Laboratorio # 2
Computación Científica II

Alumno: Diego Villouta Fredes
Rol: 2773019-1

29 de octubre de 2012

Índice

1. Introducción

- Hoy en día no es una novedad para nadie trabajar con softwares matemáticos potentes como Mathematica, Octave, Wolfram Alpha, entre otros y es interesante conocer como trabajan estos programas 'por debajo' por decirlo de alguna manera. Los métodos de interpolación e integración numérica vistos en clases y en el presente laboratorio permiten entender de mejor manera como se realizan cálculos complejos de una manera más simple para un computador en cuanto a procesamiento requerido . Para el desarrollo del laboratorio se utilizó el lenguaje de programación conocido como Python y distintas librerías que extienden su funcionamiento en el ámbito matemático. Las librerías usadas para creación, cálculo y manipulación de operaciones, fueron Numpy y Scipy.
- Cabe destacar que se optó por usar la versión 2.7 de Python ya que ésta, si bien no es la última, está dentro de las más usadas y los complementos y librerías adicionales trabajan mejor con esta versión.

2. Objetivos

- Implementar algoritmos de interpolación polinominal como son las diferencias divididas de newton y los splines cúbicos
- Implementar algoritmos de integración numérica.
- Desarrollar benchmarks para obtener resultados objetivos sobre las implementaciones realizadas.
- Analizar resultados y concluir al respecto.

3. Desarrollo

3.1. Pregunta 1

3.1.1. Función inter_pol()

Se creó la siguiente función llamada inter_pol(x_int, n, 'pol'), la cual retorna el valor y_int que corresponde al valor de x_int evaluado en el polinomio interpolador encontrado según el metodo 'pol' que se haya escogido.

- El código de inter_pol(x_int, n, 'pol') a continuación:

```
def inter_pol(x_int, n, pol):
#Se generan los vectores X e Y que contienen los datos para realizar la
#interpolacion.
    x,y = generate_Data(n)

#Luego se llama a las funciones interpoladores disponibles segun se haya
#escogido en un principio.
    if pol == 'diff':
        return diff(x_int, x, y, n)

    if pol == 'spl':
        return splines(x_int, x, y, n)
```

- Se crearon 4 funciones más aparte de la pedida, las cuales serán detalladas a continuación. Su creación fue con la finalidad de modularizar el funcionamiento del programa y poder facilitar la programación del mismo.

1. generate_Data(n): Recibe un entero n que corresponde a la cantidad de datos deseada y retorna los vectores X e Y con los datos a ser interpolados. Los valores de X están en el rango [-1, 1], por condiciones del problema, y están equiespaciados entre si. El código a continuación:

```
def generate_Data(n):
#Se crea el vector X con n datos equiespaciados entre si, que pertenecen
#al rango [-1,1].
    x = sp.linspace(-1,1,n)

#Se genera el vector Y con n datos, correspondientes a evaluar los valores
#de X en la funcion original.
    y = []

    for i in range(n):

        num = float(10*sp.log10(x[i]**2 + x[i] + 1))
        den = float(10*(x[i]**3) - 20*(x[i]**2) + x[i] - 2)
        y.append(float(num/den))

    return x, y
```

2. get_Yreal(x): Recibe un valor numérico en particular para ser evaluado en la función original y retorna su valor. El código a continuación:

```
def get_Yreal(x):
#Se evalua la funcion original en el valor x recibido.
    num = float(10*sp.log10(x**2 + x + 1))
    den = float(10*(x**3) - 20*(x**2) + x - 2)

    return float(num/den)
```

3. diff(x_int, x, y, n): Función que aplica el método de las diferencias divididas de Newton a un conjunto de datos X e Y de tamaño n para encontrar el polinomio interpolador, y finalmente evalua el valor x_int en este y retorna su valor. El código a continuación:

