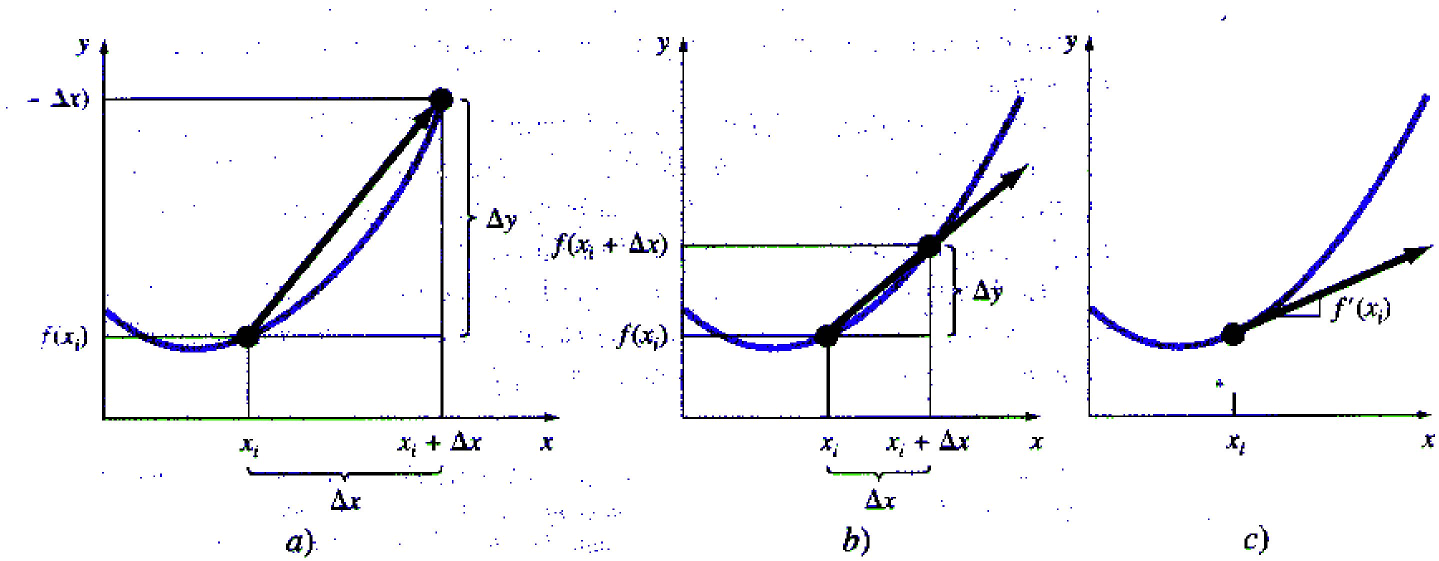
Diferenciación e integración numéricas

Derivadas e integrales

Concepto de derivada

$$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x}$$ Cociente incremental

$$\frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x}$$ Derivada



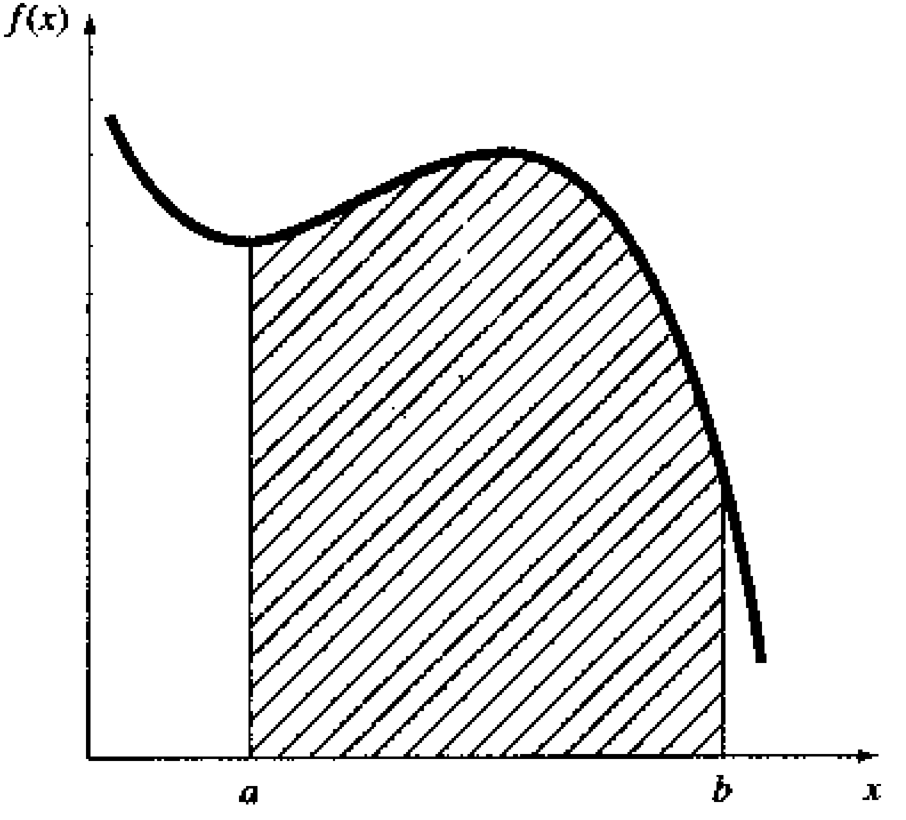
Derivadas e integrales

Concepto de integral

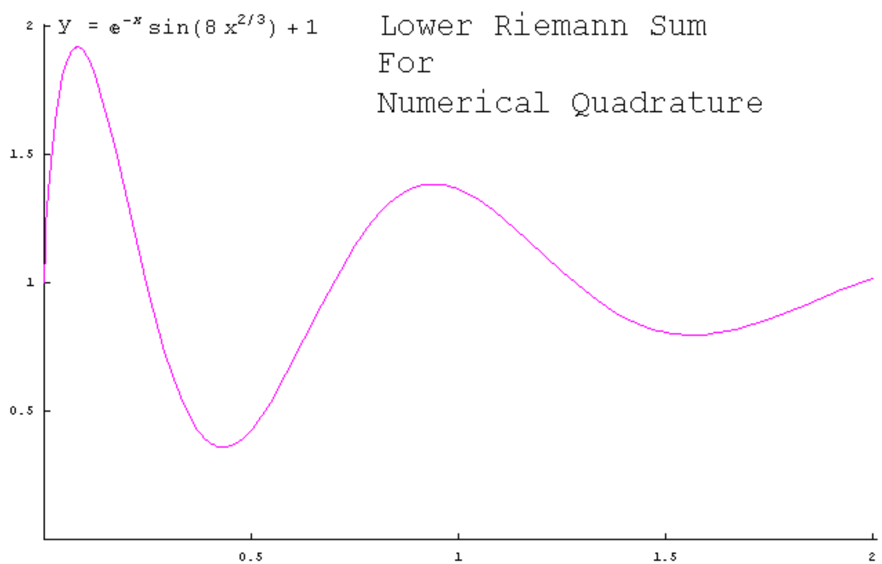
$$I = \int_a^b f(x)\,dx$$

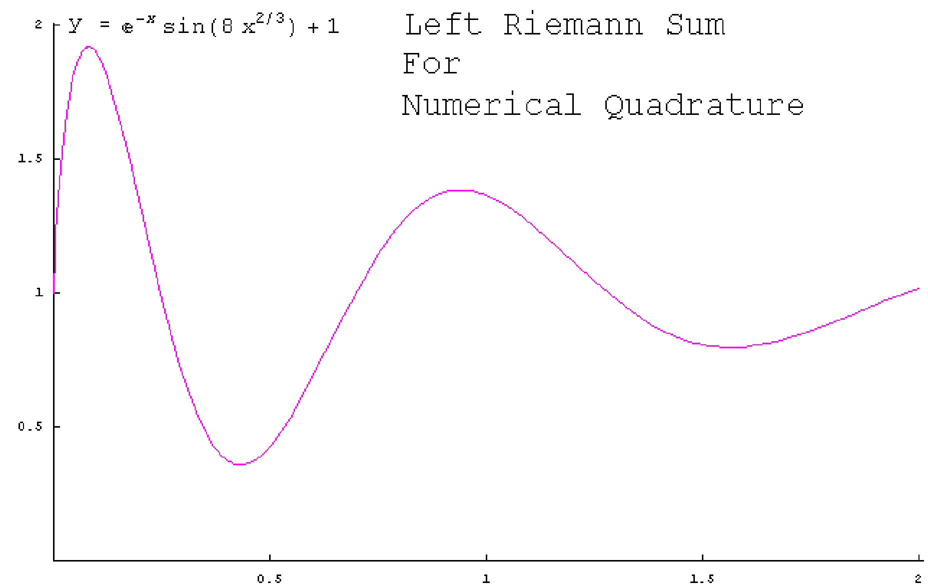
$$\int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\substack{\Delta x \to 0 \\ n \to \infty}} \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\,\Delta x$$

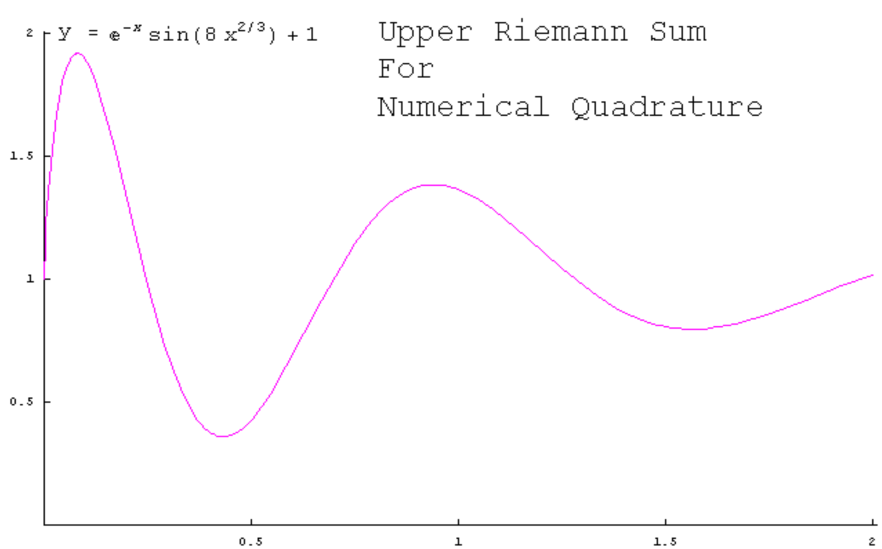
Suma de Riemann

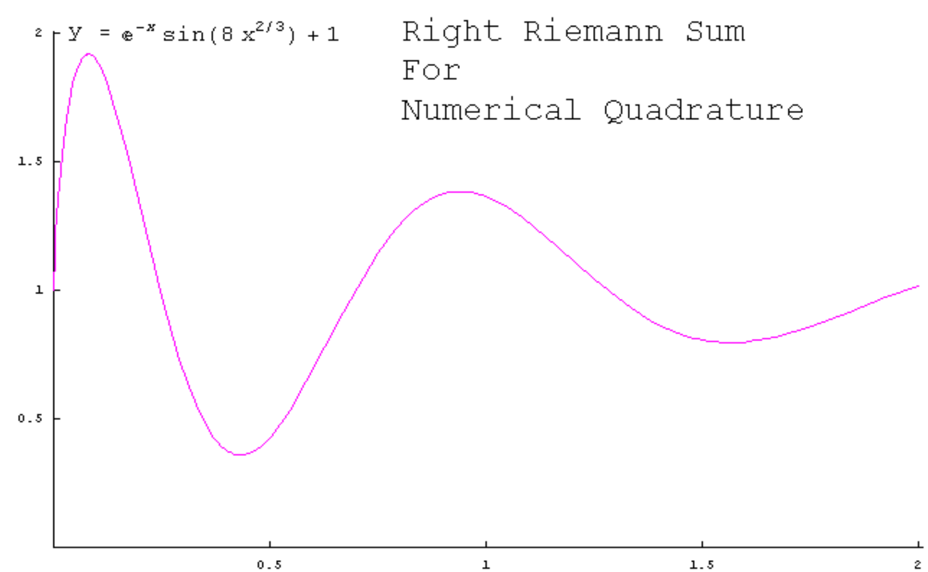


Suma de Riemann



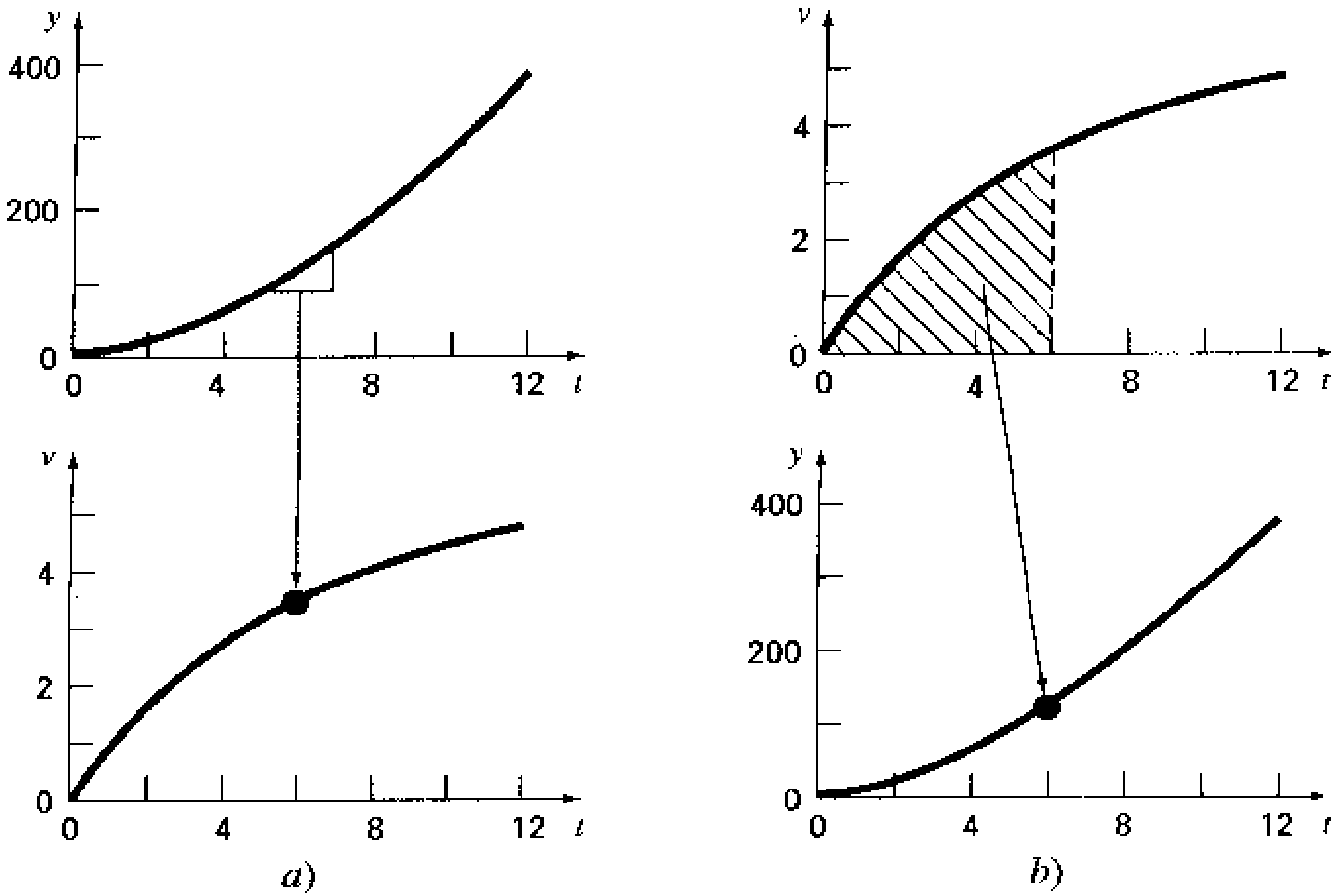






Derivadas e integrales

Relación entre derivadas e integrales: posición versus velocidad



$$v(t) = \frac{d}{dt} y(t)$$

$$y(t) = \int_0^t v(t)\,dt$$

Casos

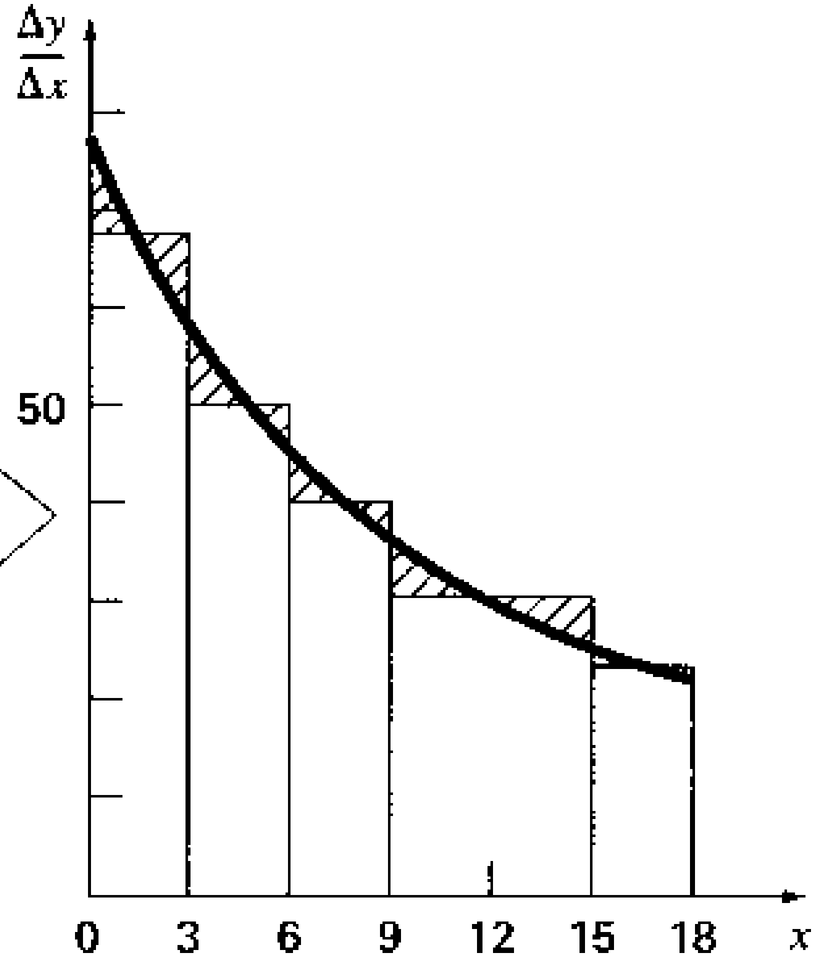
Casos:

