Computación Científica
Laboratorio 4

Camilo Andrés Gutierrez Torres

Prof. Hernán Dario Vargas Cardona

Pontificia Universidad Javeriana Cali

Facultad de Ingeniería y Ciencias
Ingeniería de sistemas y Computación

Cali, Colombia
23 de Noviembre de 2020

1 Resumen

Este informe de laboratorio muestra el proceso realizado para encontrar la derivada aproximada de una función a través de tres métodos de derivación: hacia adelante, hacia atrás y centrada. Se hace comparaciones con la derivada analítica, la cual se hace de manera manual, a través de análisis de errores y de gráficas. También se muestra el proceso llevado a cabo para realizar una integración numérica de una función, proceso que se aplica para funciones que no pueden integrarse con métodos tradicionales. Los métodos que se usaron para esta integración numérica son: regla de punto medio, regla de trapezoide y regla de Simpson, el resultado de cada método, se compara con la integración numérica que se puede hacer en Matlab por medio de la función *integral(funcion, min, max)*.

2 Abstract

This lab report shows the process used to find the approximate derivative of a function using three differentiation methods: forward, backward, and centered. Comparisons are made with the analytical derivative, which is done manually, through error analysis and graphs. The process carried out to perform a numerical integration of a function is also shown, a process that is applied for functions that cannot be integrated with traditional methods. The methods that were used for this numerical integration are: midpoint rule, trapezoid rule and Simpson's rule, the result of each method is compared with the numerical integration that can be done in Matlab through the function *integral (function, min, max)*.

3 Introducción

El método de diferencias finitas es útil para aproximar la derivada de una función suave en un punto utilizando los valores y propiedades de la misma [1]. En el caso de la integración, sabemos que en matemáticas existen ciertas funciones que no pueden ser integradas con los métodos tradicionales como: sustitución, integración por partes, integración trigonométrica, etc. Por lo tanto, se usan métodos de integración numérica, también llamada cuadratura compuesta, la cual es un cálculo aproximado de una integración, haciendo uso de técnicas numéricas [2].

4 Materiales

Los materiales utilizados para la realización de este laboratorio son:

- Matlab: El lenguaje de programación en el que se realizaron los algoritmos.
- Laptop Asus con 8gb de memoria RAM y procesador Intel Core i5-5200U

5 Métodos

Para llegar a la solución de cada uno de los problemas, se hizo uso de tres métodos distintos. Para resolver el problema de derivadas por el método de diferencias finitas, se implementaron los algoritmos de las fórmulas para: diferencia finita hacia adelante, diferencia finita hacia atrás y diferencia centrada. Para resolver el problema de cuadratura compuesta o integración numérica, se implementaron los algoritmos de las reglas de: punto medio, trapezoide y Simpson. Todos estos algoritmos se explican a continuación:

5.1 Diferencias finitas

Para realizar estos algoritmos, se tiene un arreglo de tamaño n, el cual representa los valores en x de la función que necesitamos derivar, se tiene una variable h, la cual entre más cercana esté de 0 más exacta va a ser la derivada de la función y tendremos la función derivada a la que queremos llegar. Luego, para cada valor x, vamos a aplicar una de las tres fórmulas que tenemos, dependiendo del caso:

- Hacia adelante
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$
- Hacia atrás
$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$
- Centrada
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

5.2 Cuadratura compuesta

Para realizar estos algoritmos, se tiene un arreglo de tamaño n, el cual representa los valores en x de la función que necesitamos integrar y tendremos la función. Vamos a recorrer todo el arreglo y vamos a tener en cuenta los valores x_i y x_{i-1}, debido a que vamos a usarlos para realizar la integración numérica, dependiendo del caso:

- Regla del punto medio
$$M(f) = \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) * f(\frac{x_{i-1} + x_i}{2})$$
- Regla del trapezoide
$$T(f) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) * [f(x_{i-1}) + f(x_i)]$$

- Regla de Simpson

$$S(f) = \frac{1}{6}\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1}) * [f(x_{i-1}) + 4 * f(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}) + f(x_i)]$$

6 Pruebas

Las pruebas para ambos algoritmos se hicieron teniendo en cuenta seis funciones, tres para diferencias finitas y tres para integración numérica.

