Análisis Numérico

G. P. Exlonk
Asesor: R.C. Albeiro

Química-Física Teorica y Computacional
Universidad de antioquia

2019

Contenido

Contenido

- Introducción

Contenido

Contenido

- Introducción
- Método de Interpolación [Lagrange]
- Diferenciación Numérica

Contenido

Contenido

- Introducción
- Método de Interpolación [Lagrange]
- Diferenciación Numérica
- Integración Numérica
- EDO [Método de Taylor]

Contenido

Introducción

Una ecuación diferencial parcial es una ecuación cuyas incognitas son funciones de varias variables y en la misma están presentes diferentes derivadas

$$\textit{por ejemplo}: \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \qquad (1)$$

Introducción

La ecuación de onda independiente del tiempo es:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Introducción

La ecuación de onda independiente del tiempo es:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Ahora, el hamiltoniano molecular no relativista se expresa como:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2}\sum_{\alpha}\frac{1}{m_\alpha}\nabla_\alpha^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e}\sum_i \nabla_i^2 + \sum_\alpha \sum_{\beta>\alpha} \frac{Z_\alpha Z_\beta e'^2}{r_{\alpha\beta}} - \sum_\alpha \sum_i \frac{Z_\alpha e'^2}{r_{i\alpha}}$$

$$+\sum_j \sum_{i>j} \frac{e'^2}{r_{ij}}, \quad e' = \frac{e}{\sqrt{4\pi\epsilon_0}}$$

Se puede observar que al aplicar dicho operador a una función se forma una ecuación diferencial parcial de segundo orden

Introducción

Análisis Numérico

El Análisis Numérico es la rama de las matemáticas encargada de desarrollar algoritmos para simular procesos matemáticos complejos.

El Análisis Numérico es una rama de la matemática cuyo objetivo principal es el estudio de métodos para resolver problemas numéricos complejos.[1]

[1] Rodríguez L. Análisis Numérico Básico

Interpolación

La interpolación es un proceso mediante el cual a un conjunto de puntos se les asigna una función

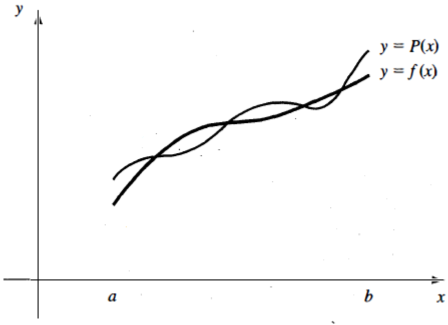

Figura 1: Interpolación

Interpolación
Polinomio de Lagrange

Supongase que se tienen dos puntos (x_0,y_0) y (x_1,y_1) ello implica el hallar una función tal que f(x_0)=y_0 y f(x_1)=y_1 para ello definiremos las funciones:

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} \; y \; L_1(x) = \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}$$

Interpolación
Polinomio de Lagrange

Supongase que se tienen dos puntos (x_0,y_0) y (x_1,y_1) ello implica el hallar una función tal que f(x_0)=y_0 y f(x_1)=y_1 para ello definiremos las funciones:

$$L_0(x) = \frac{(x - x_1)}{(x_0 - x_1)} \ y \ L_1(x) = \frac{(x - x_0)}{(x_1 - x_0)}$$

y se define entonces

$$P(x) = L_0(x)f(x_0) + L_1(x)f(x_1)$$

como

$$L_0(x_0) = 1, \ L_0(x_1) = 0, \ L_1(x_0) = 0 \ L_1(x_1) = 1$$

Interpolación
Polinomio de Lagrange

tenemos

$$P(x_0) = 1 * f(x_0) + 0 * f(x_1) = f(x_0) = y_0$$
$$P(x_1) = 0 * f(x_0) + 1 * f(x_1) = f(x_1) = y_1$$