- Función continua simple (polinomio, exp., trigon., etc.) --> métodos analíticos
- Función continua complicada --> metodos numericos
- Función tabulada --> metodos numericos

Métodos sin computadora

x	y	$\Delta y/\Delta x$
0	0	
		66.7
3	200	
		50
6	350	
		40
9	470	
		30
15	650	
		23.3
18	720	

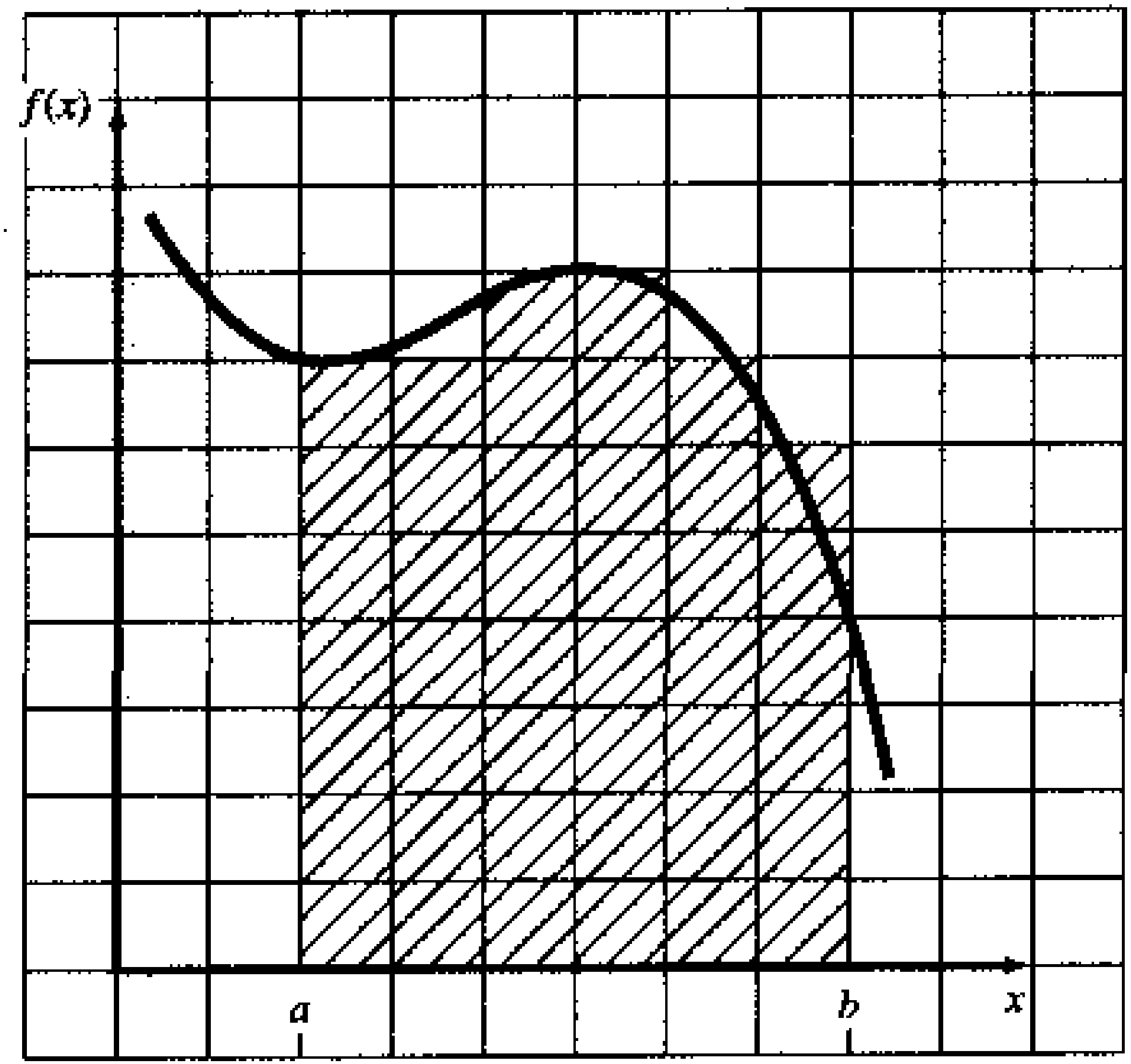
a)



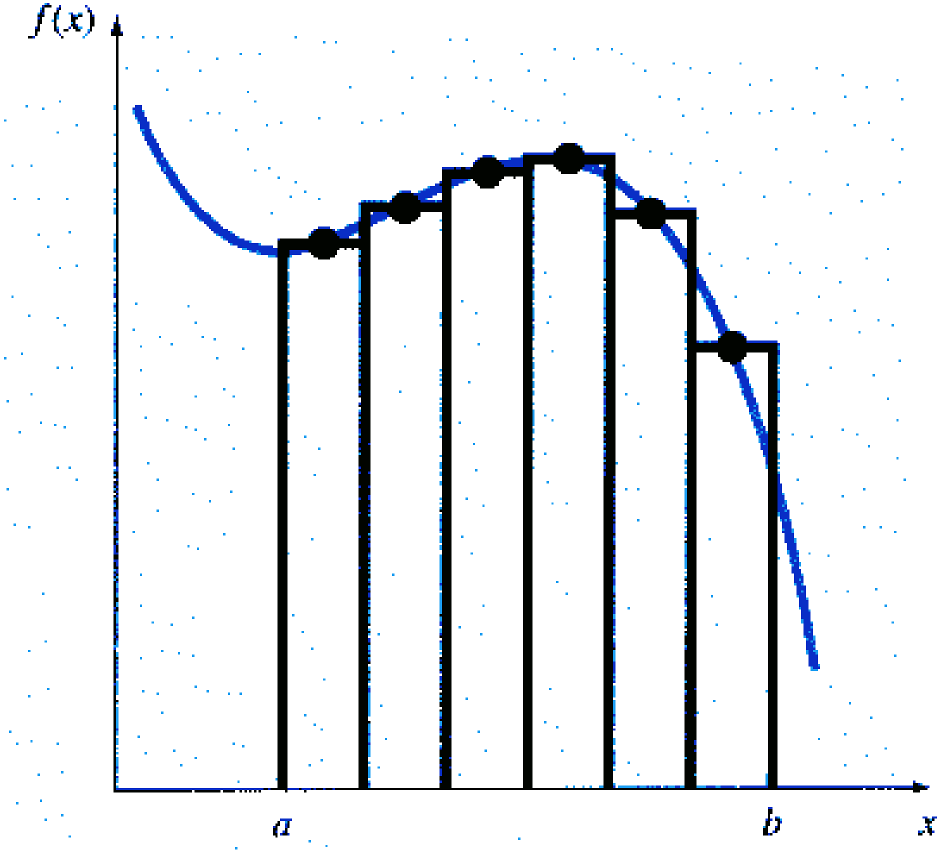
b)

x	dy/dx
0	76.50
3	57.50
6	45.00
9	36.25
15	25.00
18	21.50

Métodos sin computadora



Métodos sin computadora

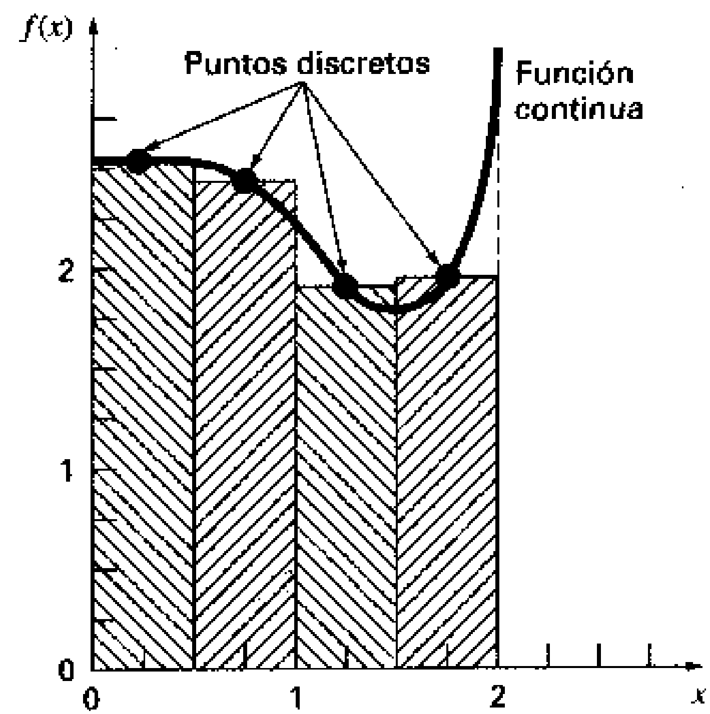


a) $$\int_0^2 \frac{2 + \cos(1 + x^{3/2})}{\sqrt{1 + 0.5\,\text{sen}\,x}}\, e^{0.5x}\, dx$$

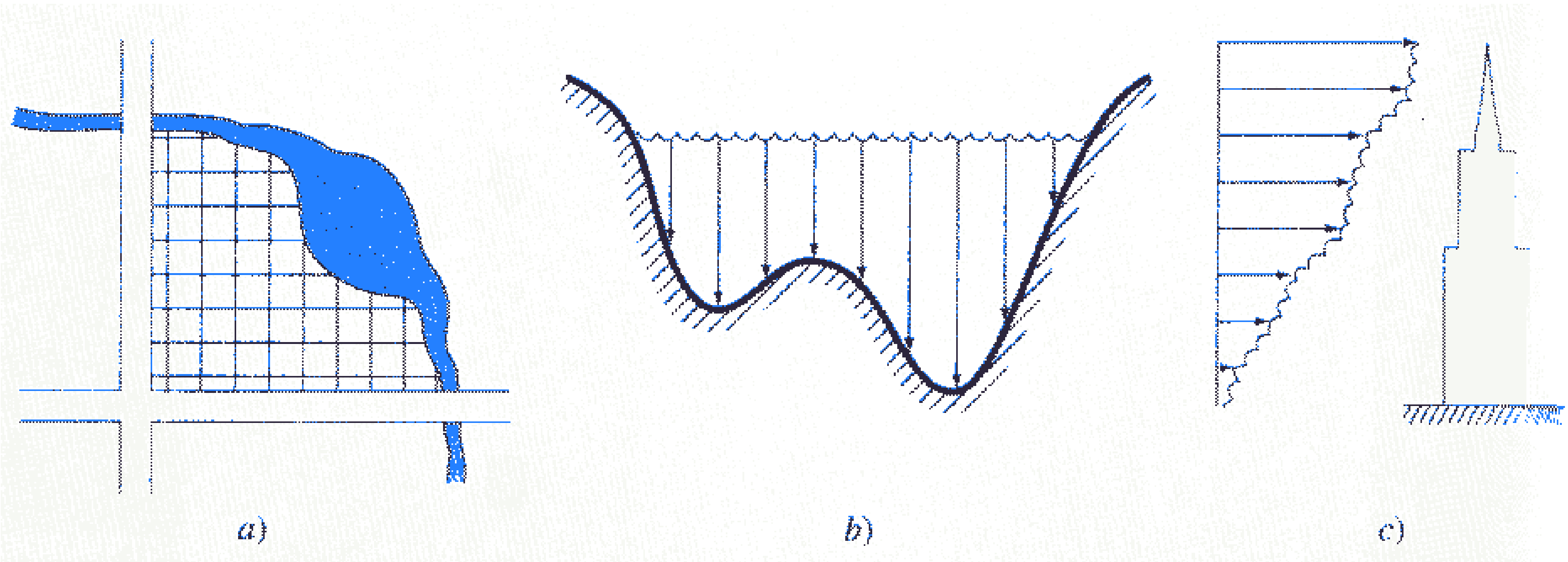
b)

x	$f(x)$
0.25	2.599
0.75	2.414
1.25	1.945
1.75	1.993

c)



Aplicaciones

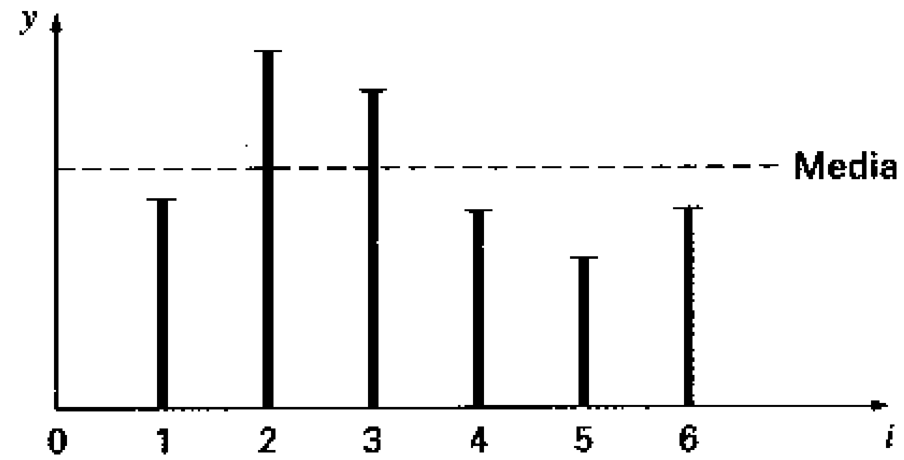


Aplicaciones

Cálculo de la media para variable:

Discreta:

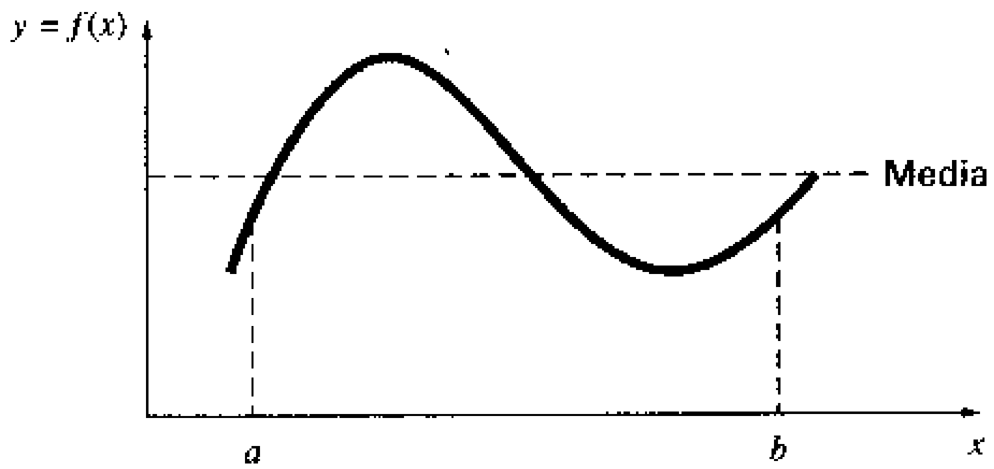
$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^{n} y_i}{n}$$



a)

continua:

