

Matemática Numérica



Patricia Saavedra Barrera*

1 Introducción

La matemática numérica es la rama de las matemáticas que se ocupa de desarrollar métodos y herramientas para resolver problemas matemáticos en forma numérica con el fin de que los resultados cuantitativos proporcionen información sobre el comportamiento de un fenómeno natural o de un proceso industrial, económico o social.

El objetivo es desarrollar algoritmos eficientes y precisos, que puedan ser implementados en un instrumento de cálculo, cuyo desempeño pueda ser analizado en detalle y cuya aplicabilidad sea lo más amplia posible.

Los problemas que se abordan provienen de casi todas las ramas de la matemática tanto pura como aplicada. Hay aspectos numéricos en la teoría de números, la combinatoria, el álgebra abstracta y lineal; en el análisis, en las ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales, en la probabilidad y en la estadística, por citar algunos ejemplos.

El desarrollo vertiginoso de las computadoras trajo consigo una demanda creciente por procedimientos más potentes para resolver problemas cada vez más complejos como la predicción del clima, el estudio de las proteínas, el desarrollo de tumores cancerosos o el control de vuelo de una nave espacial. Todos estos problemas requieren de resultados cuantitativos que permitan tomar acciones, algunas a muy corto plazo, lo que implica tener métodos eficientes que den resultados con la precisión deseada en el menor tiempo posible, incluso en lo que se ha dado por llamar *en tiempo real*.

Este campo tiene interés tanto para los que requieren de cálculos como para aquellos que procesan grandes cantidades de información en forma de imágenes, sonido o texto, ya que detrás de cada imagen enviada y cada acceso a un buscador en la red, hay uno o varios algoritmos que requieren de miles de operaciones aritméticas.

Desde Bacon y Galileo en el siglo XVII, el desarrollo de las ciencias naturales se ha enriquecido al combinar las metodologías experimentales con las teóricas, estas

*Departamento de Matemáticas. Universidad Autónoma Metropolitana. 09340, Iztapalapa, México

últimas muy relacionadas con la matemática. A partir del desarrollo de las computadoras, una tercera vía que se conoce como simulación numérica ha venido a enriquecer el método científico para la generación de nuevos conocimientos. Ésta funciona como un laboratorio cuya herramienta principal es la computadora y en donde se puede diseñar con toda precisión un experimento que proporciona un mejor entendimiento del fenómeno o proceso que se estudia. Esta metodología puede considerarse parte de la matemática numérica y está estrechamente relacionada con varias áreas de la computación y de otras disciplinas; por ello, se habla de física, química, biología y hasta finanzas computacionales que se ocupan del estudio de modelos matemáticos y algoritmos computacionales precisos y eficientes para la resolución de problemas que surgen en estas ramas de la ciencia. La influencia que ha tenido la computadora en el desarrollo de la ciencia y de nuevas tecnologías corrobora la afirmación visionaria que hizo John Von Neumann en 1950: "La ciencia fue revolucionada por la invención del cálculo. El impacto de las computadoras en la ciencia será al menos tan grande como el del cálculo."

2 Breve historia de la matemática numérica

La matemática numérica implica cálculo con números y registros numéricos existen desde las primeras civilizaciones. Se han encontrado textos relacionados con problemas matemáticos en tablillas de arcilla que provienen de excavaciones en las regiones en donde se asentaron los sumerios, caldeos, asirios y babilónicos. Los más antiguos datan del último periodo sumerio, alrededor de 2100 A. de C., mientras que la mayoría son posteriores a 600 A. de C. Las tablillas muestran que representaban los números en un sistema posicional mixto en base 10 y 60. Con este sistema sumaban y multiplicaban con la misma facilidad con la que se hace en el sistema decimal. Manejaban las cuatro operaciones básicas. Para dividir se ayudaban con tablas del inverso de un número que les permitía obtener el cociente aproximado de dos números por medio de una multiplicación. Hay también registro de lo que, posiblemente, es el primer algoritmo para aproximar la raíz cuadrada de un número. Los problemas de geometría en los que se interesaron se relacionaban con la medición de perímetros, áreas y volúmenes de algunos sólidos. Para el cálculo del perímetro de un círculo multiplicaban su diámetro por 3, lo que equivale aproximar al número π por 3, ver [3].

Sobre los conocimientos matemáticos de la cultura egipcia los primeros registros que se tienen son el Papiro de Moscú y de Rhind, escritos aproximadamente en 1850 A. de C. y 1650 A. de C., respectivamente. Ambos documentos incluyen ejemplos de cálculos que implican el manejo de ecuaciones lineales con una y dos incógnitas. En cuanto a geometría, determinaron con éxito el área y el volumen de diversas figuras

geométricas: entre ellas, el volumen de una pirámide truncada. Contaban con una fórmula aproximada para calcular el área de un círculo en el que el número π se aproxima por $3\frac{1}{6}$.

Es con los griegos que aparece por primera vez, en el siglo V A.de C., la matemática como una ciencia formal que utiliza el método deductivo como herramienta fundamental para probar que un resultado es verdadero. Los teoremas que se atribuyen a Tales de Mileto y a Pitágoras son algunos de los primeros ejemplos en el que se aplica esta metodología y el libro de los Elementos de Euclides es la muestra más acabada de ello. La matemática griega se ocupó de estudiar problemas de geometría, aritmética, teoría de números y álgebra.

Arquímedes (287-212) es posiblemente el más brillante matemático aplicado de la antigüedad; a él se deben diversos ejemplos de métodos muy ingeniosos para aproximar la solución de problemas de la hidrodinámica y estática. Escribió más de diez obras; entre ellas el estudio de las cónicas, de la esfera y el cilindro, sobre la espiral y sobre el cálculo de volúmenes de revolución de elipses, parábolas e hipérbolas que giran alrededor de un eje de simetría y el cálculo del área de una parábola. En su estudio del círculo mejora sustancialmente la aproximación al número π con el siguiente resultado: $3\frac{10}{71} < \pi < 3\frac{1}{7}$.

Desde la aparición de los primeros asentamientos humanos se usaron piedras, cordeles, varillas como instrumentos de medición y cálculo; posteriormente, la aparición del ábaco facilitó enormemente el cálculo aritmético. La introducción de la notación decimal y del cero en el siglo XII por los árabes uniformó la notación y el cálculo numérico entre los diversos pueblos. Pero no fue sino hasta inicios del siglo XVII, con el invento de las tablas de logaritmos, que el cálculo numérico experimentó un avance fundamental para el desarrollo de la ciencia en el siglo XVII y XVIII. La tabla de logaritmos fue creada por John Napier (1550-1617), quien fue de los primeros en estudiar la notación y el manejo de distintas bases numéricas como la binaria o la exponencial. Sus estudios sobre la relación entre las progresiones geométricas y aritméticas lo llevaron a definir el logaritmo base $\frac{1}{e}$ que publicó en 1615.

Al morir Napier, su amigo Henry Briggs (1561-1630), el primer profesor saviliano de geometría de Oxford, retoma y simplifica su trabajo con el fin de generalizarlo a cualquier base, en particular la decimal, que publica en 1617 con una precisión de catorce cifras. Con la tablas de logaritmos, las multiplicaciones de varias cifras se convierten en simples sumas y el elevar un número a un exponente se reduce a una simple multiplicación. Esto permitió abordar problemas de astronomía, de balística y de índole práctico que parecían incalculables. Poco después, hizo su aparición en 1624 la regla de cálculo que permaneció como instrumento personal de cálculo por excelencia hasta la aparición de las primeras calculadoras de bolsillo en 1970.

Con estos antecedentes los precursores del cálculo: Descartes, Fermat, Pascal, Wallis, Barrow y Gregory, entre otros, desarrollaron la geometría analítica, diversos



Figura 1: John Napier

métodos para determinar la ecuación de la tangente a una curva dada; el cálculo de máximos y mínimos y el cálculo de cuadraturas, entre otros temas. Estos resultados prepararon el terreno para que, a fines del siglo XVII, Leibnitz y Newton los sistematizaran, relacionaran y unificaran en una metodología poderosísima: el cálculo diferencial e integral.