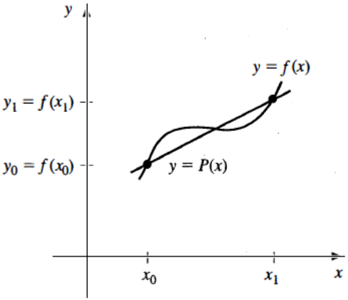

Figura 2: Lagrange

Interpolación
Polinomio de Lagrange

Ahora consideremos construir un polinomio de grado máximo n que pase por $n+1$ puntos

$$(x_0, f(x_0)), (x_{1,} f(x_1)), ..., (x_n, f(x_n))$$

Interpolación
Polinomio de Lagrange

Ahora consideremos construir un polinomio de grado máximo n que pase por *n+1* puntos

$$(x_0, f(x_0)), (x_{1,} f(x_1)), ..., (x_n, f(x_n))$$

Para cada k=0,1,2,...,n construimos una función $L_{n,k}(x)$ con la propiedad de que $L_{n,k}(x_i) = 0$, cuando i$\neq k$ y $L_{n,k}(x_k) = 1$, esto es:

$$L_{n,k}(x) = \frac{(x - x_0)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)}{(x_k - x_0)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)}$$

Interpolación
Polinomio de Lagrange

Teorema de Lagrange

Si $x_0, x_1, ..., x_n$ son *n+1* números distintos y si f es una función cuyos valores están dados en esos números, entonces existe un único polinomio P(x) de grado a lo más n, con la propiedad de que

$$f(x_k) = P(x_k) \qquad para\ cada\ k = 0, 1, 2, .., n.$$

este polinomio está dado por

$$P(x) = f(x_0)L_{n,0}(x) + \cdots + f(x_n)L_{n,n}(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k)L_{n,k}(x), \qquad (2)$$

donde para cada *k=0,1,....,n.*

$$L_{n,k}(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{k-1})(x - x_{k+1})\cdots(x - x_n)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1)\cdots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\cdots(x_k - x_n)}$$

$$= \prod_{i \neq k}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)}$$

Interpolación

f(x)	Punto 1	Punto 2	Punto 3	Punto 4	Interpolación	Exacta
sen(x)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.479396	0.479425
$\exp^{(x)}$	0.1	0.2	0.3	0.4	1.648586	1.648721
x^3	0.1	0.2	0.3	0.4	0.125000	0.125
xsin(x)cos(x)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.21154	0.21036
$x^2 + sin(x) - exp(x)$	0.1	0.2	0.3	0.4	-0.91919	-0.91929

%Error
6.05E-3
8.19E-3
0
0.56
1.09E-2

Interpolación
Polinomio de Lagrange

Error Polinomio de Lagrange

Supongamos que $x_0, x_1, ..., x_n$ son números distintos en el intervalo [a,b] y que $f \epsilon C^{n+1}$ [a,b]. Entonces, para cada x en [a,b] existe un número $\xi(x)$ en (a,b) con

$$f(x) = P(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i) \quad (3)$$

donde P(x) es el polinomio interpolante

Diferenciación Numérica

Para obtener fórmulas de aproximación a la derivada, supongamos que $x_0, x_1, ..., x_n$ son (n+1) números distintos en algún intervalo I y que $f \epsilon C^{n+1}(I)$ y utilizando la fórmula interpolante (3)

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L_{n,k}(x) + f^{(n+1)}(\xi(x)) \frac{(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)}{(n+1)!},$$

$$\textit{para alguna } \xi(x) \, \epsilon \, I$$

Diferenciación Numérica

Para obtener fórmulas de aproximación a la derivada, supongamos que $x_0, x_1, ..., x_n$ son (n+1) números distintos en algún intervalo I y que $f \epsilon C^{n+1}(I)$ y utilizando la fórmula interpolante (3)

$$f(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L_{n,k}(x) + f^{(n+1)}(\xi(x)) \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!},$$

$$\textit{para alguna } \xi(x) \,\epsilon\, I$$

Al diferenciar esta expresión tenemos:

$$f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L'_{n,k}(x) + f^{(n+1)}(\xi(x)) D_x \left[\frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} \right]$$

$$+ \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_n)}{(n+1)!} D_x[f^{(n+1)}(\xi(x))]$$

Diferenciación Numérica

Evaluamos f'(x) en x_j, y obtenemos

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L'_k(x_j) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_j))}{(n+1)!} \prod_{k \neq j}^{n} (x_j - x_k), \qquad (4)$$

Diferenciación Numérica

Evaluamos f'(x) en x_j, y obtenemos

$$f'(x_j) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L'_k(x_j) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x_j))}{(n+1)!} \prod_{k \neq j}^{n} (x_j - x_k), \qquad (4)$$

