Introducció a la Computació Científica

Semestre Tardor 2015 - Prova parcial del 17 de desembre

CADA APARTAT COMPTA 2 PUNTS SOBRE 10. ESCRIU CADA EXERCICI EN FULLS SEPARATS.

Exercici 1 (a) Troba el polinomi de Taylor $T_3(x)$ de grau 3 de la funció $f(x) = e^{-x^2}$ en $x_0 = 0$, que interpola la funció i les derivades fins a ordre 3: $f'(x) = -2xe^{-x^2}$, $f''(x) = (4x^2 - 2)e^{-x^2}$, $f'''(x) = (-8x^3 + 12x)e^{-x^2}$, en $x_0 = 0$; això és, que interpola les dades de la taula:

x	$f(x)$	$f'(x)$	$f''(x)$	$f'''(x)$
0	1	0	-2	0

(b) Troba el polinomi d'interpolació d'Hermite $H_3(x)$ de grau 3 que interpola la funció $f(x) = e^{-x^2}$ i la seva derivada $f'(x) = -2xe^{-x^2}$ en $x_0 = 0$ i $x_1 = 1$; això és, que interpola les dades de la taula:

x	$f(x)$	$f'(x)$
0	1	0
1	$1/e$	$-2/e$

(c) Troba els errors màxims d'aquests dos polinomis en aproximar $f(x) = e^{-x^2}$ a l'interval $[0, 1]$:

$$\max_{x\in[0,1]} |f(x) - T_3(x)| \ , \quad \max_{x\in[0,1]} |f(x) - H_3(x)| \ .$$

Per això:

- per a $f(x) - T_3(x)$, demostra que és creixent a l'interval $[0, 1]$,
- per a $f(x) - H_3(x)$, calcula el seu únic mínim relatiu x_m (prop de 0.8) i el seu únic màxim relatiu x_M (prop de 0.3), en els quals s'anul·la la seva derivada: $f'(x_m) - H_3'(x_m) = 0$, $f'(x_M) - H_3'(x_M) = 0$.

Exercici 2 Es considera la funció $f(x) = e^{-x^2}$ a l'interval $[0, 1]$.

(a) Es vol aproximar $f'(0.5)$ mitjançant la fórmula centrada

$$f'(0.5) \approx F_0(h) = \frac{f(0.5 + h) - f(0.5 - h)}{2h} \ .$$

Troba les aproximacions donades per la fórmula fent servir el passos $h_1 = 0.01$ i $h_2 = 0.02$. Calcula el seus errors comparant-les amb el valor exacte $f'(0.5)$.

(b) Fent servir que $F_0(h) = f'(0.5) + a_0h^2 + \ldots \ (a_0 \neq 0)$, escriu (sense deduir-la) la fórmula d'extrapolació $F_1[h] = F_1(h, 2h)$ apropiada i utilitza-la per trobar l'aproximació $F_1[0.01] = F_1(0.01, 0.02)$. Calcula el seu error comparant-la amb el valor exacte $f'(0.5)$ i digues en quin factor s'ha reduït l'error de $F_0(0.01)$.

(c) Aproxima la integral $I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$ per la regla (fórmula composta) dels trapezis $T(h) \equiv T_N$ amb pas $h = 0.2$ $(N = 5)$ i troba una fita de l'error comès a partir de la fórmula de l'error:

$$\int_a^b f(x)dx - T(h) = \frac{b-a}{12} f''(\xi)h^2 \ , \quad \xi \in [a, b] \ ,$$

i també comparant amb el valor de la integral $I = 0.746824132812427$.

Exercici 1

Idees per a la solució.

