Integrales impropias Diferenciación numérica Lección 18

Dr. Pablo Alvarado Moya

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

II Semestre 2017

Contenido

- Integrales impropias
- Diferenciación numérica
 - Datos regularmente espaciados
 - Datos irregularmente espaciados
 - Datos con errores

Una integral es impropia si

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

$$\int_0^\pi \frac{\sin(x)}{x} dx$$
 no se puede evaluar en $x = 0$

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

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



- tiene una singularidad integrable en un lugar conocido dentro del intervalo de integración
- 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:

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

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

Mejoramiento de integrales impropias

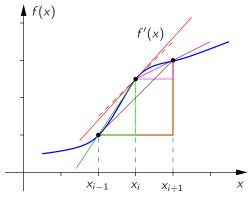
 Es posible combinar las reglas anteriores con algoritmos similares al de Romberg, pero donde el tamaño de pasos se triplica (en vez de duplicar) para reducir el número de evaluaciones de la función requeridas.

Patos regularmente espaciados Patos irregularmente espaciados Patos con errores

Diferenciación numérica

Repaso

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



Aproximación con diferencias hacia adelante

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

Aproximación con diferencias hacia atrás

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

Aproximación con diferencias centradas

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

Repaso

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

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

Segunda diferencia dividida finita centrada

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



- 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

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

 Anteriormente se truncó esta expresión a partir de la segunda derivada



Diferenciación con alta exactitud

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

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

y reagrupando términos

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

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

13 / 27

Diferencias divididas finitas hacia adelante

Primera derivada

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

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

Segunda derivada

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

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

Diferencias divididas finitas hacia atrás

Primera derivada

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

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

Segunda derivada

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

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

Diferencias divididas finitas centradas

Primera derivada

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

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

Segunda derivada

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

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

Extrapolación de Richardson

 De forma análoga al caso de integrales, para dos tamaños de paso h₁ y h₂, con h₂ < h₁, se cumple para una estimación más precisa de la derivada:

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

• 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( maxlt , maxlt );
  D[0][0] = deriv(f,x,h);
  T ea=std::limits < T > :: max();
  int n=1:
  int i:
  for (i=1; i < max | t & ea > es; ++i) {
    n *= 2:
    D[i][0] = deriv(f,x,h/n);
    T fk=T(1):
    for (int k=1; k \le i; ++k) {
      i = i - k:
      fk*=4; // esto es pow(4,k);
      D[i][k] = (fk*D[i+1][k-1] - D[i][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

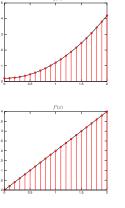
- Todos los métodos anteriores requieren que los datos estén equiespaciados
- Con muestras experimentales no siempre es posible asegurar la equidistancia entre muestras
- Una técnica usual consiste en interpolar usando Lagrange los puntos disponibles y derivar el polinomio resultante
- Por ejemplo, para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

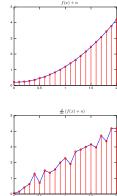
$$f'(x) = f(x_{i-1}) \frac{2x - x_i - x_{i+1}}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} + f(x_i) \frac{2x - x_{i-1} - x_{i+1}}{(x_{i-1} - x_i)(x_i - x_{i+1})} + f(x_{i+1}) \frac{2x - x_{i-1} - x_i}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)}$$

Derivada con datos irregularmente espaciados

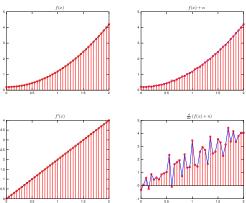
- Esta técnica permite calcular la derivada para cualquier valor de x
- No se requiere la equidistancia de las muestras
- Se mantiene la exactitud de la diferencia centrada.
- De hecho, si se asume equidistancia se obtiene la misma fórmula anterior.

• Los procesos de derivación amplifican el ruido en los datos





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



• Principal método: utilizar regresión por mínimos cuadrados.

- 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

- 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



Este trabajo se encuentra bajo una Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-Licenciarlgual 3.0 Unported. Para ver una copia de esta Licencia, visite http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/ o envíe una carta a Creative Commons, 444 Castro Street, Suite 900, Mountain View, California, 94041, USA.

© 2005-2017 Pablo Alvarado-Moya Área de Ingeniería en Computadores Instituto Tecnológico de Costa Rica