Isaac Newton (1642-1727) nació en Woolsthorpe, Inglaterra. Sus aportaciones son fundamentales para definir con precisión el concepto de velocidad instantánea, la fuerza de atracción entre los cuerpos, la fuerza gravitacional y la descomposición de la luz, entre otras muchas cosas. Desde el punto de vista numérico, Newton inventó varios algoritmos que se siguen utilizando hasta nuestros días, como el método para encontrar los ceros de una función o la aproximación de derivadas por medio de diferencias divididas o la construcción de polinomios de interpolación.

En esa misma época se introdujo el uso de series de potencias que permitió aproximar localmente con la precisión deseada a un gran conjunto de funciones y abrió la posibilidad de atacar problemas de mayor complejidad que aparecen en el estudio de fenómenos físicos como las vibraciones de una cuerda, la difusión de calor o el comportamiento de los fluidos. Por ejemplo, James Gregory (1638-1675) en 1671 determinó la serie de potencias para la función $\text{Arctang}(x)$ lo que permitió aproximar,

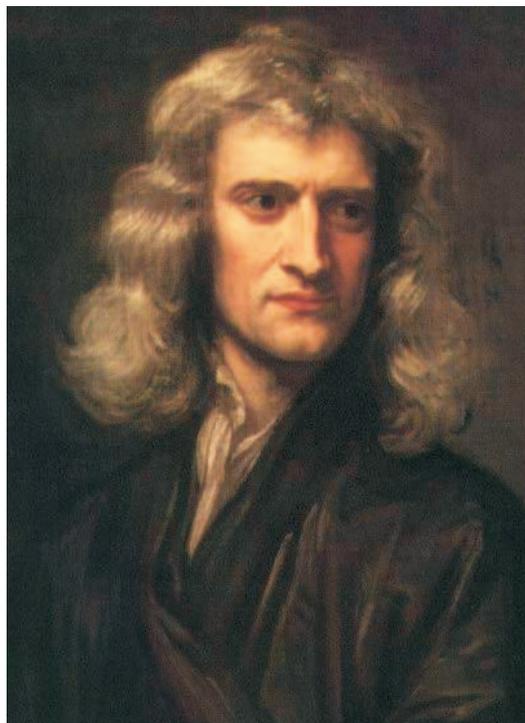


Figura 2: Isaac Newton

tanto como se deseara, el valor de π

$$\frac{\pi}{4} = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \dots$$

Siguiendo el ejemplo de Newton, varios matemáticos de primer orden contribuyeron a la solución de problemas numéricos: Leonard Euler (1707-1783) utilizó la serie de Taylor para crear el método que lleva su nombre y que aproxima la solución de problemas con condiciones iniciales en ecuaciones diferenciales ordinarias; Joseph Louis Lagrange (1736-1813) dió una forma de construir polinomios de interpolación. Karl Friedrich Gauss (1777-1855) contribuyó de manera notable con el método de mínimos cuadrados y sus fórmulas de cuadratura que abren la puerta a la utilización de familias de polinomios ortogonales para la aproximación de integrales; sus aportaciones al estudio de la solución de sistemas de ecuaciones lineales siguen siendo fundamentales en la enseñanza del álgebra lineal. También se le atribuye la invención de la transformada rápida de Fourier, algoritmo que pasó desapercibido hasta su redescubrimiento por Cooley y Tukey en 1963.

Durante la segunda mitad del siglo XIX, la matemática entró en una etapa de rigorismo necesario para cimentar con firmeza su amplio cuerpo de conocimientos.

Weierstrass y Cauchy entre otros, son los responsables del concepto riguroso de límite que es fundamental en el análisis. Esto explica que la obtención de cálculos numéricos pasara a segundo término aunque el desarrollo del análisis funcional está estrechamente ligado a la aproximación de funciones en espacios normados. Por último, hay que mencionar que, a principios del siglo XX, Richardson aplicó por primer vez el método de diferencias finitas para el análisis de esfuerzos en distintos materiales y que, en 1928 apareció el famoso artículo de Courant, Friedrichs y Lewy sobre el análisis de estabilidad de estos métodos. Para saber más sobre la historia del análisis numérico, consultar [8].

Desarrollo de las computadoras

En contraste con el desarrollo acelerado de la ciencia en el siglo XIX y la primera mitad del siglo XX, los instrumentos de cálculo permanecieron sin modificación alguna hasta mediados del siglo XX. Charles Babbage en el siglo XIX fue el primero en tener la idea de diseñar un máquina que realizara cálculos automáticos, pero sus ideas no fueron comprendidas por sus contemporáneos y tuvieron que esperar hasta inicios de la Segunda Guerra Mundial para dar frutos. La primera computadora, llamada Z3, apareció en Alemania en 1939 y fue construida por el ingeniero Konrad Zuse; usaba dispositivos electromecánicos y representaba a los números en binario en notación de punto flotante, término que será definido más adelante. También durante esos años, los británicos construyeron una gran computadora para descifrar los códigos de encriptamiento de la máquina alemana Enigma.

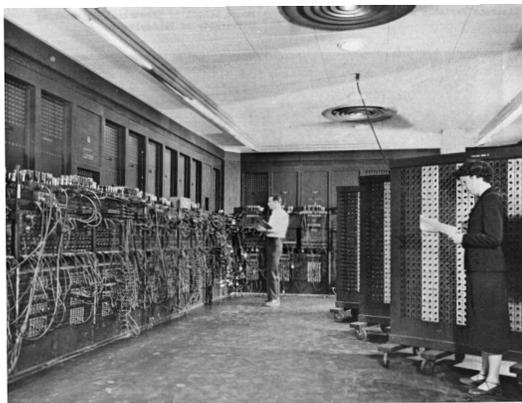


Figura 3: La computadora ENIAC

La primera computadora de uso general fue la ENIAC, construida por Prosper Eckert y John Mauchly en la Universidad de Pennsylvania de 1943 a 1945. Aunque esta computadora era electrónica, cada vez que se usaba en un problema nuevo había

que reprogramarla lo que implicaba reconectar distintos circuitos eléctricos. En el verano de 1944, Von Neumann visitó la construcción de la ENIAC como asesor de la marina. El problema de proporcionar a la computadora las instrucciones a seguir sin necesidad de desconectar los circuitos despertó su interés. En 1945 Von Neumann escribió un reporte sobre el diseño lógico de una computadora nueva, llamada EDVAC; en él plasma las ideas que habían surgido en sus discusiones con Eckhert, Mauchly y Burks, entre otros, ver [9], y dibuja un diagrama de lo que debe ser la estructura de una computadora: una unidad de cálculo, una unidad central que organice las tareas que lleva a cabo la computadora y una memoria en la que se almacenen los programas. Este documento tendrá una influencia determinante en el desarrollo posterior de las computadoras; su concepción permaneció vigente hasta la aparición de las computadoras en paralelo.

Al mismo tiempo Von Neumann se interesó en la confiabilidad de los resultados que se obtienen en una computadora, cuestión nada evidente en esos años. Estudió la propagación de errores en los cálculos numéricos y el diseño de algoritmos menos sensibles a éstos que son aspectos fundamentales de la matemática numérica.



Figura 4: John Von Neumann

Antes de la aparición de las computadoras, a la matemática numérica se le consideraba parte del análisis ya que se ocupaba principalmente del estudio de la aproximación numérica de la solución de problemas continuos. A partir de 1945, el desarrollo de la matemática numérica se aceleró, a la par que lo hizo la computadora,

y desbordó su marco inicial para ocuparse de todo tipo de problemas cuyo estudio y solución podían beneficiarse del uso intensivo de esta herramienta. En cuanto a las publicaciones, Teoría Matemática de la Computación de la Sociedad Matemática Americana inició su publicación en 1943, pero no fue sino hasta la década de los cincuenta que aparecieron las primeras revistas especializadas totalmente dedicadas a este nuevo campo; entre las primeras están el SIAM Journal en 1953 y el Numerische Mathematik en 1959.

De esta forma el número de matemáticos, ingenieros y científicos que se interesaron en crear algoritmos que aprovecharan la capacidad de las computadoras se incrementó tanto que, a principios de los sesenta, la matemática numérica se había convertido en una rama independiente de la matemática. Actualmente, hay más de una docena de revistas especializadas en este tema, sin contar las que se publican en otras disciplinas. La velocidad de las computadoras se ha incrementado en un factor de 10^9 desde su creación, lo que se ha convertido en un reto constante para generar nuevos algoritmos que puedan aprovechar y explotar dicho potencial. Hoy en día, se puede afirmar que, gracias al esfuerzo de muchos investigadores, buena parte de los problemas clásicos de la física pueden ser resueltos computacionalmente en forma confiable y eficiente; pero aún restan otros problemas, como el estudio de la turbulencia o del clima, que junto con otros nuevos, como el diseño de proteínas sintéticas o de nuevos materiales siguen siendo un reto para el ingenio de las nuevas generaciones de analistas numéricos.