(a) El polinomi de Taylor de grau 3 en $x_0 = 0$ és:

$$T_3(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{6} f'''(x_0)(x - x_0)^3 = 1 - x^2 \ .$$

(b) La taula de diferències dividides generalitzades resulta ser

$$\begin{array}{c|ccccccc}
x_0 = 0 & f(x_0) = 1 & & & & & \\
 & & f[x_0, x_0] = f'_0 = 0 & & & & \\
x_0 = 0 & f(x_0) = 1 & & f[x_0, x_0, x_1] = 1/e - 1 & & & \\
 & & f[x_0, x_1] = 1/e - 1 & & f[x_0, x_0, x_1, x_1] = -4/e + 2 & & \\
x_1 = 1 & f(x_1) = 1/e & & f[x_0, x_1, x_1] = -3/e + 1 & & & \\
 & & f[x_1, x_1] = f'_1 = -2/e & & & & \\
x_1 = 1 & f(x_1) = 1/e & & & & &
\end{array}$$

i permet trobar el polinomi d'interpolació d'Hermite en $x_0 = 0, x_1 = 1$:

$$\begin{aligned}
H_3(x) &= f(x_0) + f[x_0, x_0](x - x_0) + f[x_0, x_0, x_1](x - x_0)^2 + f[x_0, x_0, x_1, x_1](x - x_0)^2(x - x_1) \\
&= 1 + (1/e - 1)x^2 + (-4/e + 2)x^2(x - 1) \ .
\end{aligned}$$

(c) A continuació, es troben els errors màxims:

La funció d'error $f(x) - T_3(x) = e^{-x^2} - (1 - x^2)$ té per derivada

$$f'(x) - T_3'(x) = 2x(1 - e^{-x^2})$$

que és sempre positiva. Per tant, aquest error en l'interval $[0, 1]$ serà creixent, des de 0, i pendrà el màxim en $x = 1$:

$$\max_{x \in [0,1]} |f(x) - T_3(x)| = |f(1) - T_3(1)| = 1/e \ .$$

La funció d'error $f(x) - H_3(x) = e^{-x^2} - (1 + (1/e - 1)x^2 + (-4/e + 2)x^2(x - 1))$ té per derivada

$$f'(x) - H_3'(x) = 2x(1 - 1/e - (1 - 2/e)(3x - 2) - e^{-x^2})$$

que té un màxim x_m i un mínim x_M entre 0 i 1, i s'anul·la en 0 i en 1. Per tant, el valor absolut d'aquest error en l'interval $[0, 1]$ pendrà el seu valor màxim en x_m o en x_M :

$$\max_{x \in [0,1]} |f(x) - H_3(x)| = \max\{|f(x_m) - H_3(x_m)|, |f(x_M) - H_3(x_M)|\} \ .$$

Cal trobar els zeros de $F(x) = 1 - 1/e - (1 - 2/e)(3x - 2) - e^{-x^2}$.

Utilitzem el mètode de Newton $x_{k+1} = x_k - \frac{F(x_k)}{F'(x_k)}$, amb $F'(x) = 2xe^{-x^2} - 3(1 - 2/e)$, a partir de $x_0 = 0.8$ i $x_0 = 0.3$, i trobem, respectivament:

$$x_m = 0.8180429487041493 \ , \quad x_M = 0.3413187958429266 \ ;$$

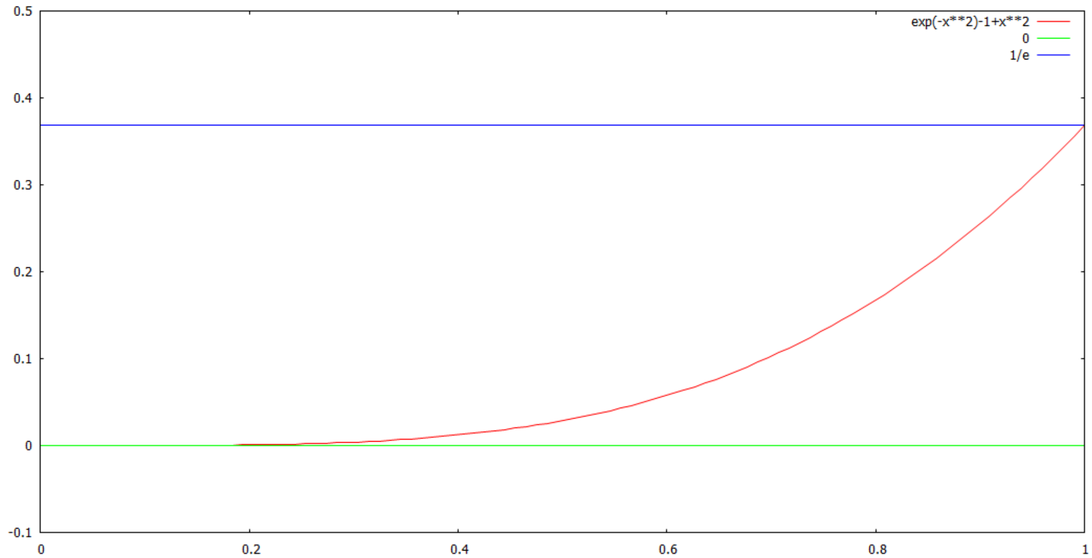
$$\max_{x\in[0,1]} |f(x) - H_3(x)| = \max\{|f(x_m) - H_3(x_m)|, |f(x_M) - H_3(x_M)|\}$$