6.1 Diferencias finitas

Cada gráfica contiene las gráficas resultantes de los tres métodos, además, tienen la gráfica de la derivada analítica.

Función: $f(x) = 3x^3 + 2x^2$
Derivada analítica: $f'(x) = 9x^2 + 4x$

- Prueba 1.

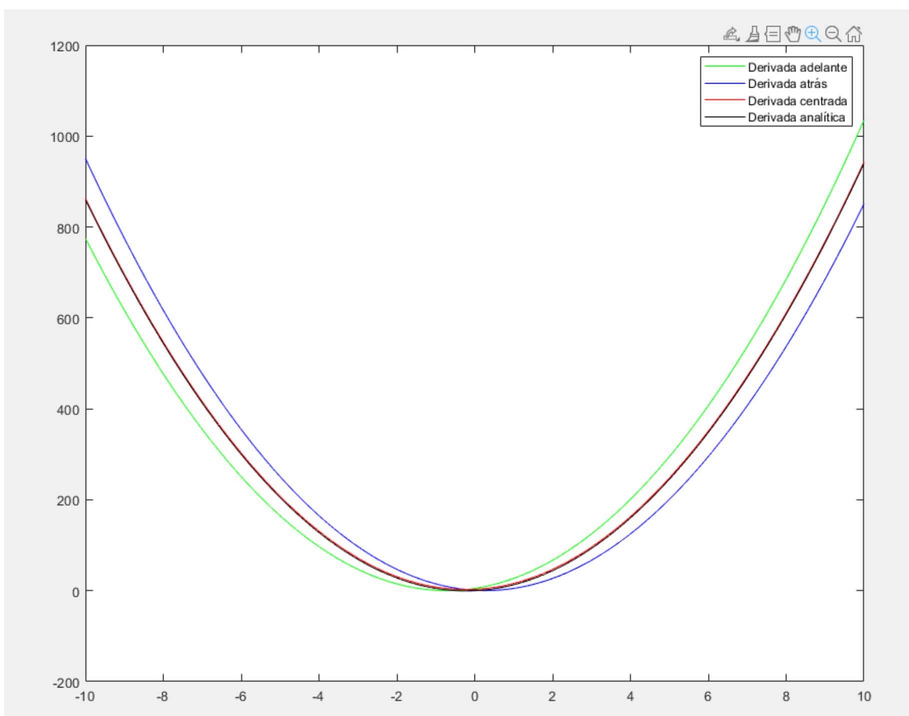

Fig 1. Prueba 1

h = 1
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.064463 segundos

Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.071126 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.069737 segundos
Error medio derivada hacia adelante =45.1393
Error medio derivada hacia atrás = 45.006
Error medio derivada centrada = 3
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 26.2202
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 25.9908
Desviación estándar de la derivada centrada = 1.0053e-13
Exactitud de la derivada hacia adelante = 0.12188
Exactitud de la derivada hacia atrás = 0.12433
Exactitud de la derivada centrada = 0.005531

- Prueba 2.