1

```
def diff(x_int, x, y, n):
#Se crea un vector que contiene los mismos valores de Y, y se mantiene su
#primer valor ya que este corresponde al primer coeficiente del polinomio.
    coef = y
    n = n-1

#El metodo de las diferencias divididas se aplica a continuacion, donde se
#van restando y dividiendo los valores del vector 'coef' y de X hasta que
#todos los valores contenidos en 'coef' corresponden a los coeficientes
#finales del polinomio interpolador.
    for i in range(1, n+1):
        for j in range(n, i-1, -1):
            coef[j] = (coef[j] - coef[j-1])/(x[j] - x[j-i])

#Finalmente se evalua el valor de x_int en el polinomio de la forma
#coef[0] + coef[1](x_int - x[0]) + coef[2](x_int - x[0])(x_int - x[1])...
    resultado = coef[0]
    factor = 1

    for i in range(0, n):

        factor *= (x_int - x[i])
        resultado += factor*coef[i+1]

    return resultado
```

4. splines(x_int, x, y, n): Función que aplica el método de los splines cúbicos a un conjunto de datos X e Y de tamaño n para encontrar los distintos polinomios interpoladores de grado 3 para cada subtramo [x[i], x[i+1]], finalmente se evalua el valor de x_int en su spline cúbico correspondiente y se retorna su valor. La forma de calcular los splines fue extraida de la materia que se encuentra en la página oficial de la asignatura, consistente en como calcular los coeficientes a_j, b_j, c_j y d_j de cada spline.

1

```
def splines(x_int, x, y, n):
#Se crea una matriz de ceros, de dimensiones 'nxn' que contiene los
#terminos [1, 4, 1] a lo largo de su diagonal a excepcion de las
#casillas [0,0] y [n-1, n-1].

    A = sp.zeros((n,n))
    A[0,0] = 1
    A[n-1,n-1] = 1

    for i in range(1,n-1):
        A[i,i-1] = 1
        A[i,i] = 4
        A[i,i+1] = 1
#Se crea un vector de ceros, de la misma dimension que el vector Y, el
#cual tiene ceros en el primer y ultimo elemento, y el resto del vector
#posee elementos de la forma y[i-1] - 2*y[i] + y[i+1].

    Y = sp.zeros(n)

    for i in range(1,n-1):
        Y[i] = y[i-1] - 2*y[i] + y[i+1]
```

```python
#Una vez que se tienen ambos elementos, A e Y, se procede a resolver el
#sistema de ecuaciones con la funcion linalg.solve(A,Y) de numpy, la que
#retorna finalmente un vector con todos los coeficientes C_j de los splines.

    C = np.linalg.solve(A,Y)

#Finalmente se debe evaluar el valor de x_int en el spline correspondiente,
#para encontrar el coeficiente C_j que le corresponde, se busca primero el
#indice del vector X del valor mas cercano a x_int y luego que se tiene este
#indice, se procede a encontrar los demas coeficientes A_j, B_j y D_j
#utilizando las formulas que aparecen en la pagina de la asignatura.

    index = min(range(n), key=lambda i: abs(x[i]-x_int))

    if index == (n-1):
        index = index - 1

    h = float((x[n-1] - x[0])/n)
    x_j = x[index]
    a_j = y[index]
    c_j = C[index]
    b_j = (y[index+1]-a_j)/h - (h*(C[index+1]+2*c_j))/3
    d_j = (C[index+1] - c_j)/(3*h)
    diff = x_int - x_j
    resultado = a_j + b_j*diff + c_j*(diff**2) + d_j*(diff**3)

    return resultado
```

3.1.2. Benchmark

Se pide un benchmark para los métodos implementados, para lo que se creo una función cuyo código es el siguiente:

```python
def benchmark():

    X = [-0.5,-0.25,0.0,0.25,0.5]
    interp_methods = ['diff','spl']

    for m in range(1,6):
        for j in interp_methods:
            for i in X:

                n = 2**m
                y_real = get_Yreal(i)
                y_int = inter_pol(i,n,j)

                if y_real != 0:
                    error_rel = abs((y_real - y_int)/y_real)
                else:
                    error_rel = abs(y_real - y_int)

                comp_time = t.timeit("inter_pol(x_int,n,pol)",setup='x_int='+str(i)+';
n='+str(n)+'; pol="'+j+'"; from __main__ import inter_pol',number=10)
```

```
                if y_real == 0:
                    print 'N:',n,' X:',i,' Y_k:',y_real,'            Y_int:',y_int,' pol:',j
,' Error Relativo:',error_rel,' Tiempo de computo:',comp_time
                else:
                    print 'N:',n,' X:',i,' Y_k:',y_real,' Y_int:',y_int,' pol:',j
,' Error Relativo:',error_rel,' Tiempo de computo:',comp_time

            print ''
```

