ANÁLISIS NUMÉRICO III – 2025
Práctico N° 1

1. Considere una función suave $f(x)$ definida en $\mathbb{R}$, y un punto $x_0 \in \mathbb{R}$.

   a) Utilizando polinomios de Taylor adecuados de la función f y un parámetro h, encuentre una aproximación en diferencias finitas de la primera derivada $f'(x_0)$ de la forma:

   $$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h}$$

   b) Determine el orden de precisión de esta aproximación en diferencias finitas.

2. Considere una función suave $f(x)$ definida en $\mathbb{R}$, y un punto $x_0 \in \mathbb{R}$.

   a) Utilizando polinomios de Taylor adecuados de la función f y un parámetro h, encuentre una aproximación en diferencias finitas de la primera derivada $f'(x_0)$ de la forma:

   $$f'(x_0) \approx \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h}$$

   b) Determine el orden de precisión de esta aproximación en diferencias finitas.

   c) Derive la misma formulación utilizando el método de extrapolación de Richardson y la aproximación de primer orden en diferencias finitas hacia atrás.

3. Considere una función suave $f(x)$ definida en $\mathbb{R}$, y un punto $x_0 \in \mathbb{R}$.

   a) Utilizando polinomios de Taylor adecuados de la función f y un parámetro h, encuentre una aproximación en diferencias finitas de la primera derivada $f'(x_0)$ de la forma:

   $$f'(x_0) \approx \frac{-3f(x_0) + 4f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{2h}$$

   b) Determine el orden de precisión de esta aproximación en diferencias finitas.

   c) Derive la misma formulación utilizando el método de extrapolación de Richardson y la aproximación de primer orden en diferencias finitas hacia adelante.

4. Considere la función $f(x) = \sin \pi x$ y los valores $h = 0.2, 0.1, 0.05, 0.01, 0.005, 0.001, 0.0005, 0.0001$.

   a) Escriba un script en python para aproximar la derivada $f'(x_0)$ para $x_0 = 0.4$ con diferencias finitas centrales, hacia atrás y hacia adelante para todos los valores del parámetro h.

   b) Además de las aproximaciones previas, considere también la siguiente aproximación en diferencias finitas:

   $$D_l f(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h}$$

   c) Sea p una tasa de convergencia tal que $|D_l f(x_0) - f'(x_0)| \leq Ch^p$. Estime numéricamente la tasa de convergencia p para cada una de las aproximaciones en diferencias finitas anteriores. Para ello, considere una función dada $f(x)$, y valores $h = h_1, h_2, \ldots, h_n$ con $h_{i+1} < h_i$. Calcule la aproximación $D_l f(x)$ de la derivada $f'(x)$ y luego calcule el error $E_i = |f'(x) -$

$D_l f(x)|$ para cada h_i. Este error debe ser $E_i = Ch^p$. Dividiendo los valores E_i y E_{i+1} es posible calcular el cociente

$$E_i/E_{i+1} = (h_i/h_{i+1})^p$$

y luego, utilizando logaritmo, es posible obtener una expresión para p

$$p = \frac{\log E_i/E_{i+1}}{\log h_i/h_{i+1}}$$

Estime la tasa de convergencia p para $x_0 = 0.4$ y $x_0 = 1.0$.

d) Repita el inciso anterior para estimar la tasa de convergencia de las diferencias finitas centrales, hacia atrás y hacia adelante.

e) ¿Que puede concluir a partir de estas estimaciones?

5. Repita el ejercicio anterior con la aproximación en diferencias finitas de la derivada segunda de $f(x) = \sin \pi x$ en $x_0 = 0.4$, utilizando la aproximación

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}$$

6. Considere una aproximación en diferencias finitas de la derivada primera $f'(x_0)$ de la forma

$$f'(x_0) \approx a\, f(x_0) + b\, f(x_0 + h) + c\, f(x_0 + 2h) \tag{1}$$

para un valor pequeño de h. Diremos que una fórmula de diferencias finitas es exacta para polinomios $p(x)$ de grado r si la aproximación anterior es exacta en esos casos

$$p'(x_0) = a\, p(x_0) + b\, p(x_0 + h) + c\, p(x_0 + 2h)$$

a) Muestre que la aproximación (1) en diferencias finitas es exacta para polinomios cuadráticos si y solo si es exacta para los monomios 1, x y x^2.

b) Encuentre los valores de a, b, y c tales que la aproximación (1) sea exacta para polinomios cuadráticos.

7. Considere una región $D \subseteq \mathbb{C}$ y una función compleja, $f : D \to \mathbb{C}$, analítica en D y tal que $f(\mathbb{R} \cap D) \subseteq \mathbb{R}$. Suponga que nos interesa la parte real de esta función, y que se desea aproximar su derivada, $f'(x_0)$, $x_0 \in [a, b] \subseteq \mathbb{R}$, con gran precisión. Por este motivo vamos a considerar valores pequeños del parámetro $h_j = 10^{-j}$ para $j = 1, 2, \ldots, 300$, y que la region D es lo suficientemente grande, es decir, $x + ih \in D$, $\forall x \in [a, b]$, $\forall h \leq h_1$.

a) Dado un parámetro $0 < h < 1$, se define una aproximación de la derivada primera de la siguiente forma:

$$D_i f(x_0) = \frac{Im(f(x_0 + ih))}{h}$$

donde i denota la unidad imaginaria, e $Im()$ es la parte imaginaria de un número complejo. Demuestre que existe una constante C, tal que si $x_0 \in [a, b]$ entonces:

$$|f'(x_0) - D_i f(x_0)| \leq Ch^2$$

b) Escriba una función en python para implementar la fórmula $D_i f$ de aproximación de la derivada primera.

c) Considere la función

$$f(x) = \frac{e^x}{\sin^3 x \cos^3 x}$$

y su derivada $f'(x)$. Calcule la aproximación de $f'(1.5)$ para cada valor de h_j, $j = 1, 2, \ldots, 300$ y grafique el error como función de h. Determine cual es el valor óptimo de h_j que puede ser utilizado con este método.

d) Para los mismos valores de h_j, calcule la aproximación central de la derivada primera $D_c f$ y compare los errores. Determine nuevamente cuál es el óptimo valor h_j que puede ser utilizado con la fórmula de diferencia central.

e) Explique las diferencias entre los dos métodos.