$$\bar{x} = \frac{\int_a^b f(x)\,dx}{b-a}$$



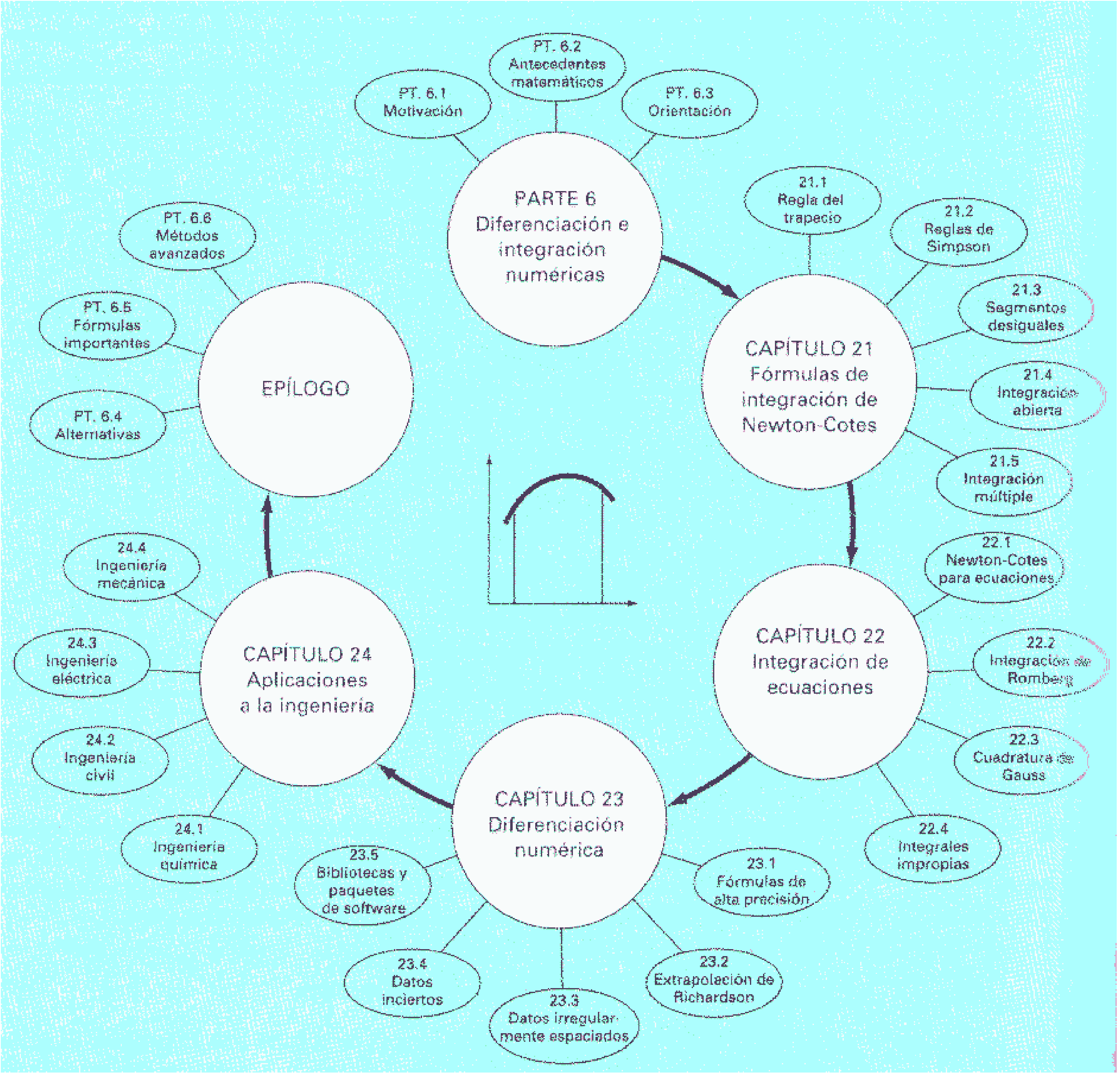
b)

Diferencias

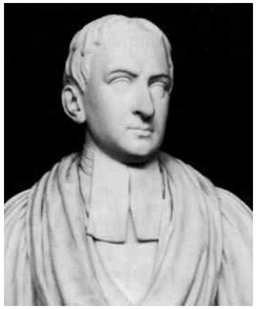
Métodos analíticos: cambian según el tipo de función --> tablas de derivadas e integrales

Métodos numéricos: se plican de igual forma a todas las funciones

Orientación



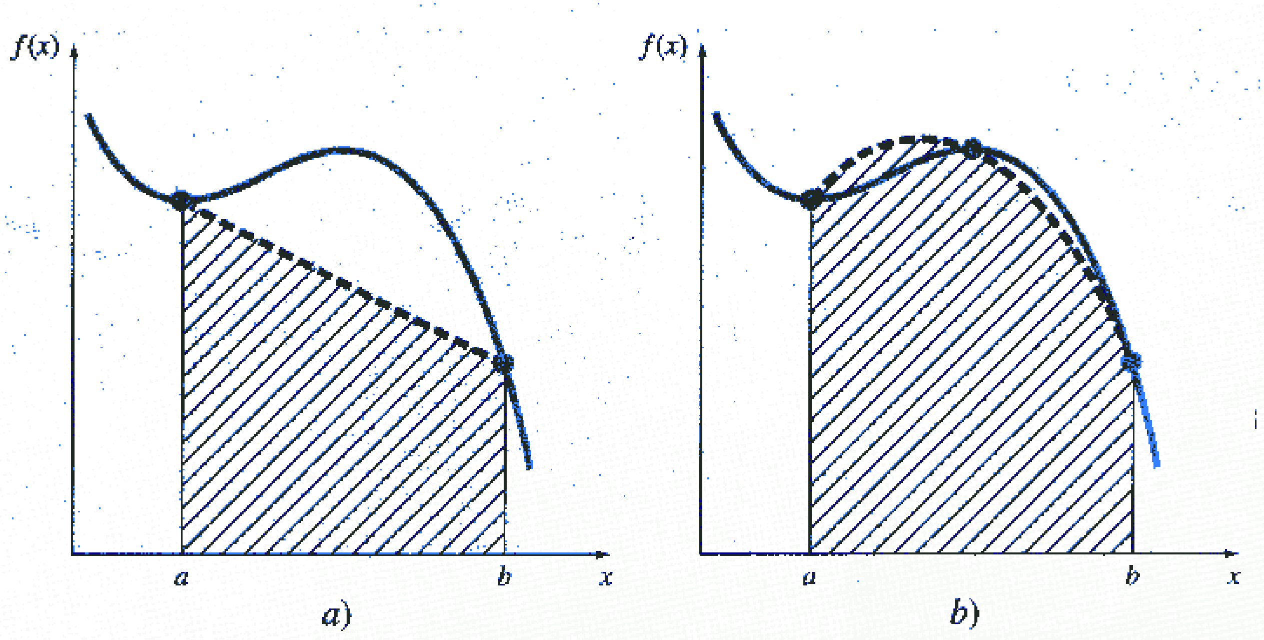
Fórmulas de integración de Newton-Cotes



Se basan en reemplazar el integrando por un polinomio:

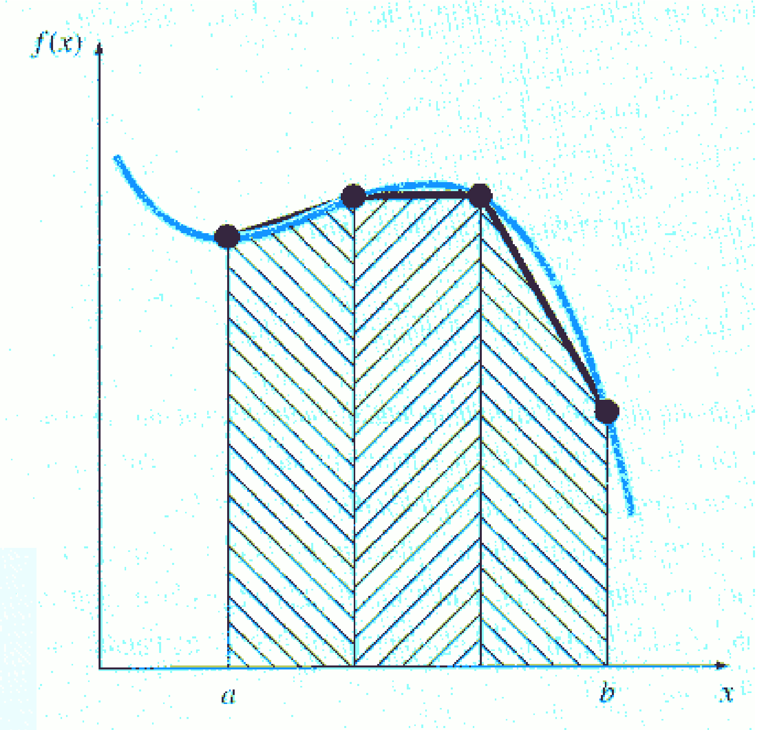
$$I=\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P_n(x)\,dx$$

$$P_n(x)=a_0+a_1 x+a_2 x^2+\ldots+a_{n-1} x^{n-1}+a_n x^n$$

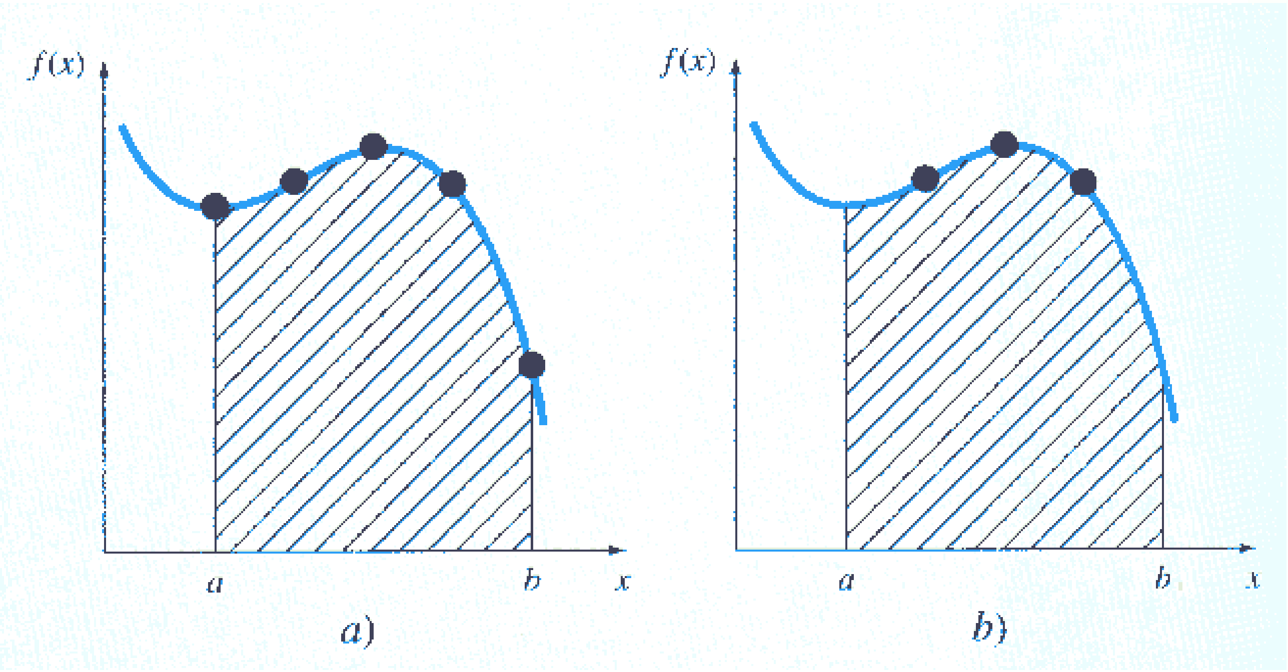


Fórmulas de integración de Newton-Cotes

Aplicación múltiple (fórmula compuesta)



Formas cerradas y abiertas

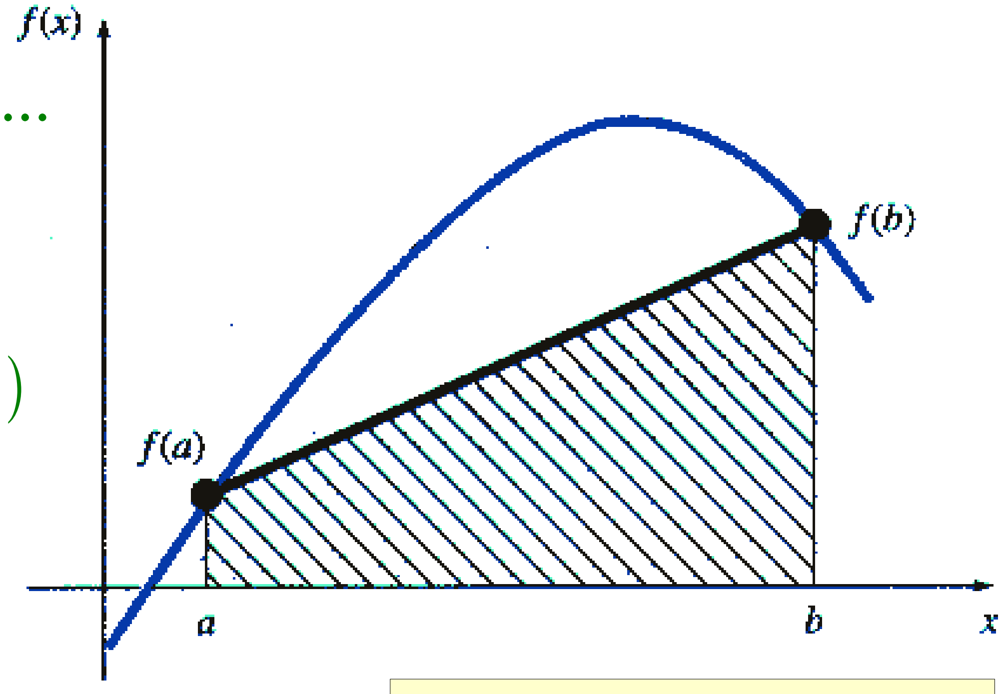


La regla del trapecio

Considerando P(x) un polinomio de grado 1:

$$P_1(x)=\frac{x-b}{a-b}f(a)+\frac{x-a}{b-a}f(b)=\ldots$$

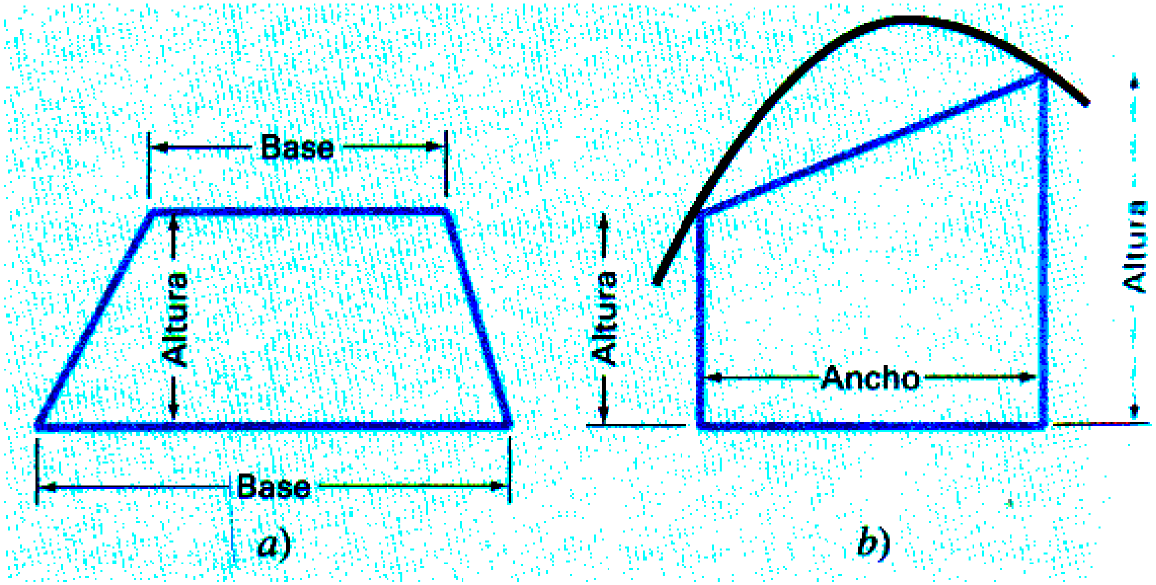
$$P_1(x)=f(a)+\frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a)$$



$$I=\int_a^b P_1(x)\,dx=\int_a^b f(a)+\frac{f(b)-f(a)}{b-a}(x-a)=\ldots=\boxed{(b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}}$$

La regla del trapecio

Integral _ ancho x altura promedio



Error de la regla del trapecio*

Partiendo de la serie de Taylor:

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + f''(a)\frac{(x-a)^2}{2} + \ldots$$

