MAT327 Cálculo Numérico

Manuel Loaiza Vasquez

Noviembre 2021

Pontificia Universidad Católica del Perú
Lima, Perú
manuel.loaiza@pucp.edu.pe

Solucionario de la tercera práctica. Instructor: Rubén Agapito.

1. Determine si S es un spline cúbico con nodos -1, 0, 1 y 2.

$$S(x) = \begin{cases} 1 + 2(x+1) + (x+1)^3 & -1 \leq x \leq 0, \\ 3 + 5x + 3x^2 & 0 \leq x \leq 1, \\ 11 + (x-1) + 3(x-1)^2 + (x-1)^3 & 1 \leq x \leq 2. \end{cases}$$

Solución. Tenemos la función S en $[-1, 2]$ con nodos $x_0 = -1 < x_1 = 0 < x_2 = 1 < x_3 = 2$. Por definición, S es un spline cúbico si satisface lo siguiente:

- S_i es un polinomio cúbico en $[x_i, x_{i+1}]$ para $i = 0, \ldots, 2$. Esto es trivial pues cada tramo es un polinomio de grado menor o igual a tres.
- S es de clase C^2. Como cada tramo S_i es un polinomio, entonces es continuo en infinitamente diferenciable en su interior. Nos faltaría analizar que se cumple $S_{i+1}(x_{i+1}) = S_i(x_{i+1})$, $S'_{i+1}(x_{i+1}) = S'_i(x_{i+1})$ y $S''_{i+1}(x_{i+1}) = S''_i(x_{i+1})$. Tenemos

$$\begin{aligned} S_0(x) &= 1 + 2(x+1) + (x+1)^3, \\ S_1(x) &= 3 + 5x + 3x^2, \\ S_2(x) &= 11 + (x-1) + 3(x-1)^2, \\ S'_0(x) &= 2 + 3(x+1)^2, \\ S'_1(x) &= 5 + 6x, \\ S'_2(x) &= 1 + 6(x-1), \\ S''_0(x) &= 6(x+1), \\ S''_1(x) &= 6, \\ S''_2(x) &= 6. \end{aligned}$$

Sin embargo, $S_0(0) = 4 \neq 3 = S_1(0)$, por lo que S no es de clase C^2.

Finalmente, concluimos que S no es un spline cúbico. □

2. Dada la función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ con $f(x) = e^{-x}$, deseamos calcular numéricamente

$$\int_0^{0.8} f(x)dx.$$

Usaremos los valores de $f(x)$ en los puntos 0, 0.2, 0.4, 0.6 y 0.8. Genere la data antes de comenzar la integración numérica.

a. Escriba la regla trapezoidal y calcule la integración numérica con seis dígitos.

Solución. Aproximamos la integral vía

$$I(f) \approx T(f;h) = h\left(\frac{1}{2}(f(x_0) + f(x_4)) + \sum_{i=1}^{3} f(x_i)\right),$$

donde $n = 4$, $h = 0.2$ y $0 = x_0 < 0.2 = x_1 < 0.4 = x_2 < 0.6 = x_3 < 0.8 = x_4$. Implementamos el algoritmo

```
function T = trapezoid_rule(f, a, b, n)
  h = (b - a) / n;
  x = [a + h : h : b - h];
  T = h * ((f(a) + f(b)) / 2 + sum(f(x)));
end
```

y lo llamamos

```
clc;
f = @(x) exp(-x);
a = 0;
b = 0.8;
n = 4;
T = trapezoid_rule(f, a, b, n);
fprintf('Integral: %.6f\n', T);
```

obteniendo 0.552505. □

b. Escriba la regla de Simpson y calcule la integración numérica con seis dígitos.

Solución. Aproximamos la integral vía

$$I(f) \approx S(f;h) = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + f(x_8) + 4\sum_{i=1}^{4} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{3} f(x_{2i})\right),$$

donde $n = 4$, $h = 0.1$ y $x_0 = 0 < x_2 < 0.2 < x_4 = 0.4 < x_6 = 0.6 < x_8 = 0.8$. Implementamos el algoritmo

```matlab
function S = simpson_rule(f, a, b, n)
  h = (b - a) / (2 * n);
  x_odd = [a + h : 2 * h : b - h];
  x_even = [a + 2 * h : 2 * h : b - 2 * h];
  S = h * (f(a) + f(b) + 4 * sum(f(x_odd)) + 2 * sum(f(
      x_even))) / 3;
end
```

y lo llamamos

```matlab
clc;
f = @(x) exp(-x);
a = 0;
b = 0.8;
n = 4;
S = simpson_rule(f, a, b, n);
fprintf('Integral: %.6f\n', S);
```

obteniendo 0.550671. □

c. ¿Cuál es el valor exacto de la integral? ¿Cuál es el error absoluto usando la regla trapezoidal y la de Simpson? ¿Cuál método es mejor?