- La cual no necesita mayor explicación, genera los datos pedidos en el enunciado y los muestra por pantalla de una manera apropiada y los datos obtenidos son los siguientes:

n	x	$y_k = f(x)$	y_int	pol	**Error relativo**	**Tiempo de cómputo**
	$-1/2$	0,142787127552	$-0{,}1084366488$	diff	1,75942874304	0,00274220982076
	$-1/4$	0,246636937707	$-0{,}1626549732$	diff	1,65949153729	0,0025914331928
2	0	$-0{,}0$	$-0{,}2168732976$	diff	0,2168732976	0,00261068127297
	$1/4$	$-0{,}41529428423$	$-0{,}271091622$	diff	0,347230067223	0,00259207479547
	$1/2$	$-0{,}462929616545$	$-0{,}3253099464$	diff	0,297279900069	0,00270243045508
	$-1/2$	0,142787127552	$-0{,}2168732976$	spl	2,51885748609	0,00428398104192
	$-1/4$	0,246636937707	$-0{,}3253099464$	spl	2,31898307457	0,00482870171058
2	0	$-0{,}0$	$-0{,}4337465952$	spl	0,4337465952	0,00470230598416
	$1/4$	$-0{,}41529428423$	$-0{,}542183244$	spl	0,305539865555	0,00493392454881
	$1/2$	$-0{,}462929616545$	$-0{,}6506198928$	spl	0,405440199862	0,00490761883925
	$-1/2$	0,142787127552	0,312487149145	diff	1,18848263497	0,0076292973745
	$-1/4$	0,246636937707	0,153534213483	diff	0,377488972615	0,00745863106371
4	0	$-0{,}0$	$-0{,}103568096603$	diff	0,103568096603	0,0121031928074
	$1/4$	$-0{,}41529428423$	$-0{,}374833556813$	diff	0,0974266416695	0,00596305523493
	$1/2$	$-0{,}462929616545$	$-0{,}576275942849$	diff	0,244845700626	0,00502439052558
	$-1/2$	0,142787127552	0,428100988728	spl	1,99817634871	0,00786091593914
	$-1/4$	0,246636937707	0,11174267883	spl	0,546934535155	0,00800655974572
4	0	$-0{,}0$	$-0{,}406746663492$	spl	0,406746663492	0,00652894879177
	$1/4$	$-0{,}41529428423$	$-0{,}448631458742$	spl	0,0802736174752	0,00627551573627
	$1/2$	$-0{,}462929616545$	$-0{,}454744096152$	spl	0,0176819976522	0,00708072708981
	$-1/2$	0,142787127552	0,0938597561839	diff	0,342659539464	0,00942899286987
	$-1/4$	0,246636937707	0,290706461664	diff	0,178681767489	0,0097921399823
8	0	$-0{,}0$	$-0{,}0177906159806$	diff	0,0177906159806	0,0121025512047
	$1/4$	$-0{,}41529428423$	$-0{,}434838969532$	diff	0,0470622545109	0,00944374973133
	$1/2$	$-0{,}462929616545$	$-0{,}429838614744$	diff	0,0714817125939	0,0104837876629
	$-1/2$	0,142787127552	0,164302232108	spl	0,150679581027	0,0117625017885
	$-1/4$	0,246636937707	0,43541685672	spl	0,765416246115	0,0118600253946
8	0	$-0{,}0$	$-0{,}189495703506$	spl	0,189495703506	0,011630331638
	$1/4$	$-0{,}41529428423$	$-0{,}368404518462$	spl	0,112907322708	0,0112909238244
	$1/2$	$-0{,}462929616545$	$-0{,}458927916166$	spl	0,00864429545274	0,0193199396637