3 La matemática numérica en México

La matemática numérica en México tiene los mismos antecedentes que cualquier otro campo de la matemática en México. Una de las características del desarrollo de esta disciplina en nuestro país es su falta de continuidad, por lo que se puede hablar de tres periodos ajenos: el precolombino, en el que destaca la matemática maya, el colonial, consultar el libro de E. Trabulse, ver [19], y el posrevolucionario a partir de 1930 a nuestros días, en el que se profesionaliza la actividad matemática en México. A continuación se hace una breve presentación de esta última etapa.

Después de la Revolución, Don Sotero Prieto (1884-1935), profesor de la Escuela Nacional Preparatoria y de la Escuela Nacional de Ingenieros, reunió a un grupo de jóvenes interesados en la matemática para profundizar ciertos temas e intercambiar ideas. La importancia de este grupo es que varios de sus miembros jugaron un papel determinante en el impulso de la actividad matemática en México. Uno de estos jóvenes era Alfonso Nápoles Gándara, quien en 1930 recibió una beca para realizar estudios de matemáticas en el M.I.T. En 1935 surgieron las carreras de matemático y física, dentro del Departamento de Ciencias Físicas y Matemáticas de la UNAM y, en noviembre de 1938, se aprobó la creación de la Facultad de Ciencias, el Instituto

de Física y el Instituto de Matemáticas. Estas instituciones junto con la Sociedad Matemática Mexicana creada en 1943, lograron contagiar a profesores y alumnos de distintos lugares de nuestro país del gusto por las distintas ramas de las matemáticas y ayudaron a crear, antes de 1970, la carreras de matemáticas en varias universidades de provincia como Nuevo León, Puebla, Veracruz y Yucatán.



Figura 5: Nápoles Gándara

Nápoles Gándara fue el director de Instituto de Matemáticas desde su inicio hasta 1965. Organizó el Instituto en tres ramas generales: Matemática Pura, dirigida por Alberto Barajas y Roberto Vázquez; Lógica y Fundamentos, dirigida por Francisco Zubieta, y Matemática Aplicada cuyo responsable era Carlos Graef. En los siguientes veinte años, sólo la primera rama lograría consolidarse con el apoyo decidido de Solomon Lefschetz, investigador de la Universidad de Princeton. Sus visitas a México, a partir de 1945 hasta 1966, influyeron considerablemente en la formación de investigadores mexicanos en Estados Unidos en tres áreas relevantes de la matemática: geometría algebraica, ecuaciones diferenciales y topología algebraica.

El desarrollo de la matemática aplicada en México fue más lento y más disperso ya que esta actividad no es exclusiva de los matemáticos, sino que también se re-

troalimenta con el trabajo realizado por los físicos, geofísicos e ingenieros. En consecuencia, otras instituciones influyeron en el avance de la matemática aplicada: la Facultad de Ciencias (FC), el Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y Sistemas (IIMAS), el Instituto de Ingeniería y el Instituto de Geofísica (IG) de la UNAM. En este instituto hay que destacar el trabajo del Dr. Ismael Herrera, matemático egresado de la Facultad de Ciencias y uno de los primeros en obtener un doctorado en matemáticas aplicadas. El Dr. Herrera contribuyó en el desarrollo de los métodos variacionales en la solución de ecuaciones en derivadas parciales y su aplicación a la ingeniería. También hay que mencionar la importancia de la labor realizada por el Dr. Julian Adem y el Dr. Arturo Rosenblueth de la UNAM y el trabajo pionero realizado por el Ing. Manuel Cerrilla quien publicó desde 1945 varios trabajos sobre algunos métodos matemáticos aplicados a problemas eléctricos, de electromagnetismo y procesamiento de señales.

Vale la pena recordar el desarrollo del IIMAS ya que su historia está entrelazada con el desarrollo de la computación en México. El Centro de Cálculo Electrónico (CCE), fue fundado en 1958, año en que se instala la primera computadora en la UNAM y en el país, con el fin de utilizarla para el avance de la ciencia en México. A partir de la creación del CCE, el número de científicos y profesionales que usaron esta nueva herramienta como parte de sus investigaciones no dejó de crecer y mostró la necesidad de formar recursos humanos en computación y áreas afines en el extranjero. En 1967 el Centro se moderniza, adquiere una computadora con tecnología muy avanzada para su tiempo y su uso se difunde rápidamente, pasando de 60 a 2000 usuarios activos. El CCE cambia de nombre (CIMASS) y funciones en 1970, reconociendo entre sus actividades la investigación en cómputo y en estadística. En 1973 se divide el CIMASS para separar la actividad de investigación de la de servicios y se crea el CIMAS que, posteriormente en 1976, se convertirá en el IIMAS. Este instituto ha desempeñado un papel fundamental en el desarrollo de la matemática aplicada y la estadística en México.

En 1962 el Centro de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional (IPN) inició sus actividades. El Dr. José Adem, hasta entonces investigador del Instituto de Matemáticas de la UNAM, se encargó de dirigir este nuevo centro que ha tenido gran impacto en el desarrollo matemático de nuestro país. Debe mencionarse que un poco antes, en 1961, se estableció la Escuela Superior de Física y Matemáticas en el IPN, cuyos primeros profesores eran egresados de la Facultad de Ciencias de la UNAM. En 1974 se crea la Universidad Autónoma Metropolitana, cuyo Departamento de Matemáticas en la Unidad Iztapalapa, ha formado a un buen número de matemáticos aplicados en el país en las áreas de control, físico matemáticas, sistemas dinámicos y análisis numérico. En 1980 se funda el Cimat en Guanajuato, institución que ha sido un foco de desarrollo y de atracción de los matemáticos en provincia.

En 1991 se llevó a cabo, a partir de una iniciativa entusiasta de varios investi-

gadores de la Facultad de Ciencias, entre ellos los doctores Pablo Barrera y Jesús López Estrada, y el Dr. Humberto Madrid de la Universidad Autónoma de Coahuila, la primera Escuela de Optimización y Análisis Numérico con el fin de difundir y actualizar entre los profesores e investigadores de las universidades de provincia, los avances en estas áreas. Hasta ahora, se han llevado a cabo diecisiete escuelas lo que ha contribuido a la consolidación de la matemática aplicada en nuestro país. También hay que señalar en esta dirección el trabajo de divulgación y promoción realizado por el Dr. Diego Bricio Hernández, ver [11].

Actualmente, hay alrededor de doscientos investigadores activos en el área de matemáticas aplicadas y, entre ellos, cerca de cincuenta son en matemática numérica, sin contar aquellos que provienen de otras disciplinas. Las áreas que se cultivan son la optimización, la solución numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales, el álgebra lineal numérica y los métodos numéricos aplicados a la probabilidad y a la estadística. Se encuentran grupos consolidados en el CIMAT; en la Facultad de Ciencias, en el IIMAS, en los Institutos de Ciencias de la Atmósfera, Geofísica e Ingeniería de la UNAM; en el ITAM; en el Departamento de Matemáticas de la Unidad Iztapalapa de la UAM y en las Facultades de Ciencias Físico-Matemáticas de la BUAP, de la U. M. de S. N. Hidalgo y de la U.A.N.L.

4 Matemática numérica y las computadoras

Hay muchas formas de representar los números, desde la antigüedad se conocen las ventajas de utilizar potencias de 10 lo que da un sistema posicional decimal en el que es importante la posición que ocupa un dígito. Usar las potencias de diez es natural porque los humanos tienen diez dedos en la mano, pero hay otros sistemas que utilizan las potencias de otros números. Los babilónicos tenían un sistema sexagesimal y quedan vestigios de ello en nuestra forma de medir el tiempo. Para las computadoras lo más natural es usar potencias de dos, ya que almacenan los caracteres en bytes que a su vez se componen de 8 bits. Cada bit puede tomar dos valores, uno si está prendido y cero si está apagado. Un byte permite representar 256 caracteres distintos. Una palabra de computadora se compone de 4 bytes y una palabra doble de 8 bytes consecutivos. Al usar potencias de dos se dice que se trabaja en base binaria en lugar de la base decimal. Algunas computadoras modernas trabajan en base octal, base 8, o hexadecimal que es en base 16.

