TRABAJO PRÁCTICO N°3
Derivación e Integración numérica

Las siguientes líneas de código definen un conjunto de puntos:

```
clear all;
d = 0.1;
x = [-10:0.05:10];
x1 = rand(1, length(x));
y = 10.^(-(x + d.*x1).^2);
```

Este conjunto de puntos debe usarse para todas las derivadas que se realicen durante la práctica, por lo que se recomienda situarlo en el principio del script general. De otra forma, cada vez que se corran estas líneas, cambiará el conjunto de datos y los resultados no serán comparables entre sí. Otra opción es generar los datos en un script y guardarlos en un archivo, para que luego al probar cada función, se carguen los mismos datos siempre. Ejemplo:

```
save('datos.mat', 'x', 'y');
```

La porción de código anterior guarda los dos conjuntos de datos en un archivo que se llama "datos" y cuya extensión es ".mat". De querer guardarse más datos, simplemente se escribe otra coma y entre comillas simples se escribe el nombre de la variable que se desea guardar. Luego, al querer cargar estos datos en nuevo script, se procede de la siguiente forma:

```
datos = load('datos.mat')
x = datos.x;
y = datos.y;
```

Los datos cargados con "load" se guardan en forma de estructura en la variable "datos". Una estructura es un tipo de variable que esta compuesta por distintos tipos de variables, cuya cantidad y tipo está definida para cada caso particular. Para el nuestro caso, la estructura cuenta con dos vectores del mismo largo, donde cada una corresponde a los conjuntos de datos de abscisa y ordenada. SI en algún momnento se tuviera duda sobre qué variables fueron cargadas desde un archivo, se puede escribir el nombre de la variable por consola y el resultado va a ser los nombres y dimensiones de cada una de las variables contenidas en la estructura.

Derivación numérica

Primero, una pequeña pero importante pregunta teórica: ¿En qué famosos polinomios se basa la derivación numérica?

i) Polinomios de Taylor

ii) Polinomios de Taylor

iii) Polinomios de Taylor

iv) Todos los anteriores

Si respondiste correctamente, entonces podrás realizar una expansión según los polinomios antes mencionados. Dale. Hacelo.

a) ¿Cómo se escribe la expansión polinómica de grado 1 en función de $x = x + x_0$? Sobre esta expresión despeje la derivada primera. ¿Cómo se le llama a esa derivada en particular?

b) Ídem anterior, pero en función de $x = x - x_0$.

c) De la suma de ambas *expansiones de 1er orden* se puede despejar también la derivada primera, que ahora será función de $x_0 + h$ y $x_0 - h$. ¿Cómo se le llama a esa expresión particular de la derivada?

d) ¿De qué ordenes son los errores en las derivadas laterales y centradas?¿Hay alguno que sea menor? En caso afirmativo, ¿Por qué utilizarías el de mayor error? Plantear un diagrama de flujo (o pseudocódigo) de una pequeña rutina que permita decidir qué derivada usar.

e) Continuar la expansión polinómica y despejar la derivada segunda centrada. ¿De qué orden es la cota del error?

f) ¿Hay alguna condición que impida calcular la derivada en forma numérica, por ejemplo, cuando se realiza el cálculo sobre un conjunto de puntos?

g) Realizar los diagramas de flujo de los algoritmos que toman dos vectores x e y, de igual longitud, y devuelven tres vectores que contienen las derivadas regresivas, progresivas y centrales.

h) Programar un código para cada algoritmo del inciso anterior.

i) Aplicar los tres algoritmos al conjunto de datos inicial. Graficar las tres derivadas. ¿Qué diferencias hay? ¿Debe tomarse algún recaudo sobre el conjunto de datos a derivar?

j) Repetir el inciso anterior, pero "salteando uno de cada dos puntos" (de modo tal de mantener todos los puntos equiespaciados). Comparar con los resultados obtenidos en el inciso anterior.

k) Variar el valor de d (esto variará el "volumen" del ruido aleatorio agregado a la función) y repetir el análisis. Comparar, cualitativamente, los resultados.

l) Variar el paso usado en la generación del vector x. Repetir el análisis. Comparar cualitativamente los resultados con los obtenidos hasta el inciso i).

