de ecuaciones diferenciales. Clásico en la materia.

[3] Carnahan, B., Luther, A.,Wilkes, J.O., Cálculo numérico: métodos, aplicaciones. Editorial Rueda.

Texto enciclopédico (640 páginas) que está bastante bien, pero que se convierte más en un libro de métodos que de análisis. Barato para su tamaño.

[4] García Merallo, F. Nevot Luna, A. Análisis numérico. Más de 300 ejercicios resueltos y comentados. Ed. Paraninfo, 1992.

Libro de problemas nada recomendable. Todos los problemas son iguales y aplicación directa de la teoría.

[5] Hammerlin, G., Hoffmann, K-H. Numerical Mathematics, Springer-Verlag 1991.

Libro que ha servido de base para toda la parte de interpolación y aproximación. Es un libro francamente bueno, con un nivel medio-alto, pero todo muy bien explicado sin meterse en complicaciones. Algunos de los ejercicios propuestos en las hojas de apuntes son ejercicios propuestos también en la parte final de los capítulos de este libro. Caro.

[6] Kincaid, D., Cheney,W. Análisis numérico. Las matemáticas del cálculo ciéntifico. Addison-Wesley Iberoamericana, 1994.

Texto de tipo medio. La teoría es bastante completa y no muy complicada. Cubre casi todas las partes de la asignatura, y tiene multitud de problemas propuestos. Cae un poco hacia la parte de métodos, pero puestos a comprar un libro, éste es ahora mismo el que recomiendo.

[7] Lascaux, P., Theodor, R. Analyse Numerique Matricielle Appliquee a l'Art de l'Ingenieur. Tomes I, II, Masson 1987. Texto adecuado para ampliar la parte de resolución numérica de sistemas lineales.

[8] Puy Huarte, J. Problemas de cálculo numérico. Servicio de Publicaciones. Revista obras públicas. Madrid 1994. ISBN/ISSN 84-7493-173-8.

No hay libros de problemas buenos. De los que conozco este es el mejor, aunque no cubre toda la asignatura. Creo que lo venden en Caminos, y debe ser barato.

[9] Sánchez, J.M. Algebra lineal numérica. Sección de publicaciones ETSIN.

Texto usado en la parte de sistemas lineales, no lineales, y cálculo de autovalores. Libro que tenéis que conseguir porque es el que se deja en el examen para esa parte del mismo.

[10] Theodor, R. Initiation a l'Analyse Numerique, 3 edition. Masson 1989.

Libro bastante pequeño que ha servido de base para la parte de integración, derivación y ecuaciones diferenciales. Últimamente no me gusta mucho, pero sigue siendo un libro muy didáctico, aunque a veces se deja demasiadas cosas sin explicar. Demasiado caro para lo que es.

[11] Yakowitz, S., Szidarowsky, F. An introduction to numerical computations. Macmillan Publishing Company.

Buen libro de consulta. Sencillo y con buenos ejemplos.

Descripción detallada del curso

1 El problema de identificación

1.1 Interpolación.

El problema general de interpolación. Interpolación polinómica. Polinomio de interpolación de Lagrange. Polinomio de interpolación de Hermite. Estudio del error en la interpolación polinómica. Interpolación polinómica a trozos. Splines. B-splines. Interpolación bidimensional.

1.2 Aproximación de funciones

Teoremas de aproximación de Weierstrass. El problema general de aproximación. Aproximación en los espacios prehilbertianos. Polinomios ortogonales. Aproximación trigonométrica. Aproximación por mínimos cuadrados. Series de Fourier discretas. Aproximación en la norma del máximo (aproximación uniforme).

2 El problema directo.

2.1 Integración numérica.

Fórmulas de cuadratura de tipo interpolación. Ejemplo fundamental: Las fórmulas de Newton-Cotes. Evaluación del error en el caso de las fórmulas de Newton-Cotes. Algunas fórmulas de Newton-Cotes del tipo abierto. Métodos compuestos. Estudio de la estabilidad y del error. Las fórmulas de Gauss.

