Cálculo Numérico 2022
Trabajo Práctico 6

Diferenciación e integración numérica

Ejercicio 1 (Aula): El objetivo de este ejercicio es estimar numéricamente la derivada de la función $f(x) = \exp(x) - 2x^2 + 3x - 1$ en el punto $x_0 = 0.0$. Realice un script en Octave para tal fin:

(a) Utilice primero la fórmula de dos puntos progresiva barriendo un rango de tamaños para h y observando como varía el error absoluto en la estimación de la derivada primera de la función. Grafique la curva del error para $h = [10^{-11}, 10^{-1}]$ y saque conclusiones.

(b) Tomando $h = 0.1$ compruebe que se verifica la cota del error teórico para esta fórmula

$$|f'(x_0) - P_1'(x_0)| \leq \frac{\|f''\|_\infty}{2} h$$

(c) Repita el ejercicio $3a$ utilizando ahora la fórmula de diferenciación centrada de tres puntos. Saque conclusiones comparando los resultados obtenidos con aquellos del inciso $3a$.

Ejercicio 2: Mediante los polinomios de Taylor de tercer grado, obtenga la fórmula para la derivada segunda centrada de $f(x)$ con $\xi \in (x - h, x + h)$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi)$$

Cuadratura de Newton Cotes: La siguiente función de Octave calcula los pesos o coeficientes de las reglas de Newton Cotes para estimar la integral definida de una función en el intervalo $[0, 1]$. El parámetro de entrada `n` corresponde al número de puntos de la regla de Newton Cotes (no al grado del polinomio).

```
function w = pesosNC(n)
% function w = pesosNC(n)
% se calculan los pesos
% de la formula de Newton-Cotes de n puntos

x = linspace(0,1,n);
A = ones(n,n);
for i=2:n
    A(i,:) = A(i-1,:) .* x;
end
b = 1./(1:n)';

w = A\b;
```

Ejercicio 3 (Aula):

(a) Justifique el cálculo de los coeficientes que realiza la función `pesosNC.m` anterior.

(b) Desarrolle y obtenga la regla del trapecio ($n = 2$ puntos) y compare los coeficientes con la función `pesosNC.m`.

(c) Desarrolle y obtenga la fórmula de Newton Cotes para $n = 3$ puntos (regla de Simpson) en el intervalo $[0, 1]$.

(d) Dado que a partir de la fórmula de integración en un intervalo se puede deducir la expresión correspondiente para cualquier otro intervalo mediante un cambio de variables lineal, entonces tendremos la misma exactitud en ambas fórmulas. Dada la fórmula

$$\int_c^d f(t)dt \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(t_i)$$

calcule la nueva fórmula

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

mediante el cambio de variable $x = \lambda(t)$, donde t recorre el $[c, d]$ y $\lambda(t)$ recorre el $[a, b]$.

(e) Con la información de los incisos anteriores obtenga la regla de Simpson para un intervalo genérico $[a, b]$. Compare los coeficientes con lo que se pueden obtener con la función `pesosNC.m`.

Reglas de Newton Cotes compuestas: La siguiente función de Octave calcula la integral definida en un intervalo $[a, b]$ de una función f utilizando las reglas de cuadratura de Newton Cotes compuestas. En el comentario de la función se describe los parámetros de entrada y de salida.

n=2 trapecios, n=3 simpson

```
function Q = intNCcompuesta(f,a,b,L,n)
% function Q = intNCcompuesta(f,a,b,L,n)
% aproxima la integral de f sobre [a,b]
% utilizando la formula de Newton-Cotes compuesta
% de  n  puntos, subdividiendo en  L  subintervalos

y = linspace(a,b,L+1);
h = (b-a)/L;

% calculamos los pesos una sola vez
w = pesosNC(n);

Q = 0;
for i=1:L
    x = linspace(y(i),y(i+1),n);
    fx = f(x);
    Q = Q + h*(fx*w);
end
```

Ejercicio 4 (Aula): Considerando que $Q_n(f, a, b)$ denota la fórmula de Newton-Cotes de n puntos en el intervalo $[a, b]$.

