Sexta práctica voluntaria — Técnicas Numéricas
Francisco R. Villatoro y Carmen M. García — 8 de Marzo de 2001
FECHA DE ENTREGA: Lunes, 26 de Marzo de 2001

ENUNCIADO DE LA SEXTA PRACTICA (PUNTUACIÓN: 0.25)

Algoritmos de integración gaussiana para calcular el número Pi.

El número π se puede calcular de muchas formas. Por ejemplo, podemos utilizar la expresión integral

$$\pi = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2}\, dx.$$

Para obtener una aproximación a π sólo tendremos que aplicar una fórmula de integración numérica adecuada.

En teoría hemos estudiado que en las fórmulas de cuadratura (integración) gaussianas basadas en polinomios ortogonales, los nodos de integración vienen dados por los ceros de dichos polinomios. Por ejemplo, una fórmula de Gauss-Legendre como la que sigue,

$$\int_{-1}^1 f(x)\, dx = \sum_{k=1}^n a_k\, f(x_k),$$

tiene como nodos los ceros del polinomio de Legendre $P_n(x)$. Aunque no se ha visto en teoría, los valores de los pesos también pueden obtenerse fácilmente. Para Gauss-Legendre,

$$a_k = \frac{2}{(1-x_k^2)\,[P_n'(x_k)]^2},$$

que dependen, obviamente, de los nodos.

Sin embargo, el problema fundamental es cómo determinar los ceros de un polinomio de Legendre, sobre todo para grado mayor o igual que cuatro, para el que no existen expresiones analíticas. La solución recomendada en muchos libros es utilizar un método de Newton. Pero, cómo acotar las raíces, cómo elegir las condiciones iniciales para la iteración de Newton con garantías de convergencia, cómo determinar tolerancias de error adecuadas para el criterio de parada del método, etc. Afortunadamente existen trabajos técnicos que nos asesoran al respecto.

Si numeramos los nodos en forma invertida $-1 < x_n < \cdots < x_1 < 1$, e introducimos la notación $x_k = \cos\theta_k$, con $\theta_k \in (0,\pi)$, podemos acotar las raíces de la forma

$$\phi_k \le \theta_k \le \phi_k + \frac{2\cot\phi_k}{(4\,n+2)^2}, \qquad \phi_k = \frac{4\,k-1}{4\,n+2}\,\pi, \qquad 1 \le k \le \frac{n+1}{2},$$

debida, la primera, a Szegö (1939) y, la segunda, a Gatteschi (1987). En esta línea, Petras (1999) recomienda que se utilice como estimación inicial para x_k el valor $\cos\psi_k$ dado por

$$\psi_k = \phi_k + \frac{2\cot\phi_k}{(4\,n+2)^2}\left(1 - \frac{11}{(4\,n+2)^2\sin^2\phi_k}\right) \le \theta_k.$$

De esta forma, el método de Newton

$$y_{k+1} = y_k - \frac{P_n(y_k)}{P_n'(y_k)},$$

para $1 \leq k \leq n/2$, con $y_0 = \cos\psi_k$ converge cuadráticamente

$$y_k - x_k \leq \frac{c_k\,(y_{k-1}-y_k)^2}{1-3\,c_k\,(y_{k-1}-y_k)}, \qquad c_k = \phi_k^{-2}, \quad x_k = \cos\phi_k,$$

$$0 < y_k - x_k \leq \frac{d_k^{2^k}}{c_k}, \qquad d_k = \frac{22}{\pi^4\,(4\,k-1)^4}\left(1+\frac{2}{\pi^4\,(4\,k-1)^2}\right).$$

También podemos utilizar un método de tercer orden

$$y_{k+1} = y_k - \frac{P_n(y_k)}{P_n'(y_k)} - \frac{P_n''(y_k)}{2\,P_n'(y_k)}\left(\frac{P_n(y_k)}{P_n'(y_k)}\right)^2,$$

que es un método de Newton de dos pasos, con la misma estimación inicial.