Solución. Integramos

$$\int_0^{0.8} e^{-x}\,dx = -e^{-x}\Big|_0^{0.8} = 1 - e^{-0.8} \approx 0.550671.$$

El error absoluto, con seis dígitos, usando la regla trapezoidal es $E_T(f;h) = 0.001834$ mientras que usando la regla de Simpson es $E_S(f,h) = 0$. Debido a que hemos obtenido un menor error absoluto, podemos decir que el método de Simpson fue mejor para esta integral numérica. □

d. La fórmula del error para la regla trapezoidal con $n+1$ puntos es

$$E_T(f;h) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi),\ h = \frac{b-a}{n},$$

para algún $\xi \in [a,b]$.

El error para la regla de Simpson con $2n+1$ puntos es

$$E_S(f;h) = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi),\ h = \frac{b-a}{2n},$$

para algún $\xi \in [a,b]$.

Si deseamos que el valor absoluto del error sea menor que 10^{-4}, ¿cuántos puntos se necesitarán para cada método?

Solución. Como la función e^{-x} es decreciente en todo su dominio, el máximo valor que puede tomar en $[0, 0.8]$ es 1.

Determinemos la mínima cantidad de puntos necesarios para que el error absoluto tras usar la regla trapezoidal sea menor que 10^{-4}. Tenemos $f''(x) = e^{-x}$. Luego

$$|E_T(f;h)| \leq \frac{0.8-0}{12} \cdot 1 \cdot h^2 < 10^{-4}.$$

Manipulemos esta expresión

$$\begin{aligned} h^2 &< \frac{12}{0.8} \cdot 10^4 \\ &= 0.0015 \\ h &< 0.0387298 \\ \frac{0.8-0}{n} &< 0.0387298 \\ n &> 20.6559. \end{aligned}$$

Escogemos $n = 21$ y por lo tanto $n + 1 = 22$ puntos.

Ahora determinemos la mínima cantidad de puntos necesarios para que el error absoluto tras utilizar la regla de Simpson sea menor que 10^{-4}. Tenemos $f^{(4)}(x) = e^{-x}$. Luego

$$|E_S(f;h)| \leq \frac{0.8-0}{180} \cdot 1 \cdot h^4 < 10^{-4}.$$

Manipulemos esta expresión

$$\begin{aligned} h^4 &< \frac{180}{0.8 \cdot 10^4} \\ h &< 0.3872983 \\ \frac{0.8-0}{2n} &< 0.3872983 \\ n &> 1.03280. \end{aligned}$$

Escogemos $n = 2$ y por lo tanto $2n + 1 = 5$ puntos. □

3. Algoritmo de Romberg.

a. Escriba una función en MATLAB que integre vía el algoritmo de Romberg. Uno debería invocar la función como `R = romberg(f, a, b, n)`, donde `f` es la función, `a` y `b` los extremos del intervalo y `n` el tamaño de la tabla de Romberg. La función debe retornar como salida la tabla de Romberg completa. La mejor aproximación de la integral sería el valor en `R(n, n)`.

Solución. La siguiente función implementa el algoritmo de Romberg, donde f es la función a integrar, a y b los extremos del intervalo de integración utilizando $2^n + 1$ puntos.

```
function R = romberg(f, a, b, n)
  R = zeros(n, n);
  % Caso base: Regla del trapecio
  h = b - a;
  R(1, 1) = h * (f(a) + f(b)) / 2;
  % Para cada refinamiento completamos su respectiva fila
      en la matriz
  for i = 2 : n
    % Anadimos los nuevos puntos
    new_x = ((1 : 2^(i - 2)) - 0.5) * h;
    R(i, 1) = (R(i - 1, 1) + h * sum(f(new_x))) / 2;
    % Completamos a nuestra derecha reutilizando lo
       precalculado
    for j = 2 : i
      R(i, j) = R(i, j - 1) + (R(i, j - 1) - R(i - 1, j -
          1)) / (2^(2 * (j - 1)) - 1);
    end
    % Refinamos
    h = h / 2;
  end
end
```

□

b. Use la función `romberg` para calcular las integrales

$$\int_0^{\pi} \sin(x)\,dx \text{ y } \int_0^1 \sqrt{x}\,dx.$$

Calcule también los errores. Los valores exactos de las integrales son 2 y 2/3, respectivamente. Exhiba los errores a lo largo de la diagonal de la tabla y observe cómo cambia a lo largo de la diagonal.

