Introducció a la Computació Científica

Semestre Tardor 2016 - Prova parcial del 22 de desembre

Cada apartat compta 2 punts sobre 10. Escriu cada exercici en fulls separats.

Considera en tota la prova la funció $f(x) = x \ln x - 1$ a l'interval $[1, 2]$

Exercici 1 [Zeros de funcions i interpolació d'Hermite]

(a) Demostra que $f(x)$ té un únic zero α en l'interval $[1, 2]$. Justifica quin dels mètodes iteratius següents és localment convergent a α i quin no:

$$x_{k+1} = e^{1/x_k} \ , \quad x_{k+1} = 1/\ln x_k \ .$$

(b) A partir de l'aproximació $x_0 = 2$, fes 5 iteracions amb cada mètode iteratiu i 5 iteracions del mètode de Newton, i discuteix com s'aproximen els iterats a $\alpha = 1.7632228343518968$ en cada cas, analitzant el comportament de les tres successions d'errors.

(c) Troba el polinomi d'interpolació d'Hermite $H_3(y)$ de grau 3 que interpola la funció inversa $h(y)$ de $f(x) = x \ln x - 1$ i la seva derivada $h'(y) = 1/f'(h(y)) = 1/(1 + \ln h(y))$ en $y_0 = f(1)$ i $y_1 = f(2)$; això és, que interpola les dades de la taula:

y	$h(y)$	$h'(y)$
-1	1	1
$2\ln 2 - 1$	2	$1/(\ln 2 + 1)$

.

Aproxima α per $H_3(0)$ i troba l'error en l'aproximació.

Exercici 2 [Derivació i integració numèriques]

(a) Aproxima la derivada de $f(x)$ en el seu zero α, donat en l'Exercici 1, amb la fórmula centrada

$$Df(\alpha, h) = \frac{f(\alpha + h) - f(\alpha - h)}{2h} \ ,$$

amb passos $h = 10^{-5}$, $h = 10^{-10}$ i compara les dues aproximacions obtingudes amb el resultat exacte $f'(\alpha)$. Comenta els resultats.

(b) Aproxima la integral

$$I = \int_1^2 (x \ln x - 1)dx = -0.363705638880109$$

per la regla (fórmula composta) de Simpson $S_0(h) = S(h)$ amb passos $h = 1/4 = 0.25$ i $1/8 = 0.125$. Calcula el seu error comparant amb el valor d'I donat.

(c) Fent servir que

$$S_0(h) = I + a_0 h^4 + \ldots \ (a_0 \neq 0) \ ,$$

escriu (sense deduir-la) la fórmula d'extrapolació $S_1(h, 2h)$ apropiada i utilitza-la per trobar el valor extrapolat $S_1(0.125, 0.25)$. Calcula el seu error comparant-la amb el valor exacte I donat i digues en quin factor s'ha reduït l'error de $S_0(0.125)$.

Exercici 1

Idees per a la solució.

(a) La funció $f(x)$ és creixent a $[1,2]$ ja que la derivada $f'(x) = 1 + \ln x$ és positiva. Pot tenir com a màxim un zero en l'interval. Com és negativa en 1 i positiva en 2, té efectivament un únic zero en l'interval.

(b) Considerem

$$g_1(x) = e^{1/x} \ , \quad g_2(x) = 1/\ln x \ .$$

La solució α de l'equació és un punt fix de g_1 i g_2:

$$\alpha \ln \alpha = 1 \ : \quad \alpha = 1/\ln \alpha \ , \quad \alpha = e^{1/\alpha} \ .$$

La convergència local depèn de la derivada de la funció d'iteració en α.

$$|g_1'(\alpha) \ = e^{1/\alpha} 1/\alpha^2 = 1/\alpha < 1 \ , \quad |g_2'(\alpha)| = 1/\ln^2(\alpha) 1\alpha = \alpha > 1 \ .$$

El primer mètode iteratiu és convergent i l'altre, divergent.