1. Demuestre analíticamente la expresión integral del número π.

2. Desarrolle una función Matlab que calcule los coeficientes del polinomio n-ésimo de Legendre P_n.

```
function coef = LegendreP (n)
% Calcula los coeficientes del polinomio de Legendre Pn(x)
% (n>=0, entero)
% Pn(x) = coef(1) x^n + coef(2) x^(n-1) + ... + coef(n) x + coef(n+1)
```

   Para ello utilice la relación de recurrencia

$$(n+1)\,P_{n+1}(x) - (2\,n+1)\,x\,P_n(x) + n\,P_{n-1}(x) = 0,$$

   donde $P_0(x) = 1$ y $P_1(x) = x$; ayúdese de la función de Matlab para el producto de polinomios `conv`. Compare el resultado que ha obtenido con el resultado de la función de Maltab `legendre` para los polinomios (¿cómo se usa esta función?). ¿Coinciden los resultados? ¿La normalización de los polinomios es la misma? NOTA: para evaluar un polinomio utilice `polyval(LegendreP(n),x)`.

3. Ahora vamos a calcular los ceros de los polinomios de Legendre (nodos de la integración gaussiana) mediante el método de Newton. Utilice la estimación inicial para cada raíz dada previamente. ¿Qué condición de parada de la iteración ha utilizado? Justifique su elección. Implemente una función Matlab que calcule todos los ceros de un polinomio de Legendre general.

```
function ceros = CerosLegendreP (n)
% Calcula los ceros del polinomio de Legendre Pn(x)
%  por el método de Newton con una buena estimación inicial
% (n>=0, entero), los ceros ordenados de la forma
%  -1 < ceros(n) < ... < ceros(1) < 1
```

   Estudie el número de iteraciones del método de Newton en función de la tolerancia de error.

4. Repita el apartado anterior pero utilizando el método numérico de tercer orden de convergencia (Newton de dos pasos). Compare las iteraciones de ambos métodos en función del número de iteraciones, error obtenido, número de operaciones, dificultad de codificación, etc.

5. Desarrolle una función de integración general de Gauss-Legendre para una función definida en el intervalo $[-1, 1]$ con un número arbitrario de nodos. ¿Qué algoritmo ha utilizado para calcular los nodos de integración? Justifique su respuesta.

```
function valor = intGaussLegendre (nombrefuncion,n)
% Calcula la integral de una función (nombrefuncion.m) utilizando
% n nodos en el intervalo [-1,1]
% nombrefuncion es una cadena de caracteres con el nombre de f(x)
```

NOTA: Para evaluar una función sólo dando su nombre utilice la función `eval`, de la forma

```
nombrefuncion='sin'; x=0.3;
eval(['y=',nombrefuncion,'(',num2str(x),');']);
% equivale a:: y=sin(0.3)
```

6. Aplique el algoritmo desarrollado en el apartado anterior para determinar el número π. ¿Cómo varían el número de decimales exactos de π conforme aumenta el número de nodos de integración n? ¿Cómo influye la tolerancia de error que utiliza en el método de Newton (1 o 2 pasos) en el número máximo de decimales de π?

7. Otra manera de calcular π es utilizar su definición como área del círculo unidad,

$$\int_0^{2\pi} \int_0^1 r \, dr \, d\theta = \pi.$$

Escriba la integral doble anterior en coordenadas cartesianas. ¿Cómo puede calcular una integral doble utilizando solamente una función para cuadratura unidimensional (por ejemplo, la `intGaussLegendre` que ha desarrollado en esta práctica)? Calcule el número π utilizando dicho procedimiento aplicado a la forma en coordenadas cartesianas del área del círculo. ¿Cómo varían el número de decimales exactos de π conforme aumenta el número de nodos de integración n?

8. Compare de forma justificada los dos procedimientos que ha desarrollado para obtener decimales del número π, basados en integración en $\mathbb{R}$ y $\mathbb{R}^2$, respectivamente.