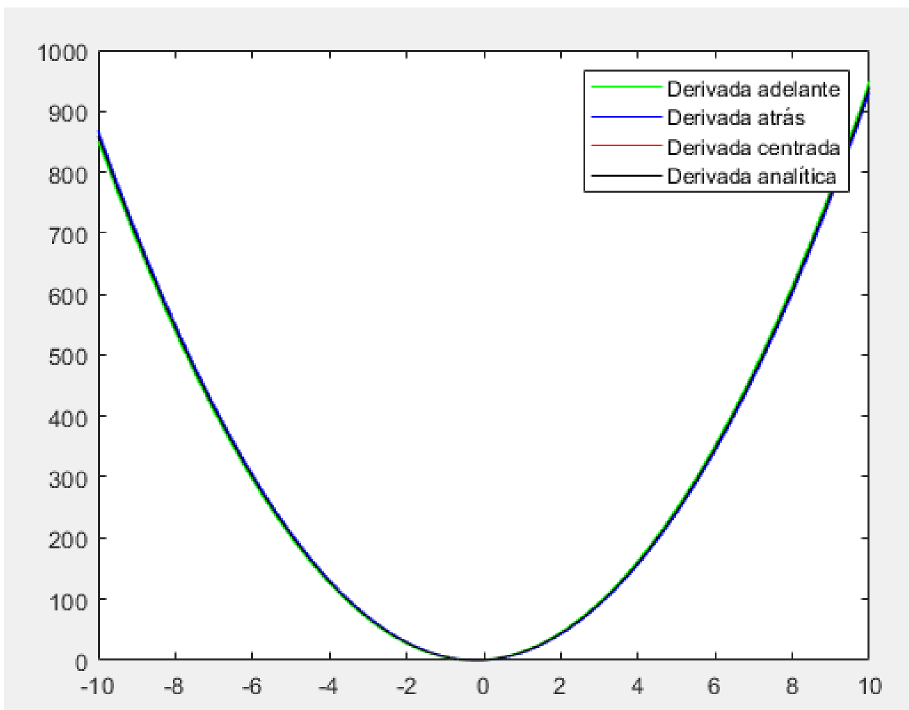

Fig 2. Prueba 2

h=0.1
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.051856 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.049423 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.062930 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 4.503
Error medio derivada hacia atrás = 4.5017
Error medio derivada centrada = 0.03

Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 2.6032
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 2.6009
Desviación estándar de la derivada centrada = 1.2496e-12
Exactitud de la derivada hacia adelante = 0.012469
Exactitud de la derivada hacia atrás = 0.012495
Exactitud de la derivada centrada = 5.5372e-05

- Prueba 3.

