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 formula 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

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

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

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

Compare el resultado con el valor que se obtiene al aplicar el método de Romberg.