Sustituyendo a z = x - a, dz = dx, e integrando

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_0^{b-a} f(z+a)\,dz = f(a)\int_0^{b-a} dz + f'(a)\int_0^{b-a} z\,dz + f''(a)\int_0^{b-a} \frac{z^2}{2}\,dz + \ldots$$

reemplazando la primera derivada por una diferencia finita dividida hacia adelante:

$$f'(a) = \frac{f(b)-f(a)}{(b-a)} - f''(a)\frac{(b-a)}{2!} + \ldots$$

Se llega a $E_t = -\frac{1}{12} f''(\xi)(b-a)^3$

Ejemplo 21.1 pág. 634

Integrar, desde a = 0 a b = 0.8,

$$f(x)=0.2+25x-200x^2+675x^3-900x^4+400x^5$$

La solución exacta es

$$\int 400x^5-900x^4+675x^3-200x^2+25x+0.2\,dx$$

$$\frac{200x^6}{3}-180x^5+\frac{675x^4}{4}-\frac{200x^3}{3}+\frac{25x^2}{2}+0.2x$$

$$I=\frac{3076}{1875}\approx 1.64053333333333$$

Ejemplo 21.1 pág. 634

$$f(0)=0.2 \quad ; \quad f(0.8)=0.232 \;\Rightarrow\; I=0.8\frac{0.2+0.232}{2}=0.1728$$

$$E_t=1.640533-0.1728=1.467733 \;\Rightarrow\; \varepsilon_t=89.5\,\%$$

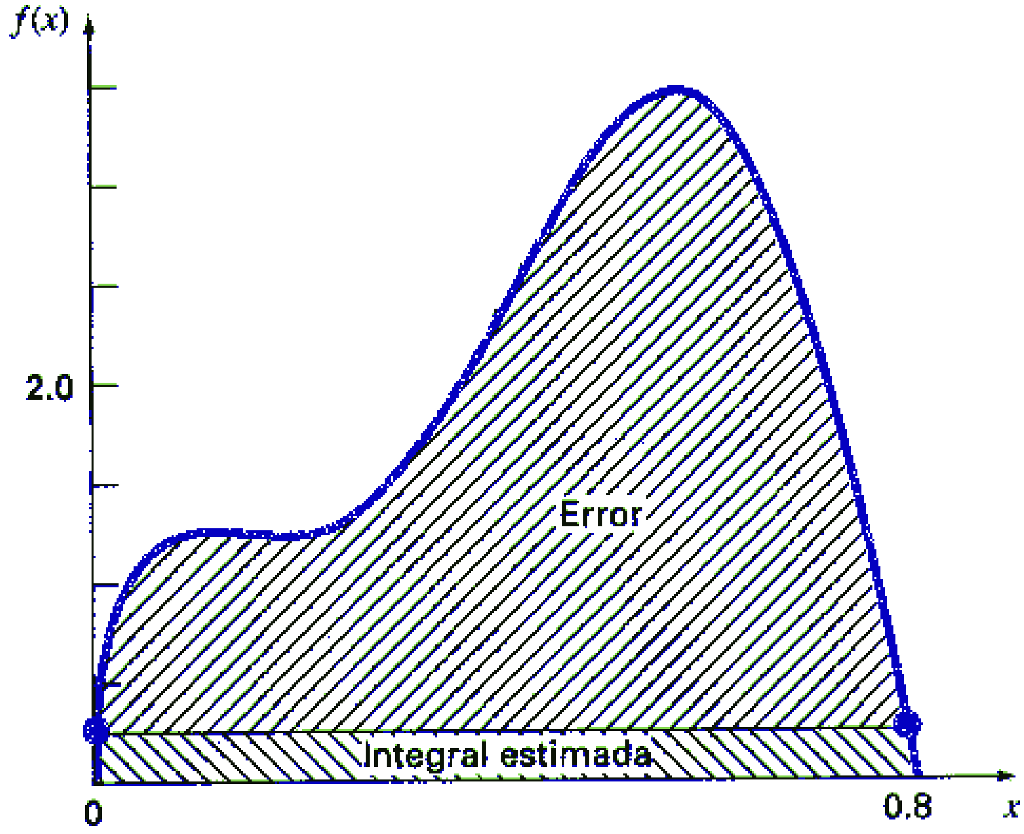
Estimación del error

$$f''(x)=8000x^3-10800x^2+4050x-400$$

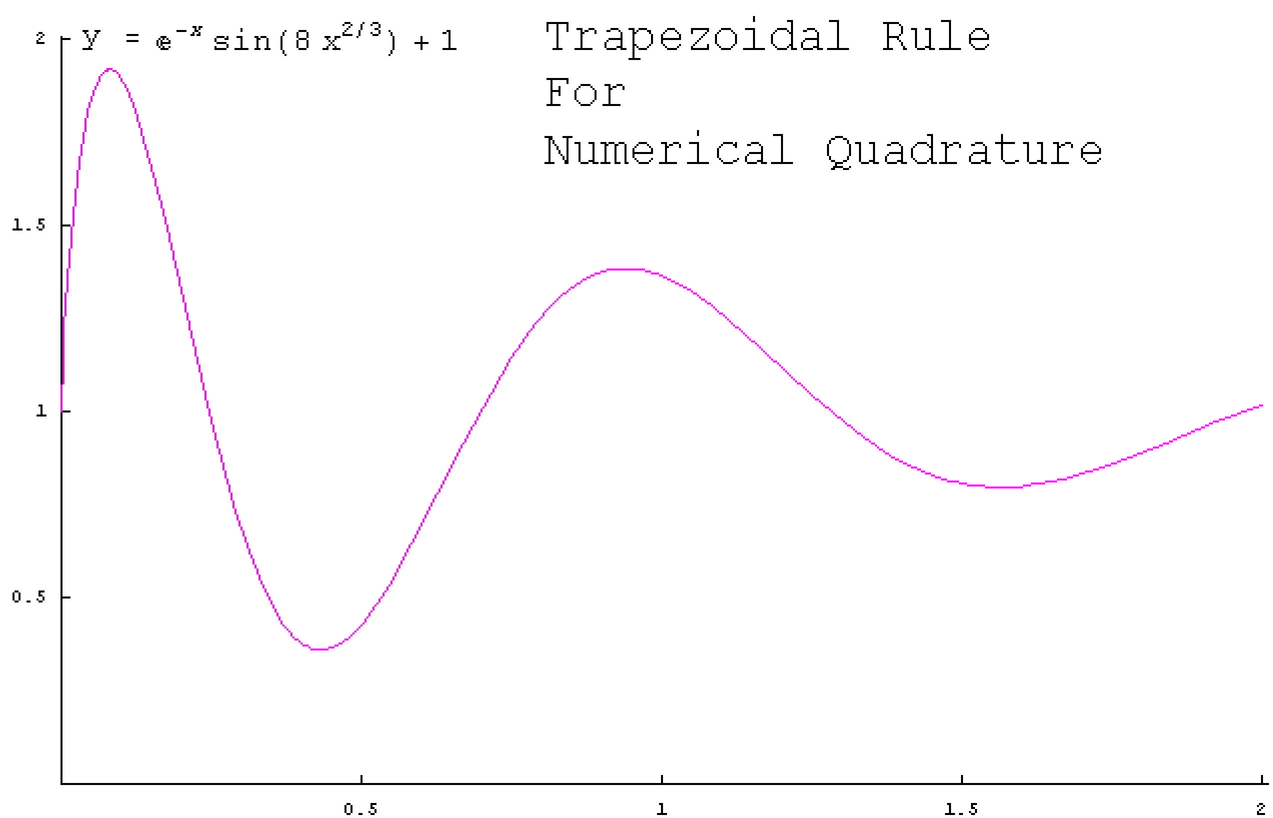
$$\bar{f''}(x)=\frac{\int_0^{0.8} 8000x^3-10800x^2+4050x-400\,dx}{0.8-0}=-60$$

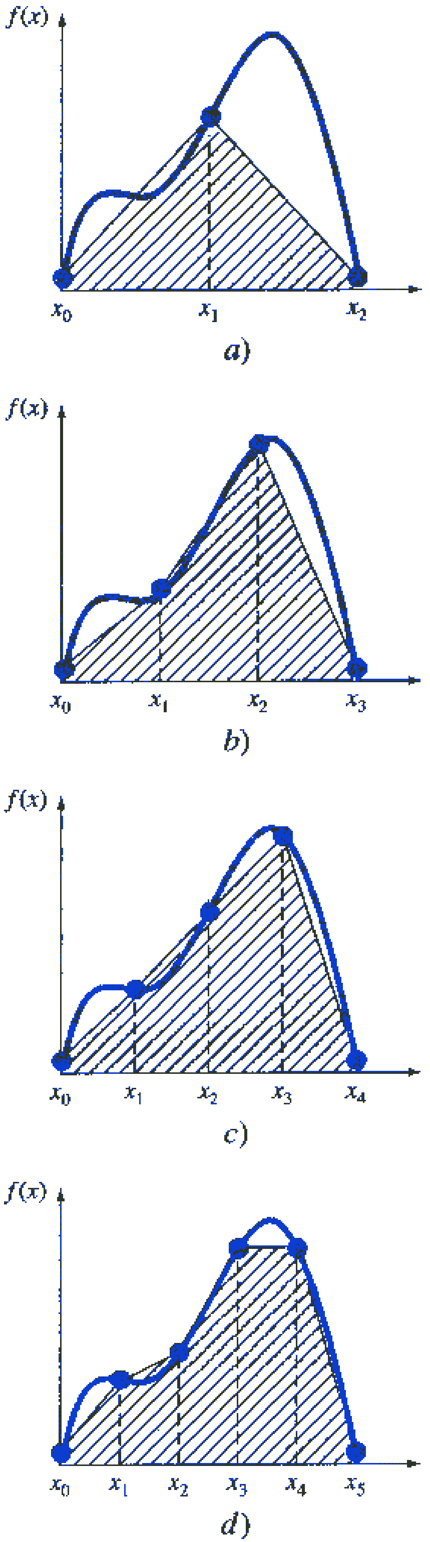
$$E_a=-\frac{1}{12}(-60)(0.8)^3=2.56$$

Ejemplo 21.1 pág. 634



La regla del trapecio de aplicación múltiple (regla compuesta)





La regla del trapecio de aplicación múltiple (regla compuesta)

Se divide el intervalo (a;b) en n segmentos:

$$I=\int_{x_0}^{x_1} f(x)\,dx+\int_{x_1}^{x_2} f(x)\,dx+\ldots+\int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)\,dx$$

$$I=h\frac{f(x_0)+f(x_1)}{2}+h\frac{f(x_1)+f(x_2)}{2}+\ldots+h\frac{f(x_{n-1})+f(x_n)}{2}$$

$$\boxed{I=\frac{h}{2}\left[f(x_0)+\sum_{i_1}^{n-1} f(x_i)+f(x_n)\right]}$$

La regla del trapecio de aplicación múltiple (regla compuesta)

Error

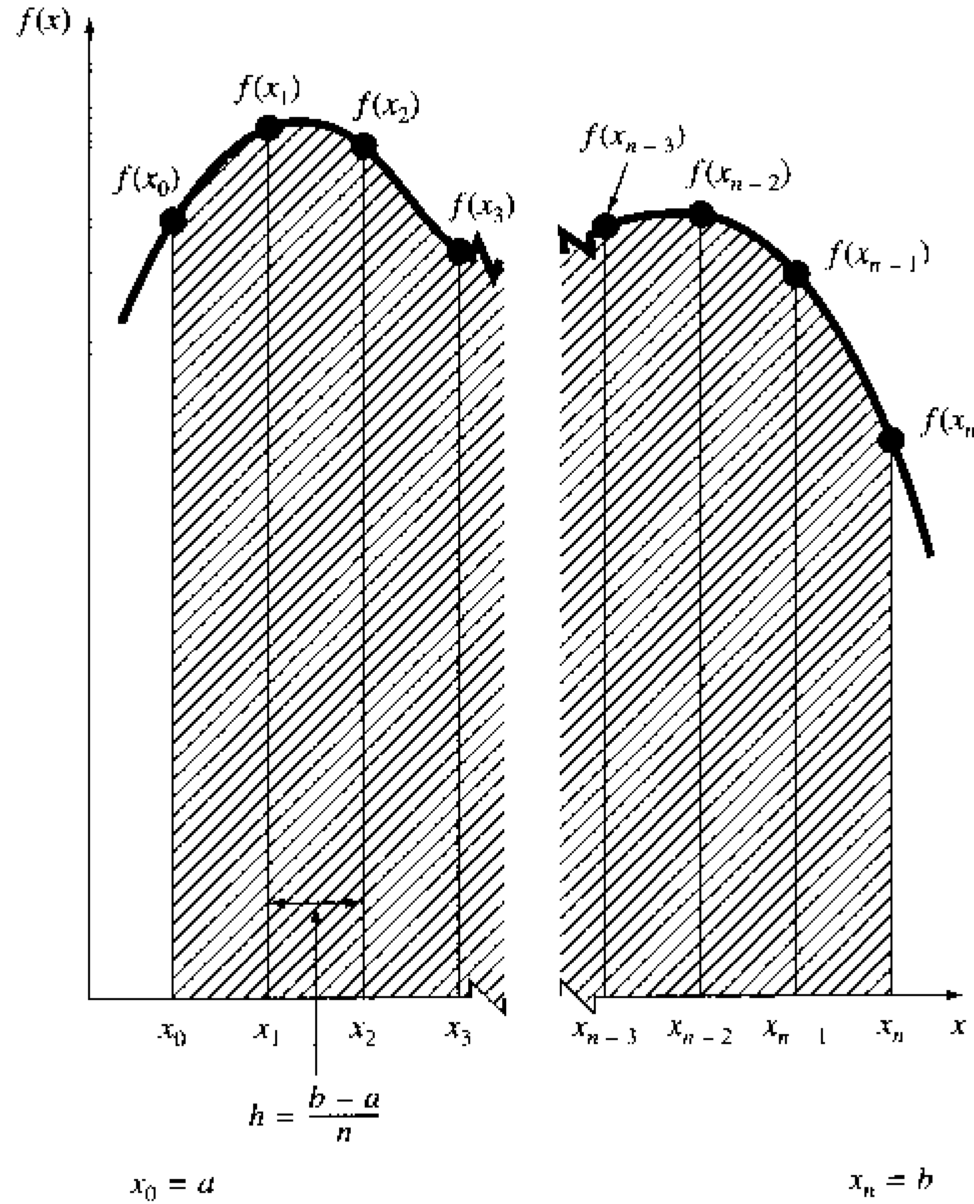
$$E_t = -\frac{(b-a)^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)$$

considerando

$$\bar{f}'' = \frac{\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)}{n}$$

Se tiene

$$E_a = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}\bar{f}''$$



Ejemplo 21.2, pag. 628

Usar la regla del trapecio con 2 segmentos para calcular la intergral entre a = 0 y b = 0.8 de

$$f(x)=0.2+25x-200x^2+675x^3-900x^4+400x^5$$

Solución. Para n = 2, h = 0.4:

$$f(0)=0.2 \quad ; \quad f(0.4)=2.456 \quad ; \quad f(0.8)=0.232$$

$$I=0.8\frac{0.2+2(2.456)+0.232}{4}=1.0688$$

$$E_t=1.640533-1.0688=0.57173 \quad ; \quad \varepsilon_t=34.9\%$$

$$E_a=-\frac{0.8^3}{12(2)^2}(-60)=0.64$$

Algoritmo

Código en Octave: trapecio.m

Solución en planilla de cálculo: trapecio.ods

Ejemplo 21.3 pag. 629

Calcular la distancia recorrida por el paracaidista en 10 s

Parámetros $g=9.8\frac{m}{s^2}$; $m=68.1\,kg$; $c=12.5\frac{kg}{s}$

$$d=\int_0^t v(t)\,dt=\frac{g\,m}{c}\int_0^t\left(1-e^{-\frac{c}{m}t}\right)d\,t$$

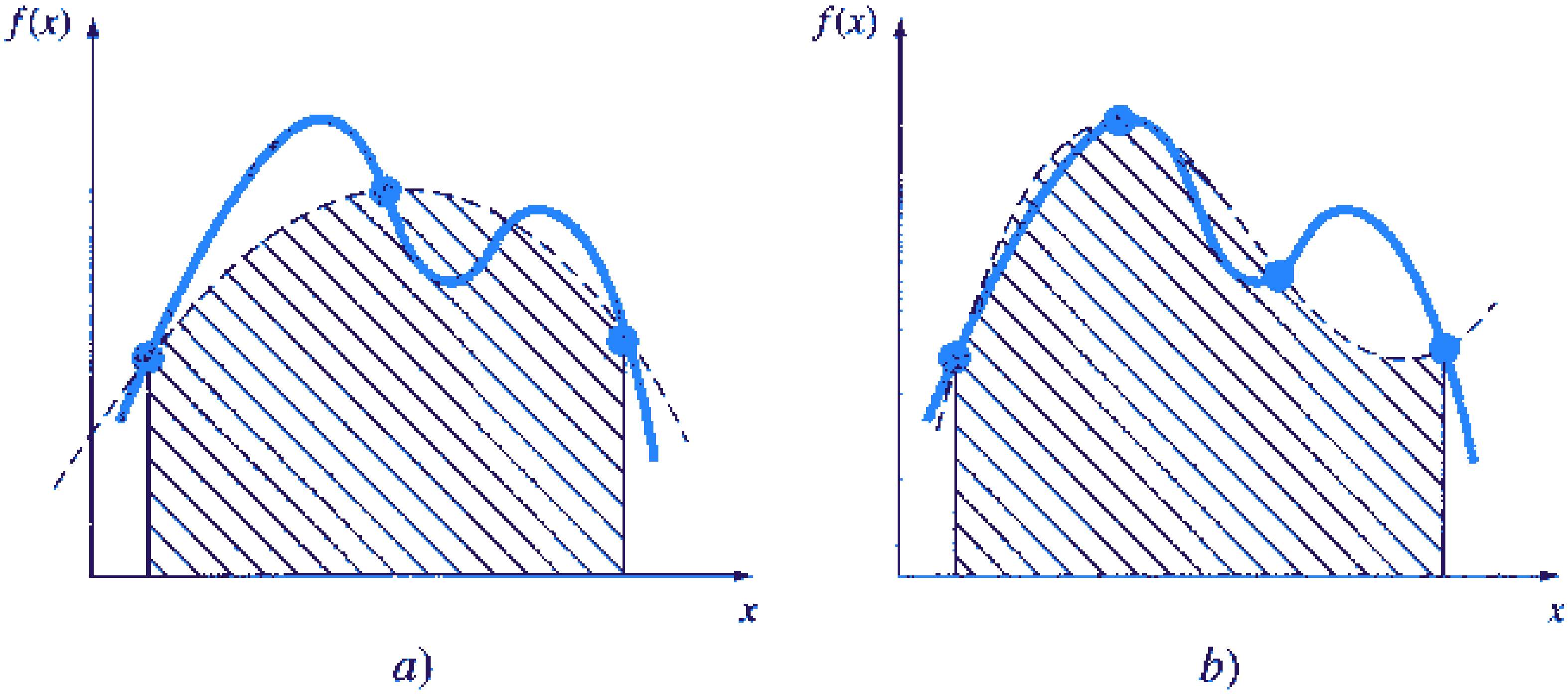
Código en octave: p21_3.m

Código en Python: p21_3.py

Reglas de Simpson

Regla 1/3 de Simpson: P(x) de segundo grado

Regla 3/8 de Simpson: P(x) de tercer grado



Regla 1/3 de Simpson

Se integra un polinomio de 2do grado:

$$P_2(x)=\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)$$

$$I=\int_{x_0}^{x_2}\left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}f(x_0)+\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}f(x_1)+\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}f(x_2)\right]dx$$

