Tema 1 - Más sobre errores de truncamiento

Curso de Física Computacional

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

Contenido

Contenido

Contenido

Contenido

Contenido

Problema 1

Considera la siguiente suma finita

$$S_N^{(1)} = \sum_{n=1}^{2N} (-1)^n \frac{n}{n+1} \qquad (1)$$

Si sumamos de manera separada los valores impares y los pares de x, tendremos dos sumas:

$$S_N^{(2)} = -\sum_{n=1}^{N} \frac{2n-1}{2n} + \sum_{n=1}^{N} \frac{2n}{2n+1} \qquad (2)$$

Tercera suma

Podemos eliminar la diferencia mediante una combinación entre las dos sumas, quedando de la siguiente manera

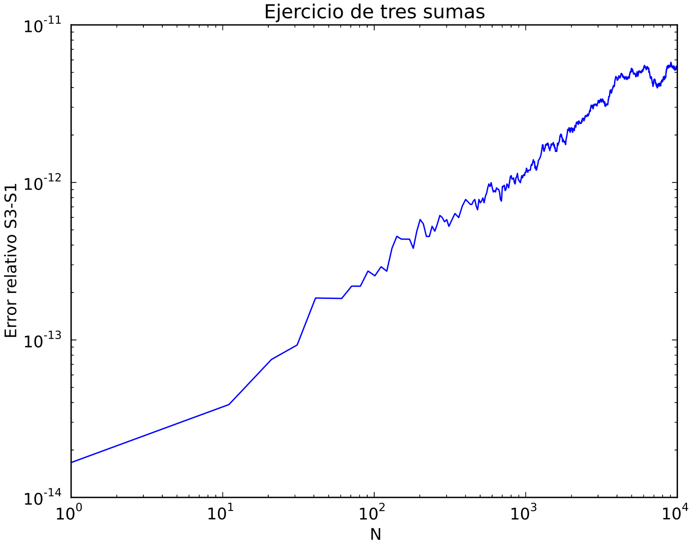
$$S_N^{(3)} = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{2n(2n+1)} \tag{3}$$

Sabemos que aunque el valor de las tres sumas $S_N^{(1)}$, $S_N^{(2)}$, $S_N^{(3)}$, es el mismo, pero el resultado númerico puede ser diferente.

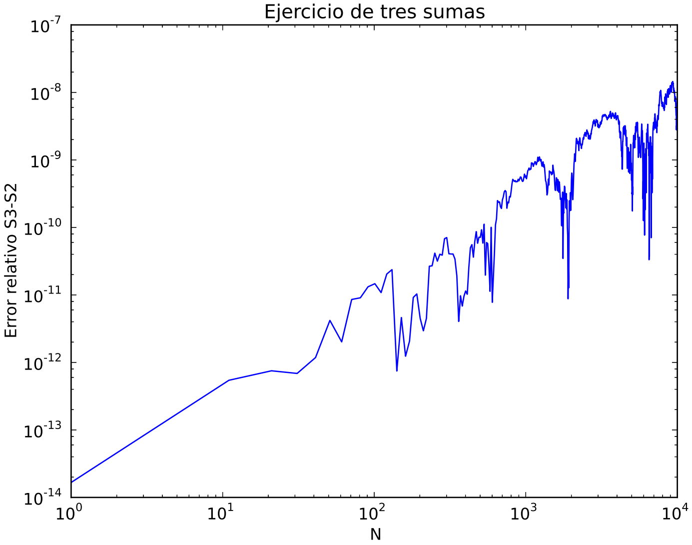
Ejercicio a resolver

1. Escribe un programa que calcule $S_N^{(1)}$, $S_N^{(2)}$, $S_N^{(3)}$.
2. Supongamos que $S_N^{(3)}$ es el valor exacto de la suma. Grafica el error relativo contra el número de términos en la suma (tip: usa una escala log-log). Comienza con $N = 1$ hasta $N = 1000000$. Describe la gráfica.
3. Identifica en tu gráfica una región en donde la tendencia es casi lineal, ¿qué representa ésta sección con respecto al error?

Error relativo entre $S3$ y $S1$



Error relativo entre $S3$ y $S2$



Problema 2

Aunque tengamos el apoyo de una buena computadora, el cálculo de la suma de una serie requiere reflexión y cuidado.
Considera la serie:

$$S^{(u)} = \sum_{n=1}^{N} \frac{1}{n}$$

que será una suma finita mientras N sea finito.
Cuando hacemos la suma de manera analítica, no importa si se hace de manera ascendente: desde $n = 1, 2, 3, \ldots, N-1, N$, o descendente: desde $n = N, N-1, N-2, \ldots, 3, 2, 1$

$$S^{(d)} = \sum_{n=N}^{1} \frac{1}{n}$$

Sin embargo, debido a los errores por redondeo, cuando calculamos de manera analítica, el valor de las sumas no es el mismo, $S^{(u)} \neq S^{(d)}$

1. Escribe un programa que calcule $S^{(u)}$ y $S^{(d)}$ como función de N.
2. Grafica (log-log) la diferencia relativa entre la suma relativa contra N.
3. Identifica en tu gráfica una región en donde la tendencia es casi lineal, ¿qué representa ésta sección con respecto al error?