Este ejercicio explora un método conocido como la aproximación de la derivada con paso complejo [2].

8. Considere la regla de integración trapezoidal de una función $f(x)$ en un intervalo $[a, b]$:

$$I[f] = I_N[f] + E_N[f]$$

donde $I[f]$ es el valor exacto de la integral, $I_N[f]$ es la regla de cuadratura y $E_N[f]$ es el error dado por la fórmula

$$E_n[f] = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\xi)$$

donde $h = (b-a)/N$.

a) Utilizando la extrapolación de Richardson considere dos valores N_1 y N_2 tales que $N_1 = 2N_2$ y elimine el error para obtener la fórmula de cuadratura de Romber:

$$I[f] = \frac{4}{3} I_{N_1}[f] - \frac{1}{3} I_{N_2}[f]$$

b) Implemente esta fórmula mejorada de cuadratura como una función de python y evalúe el código calculando la siguiente integral:

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = erf(1)\sqrt{\pi}/2$$

Donde $erf()$ es la función error de Gauss, disponible en la librería `scipy` de python como `scipy.special.erf`.

c) Estime numéricamente el orden de convergencia de la fórmula de cuadratura de Romberg.

9. Sean $x, h \in \mathbb{R}$, y

$$g(x) = \int_{-h}^{h} t f(t+x) dt$$

con $f \in C^4[x-h, x+h]$.

a) Usando la regla de Simpson, muestre que

$$\int_{-h}^{h} t f(t+x) dt = \frac{h}{3}\Big(-hf(x-h) + hf(x+h)\Big) + O(h^5).$$

b) Usando la fórmula de aproximación de diferencias finitas centrales:

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

demuestre que:

$$f'(x) \approx \frac{3}{2h^3} \int_{-h}^{h} t f(x+t) dt$$

y estime el error de esa aproximación.

c) Escriba una función de python para aproximar la función $g(x)$, con $x \in [-1, 1]$ cuando $f(x) = e^{x^2}$ implementando las aproximaciones anteriores.

d) Muestre que

$$\int_{-h}^{h} tf(t+x)dt = h^2 \int_{-1}^{1} uf(hu+x)du$$

e) Use la cuadratura de Gauss-Legendre para aproximar la misma función $g(x)$ del inciso c).

f) Defina una nueva función, f_ϵ, que devuelve los mismos valores que la función f del inciso c), más una cantidad de ruido con distribución normal, del orden del 1 % del valor de la función. Considere las aproximaciones $D_S f$, que resulta de calcular la integral del inciso b) con la regla de Simpson, y $D_{GL} f$, que resulta de calcular la misma integral utilizando cuadratura de Gauss-Legendre. Por último, considere valores $h = h_1, h_2, \ldots, h_n$ con $h_{i+1} < h_i$, y realice un único gráfico con los siguientes errores en función de h:

1) $E_h^{(1)} = \|D_S f - f'\|_1$
2) $E_h^{(2)} = \|D_S f_\epsilon - f'\|_1$
3) $E_h^{(3)} = \|D_{GL} f - f'\|_1$
4) $E_h^{(4)} = \|D_{GL} f_\epsilon - f'\|_1$

Donde $\|f\|_1 = \int_{-1}^{1} |f(x)|dx$ es la norma 1 para funciones $f : [-1, 1] \to \mathbb{R}$.

g) ¿Que puede concluir a partir del gráfico?

Esta aproximación de la derivada se conoce como derivada generalizada de Lanczos [1], y es útil cuando los valores de la función que se desea derivar provienen de mediciones con ruido, incerteza o error.

10. Cuando se trabaja con contornos irregulares o se utilizan grillas adaptables, se necesitan grillas no uniformes. Calcule los coeficientes de diferencias finitas para cada uno de los siguientes esquemas:

(a) $u'(\bar{x}) \approx \alpha_1 u(\bar{x} - h_1) + \alpha_2 u(\bar{x}) + \alpha_3 u(\bar{x} + h_2)$
(b) $u''(\bar{x}) \approx \alpha_1 u(\bar{x} - h_1) + \alpha_2 u(\bar{x}) + \alpha_3 u(\bar{x} + h_2)$
(c) $u'''(\bar{x}) \approx \alpha_1 u(\bar{x} - h_1) + \alpha_2 u(\bar{x}) + \alpha_3 u(\bar{x} + h_2)$

¿Son consistentes? En otras palabras, si $h = \max\{h_1, h_2\}$ se aproxima a cero, ¿el error también?

Si es así, ¿cuáles son los órdenes de precisión? ¿Hay algún problema potencial con alguno de los esquemas calculados?

Referencias

[1] Charles W Groetsch. Lanczos' generalized derivative. *The American mathematical monthly*, 105(4):320–326, 1998.

[2] Joaquim RRA Martins, Peter Sturdza, and Juan J Alonso. The complex-step derivative approximation. *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 29(3):245–262, 2003.