(a) Completar los siguientes cuadros y verificar si el error entre $\int_a^b f(x)\,dx$ y $Q_n(f, a, b)$ tiende a cero a medida que n crece.

$f(x) = \operatorname{sen}(\pi x)$, en $[a, b] = [0, 5]$

n	$\left\vert \int_0^5 f(x)\,dx - Q_n(f, 0, 5) \right\vert$
2	6.366197723675791e-01
3	2.696713560965754e+00
4	3.884215036559223e+00
5	2.484110549919778e+00
6	6.366197723675808e-01
7	1.989776824033656e+00
8	9.858687005451889e-01
9	7.038675768530003e-01
10	4.029023077089628e-01
11	1.580999113822456e-01
12	9.677959804616432e-02
13	2.526243801386818e-02

$f(x) = \frac{1}{1+x^2}$, en $[a, b] = [-5, 5]$

n	$\left\vert \int_{-5}^5 f(x)\,dx - Q_n(f, -5, 5) \right\vert$
2	2.362186149274648
3	4.048070260981763
4	0.665353570089127
5	0.372796228850267
6	0.439109226197739
7	1.123647139580110
8	0.152192875858229
9	1.246312626753851
10	0.348183636047876
11	1.926499022520122
12	0.497971406486806
13	3.059738049240526

Vemos que NO se cumple que al aumentar el n se reduzca el error.

El L se dejó fijo en 1.

Sugerencia: Utilice la función `intNCcompuesta.m` para $L = 1$.

(b) Para cada una de las funciones del item anterior, realizar el gráfico de f y de los polinomios interpolantes en n puntos equidistribuidos del intervalo $[a, b]$, para los valores de n en la tabla. Relacionar los resultados del item anterior con los gráficos obtenidos.

(c) ¿Es cierto que $\lim_{n\to\infty} Q_n(f, a, b) = \int_a^b f(x)\,dx$, para toda función f? FALSO. En la tabla vemos que el error no se reduce por incrementar el n.

Ejercicio 5: Consideremos las fórmulas del trapecio compuesta $Q_2^L(f, a, b)$ y de Simpson compuesta $Q_3^L(f, a, b)$ con parámetro de discretización $h = \dfrac{b-a}{L}$ en el intervalo $[a, b]$, para aproximar $\int_a^b f(x)\,dx$. Denotemos por $E_L^{\text{trap}} = \left\vert \int_a^b f(x)\,dx - Q_2^L(f, a, b) \right\vert$ y $E_L^{\text{simp}} = \left\vert \int_a^b f(x)\,dx - Q_3^L(f, a, b) \right\vert$ a los respectivos errores de aproximación.

(a) Completar las siguientes tablas y verificar si el error tiende a cero. En caso afirmativo, determinar en qué factor se reduce el error cuando se duplica la cantidad de subintervalos.

$f(x) = \operatorname{sen}(\pi x)$, en $[a, b] = [0, 5]$

		Regla de los trapecios			**Regla de Simpson**		
h	L	$Q_2^L(f, 0, 5)$	E_L^{trap}	$\frac{E_{L/2}^{\text{trap}}}{E_L^{\text{trap}}}$	$Q_3^L(f, 0, 5)$	E_L^{simp}	$\frac{E_{L/2}^{\text{simp}}}{E_L^{\text{simp}}}$
$1/2$	10	0.500000000000000	1.3662e-01	-	0.638071187457699	1.4514e-03	-
$1/4$	20	0.603553390593274	3.3066e-02	1.6142	0.636705451823217	8.5679e-05	16.9401
$1/8$	40	0.628417436515731	8.2023e-03	5.2710	0.636625053462161	5.2811e-06	16.2238
$1/16$	80	0.634573149225554	2.0466e-03	4.2139	0.636620101299282	3.2893e-07	16.0553
$1/32$	160	0.636108363280850	5.1141e-04	4.0494	0.636619792908119	2.0541e-08	16.0138
$1/64$	320	0.636491935501302	1.2784e-04	4.0121	0.636619773651089	1.2835e-09	16.0034
$1/128$	640	0.636587814113643	3.1958e-05	4.0030	0.636619772447796	8.0215e-11	16.0009
$1/256$	1280	0.636611782864257	7.9895e-06	4.0008	0.636619772372594	5.0134e-12	16.0000
$1/512$	2560	0.636617774995512	1.9974e-06	4.0002	0.636619772367895	3.1408e-13	15.9622
$1/1024$	5120	0.636619273024798	4.9934e-07	4.0000	0.636619772367600	1.9096e-14	16.4477
$1/2048$	10240	0.636619647531900	1.2484e-07	4.0000	0.636619772367584	2.7756e-15	6.8800
$1/4096$	20480	0.636619741158661	3.1209e-08	4.0000	0.636619772367582	1.4433e-15	1.9231