La manera más fácil de representar un número real en una computadora es en notación de punto flotante. A continuación, por simplicidad, se presenta esta notación en base decimal aunque las computadoras usan otras bases. La notación es la siguiente:

$$x = \pm .d_1d_2d_3\dots\dots\dots d_kd_{k+1}\dots\dots \times 10^n,$$

donde n es un número entero, d_k es un número entero entre 0 y 9, y d_1 es distinto de cero. La sucesión de dígitos d_k se le conoce como la mantisa y al entero n como el exponente.

Como la representación de un número real puede tener mantisa infinita y n puede tomar cualquier valor en los enteros, es imposible que un instrumento de cálculo pueda representar cualquier número en forma exacta; cada instrumento de cálculo tiene una cota superior e inferior para n y sólo puede almacenar un número finito de dígitos k de la mantisa. Si se almacena un real con exponente mayor a n , la computadora marca un error que se conoce como overflow o desbordamiento superior. Si el real tiene como exponente un entero menor a la cota inferior, la máquina genera un error de underflow o desbordamiento inferior. Cuando la mantisa tiene un número de dígitos mayor a k entonces la computadora redondea el número y almacena sólo k dígitos. El procedimiento de redondear consiste en lo siguiente: primero se observa el valor del dígito d_{k+1} ; si éste es menor o igual a 4 se almacenan únicamente los primeros k dígitos; si d_{k+1} es mayor o igual a 5 se suma un uno al k ésimo dígito y se almacenan los k dígitos del número resultante.

Para representar un número en punto flotante se puede usar una palabra simple o doble, la diferencia estriba en el número de dígitos k de la mantisa que almacenan. Si se usan palabras simples para representar a los reales se dice que se calcula en simple precisión o en doble precisión en caso de utilizar palabras dobles.

¿De qué tamaño es el error que se comete al representar cualquier número real en una computadora? Para estimarlo denótese por $fl(x)$ la representación en punto flotante de un número real x en una computadora con una mantisa de k dígitos. Se usará el error relativo E_r para estimar el error y se puede probar que

$$E_r = \frac{|x - fl(x)|}{|x|} \leq .5 \times 10^{1-k}.$$

A este error se le llama error de redondeo. En consecuencia, cuando se resuelve un problema con una computadora, la mayor parte de las veces, se resuelve un problema aproximado y no el original; los resultados obtenidos tendrán, en el mejor de los casos, la precisión de la computadora.

Aritmética en punto flotante

¿Qué sucede cuando realizamos las cuatro operaciones de la aritmética con $fl(x)$ en lugar de x ? Uno de los problemas que se presentan es que las cuatro operaciones no son cerradas en el conjunto de $fl(x)$ con x real. Por ejemplo, en caso de que haya desbordamiento, como cuando se multiplican dos números muy grandes, no podrá llevarse a cabo la operación y la computadora marcará el error de desbordamiento. Aunque pueda llevarla a cabo, el resultado de la operación puede tener mantisa de más

de k dígitos por lo que hay que redondearla. El resultado de las cuatro operaciones en notación punto flotante es de la forma:

$$\begin{aligned}x_{\pm}^+y &\approx fl(fl(x)_{\pm}^+fl(y)), \\x \times y &\approx fl(fl(x) \times fl(y)), \\x/y &\approx fl(fl(x)/fl(y)).\end{aligned}$$

A primera vista, parecería que los errores de redondeo se irán acumulando a medida que se realicen las operaciones. Si así fuera, sería imposible usar una computadora o cualquier otro instrumento de cálculo para aproximar la solución de un problema que involucre un gran número de operaciones. Por fortuna los errores de redondeo se comportan en forma estadística y no determinista; tienen una distribución normal por lo que, en la mayoría de los cálculos, el resultado conserva la misma precisión que la de la computadora.

Sin embargo, en ocasiones, el error de redondeo crece sin parar, deteriorando la precisión de los resultados. Numerosos estudios realizados por Von Neumann, Wilkinson, Forsythe y Henrici entre otros, documentaron ampliamente este fenómeno al que llamaron inestabilidad numérica, ver [6]. Los estudios muestran que este comportamiento no sólo es resultado del número de dígitos de precisión de la computadora, sino también de las características del problema mismo y del algoritmo que se utilice. Uno de los aspectos que debe tomar en cuenta, cualquier persona interesada en aproximar numéricamente la solución de un problema, es qué tan sensible es éste y el algoritmo que va a utilizar al error de redondeo.

La notación en punto flotante era ya estándar a mediados de la década de 1950, pero cada fabricante desarrollaba su propio sistema y, en ocasiones, distintos programas en una misma computadora lo hacían en forma diferente, con resultados desastrosos. En 1985 se aprobó un acuerdo que se conoce por Estándar IEEE, tanto para la notación, como para la aritmética en punto flotante en binario en todas las computadoras que se producían en Estados Unidos. En 1987 se adoptó ese mismo estándar para cualquier base, ya que las calculadoras utilizan base decimal, y en 1989 se adoptó a nivel internacional.

A pesar de la aprobación del estándar IEEE la falta de consistencia entre los distintos softwares y el uso de programas anteriores a la aprobación del acuerdo, han ilustrado recientemente los problemas que provoca un manejo descuidado de la aritmética en punto flotante. Entre los más graves están, en 1996 la autodestrucción del cohete Ariane V; fallas en el sistema de antimisiles Patriot durante la Guerra del Golfo y en 1997, un mal manejo del error de redondeo a nivel de hardware, obligó a Intel a sacar del mercado sus microprocesadores Pentium Pro y Pentium II, con un desplome inmediato en la cotización de sus acciones, ver [16] .



Figura 6: El cohete Ariane V

Problemas bien planteados

No todos los problemas matemáticos pueden ser resueltos con la ayuda de una computadora. El matemático Jacques Hadamar, a principios del siglo XX, precisó las características que debe tener un problema para estar bien planteado: la solución debe existir, aunque sea localmente, ser única, y la solución debe depender en forma continua de los datos.

Si un problema no tiene solución, no tiene sentido aproximarla numéricamente. Por ejemplo, en el caso que se desee calcular una integral divergente. Si la solución no es única, se corre el riesgo de obtener una solución numérica que no aproxime a solución alguna. Por ejemplo, en el caso de que nos interese aproximar la solución de una ecuación diferencial de la forma

$$\begin{aligned}y'(x) &= f(x, y(x)) \quad x \in (0, 1), \\y(0) &= y_0.\end{aligned}$$

Si no se puede garantizar unicidad en $(0, 1)$, puede suceder que para algunos valores de x_i la solución numérica se aproxime a una de las curvas integrales, mientras que para otros valores aproxime a otra curva integral. Al graficar los valores obtenidos, no corresponderán a solución alguna.

Por último, la dependencia continua de la solución respecto a los datos significa que si se modifican éstos un poco, la solución del problema perturbado es muy cercana a la del problema original. ¿De qué manera se decide matemáticamente que dos soluciones se parecen? Este es un problema delicado que hay que precisarlo en cada caso. Para sistemas lineales de ecuaciones se tendrá una definición distinta que para el caso de una ecuación diferencial.

Probar que un problema está bien planteado no es tarea fácil y en algunos casos es todavía un problema abierto a la investigación. Si se sabe de antemano que un problema está bien planteado, es muy probable que la aproximación computacional arroje resultados confiables. Sin embargo, aunque no se cumpla la tercera condición se puede resolver el problema computacionalmente siempre y cuando se usen los algoritmos adecuados. De hecho, mucha de la investigación que se realiza hoy día está relacionada con el estudio de problemas mal planteados como los que aparecen con frecuencia en la solución de problemas inversos.

Algoritmos

A diferencia de otras ramas de la matemática, probar que un problema está bien planteado no es suficiente para el matemático numérico, ya que debe encontrar una forma de aproximar, tanto como quiera, la solución. Generar buenos algoritmos numéricos es un arte. A veces estos son resultado directo de la teoría, pero otras veces se requiere formular de manera distinta el problema; por ejemplo, en lugar de buscar los ceros de una función se buscan los puntos fijos de un problema equivalente.