Solución. Primero creamos la siguiente función para que imprima ambas tablas solicitadas

```
function print_tables(f, a, b, n, exact_value)
  R = romberg(f, a, b, n);
  print_romberg(R, n);
  print_romberg_errors(R, n, exact_value);
end
```

La función anterior llama a otras dos funciones. Una se encarga de imprimir los valores de la tabla de Romberg

```
function print_romberg(R, n)
  fprintf('Matriz de Romberg:\n');
  for i = 1 : n
    for j = 1 : i
```

```
      if j > 1
        fprintf(' ');
      end
      fprintf('%.6f', R(i, j));
    end
    fprintf('\n');
  end
end
```

y la otra los errores absolutos de la tabla de Romberg con el valor exacto de la integral

```
function print_romberg_errors(R, n, exact_value)
  fprintf('Matriz de errores de Romberg:\n');
  for i = 1 : n
    for j = 1 : i
      if j > 1
        fprintf(' ');
      end
      fprintf('%.6f', abs(R(i, j) - exact_value));
    end
    fprintf('\n');
  end
end
```

Calculamos la primera integral

```
clc;
f = @(x) sin(x);
a = 0;
b = pi;
n = 5;
print_tables(f, a, b, n, 2);
```

```
Matriz de Romberg:
0.000000
1.570796 2.094395
1.896119 2.004560 1.998571
1.974232 2.000269 1.999983 2.000006
1.993570 2.000017 2.000000 2.000000 2.000000
Matriz de errores de Romberg:
2.000000
0.429204 0.094395
0.103881 0.004560 0.001429
0.025768 0.000269 0.000017 0.000006
0.006430 0.000017 0.000000 0.000000 0.000000
```

y la segunda

```
clc;
f = @(x) sqrt(x);
a = 0;
b = 1;
n = 5;
print_tables(f, a, b, n, 2 / 3);
```

```
Matriz de Romberg:
0.500000
0.603553 0.638071
0.643283 0.656526 0.657757
0.658130 0.663079 0.663516 0.663608
0.663581 0.665398 0.665553 0.665585 0.665593
Matriz de errores de Romberg:
0.166667
0.063113 0.028595
0.023384 0.010140 0.008910
0.008536 0.003587 0.003151 0.003059
0.003085 0.001268 0.001114 0.001082 0.001074
```

obteniendo como integrales numéricas 2 y 0.665593, respectivamente. □

c. Explique por qué el algoritmo de Romberg nos da pobres resultados para la última integral. Use la función `integral` de MATLAB para calcular las integrales del ítem (b) usando 10^{-9} como tolerancia para ambas integraciones.

Solución. Localmente, he llamado a la función que calcula la segunda integral para valores de n más grandes, por ejemplo, $n = 12$, y usando seis dígitos de exactitud e igual seguimos teniendo un error absoluto distinto de cero

```
Matriz de Romberg:
0.500000
0.603553 0.638071
0.643283 0.656526 0.657757
0.658130 0.663079 0.663516 0.663608
0.663581 0.665398 0.665553 0.665585 0.665593
0.665559 0.666218 0.666273 0.666284 0.666287 0.666288
0.666271 0.666508 0.666527 0.666531 0.666532 0.666533 0.666533
0.666526 0.666611 0.666617 0.666619 0.666619 0.666619 0.666619 0.666619
0.666617 0.666647 0.666649 0.666650 0.666650 0.666650 0.666650 0.666650 0.666650
0.666649 0.666660 0.666661 0.666661 0.666661 0.666661 0.666661 0.666661 0.666661 0.666661
0.666660 0.666664 0.666664 0.666665 0.666665 0.666665 0.666665 0.666665 0.666665 0.666665 0.
0.666664 0.666666 0.666666 0.666666 0.666666 0.666666 0.666666 0.666666 0.666666 0.666666 0.
Matriz de errores de Romberg:
0.166667
0.063113 0.028595
0.023384 0.010140 0.008910
```

```
0.008536 0.003587 0.003151 0.003059
0.003085 0.001268 0.001114 0.001082 0.001074
0.001108 0.000448 0.000394 0.000382 0.000380 0.000379
0.000396 0.000159 0.000139 0.000135 0.000134 0.000134 0.000134
0.000141 0.000056 0.000049 0.000048 0.000047 0.000047 0.000047 0.000047
0.000050 0.000020 0.000017 0.000017 0.000017 0.000017 0.000017 0.000017 0.000017
0.000018 0.000007 0.000006 0.000006 0.000006 0.000006 0.000006 0.000006 0.000006 0.000006
0.000006 0.000002 0.000002 0.000002 0.000002 0.000002 0.000002 0.000002 0.000002 0.000002 0.
0.000002 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.000001 0.
```

El algoritmo de Romberg nos da pobres resultados para esta última integral y necesitamos una cantidad bastante grande de puntos para mejorar el resultado puesto que la función $\sqrt{x}$ no tiene expansión de Taylor alrededor de cero y debido a la extrapolación de Richardson, el error dependería prácticamente de su expansión.