Integración numérica

a) Realizar los diagramas de flujo para los métodos de:

- Trapecios
- Simpson 1/3
- Gauss de 4 puntos

En los tres casos, contemplar la integración sobre un intervalo $[a, b]$ arbitrario, con a y b finitos.

b) Programar una función que como argumentos, tome una función (que habrá que pasarle como handle), los límites de integración y la cantidad de intervalos, y de como resultado la integral por trapecios. Esta función te permitirá integrar cualquier cosa que le pases como handle.

c) Modificar la función anterior para que acepte dos vectores, con valores de X e Y, y devuelva el valor de la integral.

Ahora debería contar con dos códigos, uno que integra una función (pasada como handle) y otra que integra sobre un conjunto de puntos.

d) Analizar las siguientes piezas de código:

```
function resultado = integral(funcion, lim_inf, lim_sup,
   nPasos)
    n = nPasos;
    h = (lim_sup - lin_inf)/n:
    sumaPares = suma(funcion, 0, lim_inf, lim_sup, nPasos
       -1, h, 2);
    sumaImpares = suma(funcion, 0, lim_inf, lim_sup,
       nPasos, h, 1);
    resultado = h/3 * (funcion(lim_inf) + funcion(lim_sup
       ) + 4*sumaImpares + 2*sumaPares);
end
```

```
function resultado = suma(funcion, valor, lim_inf,
   lim_sup, nPasos, h, n_inicial)
    n = n_inicial;
    if n < nPasos
        valor2 = valor + funcion(lim_inf + n*h);
        n = n + 2;
        resultado = suma(funcion, valor2, lim_inf,
           lim_sup, nPasos, h, n);
    else
        resultado = valor;
    end
end
```

La segunda función, llamada por la primera, se llama a si misma. A este tipo de algoritmos se los llama "recursivos", y suelen usarse para reemplazar bucles for o while. Al ser auto-contenidos, suele ser más fácil tanto su escritura como su comprensión y mantenimiento. Como desventaja, la ejecución de un ciclo recursivo suele ser más lento y ocupar más memoria, ya que la función necesita almacenarse en memoria junto con sus datos en cada iteración. En general es decisión de quien programa usar bucles convencionales o funciones recursivas.

a) ¿Qué método de integración utiliza el método del código presentado?

b) Realizar las modificaciones necesarias para resolver por el método de trapecios.

c) Integrar una función cualquiera utilizando el código realizado en el inciso anterior. Comparar el resultado con el que se obtiene utilizando el código de integración por trapecios programado en el inciso b).

e) Utilizando los comandos **tic** y **toc** mida el tiempo de ejecución que usan los distintos programas realizados a lo largo del punto de Integración para integrar la misma función con la misma tolerancia, incluyendo la función dada en este inciso. Esto requerirá modificar algunas de las funciones para incluir la tolerancia como criterio de paro en lugar de dejar fijo el número de subdivisiones del intervalo de integración.

f) ¿Cómo se puede testear una rutina de integración? Modifique los códigos anteriores para que se "auto testeen" a pedido (por ejemplo, pasándole una "bandera" o "flag" entre los parámetros).

g) ¿Debe haber algún requisito sobre los datos de entrada de una rutina de integración? En caso afirmativo, plantee un método para validar los datos de entrada. Modifique las rutinas de integración escritas (por usted) hasta este punto para que sean capaces de determinar si sus datos de entrada son válidos, y comunicar en la salida si no puede integrar por algún problema con los datos (por ejemplo, con salida NaN).

h) Armar otra rutina de integración por Gauss que permita elegir la cantidad de puntos a usar para calcular la integración. Usar hasta 6 puntos. Obtener los pesos y las posiciones de los puntos de Gauss de la tabla siguiente