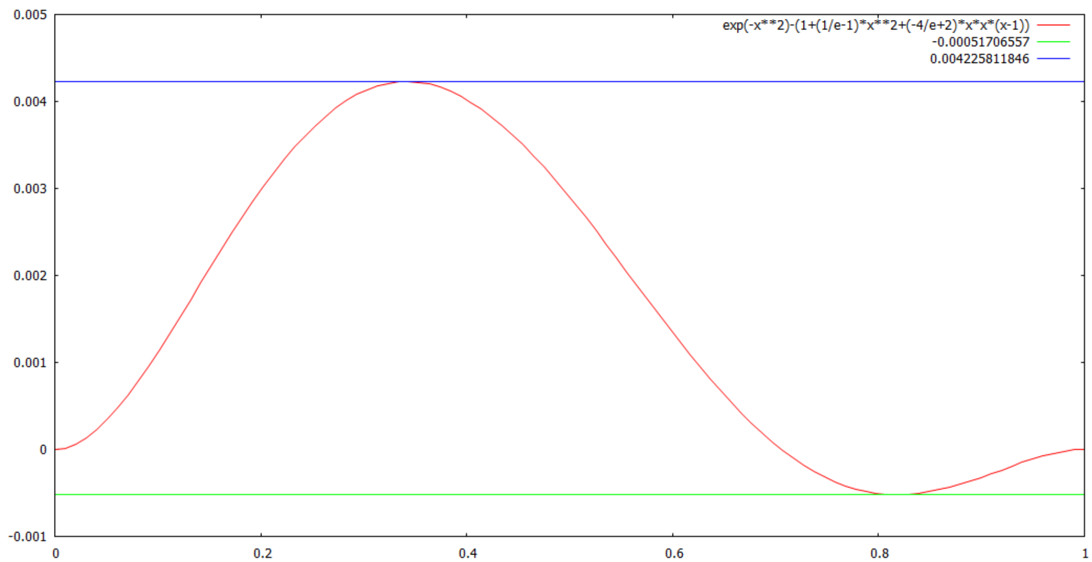
$$= \max\{0.0005170655735919, 0.0042258118459590\} = 0.0042258118459590 \ .$$

En resum

$$\max_{x\in[0,1]} |f(x) - T_3(x)| = 1/e = 0.36787944117 \ , \quad \max_{x\in[0,1]} |f(x) - H_3(x)| = 0.0042258118459590 \ .$$

Es representen a continuació les funcions d'error $f(x) - T_3(x)$ i $f(x) - T_3(x)$, respectivament, amb escales d'error diferents:





S'hi poden comprovar els errors màxims trobats.

El polinomi d'interpolador d'Hermite, en 0 i 1, és una millor aproximació que el polinomi de Taylor, en 0, dins tot l'interval $[0, 1]$, tot i que el polinomi de Taylor és millor aproximació prop de 0.

Exercici 2

Idees per a la solució.

(a) Aplicació de la fórmula de derivació per als dos passos:

$$F_0(h_1) = F_0(0.01) = \frac{e^{-0.51^2} - e^{-0.49^2}}{0.02} = -0.77873588566698 \ ,$$

$$F_0(h_2) = F_0(0.02) = \frac{e^{-0.52^2} - e^{-0.48^2}}{0.04} = -0.77854122538026 \ .$$

Valor exacte de la derivada $f'(0.5) = -0.778800783071$.

Error de $F_0(0.01) : -0.778800783071 - (-0.77873588566698) = 6.4897 \cdot 10^{-5}$.