n	x	$y_k = f(x)$	y_int	pol	**Error relativo**	**Tiempo de cómputo**
	$-1/2$	0,142787127552	0,138944204909	diff	0,0269136490756	0,023808591958
	$-1/4$	0,246636937707	0,245061304459	diff	0,00638847231247	0,0311543009514
16	0	$-0,0$	$-0,000494705457066$	diff	0,000494705457066	0,0216220100513
	$1/4$	$-0,41529428423$	$-0,414594674005$	diff	0,00168461318058	0,0319453970462
	$1/2$	$-0,462929616545$	$-0,460327445613$	diff	0,00562109409103	0,0226537071482
	$-1/2$	0,142787127552	0,141770752843	spl	0,00711811160101	0,0198184649399
	$-1/4$	0,246636937707	0,292242991092	spl	0,184911691691	0,0192981251728
16	0	$-0,0$	$-0,0184401735992$	spl	0,0184401735992	0,0256718061179
	$1/4$	$-0,41529428423$	$-0,404061996171$	spl	0,0270465751299	0,0206685884805
	$1/2$	$-0,462929616545$	$-0,461843181556$	spl	0,00234686861852	0,0190896043044
	$-1/2$	0,142787127552	0,1427630408	diff	0,000168689941292	0,0533030667966
	$-1/4$	0,246636937707	0,246634912923	diff	$8,20957485681e-06$	0,0533332221222
32	0	$-0,0$	$-3,83824555686e-07$	diff	$3,83824555686e-07$	0,0542398066979
	$1/4$	$-0,41529428423$	$-0,415293385191$	diff	$2,16482445618e-06$	0,0524336951759
	$1/2$	$-0,462929616545$	$-0,462913306652$	diff	$3,52319070007e-05$	0,0734756964116
	$-1/2$	0,142787127552	0,142300374891	spl	0,00340893937324	0,0370531959192
	$-1/4$	0,246636937707	0,254704980693	spl	0,032712224944	0,0448563676178
32	0	$-0,0$	$-0,00446981582699$	spl	0,00446981582699	0,0359053687387
	$1/4$	$-0,41529428423$	$-0,412571540349$	spl	0,00655617951974	0,0470756712608
	$1/2$	$-0,462929616545$	$-0,462646295074$	spl	0,000612018460719	0,0390158584932

3.2. Pregunta 2

3.2.1. Función erf_teo(y, n)

Antes de explicar la función erf_teo(y, n), se explicarán dos simples funciones más:

- get_roots(n): Recibe un número entero n que corresponde al grado del Polinomio de Legendre a utilizar, el cual por condición del laboratorio debe estar en $4 \leq n \leq 7$, y usando la función 'scipy.special.orthogonal.p_roots(n)[0]', se obtiene un arreglo con las raices del Polinomio de Legendre de grado n. El código a continuación:

```python
import scipy.special as sps

def get_roots(n):

    return sps.orthogonal.p_roots(n)[0]
```

- get_coefs(n): Recibe un número entero n que corresponde al grado del Polinomio de Legendre a utilizar, el cual por condición del laboratorio debe estar en $4 \leq n \leq 7$, y usando la función 'scipy.special.orthogonal.p_roots(n)[1]', se obtiene un arreglo con los coeficientes C_i asociados a las raices del Polinomio de Legendre de grado n. El código a continuación:

```python
import scipy.special as sps

def get_coefs(n):

    return sps.orthogonal.p_roots(n)[1]
```