Número de puntos	Coeficientes w_i	Raíces z_i
2	$w_1 = w_2 = 1{,}0$	$-z_1 = z_2 = 0{,}5773502$
3	$w_1 = w_30 = 0{,}55555$ $w_2 = 0{,}88888$	$-z_1 = z_3 = 0{,}7745966$ $z_2 = 0$
4	$w_1 = w_4 = 0{,}3478548451$ $w_2 = w_3 = 0{,}6521451549$	$-z_1 = z_4 = 0{,}861136311$ $-z_2 = z_3 = 0{,}33998104$
5	$w_1 = w_5 = 0{,}2369268850$ $w_2 = w_4 = 0{,}4786286705$ $w_3 = 0{,}56888888$	$-z_1 = z_5 = 0{,}90617984$ $z_3 = 0{,}0$ $-z_2 = z_4 = 0{,}53846931$
6	$w_1 = w_6 = 0{,}1713244924$ $w_2 = w_5 = 0{,}3607615730$ $w_3 = w_4 = 0{,}4679139346$	$-z_1 = z_6 = 0{,}9324695142$ $-z_2 = z_5 = 0{,}6612093865$ $-z_3 = z_4 = 0{,}2386191861$

1. Más integración numérica

a) Cada uno de los métodos numéricos de integración analizados tiene condiciones en las que el cálculo es exacto. ¿Para qué funciones puede integrar en forma exacta cada método?

b) El objetivo de este punto es construir una función que permita usar el método de integración de Gauss para integrar una función descripta por un número reducido de puntos.

El método de integración de Gauss con n parámetros (cantidad de pesos + cantidad de posiciones, o bien 2 veces la cantidad de puntos de Gauss) puede integrar en *forma exacta* polinomios de grado $2n - 1$. Construir una función que, dado un conjunto de puntos (en realidad, dos conjuntos, uno de valores de x y otro de valores de y):

i) Calcule el polinomio interpolante (usar polyfit).

ii) Estime el número de parámetros que necesita integrar por Gauss en forma exacta.

iii) Verifique si la rutina de integración disponible (programada en el inciso g) de la sección de Integración numérica) es capaz de calcular la integral exacta del polinomio hallado en el inciso i).

iv) Si la respuesta del inciso anterior es afirmativa, seleccione la cantidad de puntos de Gauss necesaria para calcular la integral exacta, la calcule y devuelva el resultado de la integración.

v) Si la respuesta al inciso iii) es negativa, de un mensaje de error y devuelva NaN,

vi) Los incisos anteriores describen el funcionamiento de la función que se busca construir. Ahora se encuentra en condiciones de armar el diagrama de flujo de esta función. Arme el diagrama de flujo, y revise que dicho diagrama se corresponda con lo enunciado en los incisos.

c) Cuando termine este punto, debería tener una función que le permita integrar prácticamente cualquier cosa usando el método de Gauss. Para eso le facilitamos los siguientes puntos, que constituyen una suerte de transcripción del diagrama de flujo de la función. Tendrá que construir una función que, dado un conjunto de puntos ingresados como dos vectores de igual longitud, y una cantidad máxima de puntos de Gauss (un número):

   i) Subdivida el conjunto de puntos en subintervalos que puedan integrarse en forma exacta con el número de puntos de Gauss dado (habrá que tener en cuenta qué pasa si la cantidad de puntos del conjunto inicial no es múltiplo de la cantidad de puntos necesaria para armar los polinomios a integrar).
   ii) Llame a la función programada en el inciso b) para calcular en forma exacta la integral en cada subintervalo.
   iii) Si, al llamar a la función programada en el inciso b), recibe NaN (error), de un mensaje de error y devuelva NaN.
   iv) Sume las integrales de los distintos subintervalos.
   v) Devuelva el resultado completo.
   vi) Calcule la integral de *los puntos originales*, por el método de trapecios, calcule la diferencia porcentual y la muestre por pantalla.

Problemas

Derivación

1. Se debe medir la tasa de flujo de agua a través de un pequeño tubo. Para ello, se coloca una boquilla en la salida de este y se mide el volumen a través de él como función del tiempo, según se ha tabulado a continuación. Estime la tasa de flujo para $t = 7$ seg.