Integrando y sustituyendo a $x_2 = x_1 + h$, $x_0 = x_1 - h$:

$$I=\frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right]=\underbrace{(b-a)}_{ancho}\underbrace{\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}}_{altura\ \ promedio}$$

Error de la regla 1/3 de Simpson*

Partiendo de la serie de Taylor:

$$f(x) = f(x_1) + f'(x_1)(x - x_1) + f''(x_1)\frac{(x - x_1)^2}{2} + \ldots$$

Sustituyendo a z = x - x_1, dz = dx, e integrando entre -h y h

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{-h}^{h} f(z + x_1)\,dz = f(x_1)\int_{-h}^{h} dz + f'(x_1)\int_{-h}^{h} z\,dz + f''(x_1)\int_{-h}^{h} \frac{z^2}{2}\,dz + \ldots$$

reemplazando la primera derivada por una diferencia finita dividida hacia adelante:

$$f''(x_1) = \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h^2} - f^{IV}(\xi)\frac{h^2}{12}$$

Se llega a $E_t = -\frac{١}{٩٠} h^{٥} f^{IV}(\xi) = -\frac{(b-a)^{٥}}{٢٨٨٠} f^{IV}(\xi)$

Ejemplo 21.4, pág. 633

Integrar entre a = 0 y b = 0.8

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

Solución.

$$f(0) = 0.2 \quad ; \quad f(0.4) = 2.456 \quad ; \quad f(0.8) = 0.232$$

$$I = 0.8\,\frac{0.2 + 4(2.456) + 0.232}{6} = 1.367467$$

$$E_t = 1.640533 - 1.367467 = 0.2730667 \quad ; \quad \varepsilon_t = 16.6\,\%$$

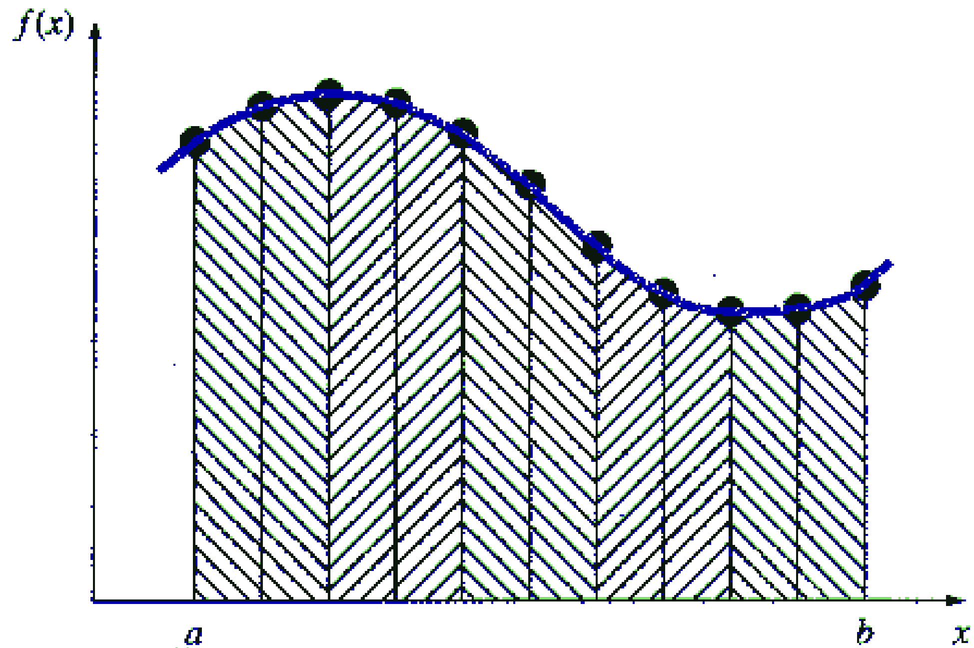
$$f^{IV}(x) = 48000\,x - 21600$$

$$\bar{f}^{IV} = \frac{\int_0^{0.8} (48000\text{x} - 21600)\,dx}{0.8 - 0} = -2400$$

$$E_a = -\frac{0.8^5}{2880}(-2400) = 0.2730667$$

La regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple

Se divide el intervalo en n partes (n par):



$$h = \frac{b-a}{n}$$

$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x)\,dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)\,dx + \ldots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)\,dx$$

$$I = h\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{3} + h\frac{f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)}{3} + \ldots + h\frac{f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)}{3}$$

La regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple

$$I=\frac{h}{3}\left[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+\ldots+2f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)\right]$$

$$I=\frac{h}{3}\left[f(x_0)+4\sum_{i=1,3,5,..}^{n-1}f(x_i)+2\sum_{i=2,4,6,..}^{n}f(x_i)+f(x_n)\right]$$

$$I=\underbrace{(b-a)}_{ancho}\underbrace{\frac{f(x_0)+4\sum_{i=1,3,5,..}^{n-1}f(x_i)+2\sum_{i=2,4,6,..}^{n}f(x_i)+f(x_n)}{3n}}_{altura\ \ promedio}$$

Error

$$E_t = -\frac{1}{90} h^5 \sum_{i=2,4,6\ldots}^{n} f^{IV}(\xi_i)$$

$$\bar{f}^{IV} = \frac{\sum_{i=1}^{n} f^{IV}(\xi_i)}{n/2}$$

$$\boxed{E_a = -\frac{(b-a)^5}{180\, n^4} \bar{f}^{IV}}$$

Ejemplo 21.5

Integrar entre a = 0 y b = 0.8

$$f(x)=0.2+25x-200x^2+675x^3-900x^4+400x^5$$

Solución.

x	f(x)
0	0.2
0.2	1.288
0.2	1.288
0.4	2.456
0.6	3.464

$$I=0.8\frac{0.2+4(1.288+3.464)+2(2.456)+0.232}{12}=1.623467$$

$$E_t=1.640533-1.623467=0.017067 \quad ; \quad \varepsilon_t=1.04\,\%$$

$$E_a=-\frac{0.8^5}{180(4)^4}(-2400)=0.017067$$

Planilla de cálculo: simpson13.ods

Regla 3/8 de Simpson

Se integra un polinomio de 3er grado:

$$P_3(x)=\sum_{i=0}^{3}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{3}\frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)} \qquad I=\int_{x_0}^{x_2}\left[\sum_{i=0}^{3}\prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{3}\frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)}\right]dx$$

Integrando y sustituyendo a $x_i = x_0 + ih$:

$$I=\frac{3h}{8}\left[f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)\right]=\underbrace{(b-a)}_{ancho}\underbrace{\frac{f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)}{8}}_{altura\quad promedio}$$

Error

$$E_t=-\frac{3}{80}h^5 f^{IV}(\xi)=-\frac{(b-a)^5}{6480}f^{IV}(\xi)$$

Ejemplo 21.6. pag. 637

Integrar entre a = 0 y b = 0.8

$$f(x) = 0.2 + 25x - 200x^2 + 675x^3 - 900x^4 + 400x^5$$

con la regla de Simpson 3/8

En 5 intervalos, usando las reglas 1/3 y 3/8 de Simpson

a) Se divide en 3 partes iguales

x	f(x)
0	0.2
0.533333	3.487177
0.266667	1.432724
0.8	0.232

$$I = 0.8\frac{0.2 + 3(3.487177 + 1.432724) + 0.232}{8} = 1.519170$$

$$E_t = 1.640533 - 1.519170 = 0.1213630 \quad ; \quad \varepsilon_t = 7.4\,\%$$

$$E_a = -\frac{0.8^5}{6480}(-2400) = 0.1213630$$

Ejemplo 21.6. pag. 637

b) Se divide en 5 segmentos (h = 0.16)

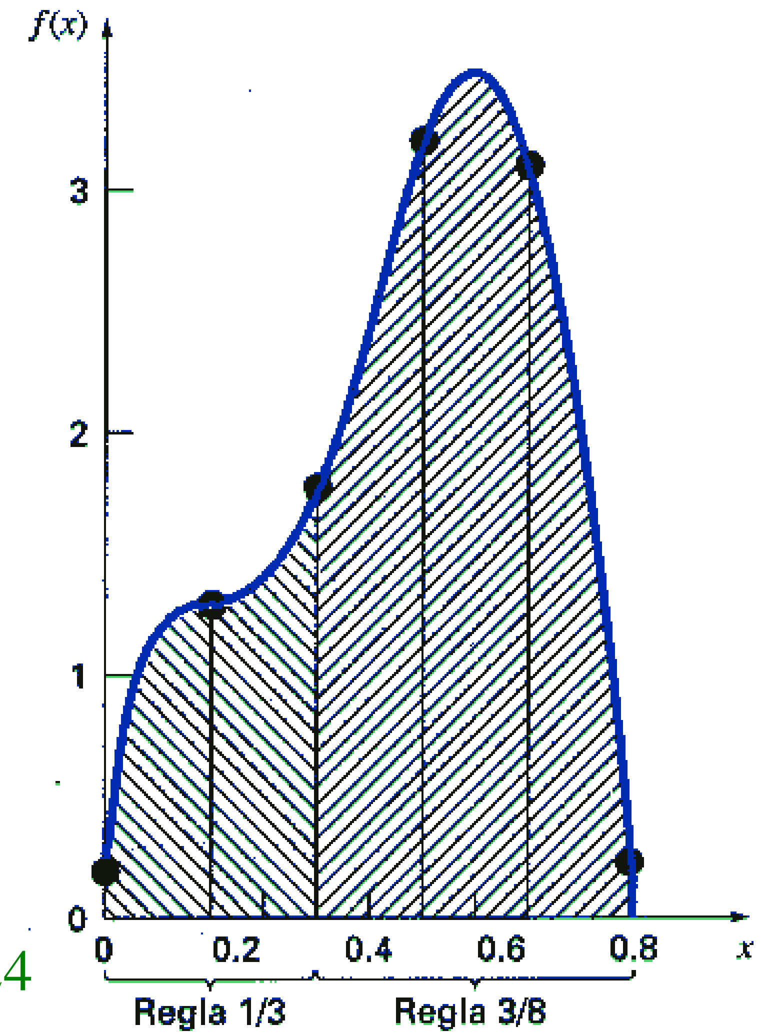
x	f(x)
0	0,200000
0,16	1,296919
0,16	1,296919
0,32	1,743393
0,48	3,186015
0,64	3,181929

$$I = I_1 + I_2 = 1.645077$$

$$E_t = -0.00454383$$

$$\varepsilon_t = -0.28\,\%$$

Planilla: simpson3_8.ods



$$I_1 = \frac{0.16}{3}(0.2 + 4\times 1.296919 + 1.743393) = 0.380324$$

$$I_2 = \frac{3}{8}0.16[1.743393 + 3(3.186015 + 3.181929) + 0.232] = 1.264753$$

Algoritmos

Código en Octave regla 1/3 de simpson compuesta: simpson1_3.m

Código en Octave regla 3/8 de simpson compuesta: simpson3_8.m

Otras fórmulas de Newton-Cotes

Fórmulas de Newton-Cotes: integrales.pdf

Integración con segmentos desiguales

Apropiada para datos experimentales

Por ejemplo, con la regla trapezoidal:

$$I = h_1 \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h_2 \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \ldots + h_n \frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

Ejemplo 21.7 pag. 640

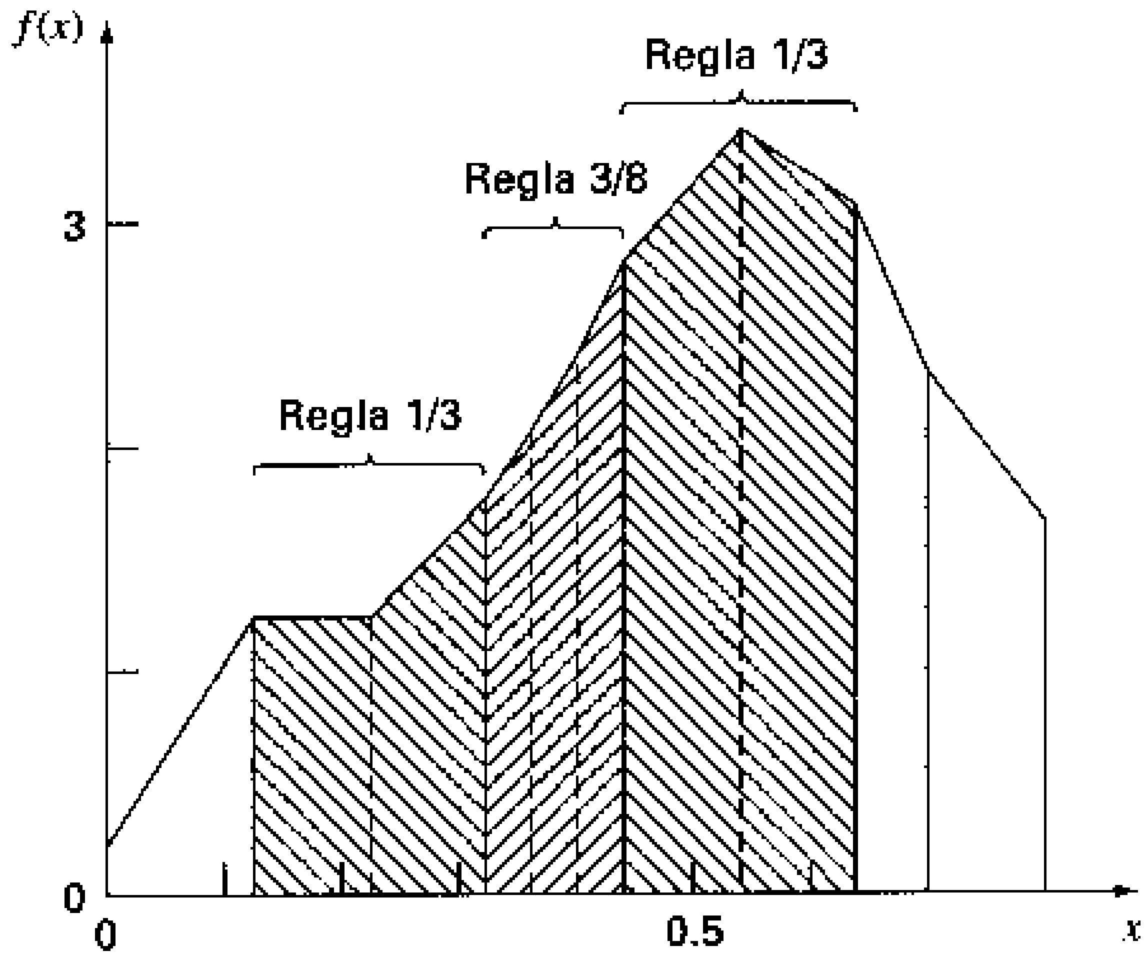
Integrar a partir de los datos:

x	f(x)
0,00	0,200000
0,12	1,309729
0,22	1,305241
0,32	1,743393
0,36	2,074903
0,40	2,456000
0,44	2,842985
0,54	3,507297
0,64	3,181929
0,70	2,363000
0,80	0,232000

solución en 21_7.ods

Ejemplo 21.8 pag. 641

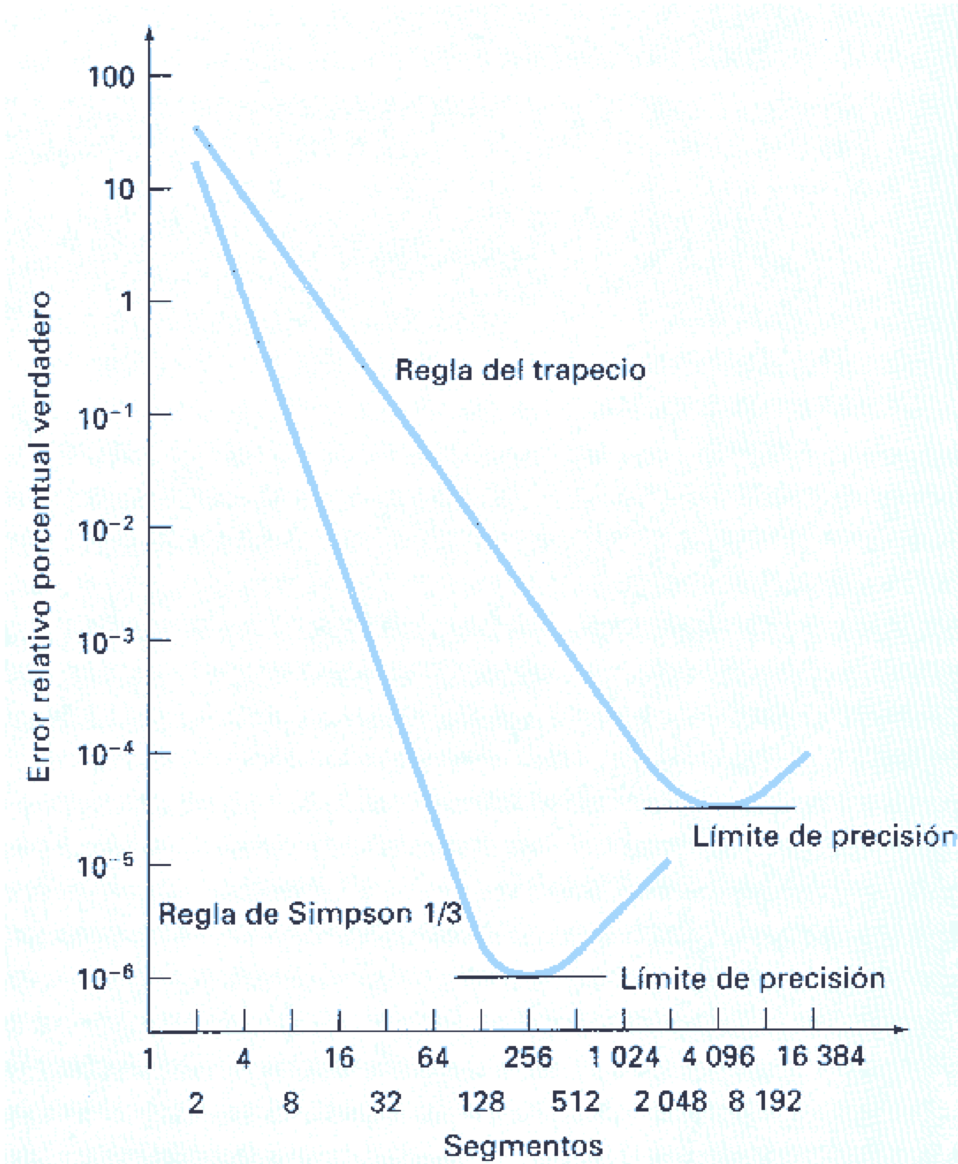
x	f(x)
0,00	0,200000
0,12	1,309729
0,22	1,305241
0,32	1,743393
0,36	2,074903
0,40	2,456000
0,44	2,842985
0,54	3,507297
0,64	3,181929
0,70	2,363000
0,80	0,232000