- Luego de explicar las dos funciones anteriores, es posible explicar la función pedida en un comienzo, $erf\_teo(y, n)$, la cual recibe como parámetros y, que corresponde al límite superior de la integral $erf(y)$, y n que corresponde al grado del Polinomio de Legendre, cuyas raices serán utilizadas para el método de la cuadratura de Gauss. El código a continuación:

```
import math as m

def erf_teo(y, n):

#Se comprueba que 'n' este dentro del rango pedido.
    if 4 <= n <= 7:

#Se obtienen las raices y los coeficientes necesarios para la cuadratura.
        x_i = get_roots(n)
        c_i = get_coefs(n)

#La cuadratura de Gauss solo es valida en los limites de integracion [-1, 1], por
#lo que se deben cambiar los limites de la integral erf(y) a estos. Luego de
#realizar el cambio se obtiene un factor constante denominado 'factor_1'.
        factor_1 = y/m.sqrt(m.pi)

        res = 0
#Es en este ciclo donde se realiza la cuadratura como tal, se hace una sumatoria de
#la multiplicacion de cada coeficiente Ci por la funcion evaluada en la raiz del
#Polinomio de Legendre correspondiente. En este caso, como se debieron mover los
#limites de integracion, la funcion no se evalua directamente en las raices y ahora
#se evalua en el valor contenido por la variable 'x'.
        for i in range(n):
            x = (y*x_i[i] + y)/2
            res += c_i[i]*m.exp(-x**2)

#Finalmente se multiplica el resultado obtenido de la sumatoria por el factor
#constante explicado anteriormente.
        return res*factor_1
    else:
        print 'n value out of range'
```

3.2.2. Tabla de raices del Polinomio de Legendre

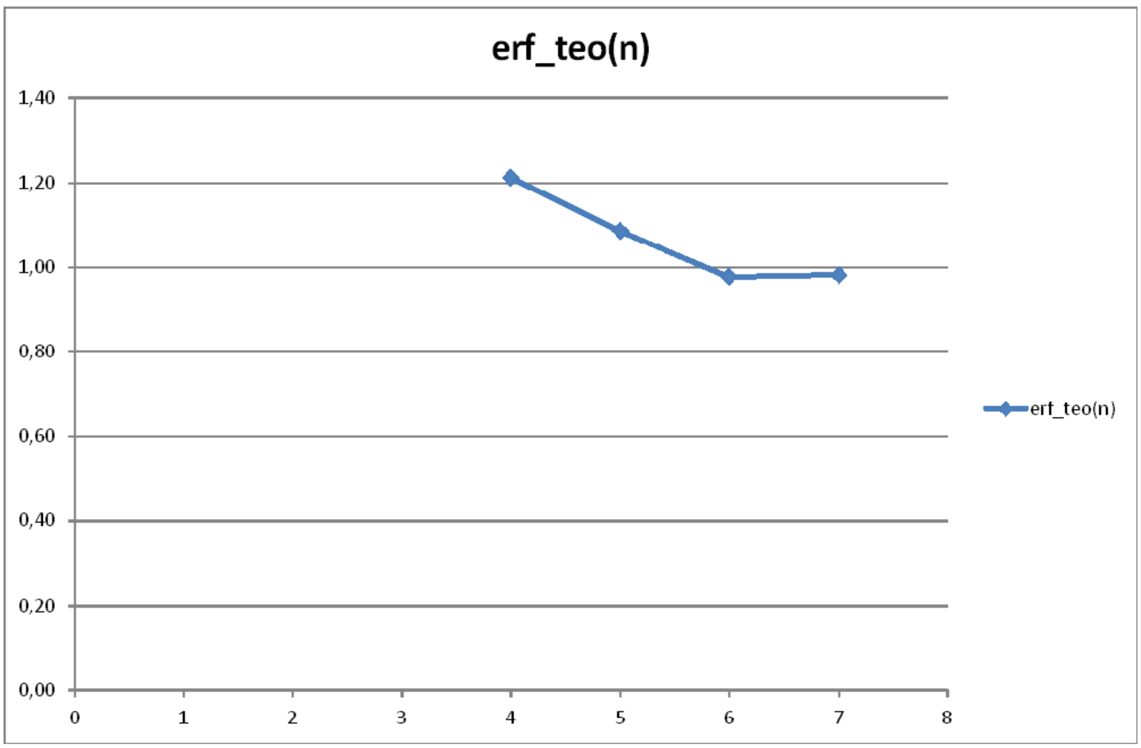
n	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
4	$-0{,}861136311594$	$-0{,}339981043585$	$0{,}339981043585$	$0{,}861136311594$			
5	$-0{,}906179845939$	$-0{,}538469310106$	$-1{,}25197490269e-16$	$0{,}538469310106$	$0{,}906179845939$		
6	$-0{,}932469514203$	$-0{,}661209386466$	$-0{,}238619186083$	$0{,}238619186083$	$0{,}661209386466$	$0{,}932469514203$	
7	$-0{,}949107912343$	$-0{,}741531185599$	$-0{,}405845151377$	$6{,}97980421714e-18$	$0{,}405845151377$	$0{,}741531185599$	$0{,}949107912343$