Tiempo [seg]	0	1	5	8
Volumen [cm^3]	0	1	8	16.4

2. Se mide la velocidad v (m/s) del aire que fluye por una superficie plana a distintas distancias, y metros sobre la superficie. Determine el esfuerzo cortante τ (N/m^2) en la superficie ($y = 0$) usando la ley de viscosidad de Newton:

$$\tau = \mu \frac{dv}{dy}.$$

Suponga un valor de viscosidad dinámica $\mu = 1{,}8 * 10^{-5}\mathrm{N} \cdot \mathrm{s/m}^2$.

y [m]	0	0.002	0.006	0.0012	0.018	0.024
v [m/seg]	0	0.287	0.899	1.915	3.048	4.299

3. Es frecuente que reacciones químicas se describan mediante el siguiente modelo:

$$\frac{dc}{dt} = -kc^n,$$

donde c es la concentración, t es el tiempo, k es la tasa de reacción y n es el orden de reacción. Es posible evaluar valores dados de c, dc/dt, k y n por medio de regresión lineal del logaritmo de esta ecuación:

$$\log\left(-\frac{dc}{dt}\right) = \log(k) + n\log(c).$$

Utilice este enfoque y los datos que siguen para estimar los valores de k y n:

t [ ]	10	20	30	40	50	60
c [ ]	3.52	2.48	1.75	1.23	0.87	0.61

4. El tejido suave sigue una deformación de comportamiento exponencial ante la tensión uniaxial, mientras se encuentre en el rango fisiológico o normal de elongación. El modelo correspondiente es:

$$\sigma = \frac{E_0}{a}(e^{a\epsilon} - 1),$$

donde σ es el esfuerzo, ϵ es la tensión y E_0 y a son constantes materiales que se determinan de forma experimental. Para obtener estas constantes, se deriva la ecuación anterior con respecto a ϵ, la cual constituye una relación fundamental para el tejido suave:

$$\frac{d\sigma}{d\epsilon} = E_0 + a\sigma.$$

Para evaluar E_0 y a se emplean datos de esfuerzo-tensión para graficar $d\sigma/d\epsilon$ versus σ, y la pendiente e intersección de esta gráfica son las dos constantes del material. La tabla siguiente contiene datos de esfuerzo-tensión para las cuerdas tendinosas del corazón (tendones pequeños que durante la contracción del músculo cardíaco mantienen cerradas sus válvulas). A continuación se recopilan datos obtenidos durante la carga del tejido. En caso de ser durante la descarga, se obtendrían curvas distintas.

ϵ [10^{-3}m/m]	σ [10^3 N/m^2]	ϵ [10^{-3}m/m]	σ [10^3 N/m^2]
153	87.8	512	1227
198	96.6	562	1623
270	176	614	2105
320	263	664	2677
355	350	716	3378
410	569	766	4257
460	830		

a) Calcule la derivada $d\sigma/d\epsilon$. Grafique los datos y elimine aquellos puntos cerca de cero que parezcan no seguir la tendencia lineal. El error en dichos datos proviene de la incapacidad de los instrumentos para medir magnitudes pequeñas en dicha región. Realice un ajuste para obtener los valores de E_0 y a. Grafique los datos de esfuerzo versus tensión junto con la curva analítica expresada por la primera ecuación. Esto indicará qué tan bien se ajustan los datos a la curva analítica.

b) Es frecuente que el análisis anterior no ajuste valores correctos para las constantes debido a que es difícil evaluar el valor de E_0. Para resolver este problema, no se utiliza E_0. Se selecciona un punto $(\overline{\sigma}, \overline{\epsilon})$ de los datos que esté ubicado a mitad del rango empleado para el ajuste. Estos valores se sustituyen en la primera ecuación y se determina un valor E_0/a que se reemplaza en la primera ecuación:

$$\sigma = \left(\frac{\overline{\sigma}}{e^{a\overline{\epsilon}} - 1}\right)(e^{a\epsilon} - 1).$$

Con este enfoque, los datos experimentales que están bien definidos producirán un buen ajuste entre los datos y la curva analítica. Emplee esta nueva relación y grafique otra vez los datos del esfuerzo versus la tensión y también la nueva curva analítica.

