Métodos Numéricos

Guía 5: Integración Numérica.
FORTRAN

Problema 1: Encuentre, haciendo los cálculos a mano, las aproximaciones a las siguientes integrales definidas utilizando las fórmulas del trapecio, Simpson y punto medio (simples):

a)

$$I_1 = \int_0^1 x^4 dx$$

b)

$$I_2 = \int_0^{\pi} \sin(x) dx$$

Trabaje con siete cifras significativas. Calcule el error absoluto y el error relativo en cada caso y para cada método.

Problema 2: Repita el Problema 1 dividiendo el intervalo de integración en dos subintervalos de igual tamaño:

a)

$$I_1 = \int_0^{0.5} x^4 dx + \int_{0.5}^1 x^4 dx$$

b)

$$I_2 = \int_0^{\pi/2} \sin(x) dx + \int_{\pi/2}^{\pi} \sin(x) dx$$

Trabaje con siete cifras significativas. Calcule el error absoluto y el error relativo en cada caso y compare con los resultados del problema 1.

Problema 3:

a) Realice un programa que encuentre las aproximaciones numéricas S_M, S_T y S_S a la integral:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

utilizando la regla compuesta del *punto medio*, *trapecio* y la de *Simpson*, respectivamente. Para los últimos dos métodos, se debe evaluar el integrando $f(x)$ en $n+1$ puntos equiespaciados x_i $(i = 0, 1, 2, \ldots, n)$ con espaciamiento $h = (b-a)/n$. En el caso del punto medio, se evalúa en los $x_i + h/2$ $(i = 0, 1, 2, \ldots, n-1)$. El programa debe utilizar un módulo de precisión y un módulo con tres subrutinas `pmedio`, `trapecio` y `simpson`. Las subrutinas deben incluir entre sus argumentos a los límites de integración y el número de puntos o intervalos empleados.

b) Utilizando el programa realizado en el punto anterior, encuentre las tres aproximaciones numéricas S_M, S_T y S_S a la integral:

$$I = \int_0^1 e^{-x} dx\,.$$

Utilice un espaciamiento $h_1 = 0,05$ con doble precisión. Luego repita el procedimiento disminuyendo su espaciamiento a la mitad, $h_2 = h_1/2 = 0,025$.

c) Teniendo en cuenta que es posible conocer el resultado exacto de la integral en cuestión, evalúe el error $\varepsilon(h) = |S - I|$, para $h = 0.05$ y $h/2 = 0.025$. Verifique que el cociente de precisión, definido como

$$Q = \frac{\varepsilon(h)}{\varepsilon(h/2)}\,,$$

toma un valor aproximado a 4 cuando se usa la regla del *punto medio* o la del *trapecio*, y un valor aproximado a 16 cuando se usa la regla de *Simpson*. Teniendo en cuenta la expresión del error de truncamiento en cada caso, justifique este resultado.

Consejo: tener cuidado con *Simpson* en elegir siempre un número par de intervalos, *i.e*, un número impar de puntos (pruebe con una integral que conoce su resultado qué resultado le da cuando usa un número impar de intervalos).

Problema 4: Usando el programa del punto a) del problema 3, aproxime las siguientes integrales variando la cantidad de puntos n (y por lo tanto h), desde 2 hasta 100, considerando sólo los valores pares ($n = 2, 4, 6, ..., 98, 100$), utilizando los métodos de punto medio, trapecio y Simpson compuestos. Calcule el valor exacto de las integrales, usando la primitiva y evaluándola en los extremos y estime los errores absolutos cometidos en cada caso. Para cada función, genere dos archivos de resultados: uno conteniendo los valores de la integrales y otro conteniendo los errores cometidos, en función de n. Grafique el valor de la integral en función de n para los tres métodos en un mismo gráfico. En otro gráfico, muestre el error en función de n para los tres métodos juntos.

a)

$$\int_0^{0.5} \frac{2}{x-4}\, dx$$

b)

$$\int_1^{1.5} x^2 \ln(x)\, dx$$

Sugerencia 1: antes de programar grafique el integrando y analice su comportamiento dentro del intervalo dado. Si puede estime el resultado, al menos el signo del área esperada. Este análisis previo da criterio para saber si el resultado numérico es correcto.