3.2.3. Tabla de c_i y valores de erf() obtenidos

n	c_1	c_2	c_3	c_4	c_5	c_6	c_7	$erf\_teo(10,n)$
4	0,347854845137	0,652145154863	0,652145154863	0,347854845137				1,2119475604
5	0,236926885056	0,478628670499	0,568888888889	0,478628670499	0,236926885056			1,08582368212
6	0,171324492379	0,360761573048	0,467913934573	0,467913934573	0,360761573048	0,171324492379		0,97790965366
7	0,129484966169	0,279705391489	0,381830050505	0,417959183673	0,381830050505	0,279705391489	0,129484966169	0,982074829295

3.2.4. Gráfico

El siguiente gráfico muestra como varía el valor de $erf\_teo(10, n)$ a medida que el valor de n aumenta desde 4 hasta 7. Se puede apreciar que para $n = 7$, el valor se acerca más a 1, que es el valor real de la función.



3.2.5. Función erf_real()

Para obtener el valor 'real' de la integral se utilizó la función 'scipy.integrate.quad(func,a,b)', la cual recibe la función a integrar y los límites de la integral a y b. El código a continuación:

```python
import scipy.integrate as spi

#Recibe como parametro el limite superior de la integral
def erf_real(y):

#factor representa la parte constante de la integral, y func es la funcion a integrar
    factor = 2/m.sqrt(m.pi)
    func = lambda x: m.exp(-x**2)

#Se utiliza scipy.integrate.quad() para obtener el valor de la integral definida entre
#[0, y].
    return factor*spi.quad(func,0,y)[0]
```

3.2.6. Error relativo

A continuación una tabla con los valores de erf_teo(y, n), erf_real(y), y el error relativo entre estos. Para ambos $y = 10$.

n	$erf\_teo(10, n)$	$erf\_real(10)$	$err\_teo\_real(10, n)$
4	1,2119475604	1,0	0,211947560402
5	1,08582368212	1,0	0,0858236821154
6	0,97790965366	1,0	0,0220903463402
7	0,982074829295	1,0	0,0179251707053

4. Conclusiones

1. Sobre la primera pregunta, mirando y revisando los resultados de la tabla, se puede apreciar que el metodo de los Splines sería extrañamente menos preciso para interpolar el polinomio que el metodo de las diferencias divididas. Digo extraño porque al interpolar entre tramos más pequeños y con polinomios de solo grado 3, se debiesen obtener menos oscilaciones entre puntos, siendo así un problema mejor condicionado. También se puede notar que para 'n'es más pequeños, el método de las diferencias divididas se calcula más rapido y para 'n'es más grandes, se calcula más rapido el metodo de los Splines. Se podría concluir entonces que dejando un poco de lado la precisión, la cual tampoco es mala, para grandes cantidades de datos conviene optar por la opción de los Splines cúbicos para interpolar datos, pensando que el tiempo es un parámetro más crítico que la precisión.

2. Sobre la segunda pregunta, la tabla más importante es donde se compara el valor teorico con el valor real de la integral, donde se aprecia que incluso con 4 raices del polinomio, ya se obtiene una aproximación decente con un 21 % de error relativo, y que al aumentar a 7 raices, el error ya disminuye bastante llegando a tan solo un $1,79\,\%$. Se puede concluir que el método es bastante exacto y que como el grado con mayor exactitud es de 7, la función integrada podría considerarse como un polinomio de grado hasta $2n-1$, es decir, $2*7-1 = 13$.

5. Anexos

1. No es necesario poner anexos ya que cada input de prueba y su respectivo output ya están presentes en el informe a modo de tablas respondiendo a las preguntas del mismo.