$$f(x) = \frac{1}{1+x^2}, \text{ en } [a,b] = [-5,5]$$

		Regla de los trapecios			**Regla de Simpson**		
h	L	$Q_2^L(f,-5,5)$	E_L^{trap}	$\frac{E_{L/2}^{\text{trap}}}{E_L^{\text{trap}}}$	$Q_3^L(f,-5,5)$	E_L^{simp}	$\frac{E_{L/2}^{\text{simp}}}{E_L^{\text{simp}}}$
1/2	20	2.746208162460220	5.9337e-04	-	2.746793958575625	7.5753e-06	-
1/4	40	2.746647509546774	1.5402e-04	3.8525	2.746801516800297	1.7090e-08	443.2669
1/8	80	2.746763014986916	3.8519e-05	3.9987	2.746801532822024	1.0680e-09	16.0015
1/16	160	2.746791903363247	9.6305e-06	3.9997	2.746801533823259	6.6773e-11	15.9945
1/32	320	2.746799126208253	2.4077e-06	3.9999	2.746801533885858	4.1736e-12	15.9991
1/64	640	2.746800931966454	6.0192e-07	4.0000	2.746801533889770	2.6201e-13	15.9288
1/128	1280	2.746801383408942	1.5048e-07	4.0000	2.746801533890014	1.8208e-14	14.3902
1/256	2560	2.746801496269743	3.7620e-08	4.0000	2.746801533890028	3.9968e-15	4.5556
1/512	5120	2.746801524484959	9.4051e-09	4.0000	2.746801533890032	0	Inf
1/1024	10240	2.746801531538765	2.3513e-09	4.0000	2.746801533890020	1.1990e-14	0
1/2048	20480	2.746801533302214	5.8782e-10	4.0000	2.746801533890029	3.1086e-15	3.8571
1/4096	40960	2.746801533743109	1.4692e-10	4.0009	2.746801533890057	2.4869e-14	0.1250

$$f(x) = |x|^{3/2}, \text{ en } [a,b] = [0,5]$$

		Regla de los trapecios			**Regla de Simpson**		
h	L	$Q_2^L(f,0,5)$	E_L^{trap}	$\frac{E_{L/2}^{\text{trap}}}{E_L^{\text{trap}}}$	$Q_3^L(f,0,5)$	E_L^{simp}	$\frac{E_{L/2}^{\text{simp}}}{E_L^{\text{simp}}}$
1/2	10	22.42605461848311	6.5375e-02	-	22.36111889443117	4.3917e-04	-
1/4	20	22.37735282544416	1.6673e-02	3.9210	22.36075748413030	7.7763e-05	5.6476
1/8	40	22.36490631945876	4.2266e-03	3.9448	22.36069351735826	1.3796e-05	5.6365
1/16	80	22.36174671788338	1.0670e-03	3.9612	22.36068220465184	2.4836e-06	5.5549
1/32	160	22.36094833295972	2.6861e-04	3.9723	22.36068020452440	4.8349e-07	5.1369
1/64	320	22.36074723663323	6.7516e-05	3.9785	22.36067985092944	1.2989e-07	3.7222
1/128	640	22.36069669735538	1.6976e-05	3.9770	22.36067978842090	6.7383e-08	1.9277
1/256	1280	22.36068401565451	4.2946e-06	3.9529	22.36067977737079	5.6333e-08	1.1962
1/512	2560	22.36068083694173	1.1159e-06	3.8486	22.36067977541734	5.4380e-08	1.0359
1/1024	5120	22.36068004079843	3.1976e-07	3.4898	22.36067977507199	5.4034e-08	1.0064
1/2048	10240	22.36067984150366	1.2047e-07	2.6544	22.36067977501105	5.3973e-08	1.0011
1/4096	20480	22.36067979163409	7.0596e-08	1.7064	22.36067977500021	5.3963e-08	1.0002