Finalmente, usando el comando `integral` conseguimos

```
clc;
f = @(x) sin(x);
e = 1e-9;
i = integral(f, 0, pi, 'AbsTol', e);
fprintf('%.9f\n', i);
```

con integral numérica 2.000000000 en la primera

```
clc;
f = @(x) sqrt(x);
e = 1e-9;
i = integral(f, 0, 1, 'AbsTol', e);
fprintf('%.9f\n', i);
```

y 0.666666667 en la segunda. □

4. Considere la regla de cuadratura gaussiana con cuatro puntos en el intervalo $[-1, 1]$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx a_1 f(x_1) + a_2 f(x_2) + a_3 f(x_3) + a_4 f(x_4)$$

donde

$$\begin{aligned}
x_1 &= -\sqrt{(3 - 4\sqrt{0.3})/7},\\
x_2 &= -\sqrt{(3 + 4\sqrt{0.3})/7},\\
x_3 &= \sqrt{(3 - 4\sqrt{0.3})/7},\\
x_4 &= \sqrt{(3 + 4\sqrt{0.3})/7},\\
a_1 = a_3 &= 1/2 + \sqrt{10/3}/12,\\
a_2 = a_4 &= 1/2 - \sqrt{10/3}/12.
\end{aligned}$$

Pruebe que la regla es exacta para todos los polinomios de grado menor o igual a siete.

Solución. Verifiquemos que la regla satisface la igualdad para $f(x) = 1, x, x^2$ y x^3. El caso $f(x) = 1$ es fácil de verificar

$$2 = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) + \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right).$$

Para $f(x) = x$ trivialmente la suma se anula

$$0 = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(-\sqrt{\frac{1}{7}\left(3 - 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)}\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(-\sqrt{\frac{1}{7}\left(3 + 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)}\right)$$
$$\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{7}\left(3 - 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)}\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(\sqrt{\frac{1}{7}\left(3 + 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)}\right).$$

Para $f(x) = x^2$ obtenemos la igualdad tras operar

$$\begin{aligned}
\frac{2}{3} = & \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(\frac{1}{7}\left(3 - 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(\frac{1}{7}\left(3 + 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)\right) \\
& \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(\frac{1}{7}\left(3 - 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right) \cdot \left(\frac{1}{7}\left(3 + 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)\right) \\
= & \frac{2}{7}\left[\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right)\left(3 - 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right) + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{12}\sqrt{\frac{10}{3}}\right)\left(3 + 4\sqrt{\frac{3}{10}}\right)\right] \\
= & \frac{2}{7}\left(\frac{3}{2} - 2\sqrt{\frac{3}{10}} + \frac{1}{4}\sqrt{\frac{10}{3}} - \frac{1}{3} + \frac{3}{2} + 2\sqrt{\frac{3}{10}} - \frac{1}{4}\sqrt{\frac{10}{3}} - \frac{1}{3}\right) \\
= & \frac{2}{7}\left(3 - \frac{2}{3}\right) \\
= & \frac{2}{3}.
\end{aligned}$$

Para $f(x) = x^3$, al igual que en el caso lineal, debido a la simetría y al ser esta una función impar, trivialmente se anula.

Finalmente, podemos concluir que la regla es exacta para todos los polinomios de grado menor o igual a $2n + 1 = 2 \cdot 3 + 1 = 7$. □

5. Construya una regla de la forma

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx a_1 f(-1/2) + a_2 f(0) + a_3 f(1/2)$$

que sea exacta para todos los polinomios de grado menor o igual a dos.

Solución. Aprovechemos

$$\int_{-1}^{1} x^k = \begin{cases} 0 & k \text{ impar}, \\ 2/(k+1) & k \text{ par} \end{cases}$$

para realizar las cuentas de una manera más rápida, puesto que basta con evaluar la expresión en 1, x y x^2. Resolvamos el sistema de ecuaciones

$$\begin{aligned} 2 &= a_0 + a_1 + a_2 \\ 0 &= -\frac{a_0}{2} + \frac{a_2}{2} \\ \frac{2}{3} &= \frac{a_0}{4} + \frac{a_2}{4}. \end{aligned}$$

De la segunda ecuación tenemos que $a_0 = a_2$ y reemplazando esto en la tercera ecuación obtenemos $a_0 = a_2 = 4/3$. Utilizando esto en la primera ecuación conseguimos $a_1 = -2/3$. Del teorema del curso, la regla es exacta para todos los polinomios de grado menor o igual a cinco, en particular, para los de grado menor o igual a dos. □