Diferenciación de Producto

$$g(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$$

$$\frac{dg}{dx} = (x - x_1)(x - x_2) + (x - x_0)(x - x_2) + (x - x_0)(x - x_1)$$

Evaluando en x_1

$$g'(x_1) = (x_1 - x_0)(x_1 - x_2)$$

Diferenciación Numérica

La fórmula anterior recibe el nombre de **fórmula de (n+1) puntos**, se deducira la que abarca tres puntos, para ello desarrollamos primero el polinomio de Lagrange, puesto que

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}, \qquad \textit{tenemos} \quad L_0'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}.$$

Diferenciación Numérica

La fórmula anterior recibe el nombre de **fórmula de (n+1) puntos**, se deducira la que abarca tres puntos, para ello desarrollamos primero el polinomio de Lagrange, puesto que

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}, \qquad \textit{tenemos} \quad L_0'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}.$$

De manera similar,

$$L_1'(x) = \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \qquad y \qquad L_2'(x) = \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

Diferenciación Numérica

Ahora, de acuerdo con la ecuación (4)

$$f'(x_j) = f(x_0)\left[\frac{2x_j - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}\right] + f(x_1)\left[\frac{2x_j - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}\right]$$

$$+f(x_2)\left[\frac{2x_j - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}\right] + \frac{1}{6}f^{(3)}(\xi_j)\prod_{k\neq j}^{2}(x_j - x_k),$$

para cada j=0,1,2 donde la notación ξ_j indica que este punto depende de x_j. La fórmula anterior es de gran utilidad si los nodos son equidistantes, es decir, cuando

$$x_1 = x_0 + h \quad y \quad x_2 = x_0 + 2h, \qquad \textit{para alguna } h \neq 0$$

Diferenciación Numérica

Al evaluar la ecuación anterior en $x_0, x_1 = x_0 + h$ y teniendo presente que $x_2 = x_0 + 2h$ obtendremos

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)\right] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$

$$f'(x_1) = f'(x_0+h) = \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_0+2h)\right] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

Diferenciación Numérica

Al evaluar la ecuación anterior en $x_0, x_1 = x_0 + h$ y teniendo presente que $x_2 = x_0 + 2h$ obtendremos

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)\right] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)$$

$$f'(x_1) = f'(x_0+h) = \frac{1}{2h}\left[-f(x_0) + f(x_0+2h)\right] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

Ahora supondremos que $x_0 + h \approx x_0$ y por tanto $x_0 \approx x_0 - h$, reemplazando en la ecuación anterior, tenemos:

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}\left[-f(x_0-h) + f(x_0+h)\right] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1) \qquad (5)$$

A esta fórmula se le denomina **fórmula de tres puntos.**

Diferenciación Numérica

También se tiene una **fórmula de cinco puntos** en el que se evalua la función en dos puntos más.

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)]$$

$$+\frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi) \qquad (6)$$

Diferenciación Numérica

f(x)	Punto 1	Numérica	Exacta	%Error Aprox
$sen(x)$	0.1	0.9950008	0.995004	3.22E-4
$\exp^{(x)}$	0.2	1.22139	1.2214	3.34E-4
x^3	0.3	0.27	0.27	0.0
$xsin(x)cos(x)$	0.4	0.6372	0.6373	1.72E-2
$x^2 + sin(x) - exp(x)$	0.5	0.228863	0.228861	0.4

Integración Numérica

El método básico con el que se aproxima $\int_a^b f(x)\,dx$ recibe el nombre de **cuadratura numérica** y utiliza una suma de la forma:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i f(x_i)$$

Teorema de Taylor

Suponga que $f \epsilon C^n[a,b]$, que $f^{(n+1)}$ existe en [a,b] y $x_0 \epsilon [a,b]$. Para cada $x \epsilon [a,b]$,existe un número $\xi(x)$ entre x_0 y x tal que

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x)$$

donde

$$P_n(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k$$

Integración Numérica

Teorema de Taylor

y

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x - x_0)^{n+1}$$

Regla de Simpson

Se tiene (x_0, x_1, x_2) igualmente espaciados, mediante el tercer polinomio de Taylor se desarrolla *f(x)* alrededor de x_1. Entonces, para cada x en $[x_0, x_2]$, existe un numéro $\xi(x)$ en (x_0, x_2) con