Integración

1. Aproxime las siguientes integrales mediante cuadraturas Gaussianas con $n = 2, 3, 4$ y compare los resultados con los valores exactos de dichas integrales.

   a) $\displaystyle\int_1^{1{,}5} x^2 \ln(x) dx$

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

   c) $\displaystyle\int_0^{0{,}35} \frac{2}{x^2 - 4} dx$

   d) $\displaystyle\int_0^{\pi/4} x^2 \sin(x) dx$

   e) $\displaystyle\int_0^{\pi/4} e^{3x} \sin(2x) dx$

   f) $\displaystyle\int_1^{1{,}6} \frac{2x}{x^2 - 4} dx$

   g) $\displaystyle\int_3^{3{,}5} \frac{x}{\sqrt{x^2 - 4}} dx$

   h) $\displaystyle\int_0^{\pi/4} (\cos(x))^2 dx$

2. Suponga que la fuerza hacia arriba de la resistencia del aire sobre un objeto en caída es proporcional al cuadrado de la velocidad. Para este caso, la velocidad se calcula con:

$$v(t) = \sqrt{\frac{gm}{c_d}} \tanh\left(\sqrt{\frac{gc_d}{m}} t\right),$$

   donde c_d es el coeficiente de arrastre de segundo orden.

   a) Si $g = 9{,}81\,\mathrm{m/seg}^2$, $m = 68{,}1\,\mathrm{kg}$ y $c_d = 0{,}25\,\mathrm{kg/m}$, integre analíticamente para determinar la distancia a la que cae el objeto luego de 10 segundos.

   b) Repite el inciso anterior pero integrando numéricamente, utilizando Newton-Cotes con n suficientemente grande para obtener tres dígitos significativos de exactitud.

3. La técnica estándar para determinar el gasto cardíaco es el método de dilución de un colorante, desarrollado por Hamilton. Se inserta el extremo de un catéter pequeño en la arteria radial, y el otro se conecta a un densitómetro que registra en forma automática la concentración del colorante en la sangre. Al inyectarse con rapidez una cantidad conocida, 5,6 mg. de colorante se obtuvieron los siguientes datos:

Tiempo [seg]	Concentración [mg/L]	Tiempo [seg]	Concentración [mg/L]
5	0	21	2.3
7	0.1	23	1.1
9	0.11	25	0.9
11	0.4	27	1.75
13	4.1	29	2.06
15	9.1	31	2.25
17	8	33	2.32
19	4.2	35	2.43

Al graficarse los datos anteriores se obtiene la curva de dilución del colorante que se muestra en la Figura 1. La concentración alcanza un valor máximo aproximadamente 15 segundos después, luego ocurre una disminución seguida de un aumento ocasionado por la recirculación del colorante. En la Figura 2, se muestra la curva graficada en escala semilogaritmica. Observe que la rama descendente de la curva de dilución se aproxima a una línea recta. A fin de separar el efecto de recirculación, los analistas extienden la porción de la linea recta. Entonces, el gasto cardíaco se calcula por medio de la ecuación siguiente:

$$C = \frac{M}{A} 60 \frac{\text{seg}}{\text{min}},$$

donde C es el gasto cardíaco en L/min, M es la cantidad de colorante inyectado en mg y A es el área bajo la curva con la corrección lineal. Calcule el gasto cardíaco de este paciente con el empleo de la regla de trapecio con un tamaño de paso de 2 segundos.