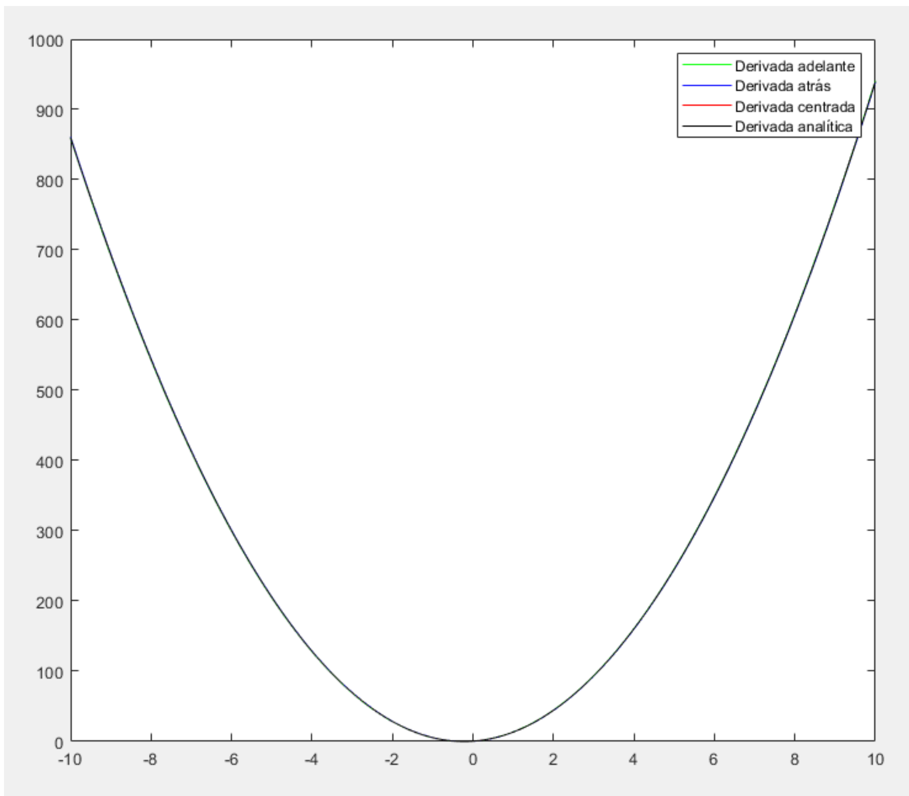

Fig 3. Prueba 3

h=0.01
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.054997 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.049385 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.053116 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 0.45023
Error medio derivada hacia atrás = 0.45022
Error medio derivada centrada = 0.0003
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 0.26021
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 0.26018

Desviación estándar de la derivada centrada = 9.0036e-12
Exactitud de la derivada hacia adelante = 0.0012482
Exactitud de la derivada hacia atrás = 0.0012485
Exactitud de la derivada centrada = 5.5372e-07

– Prueba 4.

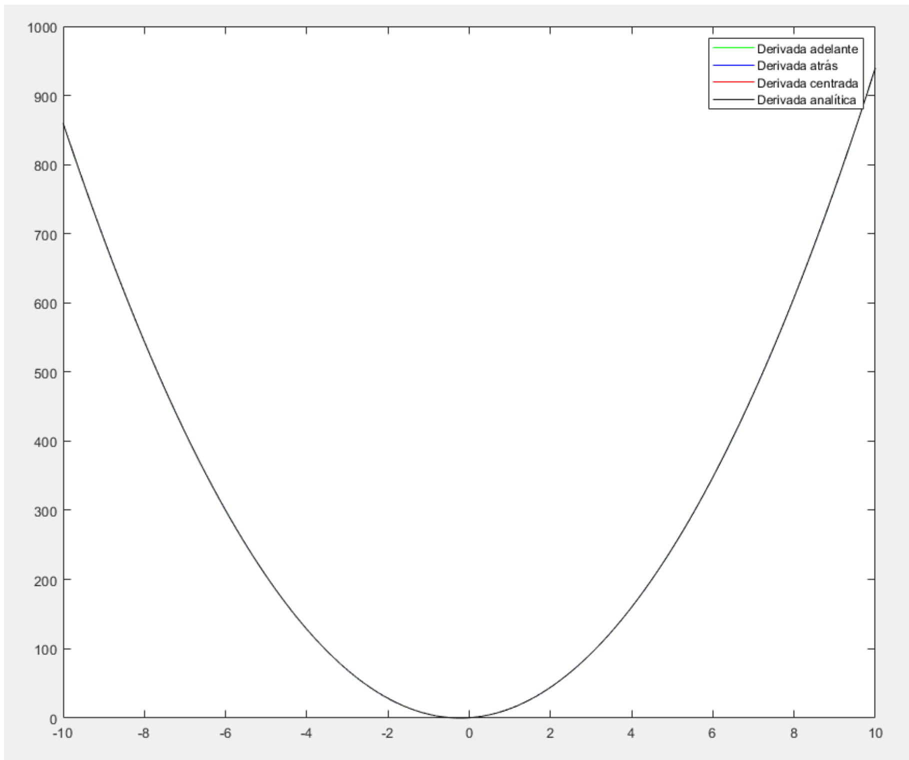

Fig 4. Prueba 4

h=0.001
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.059575 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.056360 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.090763 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 0.045023
Error medio derivada hacia atrás = 0.045023
Error medio derivada centrada = 3e-06
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 0.02602
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 0.026019
Desviación estándar de la derivada centrada = 2.0615e-10
Exactitud de la derivada hacia adelante = 0.00012483
Exactitud de la derivada hacia atrás = 0.00012484