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x - x_1)^2 + \frac{f'''(x_1)}{6}(x - x_1)^3$$

$$+\frac{f^{(4)}(\xi(x))}{24}(x - x_1)^4$$

Integración Numérica

Teorema de Taylor

y

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}(x-x_0)^{n+1}$$

Regla de Simpson

Se tiene (x_0, x_1, x_2) igualmente espaciados, mediante el tercer polinomio de Taylor se desarrolla *f(x)* alrededor de x_1. Entonces, para cada x en $[x_0, x_2]$, existe un numéro $\xi(x)$ en (x_0, x_2) con

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x-x_1) + \frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^2 + \frac{f'''(x_1)}{6}(x-x_1)^3$$

$$+\frac{f^{(4)}(\xi(x))}{24}(x-x_1)^4$$

Integrando tenemos:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = \left[f(x_1)(x-x_0) + \frac{f''(x_1)}{2}(x-x_1)^2 + \frac{f''(x_1)}{6}(x-x_1)^3 + \frac{f'''(x_1)}{24}(x-x_1)^4\right]_{x_0}^{x_2}$$

Integración Numérica

$$+\frac{1}{24}\int_{x_0}^{x_2} f^{(4)}(\xi(x))(x-x_1)^4\,dx \quad (7)$$

Teorema del Valor Medio Ponderado para Integrales

Suponga que $f \epsilon C[a,b]$, que la integral de Riemann de g existe en [a,b] y que g(x) no cambia de signo en [a,b]. Entonces existe un número c en (a,b) tal que

$$\int_a^b f(x)g(x)\,dx = f(c)\int_a^b g(x)\,dx$$

Puesto que $(x-x_1)^4$ nunca es negativo en $[x_0, x_2]$, el teorema de valor medio ponderado de las integrales implica que

$$\frac{1}{24}\int_{x_0}^{x_2} f^{(4)}(\xi(x))(x-x_1)^4\,dx = \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{24}\int_{x_0}^{x_2}(x-x_1)^4\,dx = \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{120}(x-x_1)^5\,]_{x_1}^{x_2}$$

Integración Numérica

Sin embargo, $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$, así que $(x_2 - x_1)^2 = h^2$, y si $(x_0 - x_1) = -(x_1 - x_0) = -h$ entonces $(x_0 - x_1)^2 = h^2$, de lo anterior tenemos:

$$(x_2 - x_1)^2 - (x_0 - x_1)^2 = (x_2 - x_1)^4 - (x_0 - x_1)^4 = 0$$

y en cambio

$$(x_2 - x_1)^3 - (x_0 - x_1)^3 = 2h^3 \quad y \quad (x_2 - x_1)^5 - (x_0 - x_1)^5 = 2h^5$$

Integración Numérica

Sin embargo, $h = x_2 - x_1 = x_1 - x_0$, así que $(x_2 - x_1)^2 = h^2$, y si $(x_0 - x_1) = -(x_1 - x_0) = -h$ entonces $(x_0 - x_1)^2 = h^2$, de lo anterior tenemos:

$$(x_2 - x_1)^2 - (x_0 - x_1)^2 = (x_2 - x_1)^4 - (x_0 - x_1)^4 = 0$$

y en cambio

$$(x_2 - x_1)^3 - (x_0 - x_1)^3 = 2h^3 \quad y \quad (x_2 - x_1)^5 - (x_0 - x_1)^5 = 2h^5$$

Teniendo en consideración lo anterior, la ecuación (7) se puede reescribir como:

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3} f''(x_1) + \frac{f^{(4)}(\xi_1)}{60} h^5$$

Integración Numérica

También se tiene una aproximación para f''(x) analoga a la obtenida en la sección anterior, utilizandola obtenemos:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3}\left\{\frac{1}{h_2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)\right] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_2)\right\}$$

$$+\frac{f^{(4)}(\xi_1)}{60}h^5$$

$$= \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{12}\left[\frac{1}{3}f^{(4)}(\xi_2) - \frac{1}{5}f^{(4)}(\xi_1)\right]$$