Contenido

Volvamos a nuestro sistema decimal tradicional. Supongamos ahora que los números se pueden representar de la siguiente manera:

$$fl(x) = \pm(0.d_1 d_2 d_3 \ldots d_t d_{t+1} d_{t+2} \ldots) \times 10^e$$

Si la precisión elegida es t, entonces "recortar" el número definido arriba, pues no podemos representar los d_i para $i > t$.

En consecuencia, tenemos dos alternativas básicas para efectuar dicho recorte:

1. **Corte**: Ignorar los dígitos d_i cuando $i > t$

En consecuencia, tenemos dos alternativas básicas para efectuar dicho recorte:

1. **Corte**: Ignorar los dígitos d_i cuando $i > t$
2. **Redondeo**: Sumar 1 a d_t si $d_{t+1} \geq \frac{10}{2}$ e ignorar los restantes d_i para $i > t + 1$, o aplicar corte si $d_{t+1} < \frac{10}{2}$

Esto nos permite obtener una cota del error absoluto para ambos casos:

$$e_A = \begin{cases} 10^{-t} \times 10^e & \text{para corte} \\ \dfrac{1}{2} 10^{-t} \times 10^e & \text{para redondeo} \end{cases}$$

Y como definimos el error absoluto, también podemos definir un límite para el error relativo, que será:

Corte:

$$e_r \leq \frac{10^{-t} \times 10^e}{0.1 \times 10^e} = 10^{1-t}$$

Redondeo:

$$e_r \leq \frac{1}{2} \frac{10^{-t} \times 10^e}{0.1 \times 10^e} = \frac{1}{2} 10^{1-t}$$

Al valor 10^{1-t} lo identificaremos con la letra μ, y resulta ser importante porque nos da una idea del error relativo que cometemos al utilizar una representación de coma flotante. Suele denominarse como unidad de máquina o unidad de redondeo. El negativo del exponente de μ suele llamarse también *cantidad de dígitos significativos*.

Contenido

Errores de truncamiento

Sabemos que este error surge de aproximar procesos continuos mediante procedimientos discretos o de procesos "infinitos" mediante procedimientos "finitos".

Como ejemplo suele tomarse la diferenciación numérica como forma de aproximar el cálculo de una derivada en un punto (o su equivalente, la integración numérica), en tanto que para el caso de discretización, el ejemplo más es usual es la utilización de métodos iterativos para resolver sistemas de ecuaciones lineales.

En general, el error de truncamiento está asociado al uso de la serie de Taylor para aproximar funciones, de modo que estimar una cota del error no conlleva una dificultad mayor. Sin embargo, en él suelen interactuar el error inherente y/o el de redondeo, con lo que muchas veces su influencia no es bien advertida o es muy reducida.

Veamos un ejemplo clásico: Supongamos que queremos calcular una aproximación de $f'(x_0)$ para una función continua, pues no es posible obtener la derivada en forma analítica o resulta muy difícil. Por lo tanto, usaremos un entorno del punto x_0 para calcular $f'(x_0)$ utilizando solamente $f(x)$.

Para ello nos valdremos de la serie de Taylor. En efecto, para cualquier punto distante h de x_0 tendremos:

$$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2} + \\ + f'''(x_0)\frac{h^3}{6} + f^4(x_0)\frac{h^4}{24} + \dots$$

Para ello nos valdremos de la serie de Taylor. En efecto, para cualquier punto distante h de x_0 tendremos:

$$f(x_0+h) = f(x_0) + f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2} + \\ + f'''(x_0)\frac{h^3}{6} + f^4(x_0)\frac{h^4}{24} + \ldots$$

despejamos $f'(x_0)$, por tanto

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + \\ - \left[f''(x_0)\frac{h^2}{2} + f'''(x_0)\frac{h^3}{6} + f^4(x_0)\frac{h^4}{24} + \ldots \right]$$

Si el algoritmo que proponemos para aproximar $f'(x_0)$ es

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}$$

El error que se comete en la aproximación viene dado por:

$$\left[f'(x_0) - \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}\right] =$$

$$= \left[f''(x_0)\frac{h^2}{2} + f'''(x_0)\frac{h^3}{6} + f^4(x_0)\frac{h^4}{24} + \ldots\right]$$

El término de la derecha es el denominado error de truncamiento, pues es lo que se truncó a la serie de Taylor para aproximar el valor buscado.

Este error suele asociarse también con la convergencia (o la velocidad de convergencia), que suele representarse como $O(n)$ (generalmente, como $O(h^n)$, siendo n el parámetro que determina la velocidad o la convergencia.