Exactitud de la derivada centrada = 5.5369e-09

Función: $f(x) = e^{-x^2}$
Derivada analítica: $f'(x) = (-2x) * e^{-x^2}$

– Prueba 5

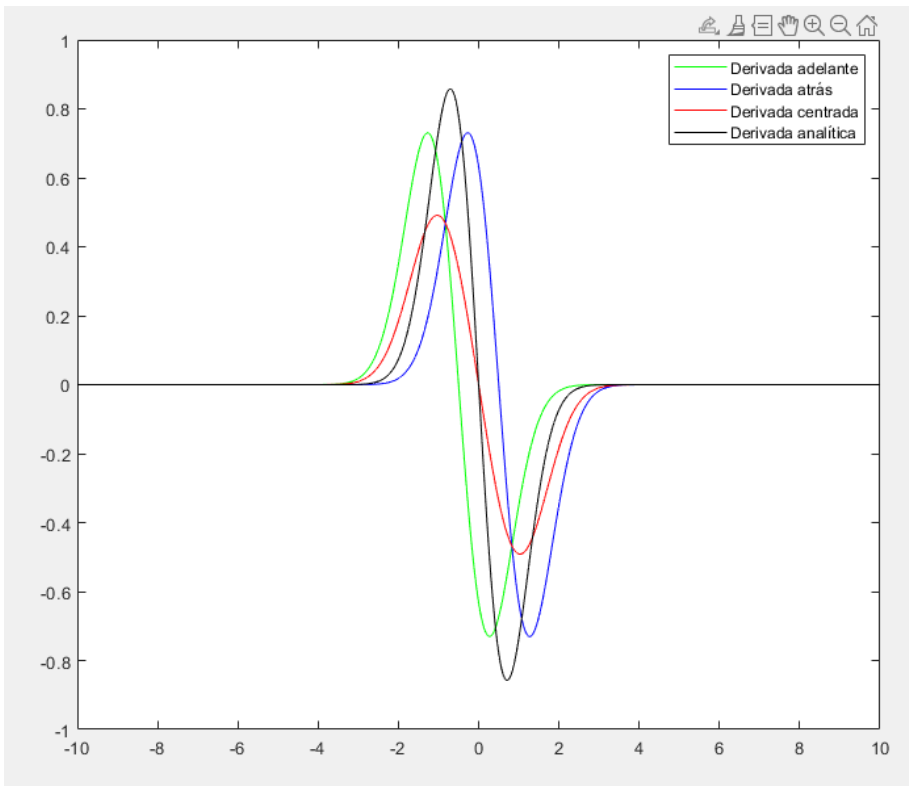

Fig 5. Prueba 5

h=1
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.044999 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.026750 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.028044 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 0.077083
Error medio derivada hacia atrás = 0.077083
Error medio derivada centrada = 0.047918
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 0.17326
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 0.17326
Desviación estándar de la derivada centrada = 0.10698
Exactitud de la derivada hacia adelante = -0.10147

Exactitud de la derivada hacia atrás = 0.10147
Exactitud de la derivada centrada = -2.9188e-17