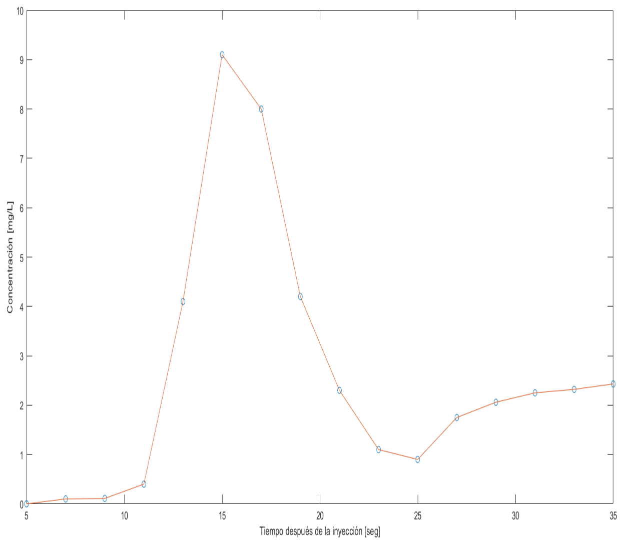

Figura 1: Concentración del colorante en sangre en función del tiempo

4. En todo el mundo, el glaucoma es la segunda causa principal de pérdida de la visión. La presión intraocular alta (presión dentro del ojo) casi siempre acompaña la pérdida de la visión. Existe la hipótesis de que la presión elevada daña un subconjunto de células en el ojo responsables de la vista. Un investigador postula que la relación entre la pérdida de la visión y la presión está descrita por la ecuación:

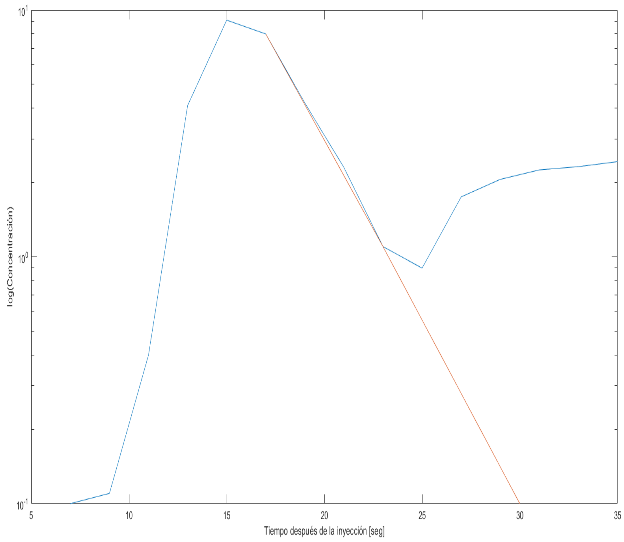

Figura 2: Concentración del colorante en sangre en función del tiempo y su aproximación lineal en el intervalo de decrecimiento de la concentración, en escala logarítmica,

$$VL = A\,exp\left(k\int_{25}^{t}(P-13)dt\right),$$

donde $exp(\cdot) = e^{(\cdot)}$, VL es el porcentaje de pérdida de visión, P es la presión intraocular (mm de mercurio [mm Hg]), t es el tiempo (años), y k y A son constantes. Con el uso de los siguientes datos procedentes de tres pacientes, estime los valores de las constantes k y A.

Paciente	A	B	C
Edad al emitir el diagnóstico	65	43	80
VL	60	40	30

Paciente A		Paciente B		Paciente C	
Edad [años]	P [mm Hg]	Edad [años]	P [mm Hg]	Edad [años]	P [mm Hg]
25	13	25	11	25	13
40	15	40	30	40	14
50	22	41	32	50	15
60	23	42	33	60	17
65	24	43	35	80	19

5. Se diseño un parcha transdérmico nuevo para aplicar insulina a través de la piel de los pacientes diabéticos en forma controlada, con lo que se elimina la necesidad de inyecciones dolorosas. Se recolectaron los siguientes datos acerca del flujo de masa de la insulina que se aplica a través del parche (y piel) como función del tiempo:

Flujo [mg/cm^2/h]	Tiempo [h]	Flujo [mg/cm^2/h]	Tiempo [h]
15	0	8	5
14	1	5	10
12	2	2.5	15
11	3	2	20
9	4	1	24

Recuerde que el flujo de masa es la tasa de flujo a través de un área, o $(1/A)dm/dt$. Proporcione su mejor estimación posible de la cantidad de medicina distribuida a través de la piel en 24 horas de uso de un parche de 12 cm^2.

Referencias

[1] Burden, R. L. *Numerical Analysis*, 2019

[2] RP, C. S. C. *Numerical methods for engineers*, 2002