En nuestro ejemplo, y dado que h generalmente es menor a 1, podemos decir que la aproximación es del tipo:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + O(h)$$

En donde el error que se comete es proporcional a h.

Se verifica que además están los términos con h^2, h^3, etc. pero como $h < 1$ se tiene que $h^2 << h$, $h^3 << h^2$, etc. por lo que la influencia de éstos es mucho menos y despreciable.

Supongamos por un momento que todas las derivadas $f^i(x_0) = 0$ para $i \geq 3$. Entonces, tenemos que:

$$\left[f'(x_0) - \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \right] = \frac{h}{2} |f''(\xi)|$$

con $\xi \in [x, x+h]$

por lo que, si conociéramos $f''(\xi)$ se podría acotar el error que se está cometiendo por despreciar el término $h/2 f''(x_0)$

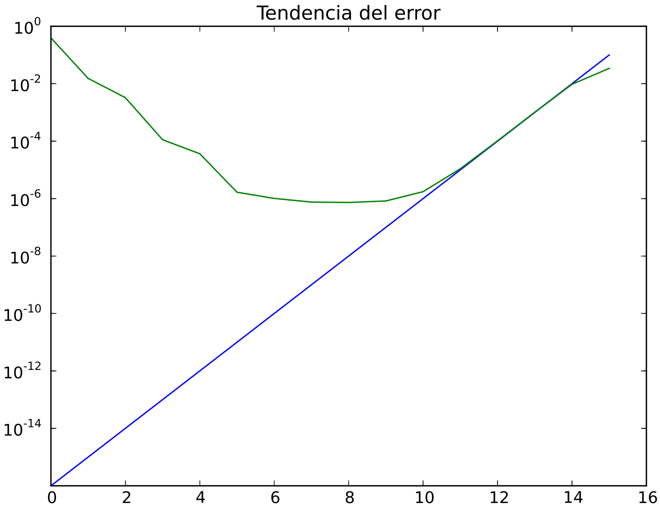
Como ejercicio, apliquemos el algortimo para obtener la derivada en $x_0 = 0.45$, es decir, $f'(0.45)$ de la función $f(x) = \sin(2\pi x)$.

Considera el valor exacto de la derivada $f'(0.45) = 2\pi cos(2\pi * 0.45) = -5.97566$, toma el valor de $h = 0.1$

Construye una tabla

h	$f'(x_0)$	Error
10^{-1}		
10^{-2}		
10^{-3}		
10^{-4}		
10^{-5}		
10^{-6}		
...		
10^{-16}		

Gráfica de la tendencia del error



h	$f'(x_0)$	Error
1e-01	-6.180340	3.425226e-02
1e-02	-6.032711	9.547183e-03
1e-03	-5.981725	1.014908e-03
1e-04	-5.976274	1.027353e-04
1e-05	-5.975725	1.093152e-05
1e-06	-5.975670	1.745271e-06
1e-07	-5.975665	8.269814e-07
1e-08	-5.975664	7.339002e-07
1e-09	-5.975665	7.561951e-07
1e-10	-5.975666	1.016302e-06

h	$f'(x_0)$	Error
1e-11	-5.975670	1.666570e-05
1e-12	-5.975442	3.642056e-05
1e-13	-5.976331	1.122121e-04
1e-14	-5.995204	3.270657e-03
1e-15	-5.884182	1.530843e+02
1e-16	-8.326673	3.934315e+01

Si analizamos en detalle, vemos que la tendencia del error de truncamiento es lineal (en escala logarítmica) pero para $h < 10^{-8}$ el error aumenta y no sigue una ley determinada. Este "empeoramiento" de la aproximación se debe a la incidencia del error de redondeo, es decir, la unidad de máquina pasa a ser más importante que el error de truncamiento.

Es por eso que no siempre el utilizar una "mejor precisión" ayuda a mejorar los resultados finales. En este tipo de problemas, es conveniente que el error que domine los cálculos sea el de truncamiento o dediscretización.

Contenido

Desde que se creó la primera computadora, la acumulación del error de redondeo ha sido uno de los "dolores de cabeza" de los especialistas, como se puede ver en esta frase:

"La extraordinaria rapidez de las actuales computadoras significa que en un problema típico se realizan millones de operaciones con coma (punto) flotante. Esto quiere decir que la acumulación de errores de redondeo puede ser desastrosa".

En muchas ocasiones la inestabilidad está dada por la incidencia de unos pocos errores de redondeo y no por la acumulación de millones de ellos.

Un ejemplo en ese sentido está dado por el algoritmo del ejemplo inicial, en el cual el error está dado por el redondeo de y_{n-1}, que se propaga a medida que el valor es cada vez más chico.

Ejercicio

Calcula el valor de e para n suficientemente grandes, a partir de la su definición:

$$f(n) = \lim_{n \to \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$$

Completa la tabla:

n	f(n)	$\lvert \exp - f(n) \rvert$
10^1		
10^2		
10^3		
...		
10^{14}		
10^{15}		

Discute tus resultados!