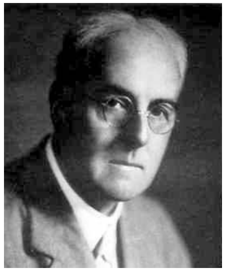
Solución en 21_8.ods

Problemas 21.1 a 21.23 pag. 645

Límite de precisión de las fórmulas de Newton-Cotes



Extrapolación de Richardson



Forma general de la regla del trapecio compuesta:

$$I = I(h) + E(h)$$

Aplicada con dos pasos distintos:

$$I(h_1) + E(h_1) = I(h_2) + E(h_2)$$

Recordando que

$$E \approx -\frac{(b-a)^3}{12n^2}\bar{f}'' = -\frac{(b-a)}{12}h^2\bar{f}''$$

Extrapolación de Richardson

Se puede escribir:

$$\frac{E(h_1)}{E(h_2)} \approx \frac{h_1^2}{h_2^2} \quad \Rightarrow \quad E(h_1) \approx E(h_2)\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^2$$

Reemplazando,

$$I(h_1) + E(h_2)\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^2 \approx I(h_2) + E(h_2)$$

despejando,

$$E(h_2) \approx \frac{I(h_1) - I(h_2)}{1 - \left(h_1/h_2\right)^2}$$

Extrapolación de Richardson

reemplazando,

$$I = I(h_2) + E(h_2) \approx \ldots \approx \boxed{I(h_2) + \frac{I(h_2) - I(h_1)}{(h_1/h_2)^2 - 1}}$$

Se puede demostrar que el error es del orden de O(h⁴)

En el caso en que $h_2 = h_1/2$

$$I \approx I(h_2) + \frac{I(h_2) - I(h_1)}{2^2 - 1} = \ldots = \boxed{\frac{4}{3} I(h_2) - \frac{1}{3} I(h_1)}$$

Ejemplo 22.1 pag. 652

Integrar entre a = 0 y b = 0.8

$$f(x)=0.2+25x-200x^2+675x^3-900x^4+400x^5$$

De la aplicación de la regla del trapecio,

n	h	I	et(%)
1	0.8000	0.1728	89.5
2	0.4000	1.0688	34.9
4	0.2000	1.4848	9.5

Con 1 y 2 segmentos,

$$I \approx \frac{4}{3}1.0688-\frac{1}{3}0.1728=1.367467 \quad \Rightarrow \quad \ldots \varepsilon_t=16.6\%$$

Con 2 y 4 segmentos,

$$I \approx \frac{4}{3}1.4848-\frac{1}{3}1.0688=1.623467 \quad \Rightarrow \quad \ldots \varepsilon_t=1.0\%$$

Extrapolación de Richardson

A partir de dos estimaciones de $O(h^2)$,

$$I = \frac{4}{3} I(h_2) - \frac{1}{3} I(h_1) + O(h^4)$$

A partir de dos estimaciones de $O(h^4)$ ($h_2 = h_1/4$),

$$I = \frac{16}{15} I(h_2) - \frac{1}{15} I(h_1) + O(h^6)$$

A partir de dos estimaciones de $O(h^6)$ ($h_2 = h_1/8$),

$$I = \frac{64}{63} I(h_2) - \frac{1}{63} I(h_1) + O(h^8)$$

Ejemplo 22.2 pag. 653

Obtener una estimación de $O(h_6)$ a partir del ejemplo 22.1:

$$I = \frac{16}{15} 1.623467 - \frac{1}{15} 1.367467 = \boxed{1.640533}$$

Algoritmo de Romberg

En general,

$$I_{j,k} = \frac{4^{k-1} I_{j+1,k-1} - I_{j,k-1}}{4^{k-1} - 1}$$

k: nivel de integración

j: estimación

Por ejemplo, para k=2 y j =1

$$I_{1,2} = \frac{4^{2-1} I_{2,1} - I_{1,1}}{4^{2-1} - 1} = \frac{4 I_{2,1} - I_{1,1}}{3}$$

Algoritmo de Romberg

La iteración continúa hasta que

$$|\varepsilon_a| = \left| \frac{I_{1,k} - I_{1,k-1}}{I_{1,k}} \right| 100\% < \varepsilon_s$$

Planilla de cálculo: romberg.ods

Código en Octave: romberg.m

Integrales impropias

Se resuelven con una sustitución:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f\left(\frac{1}{t}\right) dt \quad , \quad a\,b > 0$$

Es decir cuando a >0 y b ⟶ +∞, o a ⟶ -∞ y b < 0. Si a·b < 0, se puede hacer:

$$\int_{-\infty}^{b} f(x)\,dx = \int_{-\infty}^{-A} f(x)\,dx + \int_{-A}^{b} f(x)\,dx$$

Integrales impropias

Se deben usar fórmulas abiertas, o combinar fórmulas abiertas con fórmulas cerradas:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = h\left[\frac{3}{2} f(x_i) + \sum_{i=2}^{n-2} f(x_i) + \frac{3}{2} f(x_{n-1})\right]$$

Regla del trapecio + regla del punto medio

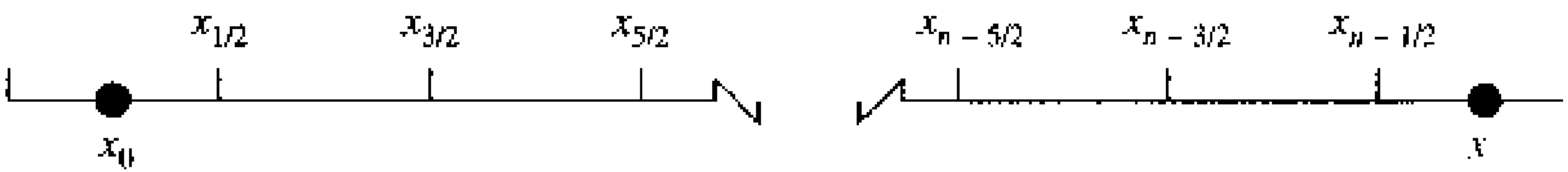
O desarrollar una fórmula semiabierta:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = h\left[\frac{3}{2} f(x_i) + \sum_{i=2}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_n)\right]$$

Integrales impropias

Regla extendida del punto medio:

$$\int_{x_0}^{x_n} f(x)\,dx = h\left[f(x_{1/2}) + f(x_{3/2}) + \ldots + f(x_{n-3/2}) + f(x_{n-1/2}) \right]$$



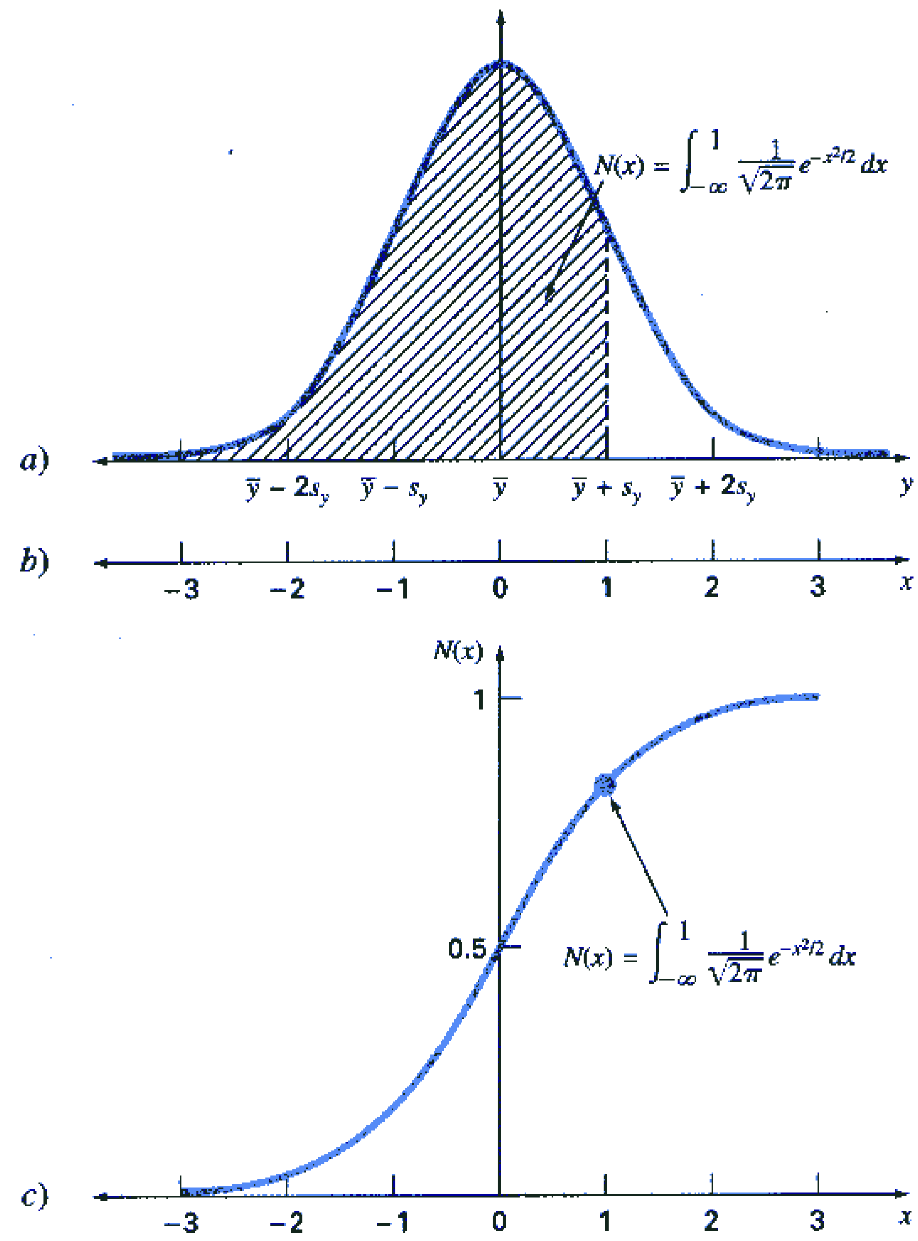
Ejemplo 22.6 pag. 664

Distribución normal

$$N(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} dx$$

donde $x = \dfrac{y - \mu_y}{\sigma_y}$

Calcular N(1)



Ejemplo 22.6 pag. 664

Solución.

$$N(1)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\int_{-\infty}^{-2} e^{-x^2/2}\,dx+\int_{-2}^{1} e^{-x^2/2}\,dx\right)$$

La primera integral se calcula como

$$\int_{-\infty}^{-2} e^{-x^2/2}\,dx=\int_{-1/2}^{0}\frac{1}{t^2}e^{-1/(2t^2)\,dt}$$

Usando al regla extendida del punto medio (h = 1/8):

$$\int_{-1/2}^{0}\frac{1}{t^2}e^{-1/(2t^2)\,dt}\approx\frac{1}{8}\left[f\left(-\frac{7}{16}\right)+f\left(-\frac{5}{16}\right)+f\left(-\frac{3}{16}\right)+f\left(-\frac{1}{16}\right)\right]$$

Ejemplo 22.6 pag. 664

$$\ldots = \frac{1}{8}[0.3833 + 0.0612 + 0 + 0] = 0.0556$$

La segunda integral se calculas usando la regla 1/3 de Simpson con h = 0.5:

$$\int_{-2}^{1} e^{-x^2/2}\,dx = [1-(-2)]\frac{0.1353 + 4(0.3247 + 0.8825 + 0.8825) + 2(0.6065 + 1) + 0.6065}{3 \times 6}$$

$$\int_{-2}^{1} e^{-x^2/2}\,dx = 2.0523$$

El resultado final es

$$N(1) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(0.0556 + 2.0523) = 0.8409 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_t = 0.046\,\%$$

Problemas

22.1 a 22.3

22.9 a 22.11

22.14 y 22.15

Diferenciación numérica

Recordando que a partir de la serie de Taylor:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \ldots$$

Es posible obtener:

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

Que se puede escribir como:

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

Diferencia finita dividida hacia adelante

Diferenciación numérica

En forma similar se obtenían

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

Primera diferencia finita dividida hacia atrás

y

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

Primera diferencia finita dividida centrada

Diferenciación numérica

Si escribimos

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + f'(x_i)\,2h + \frac{f''(x_i)}{2!}(2h)^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}(2h)^3 + \ldots$$

Ahora hacemos

$$f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) = \ldots = -f(x_i) + f''(x_i)\,h^2 + \ldots$$

despejando,

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

Segunda diferencia finita dividida hacia adelante

Diferenciación numérica

En forma similar, haciendo $f(x_{i-2})-2f(x_{i-1})$

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

Segunda diferencia finita dividida hacia atrás

En forma similar, haciendo $f(x_{i+1})+f(x_{i-1})$

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

Segunda diferencia finita dividida centrada

Diferenciación numérica

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

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

Se llega a
$$f'(x_i)=\frac{f(x_{i+1})-f(x_i)}{h}-\left[\frac{f(x_{i+2})-2f(x_{i+1})+f(x_i)}{2h^2}+O(h)\right]h+O(h^2)$$

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

Fórmulas de diferencias finitas divididas

En forma similar se obtienen las fórmulas indicadas en derivadas.pdf

Ejemplo 23.1 pag. 671

Encontrar la derivada de f(x) en x = 0.5

$$f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$$

Valor exacto:

$$f'(0.5) = -0.3 \times 0.5^3 - 0.45 \times 0.5^2 - 0.5 - 0.25 = -0.9125$$

Ejemplo 23.1 pag. 671

x	f(x)
0	1.2
0.25	1.103516
0.5	0.925
0.75	0.6363281
1	0.2

Con fórmulas de exactitud O(h):

$$f'(0.5) = \frac{0.925 - 1.103516}{0.25} = -0.714 \quad ; \quad \varepsilon_t = 21.7\,\%$$

Diferencia finita dividida hacia atrás

$$f'(0.5) = \frac{0.6363281 - 0.925}{0.25} = -1.155 \quad ; \quad \varepsilon_t = -26.5\,\%$$

Diferencia finita dividida hacia adelante

Con fórmulas de exactitud O(h^2):

$$f'(0.5) = \frac{0.6363281 - 1.103516}{2 \times 0.25} = -0.934 \quad ; \quad \varepsilon_t = -2.4\,\%$$

Diferencia finita dividida centrada

Ejemplo 23.1 pag. 671

x	f(x)
0	1.2
0.25	1.103516
0.5	0.925
0.75	0.6363281
1	0.2

Con fórmulas de exactitud O(h^2):

$$f'(0.5)=\frac{-0.2+4\times 0.6363281-3\times 0.925}{2\times 0.25}=-0.859375 \quad ; \quad \varepsilon_t=5.82\%$$

Diferencia finita dividida hacia adelante

$$f'(0.5)=\frac{3\times 0.925-4\times 1.103516+1.2}{2\times 0.25}=-0.878125 \quad ; \quad \varepsilon_t=3.77\%$$