Así como hay problemas que no son resolubles en una computadora también hay algoritmos cuya implementación computacional no se recomienda debido a su poca eficiencia. La eficiencia de un algoritmo se mide por el número de operaciones numéricas básicas que involucra. Los algoritmos se clasifican según el número de operaciones que requieren realizar para obtener el resultado deseado. Si un problema con n incógnitas requiere n operaciones se dice que es un algoritmo de complejidad lineal, si es de n^s , para un natural s , se dice que es un algoritmo polinomial. Pero algunos algoritmos son de tipo exponencial o factorial, como el cálculo de determinantes, lo que los hace incosteables; entre dos algoritmos con la misma precisión se prefiere aquel que requiera del menor número de operaciones.

Hay algoritmos que en un paso obtienen en principio, si no hubiera error de redondeo, la solución exacta. Mientras que hay otros métodos llamados iterativos, que a partir de una aproximación inicial x_0 , generan una sucesión de valores $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ que

convergen a la solución cuando n tiende a infinito. Estos métodos son en muchos casos la única alternativa para resolver problemas no lineales. La desventaja principal de este tipo de métodos es que la sucesión debe interrumpirse antes de la convergencia, ya que cualquier algoritmo que se implemente en una computadora debe constar de un número finito de pasos. En consecuencia, sólo se genera un número finito de elementos de la sucesión. Esto introduce un error en los cálculos que se busca sea menor o igual a la precisión de la computadora.

Campos de la matemática numérica

El número de líneas de investigación que se trabajan actualmente en la matemática numérica es muy grande y es imposible presentarlas todas en un texto introductorio y de carácter general como éste. Una posibilidad era mencionar a una buena parte de ellas de manera muy somera y con una gran lista de referencias. Para aquellos interesados en conocer una lista completa, consultar el artículo de divulgación de Trefethen, ver [20]. Otra opción era exponer unos cuantos temas de manera más amplia, buscando transmitir en la exposición los aspectos que le interesan al matemático numérico. Se optó por esta última. La selección de temas se hizo tomando en cuenta que estos son algunos de los que más se han trabajado en México: álgebra lineal numérica, solución de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales y optimización.

5 Álgebra lineal numérica

El álgebra lineal numérica es uno de los pilares que sostienen a la matemática numérica y aplicada. Algunos de los temas principales de investigación son la solución de sistemas lineales, la aproximación por mínimos cuadrados lineales y la obtención de vectores y valores propios. Sólo se presenta la solución numérica de sistemas de ecuaciones lineales, los otros temas se pueden consultar en [7].

Una gran cantidad de aplicaciones de la matemática involucran la solución de sistemas lineales por lo que se ha dedicado mucho trabajo y esfuerzo a la obtención de métodos eficientes y confiables para su resolución. Un sistema de ecuaciones lineales de n ecuaciones con n incógnitas es de la forma

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2, \\ &\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n. \end{aligned}$$

Los sistemas lineales aparecen en el cálculo de máximos y mínimos de una función cuadrática de varias variables, en la solución de problemas de optimización lineal con restricciones lineales, en la aproximación de funciones por medio de polinomios de interpolación o por mínimos cuadrados y en la solución numérica de problemas integrales o en derivadas parciales, entre otros. En este último caso implican la solución de miles de sistemas de ecuaciones lineales con miles de variables.



Figura 7: Carl Friedrich Gauss

Hay métodos directos e iterativos. Entre los primeros, el más general es el método de eliminación de Gauss creado por el gran matemático Gauss. El sistema de ecuaciones anterior se puede escribir matricialmente de la forma

$$A\vec{x} = \vec{b}, \quad (1)$$

con A una matriz cuadrada de n renglones con n columnas y \vec{x} y \vec{b} son vectores en R^n . La idea del método de Gauss es la siguiente: transformar el sistema (1) en un sistema triangular superior, ver glosario, por medio de operaciones elementales que son aquellas que no alteran la solución del sistema. La solución del sistema resultante $A'\vec{x} = \vec{b}'$ es más fácil de obtener que la del sistema original, ya que al resolver el sistema de abajo hacia arriba, el problema se reduce a resolver n ecuaciones con una

sola incógnita. Además, el método permite comprobar que la solución es única ya que basta que las $A'_{ii} \neq 0$, para $i = 1, \dots, n$ para que esto se cumpla.

El resto de los métodos directos se basan en la factorización de la matriz A en matrices con estructura más sencilla. Por ejemplo, cuando el sistema se puede transformar a la forma triangular, sin intercambio de renglones, A puede escribirse como producto de dos matrices, es decir $A = LU$, con L una matriz triangular inferior, con unos en la diagonal y U es una matriz triangular superior. Esta factorización da lugar a otros métodos que resuelven de manera más eficiente los sistemas lineales que tienen una estructura especial. Por ejemplo, el método de Cholesky que se usa cuando la matriz asociada es simétrica y positiva definida, ver glosario. Otro aplicación interesante de esta factorización aparece en la solución numérica de ecuaciones en derivadas parciales y que da lugar a la solución de sistemas raros, llamados así porque un buen número de los coeficientes A_{ij} son iguales a cero.

Una de las ventajas de los métodos de factorización es la reducción del número de operaciones necesarias para obtener la solución. El método de eliminación de Gauss requiere de aproximadamente $\frac{n^3}{3}$ operaciones para resolver un sistema de n ecuaciones con n incógnitas, mientras que la factorización de Cholesky necesita la mitad.

¿Qué tan precisa es la solución obtenida por computadora al usar métodos exactos? Para responder esta pregunta se requiere definir con cuidado lo que significa que dos elementos de R^n estén cerca. La forma de hacerlo es a través de una función que se le llama norma. Una norma es una función $\|\cdot\|$ que a cada vector \vec{x} le asocia un real mayor o igual a cero que satisface ciertas propiedades, ver [7]. La norma usual es la euclídeana que se define por $\|\vec{x}\|_2 = [\sum_{i=1}^n x_i^2]^{1/2}$.

Si \vec{x} es la solución del problema original y \vec{x}^* es la solución que se obtiene en la computadora, se puede probar que el error relativo es igual a

$$\frac{\|\vec{x} - \vec{x}^*\|_2}{\|\vec{x}\|_2} \leq C \times 10^{-k}, \quad (2)$$

con k la precisión de la computadora y $C > 0$ una constante que depende del producto de la norma de A y de su inversa. Este producto juega un papel muy importante y se conoce con el nombre de número de condición de la matriz A y se denota por $cond(A)$. Si $cond(A)$ es grande, también C lo es, y se dice que la matriz A está mal condicionada. En este caso, los resultados que se obtengan con el método de eliminación de Gauss, no van a tener la precisión esperada ya que, por cada orden de magnitud que tenga C , se pierde un orden de precisión en los resultados. Esto ha motivado la creación de métodos especiales que no sean tan sensibles a los errores de redondeo como métodos de preconditionamiento, para enterarse más sobre este tema, consultar [7] y [10].

También se usan métodos iterativos para resolver los sistemas lineales de ecuaciones. Hay muchas formas de generar la sucesión. Una clase de métodos iterativos

se basa en la idea de transformar el problema en un problema de punto fijo de una función G , el punto que bajo G va a dar a sí mismo. La sucesión se genera de la siguiente forma: dado \vec{x}_0 , $\vec{x}_{k+1} = G(\vec{x}_k)$. El método de Jacobi, Gauss-Seidel y relajación son algunos ejemplos. Otros métodos iterativos más recientes como gradiente conjugado o GMRES se presentan como buenas alternativas para reducir el error de redondeo y el tiempo de cómputo, cuando el número de ecuaciones es muy grande, ver [10] para más información.

En México han hecho contribuciones a este campo: H. Madrid de la Universidad Autónoma de Coahuila, J. L. Morales del ITAM, M.L. Sandoval de la UAM-Iztapalapa, P. Barrera y J. López E. de la FC y S. Gómez del IIMAS en la UNAM, entre muchos otros.

6 Ecuaciones diferenciales ordinarias

La formulación matemática de muchos problemas de aplicación se hace a través de sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) o parciales (EDP). Ejemplo de los primeros son los problemas de mecánica, de circuitos eléctricos y biológicos en los que la solución sólo depende de una variable que puede ser espacial o temporal. La forma general de un problema de EDO con condiciones iniciales es

$$y'(t) = f(t, y(t)) \quad a < t < b, \quad y(a) = y^*, \quad (3)$$

cuya solución existe y es única si f es continua y Lipschitz en y en el intervalo $[a, b]$.

