Integrales impropias
Diferenciación numérica
Lección 19

Dr. Pablo Alvarado Moya

CE3102 Análisis Numérico para Ingeniería
Área de Ingeniería en Computadores
Tecnológico de Costa Rica

I Semestre 2018

Contenido

Integrales impropias (1)

Una integral es impropia si

1. su integrando tiende a un valor finito en los límites finitos de integración, pero no puede ser evaluado directamente en esos límites. Por ejemplo:

$$\int_0^{\pi} \frac{\operatorname{sen}(x)}{x}\,dx \qquad \text{no se puede evaluar en } x = 0$$

2. su límite superior es ∞ o su límite inferior es $-\infty$
3. hay una singularidad en cualquiera de sus límites. Por ejemplo:

$$\int_0^1 x^{-1/2}\,dx$$

Integrales impropias (2)

4. tiene una singularidad integrable en un lugar conocido dentro del intervalo de integración
5. tiene una singularidad integrable en un lugar desconocido dentro del intervalo de integración

Límites infinitos

- Para el Caso 2, donde el límite superior o el inferior es $\pm\infty$ se recurre a un cambio de variable que elimine el infinito.
- Si la función decrece hacia cero más rápido que $1/x^2$ con $x \to \infty$ entonces, con $t = 1/x$ y $dt = -dx/x^2$ se tiene

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f\left(\frac{1}{t}\right)\,dt$$

  para $ab > 0$
- Si el intervalo incluye al origen, la integral se calcula en dos partes: una propia y otra impropia.

Regla del valor medio extendida

- Se requiere una fórmula de integración abierta, que no requiera la evaluación en los extremos del intervalo, en donde los integrandos se pueden indefinir
- La **regla del valor medio extendida** es la mejor opción:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\sum_{i=1}^{n} f\left(a + h\left[i - \frac{1}{2}\right]\right)$$

y con $h = (b-a)/n$ con n el número de segmentos:

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \underbrace{(b-a)}_{\text{Ancho}}\underbrace{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} f\left(a + h\left[i - \frac{1}{2}\right]\right)}_{\text{Altura promedio}}$$

- Esta regla tiene error $\mathcal{O}\left(h^2\right)$

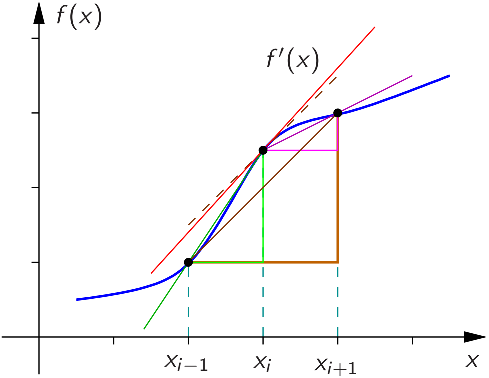
Mejoramiento de integrales impropias

- Es posible combinar las reglas anteriores con algoritmos similares al de Romberg, pero donde el tamaño de pasos se triplica (en vez de duplicar) para reducir el número de evaluaciones de la función requeridas.

Diferenciación numérica

Repaso (1)

- En la Lección 3 se introdujeron las aproximaciones de derivadas por diferencias divididas finitas hacia adelante, hacia atrás y centradas



Repaso (2)

- Aproximación con diferencias hacia adelante

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} + \mathcal{O}\left(x_{i+1} - x_i\right)$$

- Aproximación con diferencias hacia atrás

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} + \mathcal{O}\left(x_i - x_{i-1}\right)$$

- Aproximación con diferencias centradas

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

Repaso (3)

- Segunda diferencia dividida finita hacia adelante

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} \underbrace{- \frac{f'''(x_i)}{3!}h - \dots}_{\mathcal{O}(h)}$$

- Segunda diferencia dividida finita hacia atrás

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} + \mathcal{O}\left(h\right)$$

- Segunda diferencia dividida finita centrada

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

Diferenciación con alta exactitud (1)

- La exactitud de fórmulas anteriores se eleva considerando más términos de la serie de Taylor
- De la expansión hacia adelante se sabe que

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2!}f''(x_i)h^2 + \cdots$$

  de donde se despeja

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{f''(x_i)}{2}h + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

- Anteriormente se truncó esta expresión a partir de la segunda derivada

Diferenciación con alta exactitud (2)

- Ahora se recurre a la aproximación de la segunda derivada

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} + \mathcal{O}(h)$$

para resultar en

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2h^2} h + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

y reagrupando términos

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

- El error se reduce ahora en $\mathcal{O}\left(h^2\right)$ en vez de $\mathcal{O}(h)$
- El método se repite con las diferencias hacia adelante, hacia atrás y centradas.