(b) ¿Es cierto en general que $\displaystyle\lim_{L\to\infty} Q_2^L(f,a,b) = \int_a^b f(x)\,dx$, para toda función f? En caso afirmativo, ¿con qué orden k tiende a cero el error? Es decir, determinar el valor de k tal que $E_L^{\text{trap}} = \mathcal{O}(h^k)$.

(c) ¿Es cierto en general que $\displaystyle\lim_{L\to\infty} Q_3^L(f,a,b) = \int_a^b f(x)\,dx$, para toda función f? En caso afirmativo, ¿con qué orden k tiende a cero el error? Es decir, determinar el valor de k tal que $E_L^{\text{simp}} = \mathcal{O}(h^k)$.

(d) Para cada una de las tres funciones del item (a): Mirando los valores de la tabla, determinar cuántos subintervalos (y cuántas evaluaciones de f) se necesitan para calcular la integral con 7 dígitos de precisión con la regla de los trapecios. ¿Y con la regla de Simpson compuesta?

Ejercicio 6 (Aula):

(a) Realice una función de Octave `I = trapcomp(x,y)` que reciba como argumentos una *lista ordenada de valores* de x y una lista de valores de $y = f(x)$ y calcule la aproximación de la integral de f en el intervalo que va desde `x(1)` hasta `x(end)` utilizando la regla del trapecio compuesta (no se supone necesariamente que los x_i están equiespaciados).

Para Simpson necesito un numero impar de valores y que estén igualmente espaciados

(b) Realice una función de Octave `I = simpsoncomp(x,y)` que reciba como argumentos una *lista ordenada de valores* de x y una lista de valores de $y = f(x)$ y calcule la aproximación de la integral de f en el intervalo que va desde `x(1)` hasta `x(end)` utilizando la regla de Simpson compuesta (se supone que los x_i están equiespaciados y las listas tienen un número impar de valores).

Ejercicio 7 (Aula): La masa total de una barra de densidad variable está dada por: $m = \int_0^L \rho(x)A_c(x)dx$. Donde m representa la masa, ρ la densidad, A_c el área de la sección transversal, x representa la distancia a lo largo de la barra y L la longitud total de la barra. Se midieron los siguientes datos para una barra de 12 metros de longitud.

x (cm)	0	200	400	600	800	1000	1200
$\rho(x)$ (g/cm^3)	4	3.95	3.89	3.80	3.60	3.41	3.30
$A_c(x)$ (cm^2)	100	103	106	110	120	133	149.6

(a) Calcule la masa total de la barra y detalle que fórmula de cuadratura utilizó.

(b) Determine la precisión del cálculo del item anterior. Para ello, compare los resultados obtenidos usando las funciones del ejercicio 6, realizando una diferencia relativa.

Cuadratura de Gauss: en las fórmulas de Newton-Cotes los nodos se eligen a priori e igualmente espaciados. Luego, se calculan los coeficientes de la cuadratura utilizando los polinomios de Lagrange o el método de coeficientes indeterminados. En cambio, para las fórmulas de cuadratura Gaussiana se calculan no sólo los coeficientes de la cuadratura sino también las coordenadas de los nodos de forma tal de reducir el error al aproximar

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i)$$

Con esta generalización el grado de la clase de polinomios para la cuál la aproximación será exacta es mayor.

Ejercicio 8:

(a) Obtenga el grado de precisión de la fórmula de cuadratura de Gauss:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = f(-\sqrt{3}/3) + f(\sqrt{3}/3)$$

(b) La siguiente fórmula de cuadratura es exacta para todo polinomio de grado menor o igual que 2. Determine las constantes c_0, c_1 y c_2

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = c_0 f(-1) + c_1 f(0) + c_2 f(1)$$

Ejercicio 9: Aproxime el valor de la siguiente integral usando cuadratura de Gauss con n=2 (número de puntos de integración). Compare este resultado con el valor exacto de la integral y con aquél obtenido mediante la regla de Newton-Cotes que utiliza igual cantidad de puntos de integración.

$$\int_0^1 x^2 e^{-x} dx$$

Repita el ejercicio con n=3.