Una forma de aproximar la solución en un número finito de puntos del intervalo $[a, b]$ la dió Euler; la interpretación geométrica es la siguiente: dado que se conoce el valor de la solución y de su derivada en $t_0 = a$, trazar la recta que pasa por (t_0, y^*) con pendiente $y'(t_0) = f(t_0, y^*)$, la ordenada del punto de intersección de esta recta con la recta $t = t_1$ nos da una aproximación al valor de $y(t_1)$ y así sucesivamente.

Hay muchas formas de seleccionar los puntos t_i , la más sencilla es usar puntos cuya distancia entre dos consecutivos sea la misma: $h = |t_i - t_{i-1}|$. Entonces cada y_i se obtiene por el esquema de Euler de la siguiente forma: dado $N \in \mathcal{N}$, sea $h = (b-a)/N$ y defínanse los siguientes puntos $t_0 = a$, $t_i = a + ih$, para $i = 1, \dots, N$ y si $y_0 = y^*$

$$y_i = y_{i-1} + hf(t_{i-1}, y_{i-1}), \quad i = 1, \dots, N. \quad (4)$$

Otra manera de obtener el método de Euler es por medio de la serie de Taylor lo que permite estimar el error que se comete al aproximar $y(t_i)$ por Euler cuando los valores anteriores $y(t_j)$ con $j = 1, \dots, i-1$ son exactos. Este error se conoce con el nombre de error local del método y es aproximadamente h^2 para Euler. Obsérvese que al aplicar el método, se usa el valor aproximado y_{i-1} para calcular el valor y_i , por lo

que el error se va acumulando a medida que se generen más puntos; a este error se le conoce con el nombre de error global. Se dice que una solución aproximada $\{y_i\}_{i=1}^n$ converge a la solución $y(t)$ si el error global en el punto t_n converge a cero cuando h tiende a cero. Es fácil probar la convergencia del método de Euler cuando la función f es suficientemente regular en el intervalo $[a, b]$.

Métodos más precisos se pueden obtener tomando más términos de la serie de Taylor, pero tienen el inconveniente de que deben existir las derivadas de orden superior de f y, aunque existan, su cálculo puede llegar a ser muy engorroso. Una forma de darle vuelta a esta dificultad, es aproximar las derivadas de orden superior de f por aproximaciones de la serie de Taylor en dos variables, lo que ha dado lugar a los conocidos métodos Runge-Kutta (RK) de distinto orden, el más popular es el de orden cuatro (RK4).

En la Figura 8 se comparan la solución exacta y las aproximadas que se obtienen con Euler y RK4 con $h = 0.05$ para el siguiente problema

$$y'(t) = \frac{y^2 + 2ty}{t^2} \quad 0 < t < 1; \quad y(0.1) = \frac{0.01}{1.9}.$$

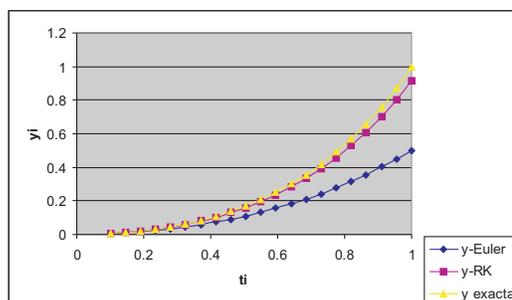


Figura 8: Aproximación por Euler y RK4. La solución exacta es $y(t) = \frac{t^2}{2-t}$ y los valores se han unido por rectas.

Otra alternativa ha sido trabajar con el problema integral que se obtiene al integrar respecto a t ambos lados de la igualdad de la ecuación (3), lo que da lugar a

$$y(t) = y(a) + \int_a^t f(s, y(s)) ds.$$

Al aproximar numéricamente la integral por medio de las fórmula de integración de Newton-Cotes se obtienen distintos métodos conocidos con el nombre de métodos de multipaso. Probar la convergencia tanto de los métodos RK, como los de multipaso no es sencillo. En 1956, Dahlquist demostró que un método es convergente si es

consistente y estable. Consistente significa que el error local $R(t)$ del método va a cero cuando h tiende a cero y es estable si el error global permanece acotado y es del mismo orden que el error local.

Actualmente la investigación sigue abierta en el caso de las ecuaciones diferenciales algebraicas que aparecen en las aplicaciones de la teoría de control y del cálculo de variaciones, ver [2], y en problemas de sistemas dinámicos. En México problemas numéricos en EDO los han trabajado C. Vargas del Cinvestav, F. Solis del CIMAT, R. England, J. López E. y L. Velasco de la FC, entre otros.

6.1 Ecuaciones en derivadas parciales

Los problemas de ecuaciones en derivadas parciales son el fundamento matemático de muchos modelos que se usan en la física, ingeniería, biología y recientemente en la economía y las finanzas. En particular, la mecánica del medio continuo en dos y tres dimensiones se formula matemáticamente por medio de ecuaciones en derivadas parciales (EDP). El estudio de las ecuaciones lineales data del siglo XIX y se puede encontrar una solución analítica para casi todas ellas, cuando están definidas en regiones sencillas del plano y del espacio como rectángulos, cubos, círculos, esferas o cilindros. Cuando la región es más complicada o la ecuación es no lineal, sólo queda aproximar la solución numéricamente.

La solución numérica de las EDP puede obtenerse de muchas formas. Una clase de métodos se obtiene al discretizar tanto la región como las ecuaciones en derivadas parciales para obtener un sistema de ecuaciones en diferencias finitas. Estos métodos son una generalización de los métodos para EDO y, como se mencionó en la parte histórica, se usan desde 1910. A principio de los años sesenta se contaba con una teoría completa para este tipo de métodos para las ecuaciones más importantes de la física matemática. El método de Crank-Nicholson es el más popular para problemas parabólicos y el de upwind y Lax-Wendroff para sistemas hiperbólicos lineales.

El principal inconveniente de los métodos de diferencias finitas es que no se adaptan bien a problemas definidos en regiones con fronteras curvas. En los años cincuenta, apareció en la literatura de ingeniería civil y mecánica la utilización del método de elemento finito. Este método tienen sus antecedentes en los trabajos de Alexander Hrennikoff y de Richard Courant a inicios de 1940. Su fundamento matemático es complementemente distinto al de los métodos en diferencias finitas y se basa en varios resultados del análisis funcional y de las EDP desarrolladas previamente por Rayleigh, Ritz y Galerkin. Este procedimiento ha sido muy exitoso en la aproximación numérica de la solución de ecuaciones elípticas y parabólicas en dos y tres dimensiones, en particular en la solución de problemas de mecánica de fluidos o de convección difusión. En la Figura 9 se muestra los resultados numéricos del estudio de la sedimentación de partículas rígidas en un fluido incompresible realizado con el método de elemento

finito; las flechas indican la velocidad del fluido y los colores la presión del mismo. En el caso de los sistemas hiperbólicos como la ecuación de onda, se usan métodos en diferencias finitas especialmente diseñados para adaptarse a soluciones con saltos o con ondas de choque como en los problemas de flujo supersónico. Para conocer más sobre este tema, ver [14] y [4].

A continuación se mencionan algunos grupos y personas de los muchos que han trabajado en este campo en México. Entre los investigadores de la UNAM se cuentan a G. Alduncin y al grupo de I. Herrera en el Instituto de Geofísica; en Ciencias de la Atmósfera el grupo de modelos climáticos de J. Adem y el grupo de modelación atmosférica de Y. Skiba; en el Instituto de Ingeniería F. J. Sánchez Sesma, G. Ayala y M. Chávez, entre muchos otros. En el IIMAS trabajó en métodos nodales J.P. Hennart, F. Sabina en mecánica de sólidos, A. Minzoni en ondas y también hay que mencionar las contribuciones de B. Chen mientras trabajó en México; en DGSCA P. Gonzáles Casanova estudia los métodos radiales, mientras que P. Barrera de la FC se ha dedicado al estudio de la generación automática de mallas en dos dimensiones mientras que L. Esteva ha trabajado en aplicaciones a biomatemáticas. En el Departamento de Matemáticas de la UAM-Iztapalapa E. Baez, H. Juárez, A. Nicolás, P. Saavedra y F. Sánchez han aplicado diversos métodos en diferencias finitas y elemento finito a problemas de flujo en medios porosos, mecánica de fluidos, contaminación atmosférica, finanzas y tráfico vehicular. En el Cinvestav C. Vargas ha hecho contribuciones en aplicaciones a biomatemáticas; en el Cimat el grupo de J.L. Moreles han trabajado en varios problemas de la industria eléctrica como también en dispersión de ondas; en la BUAP el grupo de A. Fragueta se dedica a la solución teórica y numérica de problemas inversos; F. Castillo del ITESM-Estado de México se dedica a problemas de aplicación a ingeniería y en el IMTA el grupo de A. Aldama trabaja en métodos numéricos aplicados a la hidrología.