Els 5 primers iterats són:

$$x_0 = 2 \ , \quad x_1 = 1.64872 \ , \quad x_2 = 1.83405 \ , \quad x_3 = 1.72502 \ , \quad x_4 = 1.78551 \ , \quad x_5 = 1.75079 \ .$$

$$x_0 = 2 \ , \quad x_1 = 1.4427 \ , \quad x_2 = 2.7284 \ , \quad x_3 = 0.9963 \ , \quad x_4 = -269.2!!.$$

El mètode de Newton

$$x_0 = 2 \ , \quad x_{k+1} = x_k - \frac{x_k \ln x_k - 1}{\ln x_k + 1} = \frac{x_k + 1}{\ln x_k + 1} \ .$$

i els 5 primers iterats són:

$$x_0 = 2 \ , \quad x_1 = 1.7718483274489236 \ , \quad x_2 = 1.7632362113366400 \ , \quad x_3 = 1.7632228343842757 \ ,$$
$$x_4 = 1.7632228343518968 \ , \quad x_5 = 1.7632228343518968 \ .$$

(c) La taula de diferències dividides generalitzades resulta ser

$$\begin{array}{r|lccc}
y_0 = -1 & h(y_0) = 1 & & & \\
 & & h[y_0, y_0] = h_0' = 1 & & \\
y_0 = -1 & h(y_0) = 1 & & -0.201005 & \\
 & & h[y_0, y_1] = 0.721348 & & 0.076969 \\
y_1 = 2\ln 2 - 1 = 0.386294 & h(y_1) = 2 & & -0.0943028 & \\
 & & h[y_1, y_1] = h_1' = 1/(\ln 2 + 1) = 0.590616 & & \\
y_1 = 2\ln 2 - 1 = 0.386294 & h(y_1) = 2 & & &
\end{array}$$

i permet trobar el polinomi d'interpolació d'Hermite en y_0, y_1:

$$H_3(y) = h(y_0) + h[y_0, y_0](y - y_0) + h[y_0, y_0, y_1](y - y_0)^2 + h[y_0, y_0, y_1, y_1](y - y_0)^2(y - y_1) \ .$$
$$= 1 + 1(y + 1) - 0.201005(y + 1)^2 + 0.076970(y + 1)^2(y - 0.386294)$$

L'aproximació d'α resulta ser:

$$H_3(0) = 1 + 1 - 0.201005 + 0.076970(-0.386294) = 1.76926 \ .$$

que té un error aproximat de 0.006.

Exercici 2

Idees per a la solució.

(a) La fórmula de derivació amb els passos $h = 10^{-5}, 10^{-10}$ dóna:

$$Df(\alpha, 10^{-5}) = 1.5671432904096336 \ , \quad Df(\alpha, 10^{-10}) = 1.5671432904096336 \ .$$

La derivada exacta és $f'(\alpha) = 1 + \ln \alpha = 1 + 1/\alpha = 1.5671432904097840$.

$$Df(\alpha, 10^{-5}) - f'(\alpha) = -0.0000000000001503 \ , \quad Df(\alpha, 10^{-10}) - f'(\alpha) = 0.0000003466725405 \ .$$

L'aproximació de la derivada amb pas més petit és pitjor pels efectes produïts per la cancel·lació en el numerador de la fórmula.

(b) Les fórmules compostes de Simpson per a $h = 0.25$ i $h = 0.125$ donen:

$$S(0.25) = \frac{0.25}{3}[f(1) + 4f(1.25) + 2f(1.5) + 4f(1.75) + f(2)) = -0.36369017020 \ .$$

$$S(0.125) = \frac{0.125}{3}[f(1)+4f(1.125)+2f(1.25)+4f(1.375)+2f(1.5)+4f(1.625)+2f(1.75)+4f(1.875)+f(2)]$$
$$= -0.36370463536 \ .$$

L'error de $S(0.25)$ és aproximadament $1.55 \cdot 10^{-5}$ i el de $S(0.125)$, aproximadament $1.00 \cdot 10^{-6}$: unes 16 vegades més petita, cosa raonable perquè l'error de Simpson és proporcional a h^4.

(c) El valor extrapolat seria:

$$S(0.125, 0.25) = S(0.125) + \frac{S(0.125) - S(0.25)}{15} = -0.36370559970 \ .$$

L'error de $S(0.125, 0.25)$ és aproximadament $3.9 \cdot 10{-}8$, unes 25 vegades més petit.