Diferencias divididas finitas hacia adelante

Primera derivada

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \qquad +\mathcal{O}(h)$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} \qquad +\mathcal{O}(h^2)$$

Segunda derivada

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} \qquad +\mathcal{O}(h)$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2} \qquad +\mathcal{O}(h^2)$$

Diferencias divididas finitas hacia atrás

Primera derivada

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} \qquad +\mathcal{O}(h)$$

$$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h} \qquad +\mathcal{O}\left(h^2\right)$$

Segunda derivada

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} \qquad +\mathcal{O}(h)$$

$$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^2} \qquad +\mathcal{O}\left(h^2\right)$$

Diferencias divididas finitas centradas

Primera derivada

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h} + \mathcal{O}\left(h^4\right)$$

Segunda derivada

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + \mathcal{O}\left(h^2\right)$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{12h^2} + \mathcal{O}\left(h^4\right)$$

Extrapolación de Richardson

- De forma análoga al caso de integrales, para dos tamaños de paso h_1 y h_2, con $h_2 < h_1$, se cumple para una estimación más precisa de la derivada:

$$D \approx D(h_2) + \frac{1}{(h_1/h_2)^2 - 1}\left[D(h_2) - D(h_1)\right]$$

- Con $h_2 = h_1/2$ se tiene

$$D \approx \frac{4}{3}D(h_2) - \frac{1}{3}D(h_1)$$

- Con aproximaciones de diferencia centrada $\mathcal{O}\left(h^2\right)$ esta nueva aproximación tiene error $\mathcal{O}\left(h^4\right)$

Plantee el algoritmo de Romberg para el caso de las derivadas

Código de integración de Romberg

```
// F:     tipo de functor
// x:     punto donde debe evaluarse la derivada
// h:     tamaño de paso
template<class F,typename T>
T deriv(F f,T x, T h) {
  return (f(x+h)-f(x-h))/(2*h);
}
```

Código de integración de Romberg

```
template<class F, typename T>
T romberg(F f, T x, T h,
          int maxIt = 10, T es=std::limits<T>::epsilon()) {
  matrix<T> D(maxIt,maxIt);
  D[0][0] = deriv(f,x,h);
  T ea=std::limits<T>::max();
  int n=1;
  int i;
  for (i=1;i<maxIt && ea>es;++i) {
    n *= 2;
    D[i][0] = deriv(f,x,h/n);
    T fk=T(1);
    for (int k=1;k<=i;++k) {
      j = i - k;
      fk*=4; // esto es pow(4,k);
      D[j][k] = (fk*D[j+1][k-1] - D[j][k-1])/(fk-T(1));
    }
    ea = abs((D[0][i]-D[1][i-1])/D[0][i]);
  }
  return D[0][i-1];
}
```

Derivada con datos irregularmente espaciados (1)

- Todos los métodos anteriores requieren que los datos estén equiespaciados
- Con muestras experimentales no siempre es posible asegurar la equidistancia entre muestras
- Una técnica usual consiste en interpolar usando Lagrange los puntos disponibles y derivar el polinomio resultante
- Por ejemplo, para segundo orden se tiene

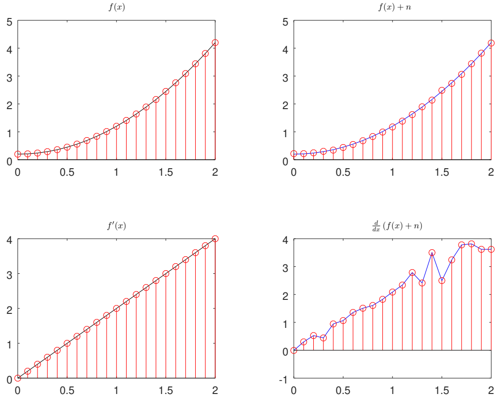
$$
\begin{aligned}
f'(x) = & f(x_{i-1})\frac{2x - x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} + \\
& f(x_i)\frac{2x - x_{i-1} - x_{i+1}}{(x_{i-1}-x_i)(x_i-x_{i+1})} + \\
& f(x_{i+1})\frac{2x - x_{i-1} - x_i}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)}
\end{aligned}
$$

Derivada con datos irregularmente espaciados (2)

- Esta técnica permite calcular la derivada para cualquier valor de x
- No se requiere la equidistancia de las muestras
- Se mantiene la exactitud de la diferencia centrada.
- De hecho, si se asume equidistancia se obtiene la misma fórmula anterior.

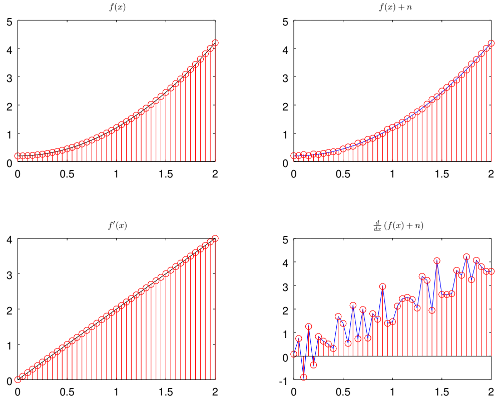
Datos con errores (1)

- Los procesos de derivación amplifican el ruido en los datos



Datos con errores (2)

- Si ruido proviene de proceso de medición, reducir el paso empeora la situación



- Principal método: utilizar regresión por mínimos cuadrados.

Datos con errores (3)

- Si se conoce el patrón de la función, se aproxima con el método de mínimos cuadrados.
- Si se desconoce, se asume algún polinomio o función a partir de los datos.
- Integración usualmente cancela en la suma el ruido, y por tanto no requiere mayor ajuste. De ser necesario, se puede utilizar regresión.

Resumen

1. Integrales impropias
2. Diferenciación numérica
   - Datos regularmente espaciados
   - Datos irregularmente espaciados
   - Datos con errores

Este documento ha sido elaborado con software libre incluyendo LATEX, Beamer, GNUPlot, GNU/Octave, XFig, Inkscape, LTI-Lib-2, GNU-Make y Subversion en GNU/Linux