PRACTICA 5

Diferenciación e integración numérica.

Diferenciación numérica. Sea f una función suave sobre un intervalo[1]. En un punto a de dicho intervalo, la derivada de f puede ser estimada a partir del cociente incremental

$$f'(a) \simeq \frac{f(a+h) - f(a)}{h},$$

para valores pequeños de h. Tal aproximación es conocida como *fórmula de diferencia progresiva* (si $h > 0$) o *regresiva* si ($h < 0$).

Ejercicio 1. Mostrar que el error de truncamiento de la fórmula de diferencia anterior está dado por

$$\mathrm{E}(f) = -\frac{h}{2} f^{(2)}(\xi),$$

para algún ξ entre a y $a+h$.

Ejercicio 2. Mostrar que la *fórmula de diferencia centrada*

$$f'(a) \simeq \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h},$$

tiene un término de error

$$\mathrm{E}(f) = -\frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi),$$

donde ξ se encuentra entre $a-h$ y $a+h$, y por lo tanto constituye una mejor aproximación que la fórmula anterior.

Ejercicio 3. Compute, con precisión simple, la aproximación de $f'(0.1)$ para $f(x) = \sin(x)$ utilizando la fórmula de diferencia centrada con diferentes valores de h. Comience con $h = 10$ y reduzca sucesivamente el paso a la décima parte del paso anterior, procediendo de esta manera por lo menos quince veces. Imprima para cada h el valor estimado de la derivada y el error cometido. Comente los resultados obtenidos. ¿A qué se debe lo observado? ¿Cual parece ser el rango del valor apropiado para h? Repita el procedimiento, pero ahora con precisión doble y efectuando la división del paso h al menos veinticinco veces.

Ejercicio 4. Mostrar que si los errores de redondeo por la utilización de aritmética finita en la evaluación de f están acotados por algún $\delta > 0$ y la derivada tercera de f está acotada por $M > 0$, entonces

$$\left| f'(a) - \frac{\hat{f}(a+h) - \hat{f}(a-h)}{2h} \right| \leq \frac{\delta}{h} + \frac{h^2}{6} M,$$

donde $\hat{f}$ denota la evaluación de f en aritmética finita. Mientras que el error de truncamiento, $(h^2/6)M$, decrece conforme h disminuye, el error debido al redondeo, δ/h, se incrementa confome h disminuye. Claramente, para h suficientemente pequeño, el error debido al redondeo dominará al error de truncamiento, convirtiéndose en la fuente principal de error. Mostrar que el valor *óptimo* de h, definido como el valor de h para el cual la suma de las magnitudes del error de redondeo y truncamiento se minimizan, puede ser estimado como

$$h_{\text{óptimo}} = \sqrt[3]{\frac{3\delta}{M}}.$$

Calcular el valor óptimo de h para el ejercicio anterior y comparar con los resultados obtenidos.

Ejercicio 5. Mostrar que $f''(a)$ puede ser aproximada por la fórmula de diferencias

$$f''(a) \simeq \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2},$$

con un término de error dado por

$$\mathrm{E}(f) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi),$$

donde ξ se encuentra entre $a-h$ y $a+h$.

Fórmulas elementales de integración numérica. Sea f una función suave sobre el intervalo cerrado $[a, b]$, el cual es subdividido en n subintervalos de longitud $h = (b-a)/n$ por los puntos equipaciados

$$x_0 \equiv a, \quad x_n \equiv b, \quad x_i = x_0 + ih \quad i = 0, 1, \ldots, n.$$

Se tienen entonces las siguientes *reglas de integración* con sus respectivos términos de error (siendo ξ un punto del intervalo (a, b)),

Regla del rectángulo

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1}) + \frac{h(b-a)}{2} f'(\xi).$$

Regla del trapecio

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}\left(f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right) - \frac{h^2(b-a)}{12} f''(\xi).$$

Regla de Simpson

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + f(x_n) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{m} f(x_{2j-1}) \right) - \frac{h^4(b-a)}{180} f^{(4)}(\xi),$$

siendo $n = 2m$.

[1] Por *suave* queremos decir que las derivadas de hasta orden $n \geq 1$ de f son continuas sobre el intervalo, donde el orden n depende del contexto del problema.

Ejercicio 6. Indicar cual es el *grado de exactitud* o *precisión* de las reglas de integración anteriores, esto es, el entero n no negativo tal que la regla de integración es exacta para todo los polinomios de grado menor o igual que n.

Ejercicio 7. Implementar los métodos anteriores como funciones Fortran. Notar que, en la implementación, sólo los valores $y_i = f(x_i)$ son necesarios.