Error de $F_0(0.02) : -0.778800783071 - (-0.77854122538026) = 25.95577 \cdot 10^{-5}$.

(b) Aplicació de la fórmula d'extrapolació:

$$F_1(h_1, h_2) = F_1(h_1, 2h_1) = F_0(0.01) + \frac{F_0(0.01) - F_0(0.02)}{3}$$

$$= -0.77873588566698 + (-0.77873588566698 + 0.77854122538026)/3 = -0.77880077243016.$$

Valor exacte de la derivada $f'(0.5) = -0.778800783071$.

Error de $F_2(0.2, 0.4) : 1.064084 \cdot 10^{-8}$.

Factor de reducció aproximat: 6099.

(c) El valor aproximat per la regla dels trapezis és:

$$T(0.2) = \frac{0.2}{2}(e^0 + 2e^{-0.04} + 2e^{-0.16} + 2e^{-0.36} + 2e^{-0.64} + e^{-1}) = 0.744368339763667 \ .$$

L'expressió d'error per trapezis en el càlcul de la integral de f a $[a, b]$ és pot fitar per

$$\frac{b-a}{12} M_2 h^2 \ ,$$

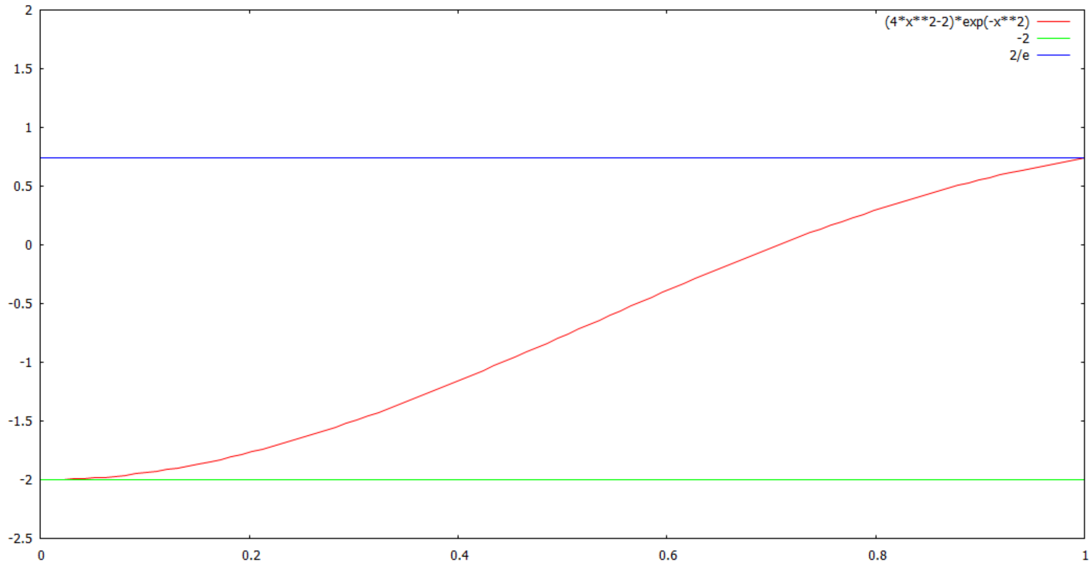
on M_2 és una fita del valor absolut de la segona derivada de f a l'interval $[a, b]$.

En aquest cas $b - a = 1$, $h = 0.2$ i $M_2 = \max_{x \in [0,1]} |(4x^2 - 2)e^{-x^2}|$.

La derivada tercera $f'''(x) = (-8x^3 + 12x)e^{-x^2} = 4x(3 - 2x^2)e^{-x^2}$ és positiva en $[0, 1]$ i, per tant,

$$M_2 = \max\{|f''(0)|, |f''(1)|\} = \max\{2, 2/e\} = 2 \ .$$

En la figura següent es representa $f''(x) = (4x^2 - 2)e^{-x^2}$ i els valors que pren en els extrems de l'interval:



La fita d'error resulta ser:

$$\frac{b-a}{12} M_2 h^2 = \frac{0.02}{3} < 0.0067 \ .$$

Comprovació:

El valor exacte de la integral és $I = 0.746824132812427$.

L'error és menor que 0.0025 i, per tant, menor que la fita trobada.