Sugerencia 2: abra archivos de escritura con atribuciones como status, etc... y escriba con formato de escritura exponencial, en columnas separadas con los espacios que elija. Es buena costumbre también escribir el nombre arriba de cada columna de datos.

Problema 5: *Comparación de los métodos*

Realice este problema para cada una de las precisiones que conoce: simple, doble, etc.. Repita el cálculo empleando los algoritmos del punto medio, trapecio y Simpson; utilizando el programa del problema 3.

a) Escriba un programa que calcule la integral

$$I = \int_0^1 e^{-t} dt = 1 - e^{-1}$$

utilizando todos los métodos de integración estudiados.

b) Calcule el error relativo $\epsilon_r = |(numerico - exacto)/exacto|$ para distintos valores del número de puntos N, donde se evaluará la función que se desea integrar. Considere valores de N dados por $N = 10 \times 2^i + 1$ con $i = 0, 1, ..., 9$.

c) Para cada precisión, genere un gráfico *log-log* comparativo de los errores relativos *versus* N. Observe que

$$\epsilon_r \approx CN^\alpha => \log \epsilon_r = \alpha \log N + constante.$$

Esto significa que una dependencia como ley de potencia aparece como una línea recta en un gráfico *log-log*.

d) Use el gráfico para estimar las leyes de potencia de la dependencia del error ϵ_r con el número de puntos N y para determinar el número cifras decimales de precisión en cada método. Haga esto para el error del algoritmo. Junto con los gráficos del error, grafique funciones de la forma $f(x) = A \times x^{-\beta}$, siendo β el exponente apropiado para cada caso (2 y 4).

Ejercicios Complementarios

Problema 6: Modifique el programa del problema 3.a) para leer archivos de datos que contienen en la primera columna los puntos de integración y en la segunda columna el valor de la función a integrar. Copie los archivos `mediciones1-p6-g5.dat` y `mediciones2-p6-g5.dat` (que están cerca de la guía 5) y realice ambas integrales. El primer archivo corresponde a un muestreo con 629 puntos y el segundo con 10001 puntos del mismo intervalo de integración. Observe los datos medidos y su periodicidad.

Problema 7: Idem problema 4, para las siguientes integrales:

a)

$$\int_{0.5}^{1} x^4 dx$$

b)

$$\int_{0}^{\frac{\pi}{4}} x \sin x dx$$

Problema 8: *Integración numérica en dos dimensiones*

a) Haga un programa que integre funciones en la región $a \leq x \leq b\,;\; c \leq y \leq d$ siguiendo el código delineado en la clase teórica, usando el método de cuadratura de Simpson en cada coordenada.

b) Evalue numéricamente con no menos de 8 cifras significativas las integrales

$$\int_0^2 dx \int_0^1 dy\, e^{-x\,y} \qquad ; \qquad \int_{1.4}^2 dx \int_1^{3/2} dy\, \ln{(x+2y)}$$

c) Modifique el programa para permitir que los límites de integración en y sean función de x y evalue la integral

$$\int_0^1 dx \int_0^{\sqrt{1-x^2}} dy\, e^{-x\,y}$$

Problema 9: *Fórmula de Integración de Newton–Cotes.*
Estas fórmulas se basan en la idea de integrar una función polinomial en vez de $f(x)$, i.e.

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_n(x)dx$$

donde $P_n(x)$ es el polinomio interpolante de grado n para ciertos valores de x que se escogen apropiadamente en el intevalo $[a, b]$. Muestre que si se eligen puntos equiespaciados y que incluyan los extremos (fórmula cerrada), los casos $n = 1$ y $n = 2$ corresponden a la regla del *trapecio* y de *Simpson*, respectivamente. *Ayuda*: use la forma de Lagrange para el polinomio interpolante, y calcule los pesos de la fórmula de integración resultante.