7 Optimización

Optimizar recursos, minimizar costos y maximizar beneficios son cuestiones que siempre están presentes en el desarrollo de nuevas tecnologías y en las ciencias económico-administrativas. Se llaman problemas de optimización aquellos en los que se busca determinar una solución óptima. Los problemas reales involucran miles de variables, por lo que difícilmente se pueden resolver sin el uso de una computadora.

La clasificación de los problemas de optimización puede ser muy amplia aunque nos limitaremos al caso en que la función F a optimizar, llamada función objetivo, sea lo suficientemente regular para usar el cálculo diferencial. Si la solución se busca en todo R^n se dice que el problema es sin restricciones; en este caso el procedimiento a seguir es directo. Se buscan primero los puntos en los que las derivadas parciales se hacen

cero, llamados puntos críticos, y posteriormente se comprueba si son un máximo o un mínimo. Esto implica resolver un sistema no lineal, de n ecuaciones con n incógnitas. En la mayoría de los casos es un problema difícil ya que es poco probable que se pueda obtener una solución explícita. La única alternativa es aproximar la solución en forma numérica a través de métodos iterativos como el método de Newton.

En la solución numérica se prefiere trabajar directamente con el problema de optimización en lugar de resolver el sistema no lineal ya que este enfoque permite usar la información del gradiente de la función: $\vec{\nabla} F$, ver glosario, para acercarse más rápido a la solución. Todos los métodos son de tipo iterativo, el más sencillo es el de máximo descenso; la idea detrás de este procedimiento es muy geométrica: supóngase que se busca el mínimo de una función y se toma como punto inicial a \vec{x}_0 , como $\vec{d}_0 = -\vec{\nabla} F(x_0)$ es la dirección en la que disminuye más el valor de la función F , se traza la recta que pasa por \vec{x}_0 con dirección \vec{d}_0 y se determina el punto, a lo largo de esta recta, en el que F toma el valor más pequeño. Este punto $x_1 = \vec{x}_0 + t^* \vec{d}_0$ se escoge como el siguiente punto de la iteración y se repite el proceso hasta que la norma del gradiente en el punto \vec{x}_i sea menor que una tolerancia dada, lo que implica, en principio, que \vec{x}_i es una buena aproximación a la solución.

Para seleccionar un método iterativo se compara costo, número de operaciones, y rapidez de convergencia. Se dice que un método iterativo converge con orden p , si el error absoluto en la i -ésima iteración satisface que $e_i \leq K e_{i-1}^p$, con $K > 0$. El método de descenso pronunciado es de orden uno, por lo que el método es lento pero barato porque sólo requiere de la evaluación del gradiente en cada iteración. Una alternativa más rápida, con convergencia cuadrática, es el método de Newton que es una adaptación del método de Newton-Raphson para resolver ecuaciones no lineales. Para problemas cuadráticos, Newton converge en una iteración. El procedimiento es similar al de descenso pronunciado con la diferencia que el vector dirección se obtiene al resolver en cada iteración un sistema de ecuaciones lineales, cuya matriz asociada es la matriz Hessiana de F , ver glosario. Como puede observarse el costo de cada iteración de Newton es alto, pues hay que evaluar tanto el gradiente como la matriz Hessiana en cada iteración. Para conocer más sobre optimización sin restricciones se sugiere la lectura de [15], uno de los autores es mexicano y se ha distinguido por sus contribuciones a este campo.

Hay que mencionar que en los últimos años han aparecido otras técnicas de tipo heurístico como los algoritmos genéticos que compiten en algunos casos con los métodos aquí mencionados. Un método es heurístico cuando no se puede garantizar de antemano la convergencia al óptimo, pero cuyo desempeño ha dado prueba de su efectividad.

Optimización con restricciones

Otro tipo de problemas de optimización son aquellos en los que se da un conjunto Ω y se desea determinar los puntos de Ω en los que F alcanza su valor máximo o mínimo. Por lo general Ω está definido por un conjunto de restricciones expresadas en forma de ecuaciones: $g_i(x) = 0$ o de desigualdades $g_i(x) \leq 0$ para $i = 1, \dots, m$. A estos problemas se les conoce como problemas de optimización con restricciones. Si F y g_i son lineales se tiene un problema de programación lineal. Desde 1947, se conoce un método iterativo para resolverlo que es el método simplex creado por Dantzig. Este método fue el campeón por muchos años hasta que Karmarkar, en 1984, creara un método muy distinto; sin embargo hasta ahora no se ha podido demostrar la superioridad de uno sobre el otro.

Cuando tanto la función objetivo F como las restricciones g_i son no lineales y éstas son ecuaciones se puede aplicar el método de multiplicadores de Lagrange para obtener un sistema de ecuaciones no lineales de $n + m$ variables. En caso de que las g_i sean desigualdades, no se cuenta con un método que sea la panacea; se tiene, en cambio, métodos ad-hoc que aprovechan las características del conjunto Ω , y las de la función objetivo. Entre los métodos de carácter general más populares están el de gradiente proyectado, gradiente reducido generalizado, los métodos de penalización y el método cuadrático secuencial. Para saber más, consultar [13].

Hay otros problemas de optimización igualmente importantes, pero que, por falta de espacio, no se incluyen. Problemas de cálculo de variaciones en los que la función objetivo es un funcional; por ejemplo, una integral y el mínimo es una función que pertenece a un espacio de dimensión infinita. Otros problemas aparecen en teoría de control. Para saber más, consultar [17].

En México han trabajado problemas de optimización: I. Gitler del Cinvestav, G. Calvillo, Z. Parada del ITAM y C. Gigola e I. Romero de la ESFM del I.P.N.; J. Goddard, M. A. Gutierrez, S. de Los Cobos y B. Pérez en la UAM-Iztapalapa y C. Barrón en la UAM-Cuajimalpa. En la UNAM, los grupos de P. Barrera y J. López E. de la FC, D. Romero del IM, A. Velasco Levy, S. Gómez y Luís Morales del IIMAS; R. Ríos de la UANL y P. Flores de UNISON, entre otros.

8 Perspectivas a futuro

Es difícil prever de antemano el futuro de un campo cuyo avance depende tanto del desarrollo tecnológico; nuevos problemas aparecerán conforme se creen nuevas tecnologías. En 1950, nadie podía imaginar el papel que desempeñan, en la vida cotidiana de hoy en día, las computadoras y los instrumentos electrónicos. Sin embargo, es de esperarse que el cambio climático, la astronomía, que continúa siendo

una fuente inagotable de problemas abiertos y el desarrollo de nuevos materiales, entre otros muchos temas, demanden de métodos numéricos más rápidos y más precisos que aprovechen el creciente incremento de capacidad computacional. Asimismo, se espera que la modelación matemática y la matemática numérica se vuelvan herramientas indispensables en la biología, la farmacología y la medicina y que ayuden, entre otras cosas, al desarrollo de nuevos medicamentos y hacer una realidad el diagnóstico médico computarizado.

Uno de los aspectos que está cambiando en la matemática numérica es que cada vez es más frecuente que para resolver un mismo problema se usen técnicas híbridas que combinan algoritmos deterministas con estocásticos; hasta hace poco, los investigadores se especializaban en sólo uno de estos enfoques, pero ahora en varios campos como las finanzas, el estudio de la turbulencia, del tráfico vehicular o la dinámica de poblaciones se usan ambas metodologías. Esta tendencia se generalizará en otros temas, lo que exigirá una formación más amplia y flexible por parte del matemático numérico.