2.2 Diferenciación numérica.

El caso general. Caso en que los puntos de interpolación son equidistantes. Estabilidad. Aproximación de la derivada segunda.

3 El problema inverso.

3.1 Ecuaciones diferenciales ordinarias

El problema de Cauchy. Métodos de un paso para las E.D.O. de primer orden. El método de Euler. Esquema general. Convergencia. Estabilidad. Consistencia. Error de discretización. Control del paso. Métodos de Runge-Kutta. Métodos de paso múltiple. Métodos de Adams-Bashforth. Métodos de Adams-Moulton. El método de Milne-Simpson. Sistemas de e.d.o.s. Problemas de contorno en e.d.o.s.

3.2 Ecuaciones diferenciales en derivadas parciales

Método de las diferencias finitas.

3.3 El problema inverso no lineal.

Resolución de ecuaciones y sistemas de ecuaciones no lineales.

Caso general. Introducción. Método de bisección. Método de la secante. Aproximaciones sucesivas. Método de aproximaciones sucesivas (Iteración del punto fijo). Teorema del punto fijo de Banach. Estimación "a priori" y "a posteriori" del error. Análisis de la convergencia. El método de Newton-Raphson. Convergencia del método de Newton. Método de von Mises. Tests de parada de las iteraciones.

3.4 El problema inverso lineal.

Sensibilidad de la solución de un sistema lineal. Número de condición.

Condicionamiento de un sistema lineal.

Métodos directos para la resolución de sistemas lineales.

Eliminación gaussiana. (Descomposición $PA = LU$ y $A = LU$). Eficacia del algoritmo. Estrategia de pivotes. Coste numérico. Cálculo de A^{-1}. Método de Gauss-Jordan. Factorización de las matrices simétricas (Descomposición $A = LD\,{}^tL$). Factorización de Cholesky (Descomposición $A = L\,{}^tL$). Coste numérico del método de Cholesky. Casos particulares importantes.

Métodos iterativos para la resolución de sistemas lineales.

Procedimiento general de construcción de métodos iterativos. Métodos de Jacobi, Gauss-Seidel y de relajación. Conclusiones de convergencia. Métodos iterativos por bloques y puntuales. Problemas iterativos para ecuaciones no lineales. Extensión al problema inverso no lineal de los Métodos de Jacobi, Gauss-Seidel y de relajación.

3.5 Cálculo de los valores y vectores propios de una matriz

Introducción. Métodos de la potencia.

NORMAS EXAMEN CÁLCULO NUMÉRICO

Con estas normas lo único que se pretende es que los medios de los que dispongáis a la hora de realizar los ejercicios sean iguales para todos, y que al mismo tiempo no tengáis que hacer un esfuerzo de memorización de contenidos que a estas alturas consideramos estéril. Es por eso que no permitimos apuntes personales, porque después hay líos con que si esto es un ejemplo, no un problema, con que si estas fórmulas me las dio mi abuelito que sabía mucho de esto,.... El que pone el examen, decide los problemas teniendo en cuenta el material del que el estudiante dispone, y consideramos que un planteamiento razonable pasa por disponer del material trabajado en clase, y nada más. Se han ensayado ya varias posibilidades, y se ha llegado a la conclusión de que para esta asignatura, esta posibilidad es la menos mala.

1. El material que se permite usar durante el examen es:
   - El libro de J.M. Sánchez, Álgebra lineal numérica. Sección de publicaciones ETSIN.
   - Parte teórica de las entregas de fotocopias que se hacen en clase.
   - Calculadora que puede ser programable o nó.
2. No se permitirá :
   - Tener ningún tipo de problema resuelto.
   - Tener apuntes personales.
   - Ordenadores personales.
3. El alumno traerá como identificación su carnet de identidad.