Ejercicio 10 (Aula): El área de la superficie de revolución que se obtiene al girar el gráfico de $y = f(x)$ alrededor del eje x, para $a \leq x \leq b$ es:

$$\int_a^b 2\pi f(x)\sqrt{1+f'(x)^2}dx$$

Aproxime el área de la superficie de revolución que se obtiene al girar el gráfico de

$$f(x) = 20x - \frac{x^3}{5}, \qquad x \in [0,2],$$

alrededor del eje x, utilizando cuadratura de Gauss para n=3 (puntos de integración) y comparar el resultado con la regla de Simpson para un sólo intervalo. Luego, resuelva la integral utilizando las reglas de trapecio y Simpson compuestas para $L = 5$. Compare los resultados con la aproximación que se obtiene al usar la función `quad()` de Octave y realice los comentarios pertinentes acerca de la precisión de cada uno de los métodos utilizados.

Los siguientes códigos de Octave resuelven la cuadratura compuesta usando n puntos de Gauss para cada subintervalo.

```
function [x, w] = gauss_xw(n)
% [x, w] = gauss_xw(n)
% Genera las abscisas y pesos para la Cuadratura Gauss-Legendre.
% n: numero de puntos de integracion
% x: abscisas de la cuadratura
% w: pesos de la cuadratura
x = zeros(n,1);
w = x;
m = (n+1)/2;
for ii=1:m
  z = cos(pi*(ii-.25)/(n+.5));           % estimado Inicial.
  z1 = z+1;
  while abs(z-z1)>eps
    p1 = 1;
    p2 = 0;
    for jj = 1:n
      p3 = p2;
      p2 = p1;
      p1 = ((2*jj-1)*z*p2-(jj-1)*p3)/jj; % El polinomial. Legendre
    endfor
    pp = n*(z*p1-p2)/(z^2-1);            % La L.P. Derivada.
    z1 = z;
    z = z1-p1/pp;
  endwhile
  x(ii) = -z;                            % Construye las abscissas.
  x(n+1-ii) = z;
  w(ii) = 2/((1-z^2)*(pp^2));            % Construye  los pesos.
  w(n+1-ii) = w(ii);
endfor
```

```
function Q=cuad_gauss_c(f,a,b,L,n)

[xg,w]=gauss_xw(n);

x=linspace(a,b,L+1);
h=(b-a)/L;
Q=0;
for i=1:L
  t=h/2*(xg+1)+x(i);
  Q+=h/2*(w'*f(t));
endfor
```

Ejercicio 11: Complete las tablas del ejercicio 5 usando cuadratura compuesta con puntos de gauss correspondientes. Compare los resultados para $n = 2$ puntos con la regla de trapecios compuesta y para $n = 3$ puntos con la regla de Simpson.

Ejercicio 12: La energía térmica total de una placa circular de radio $R = 1$ en estado estacionario viene dada por $E = c\rho \int_{-\pi}^{\pi} \int_{0}^{R} u(r, \theta) r \; dr d\theta$, donde c denota del calor específico, ρ la densidad de masa, $u(r, \theta)$ la temperatura de equilibrio en cada punto (r, θ) de la placa, para $0 < r \leq R$ y $-\pi \leq \theta \leq \pi$. Sabiendo que la temperatura de equilibrio está dada por $u(r, \theta) = 10 + r^3 \cos(3\theta) + 2r^2 \operatorname{sen}(2\theta)$, determine la energía total E.

Ejercicios sugeridos: S.4.1:1-7,13,14,19; **S.4.3**:1-4,7,9,10,11,13,15 (sólo para trapecio y Simpson), 16; **S.4.4**:1,2,4a,4b,5,7a,7b,8,9a,9b,17-19, 21,22; **S.4.7**:1-3,5.