Diferencia finita dividida hacia atrás

Con fórmulas de exactitud O(h^4):

$$f'(0.5)=\frac{-0.2+8\times 0.6363281-8\times 1.1035156+1.2}{12\times 0.25}=-0.9125 \quad ; \quad \varepsilon_t=0\%$$

Diferencia finita dividida centrada

Extrapolación de Richardson

También se puede aplicar a las derivadas (O(h²)):

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

Si $h_2 = h_1/2$:

$$D \approx \frac{\text{٤}}{\text{٣}} D(h_{\text{٢}}) - \frac{\text{١}}{\text{٣}} D(h_{\text{١}})$$

Se puede usar el algoritmo de Romberg

Ejemplo 23.2 pag 672

Calcular la primera derivada en x = 0.5

$$f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$$

Con fórmulas centradas, pasos 0.5 y 0.25:

$$f'(0.5) = \frac{0.2 - 1.2}{2 \times 0.5} = -1.0 \quad ; \quad \varepsilon_t = -9.6\%$$

$$f'(0.5) = \frac{0.6363281 - 1.103516}{2 \times 0.25} = -0.934375 \quad ; \quad \varepsilon_t = -2.4\%$$

extrapolando,

$$f'(0.5) = \frac{4}{3}(-0.934375) - \frac{1}{3}(-1) = -0.9125 \quad ; \quad \varepsilon_t = 0\%$$

Derivadas de datos irregularmente espaciados

Datos experimentales y/o de campo

Ajustar un polinomio de Lagrange de grado 2 a 3 puntos adyacentes

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

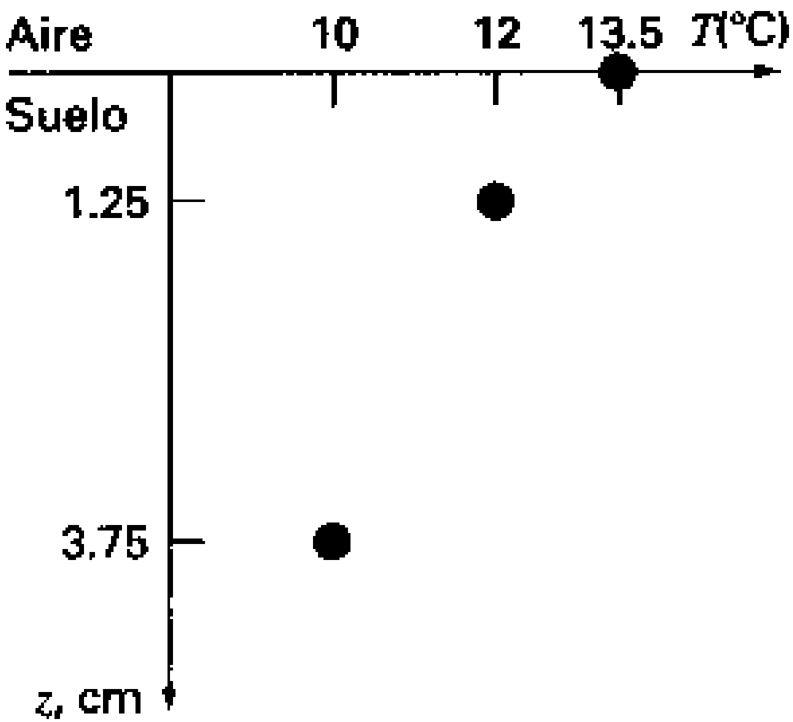
$$+ f(x_{i+1})\frac{2x - x_{i-1} - x_i}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)}$$

Ejemplo 23.3 pag. 673

Cálculo del flujo de calor en la sup. del suelo

Ley de Fourier

$$q\,(z=0) = -k\,\rho\,C\left(\frac{dT}{dz}\right)_{z=0}$$



Parámetros

$$k = 3.5\times10^{-7}\,\frac{m^2}{s}$$

$$\rho = 1800\,\frac{kg}{m^3} \qquad C = 840\,\frac{J}{kg\cdot{}^\circ C}$$

Ejemplo 23.3 pag. 673

Solución.

$$f'(x)=13.5\frac{2(0)-1.25-3.75}{(0-1.25)(0-3.75)}+12\frac{2(0)-0-3.75}{(1.25-0)(1.25-3.75)}$$
$$+10\frac{2(0)-0-1.25}{(3.75-0)(3.75-1.25)}=-1.333333\,^{\circ}C/cm$$

$$q(z=0)=-3.5\times10^{-7}\frac{m^2}{s}1800\frac{kg}{m^3}840\frac{J}{kg\cdot{}^{\circ}C}\left(-133.3333\,^{\circ}\frac{C}{m}\right)$$

$$q(z=0)=70.56\frac{W}{m^2}$$

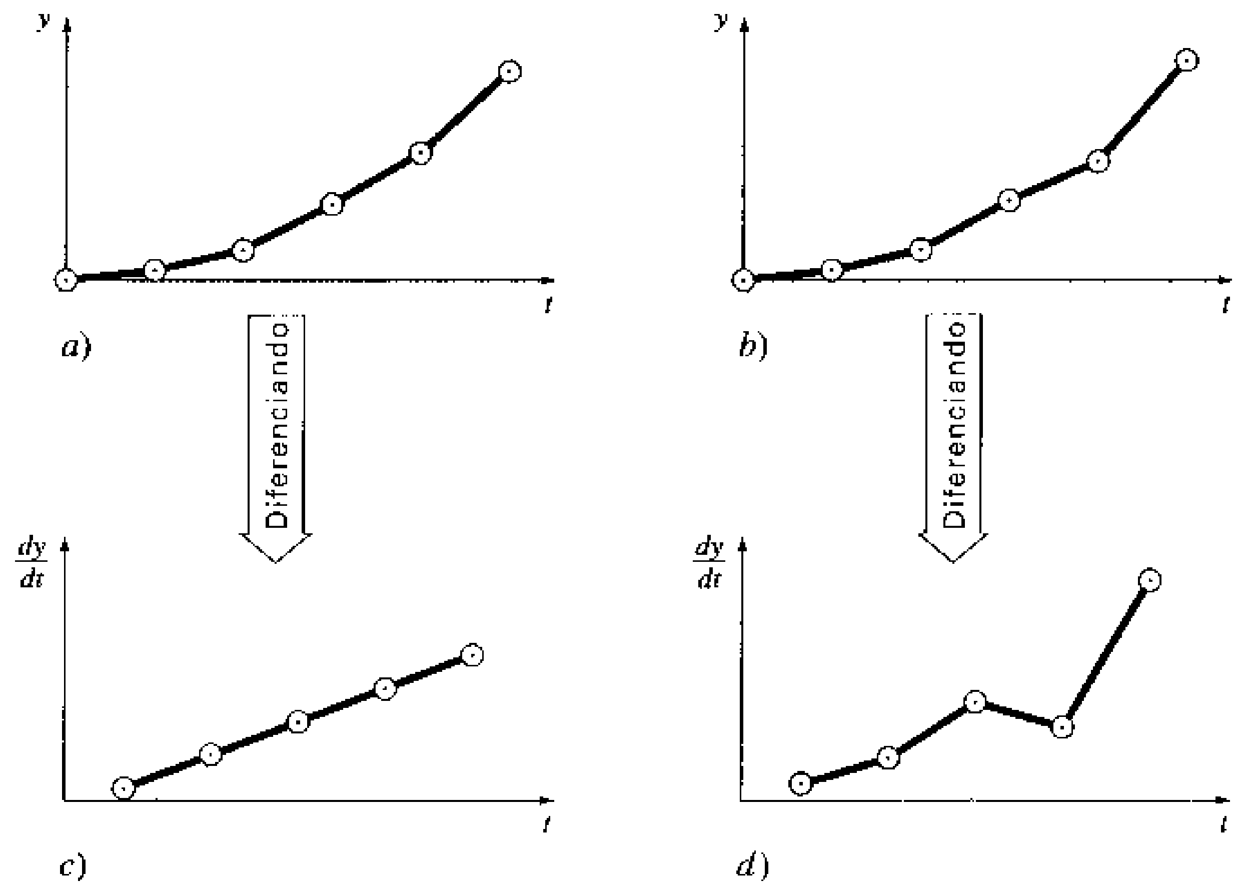
Derivadas e integrales para datos con errores

Datos empíricos

La diferenciación numérica tiende a amplificar los errores

Se prefiere ajusta

La integración (por ser una suma) tiende a compensar los errores y es mucho más



Uso de Octave

quad

trapz

diff

Problemas 23.1 a 23.27 pag. 679

Estudio de casos

Determinación de la cantidad total de calor

El calor necesario para incrementar la temperatura de un material es

$$\Delta H = m c \Delta T$$

Donde la capacidad calorífica c puede variar con la temperatura:

$$c(T) = 0.132 + 1.56 \times 10^{-4} T + 2.64 \times 10^{-7} T^2$$

Calcular el calor necesario para elevar la temperatura de 1000 g de ese material desde -100 a 200 °C.

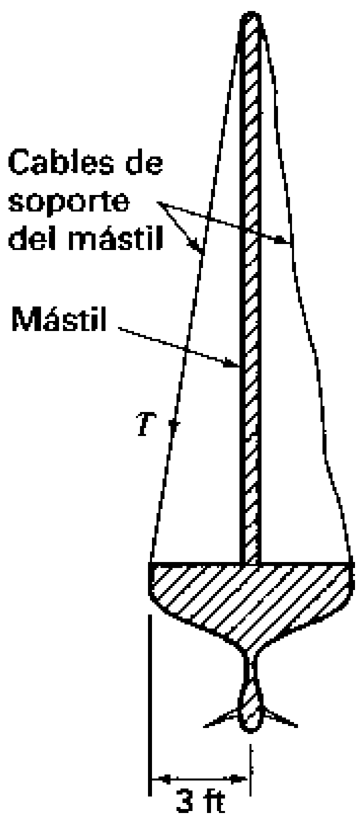
Determinación de la cantidad total de calor

Solución. El incremento de temperatura se calcula como

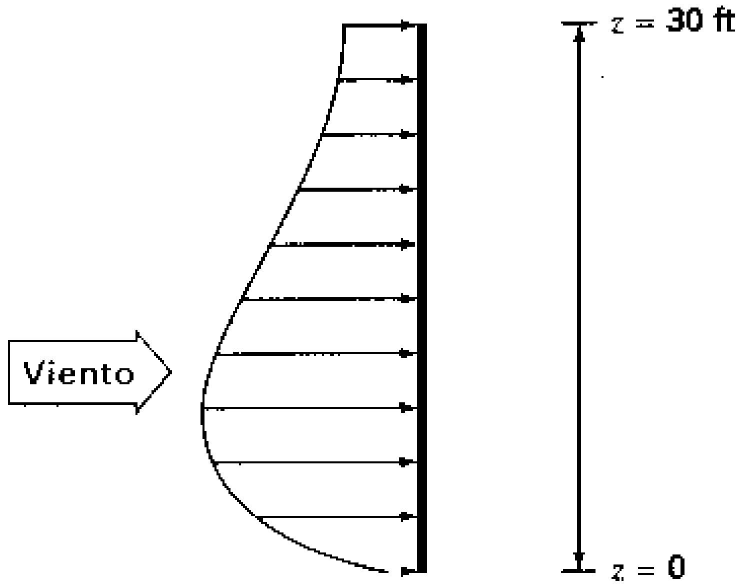
$$\Delta H = m \int_{T_1}^{T_2} c(T)\, dT$$

Se aplica la regla del trapecio. Solución en caso24_1.m

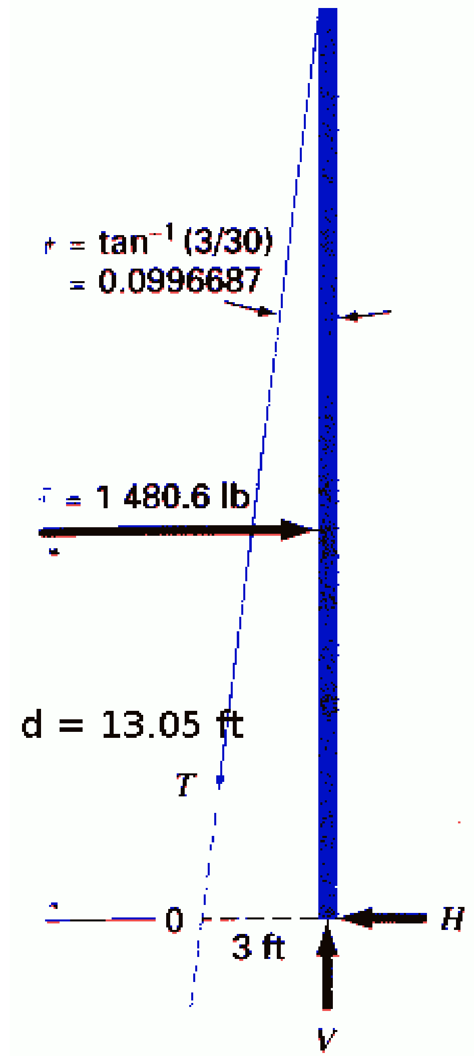
Fuerza efectiva sobre el mástil de un bote de vela de carreras



a)



b)



$$F = \int_0^{30} 200 \left(\frac{z}{5+z} \right) e^{-2z/30} \, dz$$

Fuerza efectiva sobre el mástil de un bote de vela de carreras

La posición de la fuerza viene dada por:

$$d = \frac{\int_0^{30} z\, f(z)\, dz}{\int_0^{30} f(z)\, dz}$$

Determinar la fuerza T en el cable

Determinación de F y d en planilla de cálculo: caso24_2.ods

F = 1480,56 lb

d = 13,05 ft

Fuerza efectiva sobre el mástil de un bote de vela de carreras

Ecuaciones de equilibrio:

$$\sum F_H = 0 = F - T\sin\theta - H$$

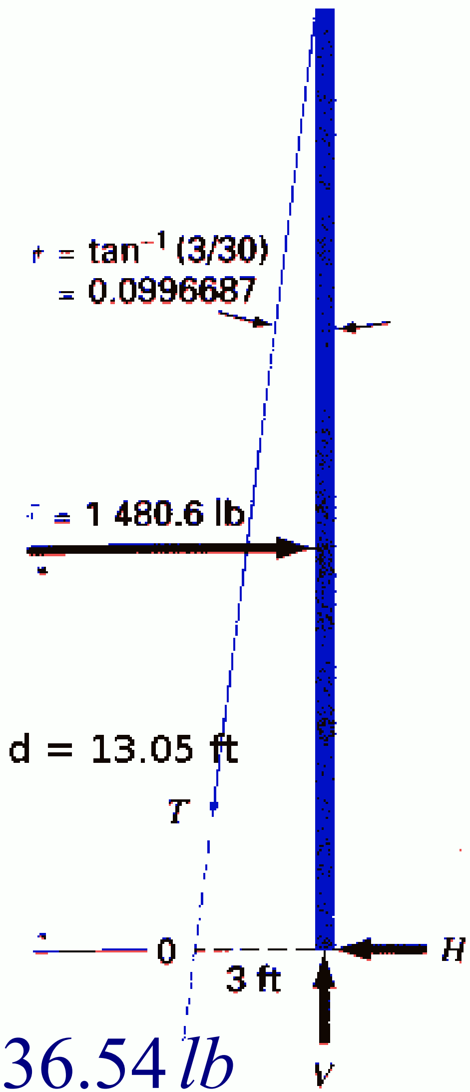
$$\sum F_V = 0 = V - T\cos\theta$$

$$\sum M_0 = 0 = 3V - Fd$$

$$V = \frac{Fd}{3} = \frac{1480.6 \times 13.05}{3} = 6440.6\,lb$$

$$T = \frac{V}{\cos\theta} = \frac{6440.6}{0.995} = 6473\,lb$$

$$H = F - T\sin\theta = 1480.6 - 6473 \times 0.0995 = 836.54\,lb$$



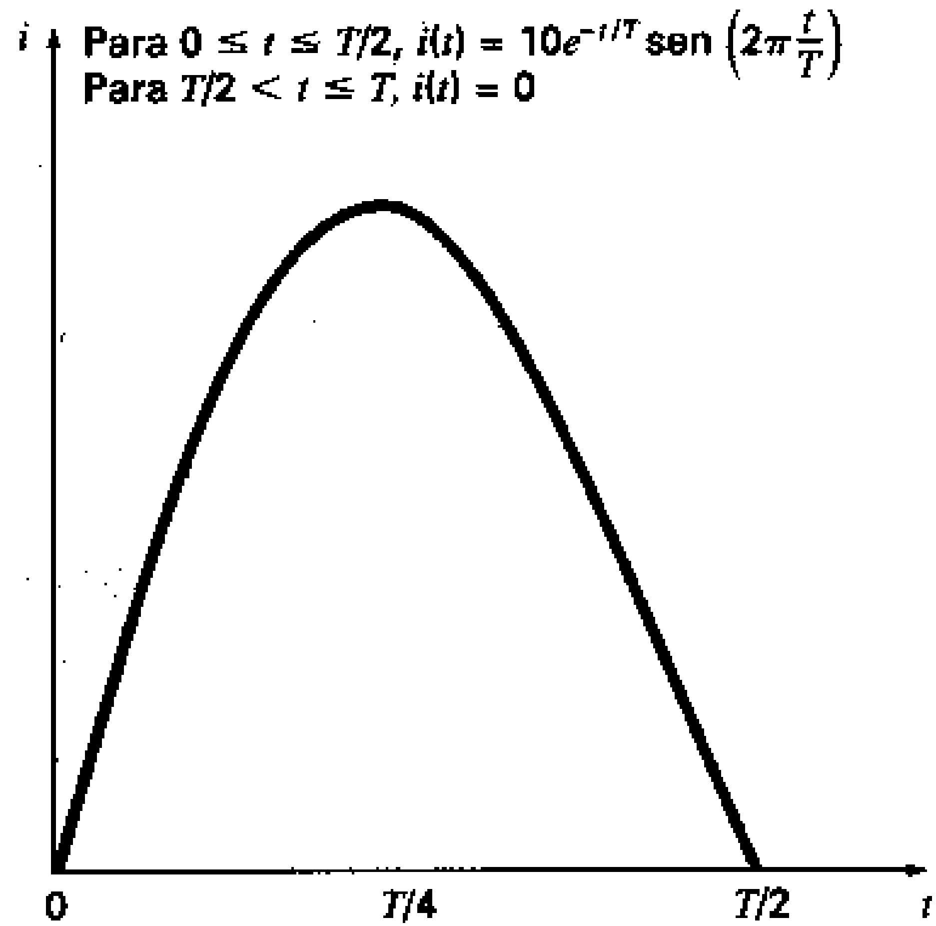
Raíz media cuadrática de la corriente eléctrica