Ejercicio 8. Estimar

$$\int_0^{\pi} \sin(x)\,\mathrm{d}x,$$

con paso $h = \pi/10$ utilizando las subrutinas implementadas en el punto anterior. Compare los resultados obtenidos. ¿Cuál debería ser, para cada método, el número n de nodos necesario para garantizar que el error en la estimación correspondiente de la integral sea, a lo más, 2×10^{-5}?

Cuadratura de Gauss-Legendre. Si $x_1, x_2, \ldots, x_n$ son las n raíces del *polinomio de Legendre* de grado n, la *fórmula de cuadratura de Gauss-Legendre de n puntos* para estimar la integral de una función f sobre el intervalo $[-1, 1]$ está dada por

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \simeq \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i),$$

donde

$$A_i = \int_{-1}^{1} \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}\,\mathrm{d}x,$$

y el error de truncamiento está dado por $\mathrm{E}(f) = c_n f^{(2n)}(\xi)$ donde ξ es un punto del intervalo $(-1, 1)$ y c_n es una constante. Tal fórmula es exacta para todo polinomio de grado $\leq 2n - 1$.

Ejercicio 9. Mostrar que la fórmula de Gauss-Legendre de *dos puntos* es

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \simeq f(-1/\sqrt{3}) + f(1/\sqrt{3}),$$

y su término de error es $\mathrm{E}(f) = \frac{1}{135} f^{(4)}(\xi)$. (*Ayuda:* Recordar que $P_2(x) = \frac{3}{2}(x^2 - \frac{1}{3})$. Además utilizando el hecho de que la fórmula debe ser exacta para todo polinomio de grado menor o igual que 3 determinar los coeficientes A_1 y A_2, vía el *método de los coeficientes indeterminados*, aplicando la fórmula a $f(x) = 1$ y $f(x) = x$. Finalmente el coeficiente c_2 del término del error puede ser determinado calculando el error de truncamiento para $f(x) = x^4$).

Ejercicio 10. Mostrar que, si $b > a$, al efectuar el cambio de variable $t = \dfrac{2x - (b + a)}{(b - a)}$,

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-1}^{1} \phi(t)\,\mathrm{d}t,$$

donde

$$\phi(t) = \frac{1}{2}(b - a) f\left(\frac{1}{2}(b - a)\,t + \frac{1}{2}(b + a)\right)$$

Esto permite calcular la integral dada por las fórmulas de Gauss-Legendre.

Ejercicio 11. Implemente un programa Fortran para la evaluación de $\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$ por el método de Gauss-Legendre de seis puntos. Los nodos y coeficientes correspondientes son dados en la siguiente tabla.

x_i	A_i
± 0.9324695142	0.1713244924
± 0.6612093865	0.3607615730
± 0.2386191861	0.4679139346

Ejercicio 12. Utilice el programa anterior para estimar

$$\int_1^{1.5} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x.$$

Integrales impropias. Para resolver una integral impropia numéricamente, debemos transformarla a integrales que podamos resolver. Un método es subdividir el intervalo de integración en varios subintervalos, por ejemplo,

$$\int_0^{\infty} f(x)\,dx = \int_0^{r_1} f(x)\,dx = \int_{r_1}^{r_2} f(x)\,dx = ...$$

Vamos resolviendo cada integral y las vamos sumando hasta encontrar,

$$\left|\int_{r_i}^{r_{i+1}} f(x)\,dx\right| < \varepsilon$$

Este método sirve para muchas funciones, pero se corre el riesgo de estar resolviendo integrales que en realidad son divergentes.

Un método mejor es realizar un cambio de variables de forma tal que el intervalo de integración sea acotado. Por ejemplo, realizando la sustitución $y = e^{-x}$, tendremos,

$$\int_0^{\infty} f(x)\,dx = \int_0^1 \frac{f(-\ln y)}{y}\,dy = \int_0^1 \frac{g(y)}{y}\,dy$$

Existen varias sustituciones que modifican los intervalos de integración semi- o infinitos a intervalos finitos, y cual usemos dependerá del problema que estemos resolviendo.

Ejercicio 13. Utilizando cuadratura de Gauss-Legendre y la sustitución $t = 1/x$, resolver la integral,

$$\int_0^{\infty} \frac{dx}{(1 + x^2)^3}$$

Para que la sustitución pueda se usada, descomponer la integral en la suma de dos integrales, una en el intervalo $[0,1]$ y la otra en el intervalo $(1,\infty)$. La primera se resuelve sin usar el cambio de variable, mientras que en la segunda si debe utilizarse. Observar que el intervalo $(1,\infty)$, se transforma en el intervalo $(1,0)$ utilizando este cambio de variable.