Otros aspectos importantes en los que se hará más énfasis en el futuro en el diseño de algoritmos son la paralelización y la adaptabilidad. Lo primero implica que a nivel de programación se explote, al cien por ciento, la posibilidad de realizar distintas tareas al mismo tiempo con distintos procesadores; la adaptabilidad implica que un algoritmo sea capaz de ajustar el valor de sus parámetros dependiendo de lo que mejor convenga al tipo de problema que se está resolviendo. Cada vez más, los paquetes computacionales que tienen éxito son aquellos que tienen mayor aplicabilidad y capacidad de adaptarse automáticamente a los requerimientos de cada problema con el fin de aproximar la solución de la manera más precisa en el menor tiempo posible.

Por último, es de esperarse, que a medida que sigan evolucionando los instrumentos de cálculo y el grado de complejidad de los problemas a resolver, seguirán ampliándose los campos de acción de la matemática numérica.

9 Glosario

1. Número de condición de una matriz cuadrada invertible se define por: $cond(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$, con $\|A\|_2$ igual a la raíz cuadrada del valor propio más grande en valor absoluto de la matriz $A^t A$.
2. Diagonal de una matriz: los elementos A_{ii} , con $i = 1, \dots, n$, de una matriz cuadrada.
3. Función Lipschitz. Una función f es Lipschitz en el conjunto $[a, b]$ si existe un real $L > 0$ tal que para cualquier $x, y \in [a, b]$

$$|f(x) - f(y)| \leq L|x - y|.$$

4. $\nabla F(x_0) = \left(\frac{\partial F(x_0)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial F(x_0)}{\partial x_n} \right)$.
5. Inversa de una matriz: Dada una matriz cuadrada A , la matriz inversa de A se denota por A^{-1} y es la matriz que satisface: $AA^{-1} = A^{-1}A = I$ con I la matriz identidad.
6. Matriz Hessiana H : Matriz cuyo elemento $H_{ij} = \frac{\partial^2 F}{\partial x_i \partial x_j}$.
7. Matriz identidad: es una matriz cuadrada con unos en la diagonal y cero en el resto de los elementos.
8. Matriz simétrica es una matriz que es igual a su transpuesta.
9. Matriz positiva definida es aquella que satisface $x^t A x > 0$ para todo vector $x \neq 0$.
10. Matriz triangular superior: una matriz cuadrada cuyos elementos abajo de la diagonal son cero. Matriz triangular inferior: una matriz cuadrada cuyos elementos arriba de la diagonal son cero.
11. R^n : es el conjunto de vectores con n componentes en los reales.
12. La matriz transpuesta de una matriz A se denota por A^t y $A_{ij}^t = A_{ji}$, para $i, j = 1, \dots, n$.

References

- [1] P. Barrera, V. Hernández y C. Durán. El ABC de los splines. Aportaciones Matemáticas. Textos No. 9. Publicaciones SMM. 1996.
- [2] K.E. Brenan, S.L. Campbell y L.R. Petzold. Numerical Solution of Initial Value Problems in Differential Algebraic Equations. Classics in Applied Mathematics. 14. SIAM. 1996.
- [3] J.P. Collette. Historia de las matemáticas I y II. Tercera edición. Siglo XXI Editores. 1998.
- [4] P. G. Ciarlet. The Finite Element Method for Elliptic Problems. North-Holland. 1978.
- [5] J. Demmel. Applied Numerical Linear Algebra. SIAM. 1997.
- [6] G.E. Forsythe. Pitfalls in computation, or why a math book isn't enough. The American Monthly, Vol. 77, No. 9. 931-956. 1970.

- [7] G. Golub y C. Van Loan. *Matrix Computations*. Tercera edición. John Hopkins University Press. 1996.
- [8] H. Goldstein. *A History of Numerical Analysis: From 16th through 19th Century*. Springer Verlag. 1977.
- [9] H. Goldstein y J. V. Neumann. On the principles of large scale computing machines. *Proceedings of the Summer Research Institute on the Legacy of John Von Neumann*. Vol 50, AMS. 1990.
- [10] A. Greenbaum. *Iterative Methods for Solving Linear Systems*. SIAM. 1997.
- [11] D.B. Hernández. *Análisis Numérico*. III Coloquio del Departamento de Matemáticas del Cinvestav. 1983.
- [12] H. Madrid. El álgebra lineal numérica del PageRank de Goggle. *Memorias de la Sociedad Matemática de México 2006*. Aportaciones Matemáticas. Comunicaciones 36. 33-52. 2006.
- [13] J.M. Martinez y S. A. Santos. *Metodos Computacionais de Optimizacao*. Notas del curso impartido en el 20 Coloquio Brasileiro de Matemáticas. IMPA. 1995.
- [14] K. W. Morton y D.F. Mayers. *Numerical Solution of Partial Differential Equations*. Second Edition. Cambridge University Press. 2005.
- [15] Nocedal, J. y S.W. Wright. *Numerical Optimization*. Springer. 1999.
- [16] M. Overton. *Cómputo numérico con aritmética en punto flotante IEEE*. Aportaciones Matemáticas. Textos Nivel Medio. Num. 19. SIAM y SMM. 2002.
- [17] D.A. Pierre. *Optimization Theory with Applications*. Dover. Second Edition. 1986.
- [18] C. Vargas. *Solución numérica de ecuaciones diferenciales*. IV Coloquio del Departamento de Matemáticas del Cinvestav. 1985.
- [19] E. Trabulse. *Historia de la ciencia en México*. Fondo de Cultura Económica. 1997.
- [20] L.N. Trefethen. *Numerical Analysis*. 2006 (por aparecer en el *Princeton Companion to Mathematics*. Editado por T. Gowers y J. Barrow-Green y publicado por Princeton University Press).

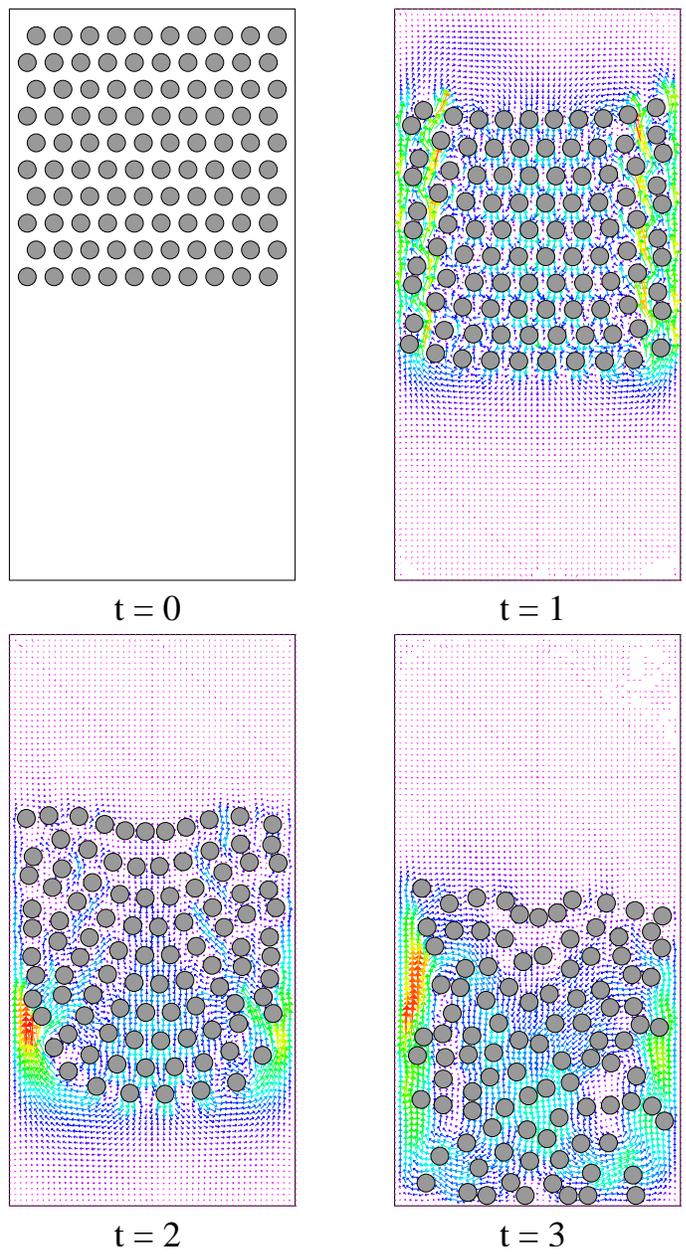


Figura 9: Sedimentación de 100 partículas rígidas en un fluido viscoso incompresible.
Cortesía de H. Juárez