El valor medio de la CA puede ser 0:

$$i = \frac{\int_0^T \sin\left(\frac{2\pi t}{T}\right) dt}{T-0}$$

$$i = \frac{-\cos(2\pi)+\cos 0}{T} = 0$$

En su lugar, se calcula



$$I_{RMC} = \sqrt{\frac{1}{T}\int_0^T i^2(t)\,dt} = \sqrt{\frac{1}{T}\int_0^T \left(10\, e^{-t} \sin 2\pi t\right)^2 dt}$$

Raíz media cuadrática de la corriente eléctrica

Se usa la integración de Romberg para calcular la integral

Código en Octave: caso24_3.m

I = 15.41261

La I_{RMS} se calcula como (con T = 1):

$$I_{RMC} = \sqrt{\frac{1}{1} 15.41261} = 3.925890\ A$$

Cálculo del trabajo

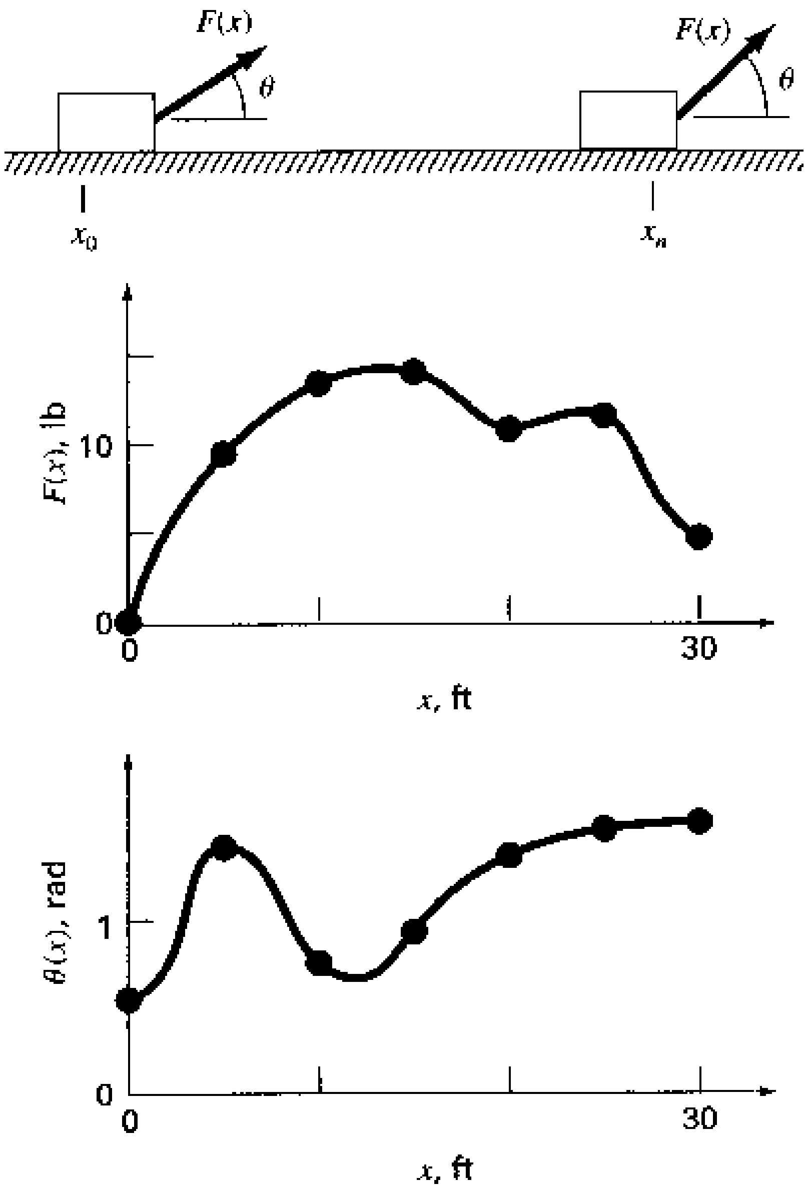
Trabajo:

$$W = F \times d$$ Si F es cte

$$W = \int_{x_0}^{x_n} F(x)\,dx$$

Si θ no es cte:

$$W = \int_{x_0}^{x_n} F(x)\cos[\theta(x)]\,dx$$



Cálculo del trabajo

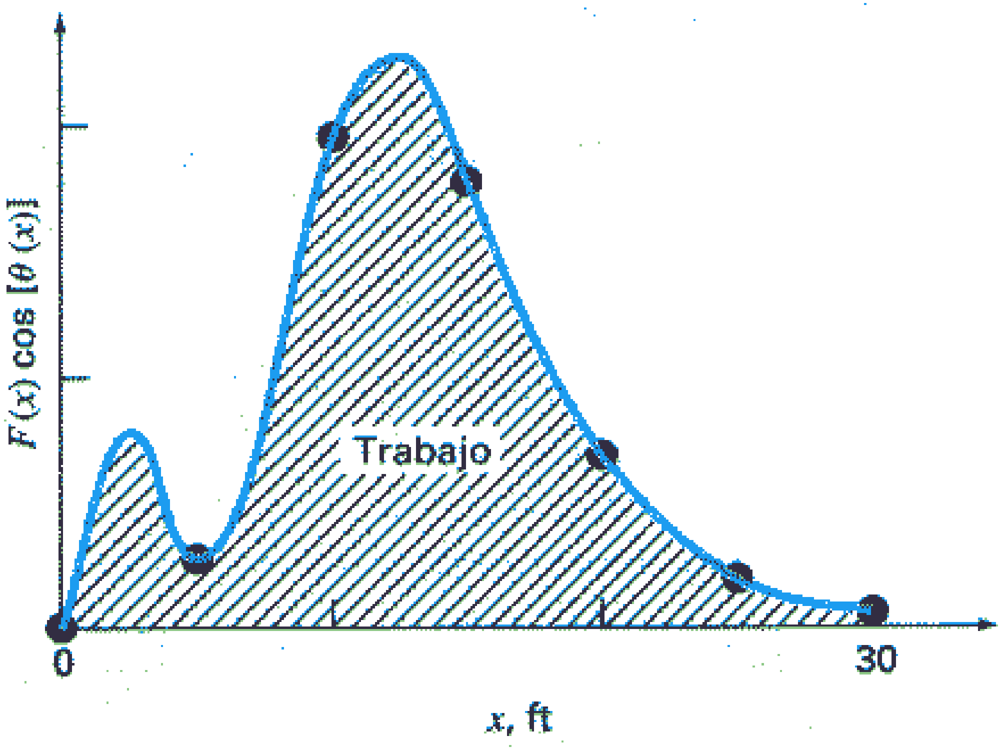
Datos

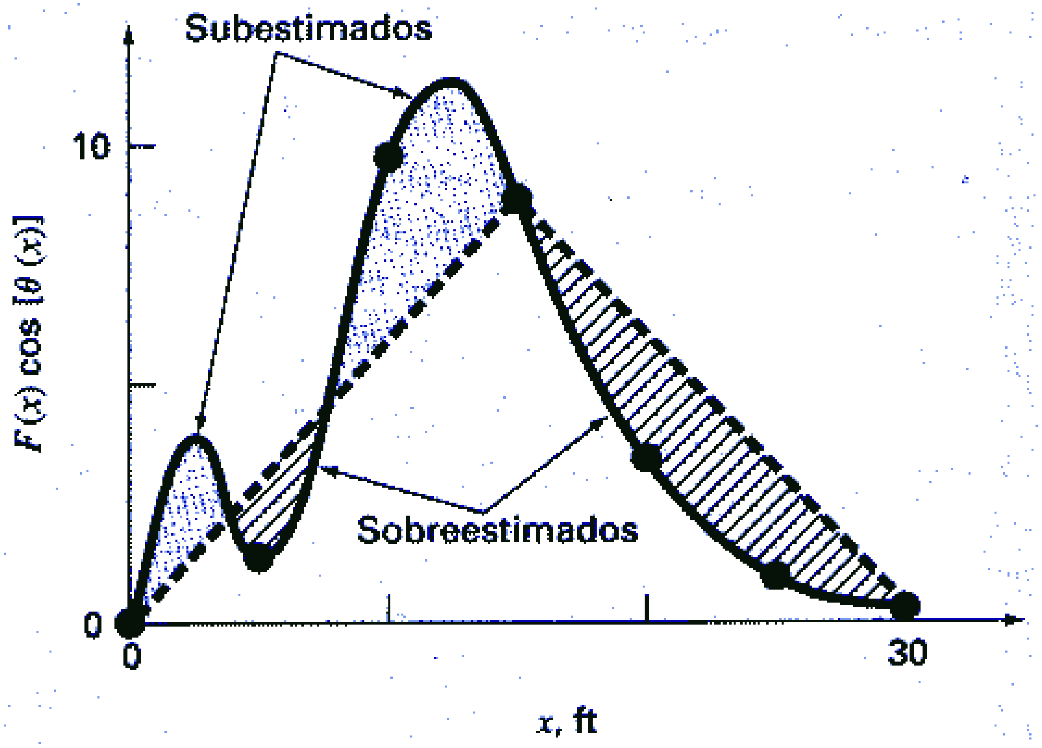
x, ft	F(x), lb	θ, rad	F(x) cos θ
0	0,0	0,50	0,0000
5	9,0	1,40	1,5297
10	13,0	0,75	9,5120
15	14,0	0,90	8,7025
20	10,5	1,30	2,8087
25	12,0	1,48	1,0881
30	5,0	1,50	0,3537

Solución en caso24_4.ods

Cálculo del trabajo

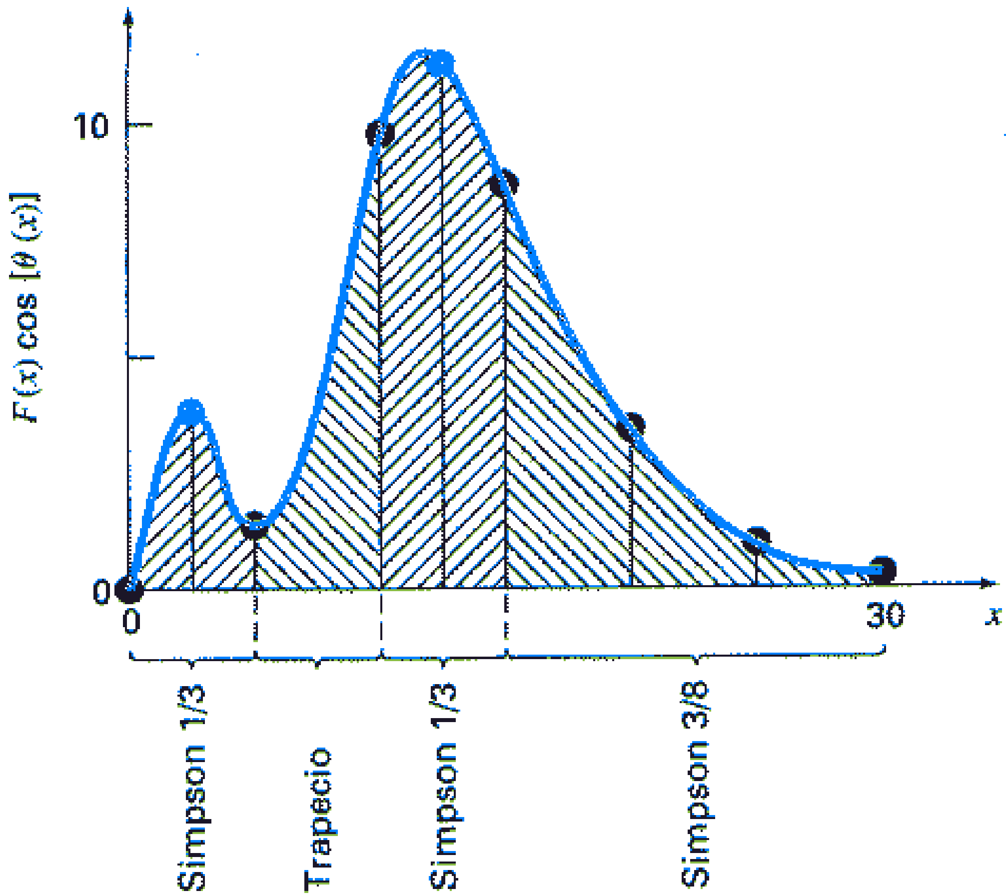
Por qué la regla del trapecio con 2 tramos da el mejor resultado??



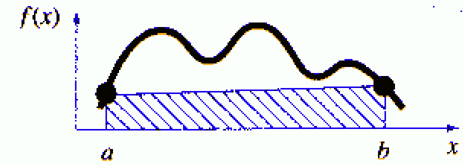
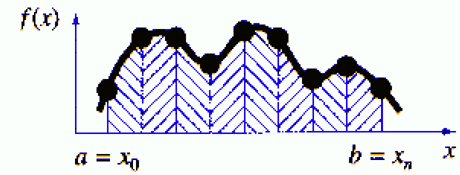
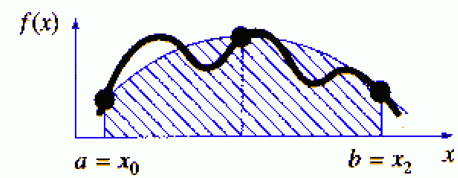
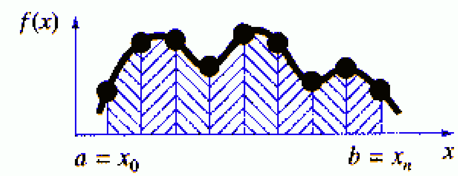
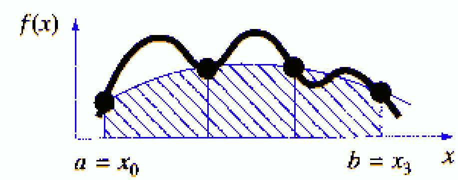
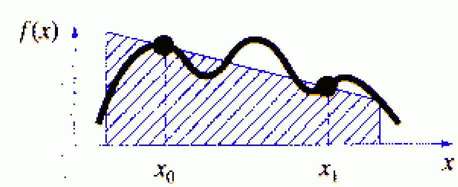


Cálculo del trabajo

Cómo podría mejorarse la estimación?



Problemas 24.1 a 24.55 pag. 693

Método	Formulación	Interpretación gráfica	Error
Regla del trapecio	$I \cong (b-a)\dfrac{f(a)+f(b)}{2}$		$-\dfrac{(b-a)^3}{12}f''(\xi)$
Regla del trapecio de aplicación múltiple	$I \cong (b-a)\dfrac{f(x_0)+2\sum_{i=1}^{n-1}f(x_i)+f(x_n)}{2n}$		$-\dfrac{(b-a)^3}{12n^2}\bar{f}''$
Regla de Simpson 1/3	$I \cong (b-a)\dfrac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}$		$-\dfrac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\xi)$
Regla de Simpson 1/3 de aplicación múltiple	$I \cong (b-a)\dfrac{f(x_0)+4\sum_{i=1,3}^{n-1}f(x_i)+2\sum_{j=2,4}^{n-2}f(x_j)+f(x_n)}{3n}$		$-\dfrac{(b-a)^5}{180n^4}\bar{f}^{(4)}$
Regla de Simpson 3/8	$I \cong (b-a)\dfrac{f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)}{8}$		$-\dfrac{(b-a)^5}{6480}f^{(4)}(\xi)$
Integración de Romberg	$I_{j,k} \cong \dfrac{4^{k-1}I_{j+1,k-1}-I_{j,k-1}}{4^{k-1}-1}$	$I_{j,k-1} \longrightarrow I_{j,k}$ $I_{j+1,k-1} \nearrow$	$O(h^{2k})$
Cuadratura de Gauss	$I \cong c_0f(x_0)+c_1f(x_1)+\cdots+c_{n-1}f(x_{n-1})$		$\cong f^{(2n+2)}(\xi)$