Integración Numérica

También se tiene una aproximación para f''(x) analoga a la obtenida en la sección anterior, utilizandola obtenemos:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx = 2hf(x_1) + \frac{h^3}{3}\left\{\frac{1}{h_2}\left[f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)\right] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_2)\right\}$$

$$+\frac{f^{(4)}(\xi_1)}{60}h^5$$

$$= \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{12}\left[\frac{1}{3}f^{(4)}(\xi_2) - \frac{1}{5}f^{(4)}(\xi_1)\right]$$

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)] - \frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi), \quad \xi \; en\,(x_0, x_2) \qquad (8)$$

Integración Numérica

f(x)	x^2	1/(x+1)	$(1+x^2)^{1/2}$	sin(x)
Exacto	2.667	1.099	2.958	1.416
Simpson	2.667	1.111	2.964	1.425
%Error Aprox.	0	1.09	0.2	0.635

EDO [Método de Taylor]

Este método sirve para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden. Supongamos que la solucion y(t) del problema de valor inicial

$$y' = f(t, y), \quad a \leq y \leq b, \; y(a) = \alpha$$

tiene (n+1) derivadas continuas. Si se desarrolla la solución y(t) en función del n-ésimo polinomio de Taylor alrededor de t_i y calculamos en t_{i+1} obtendremos

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hy'(t_i) + \frac{h^2}{2}y''(t_i) + \cdots + \frac{h^n}{n!}y^{(n)}(t_i) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)}y^{(n+1)}(\xi_i)$$

para alguna ξ_i en $(t_i, t_i + 1)$

EDO [Método de Taylor]

La diferencia sucesiva de la solución y(t) nos da

$$y'(t) = f(t, y(t)),$$

$$y'' = f'(t, y(t)),$$

y, en general,

$$y^{(k)}(t) = f^{(k-1)}(t, y(t))$$

Al sustituir estos resultados en la ecuación anterior, tenemos:

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + hf(t_i, y(t_i)) + \frac{h^2}{2} f'(t_i, y(t_i)) + \cdots$$

$$+ \frac{h^n}{n!} f^{(n-1)}(t_i, y(t_i)) + \frac{h^{(n+1)}}{(n+1)!} f^{(n)}(\xi_i, y(\xi_i))$$

El método de Taylor se obtiene suprimiendo el término de error.

EDO [Método de Taylor]

Método de Taylor

$$w_0 = \alpha$$

$$w_{i+1} = w_i + hT^{(n)}(t_i, w_i) \quad \textit{para cada } i = 0, 1, 2, ..., N-1$$

donde

$$T^{(n)}(t_i, w_i) = f(t_i, w_i) + \frac{h}{2}f'(t_i, w_i) + \cdots + \frac{h^{(n-1)}}{n!}f^{(n-1)}(t_i, w_i)$$

Método variacional 1-D

$$\begin{vmatrix} H_{11}-S_{11}W & H_{12}-S_{12}W & \cdots & H_{1n}-S_{1n}W \\ H_{21}-S_{21}W & H_{22}-S_{22}W & \cdots & H_{2n}-S_{2n}W \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ H_{n1}-S_{n1}W & H_{n2}-S_{n2}W & & H_{nn}-S_{nn}W \end{vmatrix} = 0$$

$$S_{jk} = \int f_j^* f_k \, d\tau \quad H_{jk} = \int f_j^* \left(-\frac{1}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2} f_k \, d\tau$$

Para una particula 1-D con potencial infinito se utilizaran las siguientes funciones iniciales:

$$f_1 = x(l-x),\ f_2 = x^2(l-x)^2,\ f_3 = x(l-x)(\frac{1}{2}l-x),\ f_4 = x^2(l-x)^2(\frac{1}{2}l-x)$$

Método variacional 1-D

Energía Exacta	Energía variacional analítica	%Error aprox.
4.934802201	4.93487326	0.0014
19.73920880	19.75077598	0.058
44.4132198	51.06513578	14.97
78.9568352	100.2492237	26.96

Energía Exacta	Energía variacional numerica	%Error aprox.
4.934802201	4.93487042	0.00138
19.73920880	19.75070042	0,058
44.4132198	51.06490629	14,97
78.9568352	100.24784804	26,96

Método variacional 1-D

%Error analítico vs. numerico
5.7E-05
3.8E-04
4.4E-04
1,3E-03