– Prueba 6

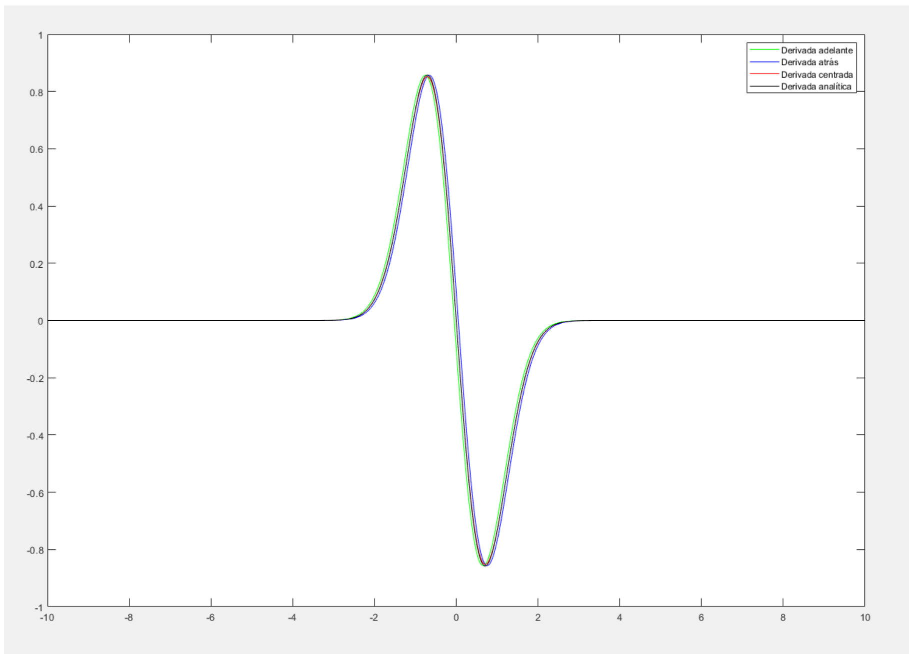

Fig 6. Prueba 6

h=0.1
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.040876 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.031185 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.028650 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 0.008568
Error medio derivada hacia atrás = 0.008568
Error medio derivada centrada = 0.00062895
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 0.019882
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 0.019882
Desviación estándar de la derivada centrada = 0.0014823
Exactitud de la derivada hacia adelante = -0.0010216
Exactitud de la derivada hacia atrás = 0.0010216
Exactitud de la derivada centrada = 1.5669e-18

– Prueba 7

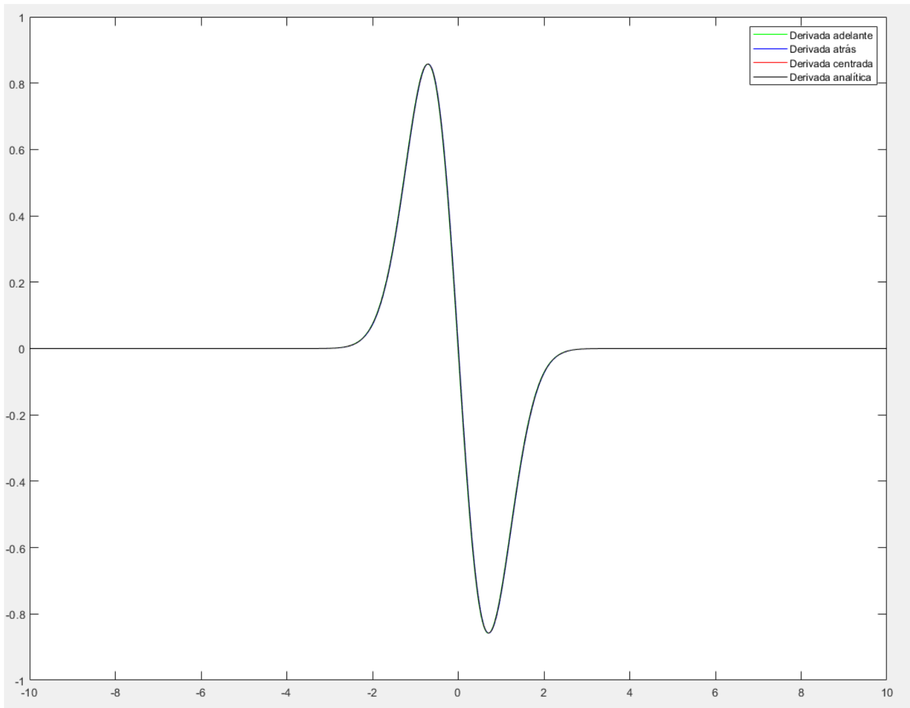

Fig 7. Prueba 7

h=0.01
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.041870 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.029830 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.032414 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 0.00085775
Error medio derivada hacia atrás = 0.00085775
Error medio derivada centrada = 6.3081e-06
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 0.001991
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 0.001991
Desviación estándar de la derivada centrada = 1.4876e-05
Exactitud de la derivada hacia adelante = -1.0217e-05
Exactitud de la derivada hacia atrás = 1.0217e-05
Exactitud de la derivada centrada = -2.2067e-20

– Prueba 8

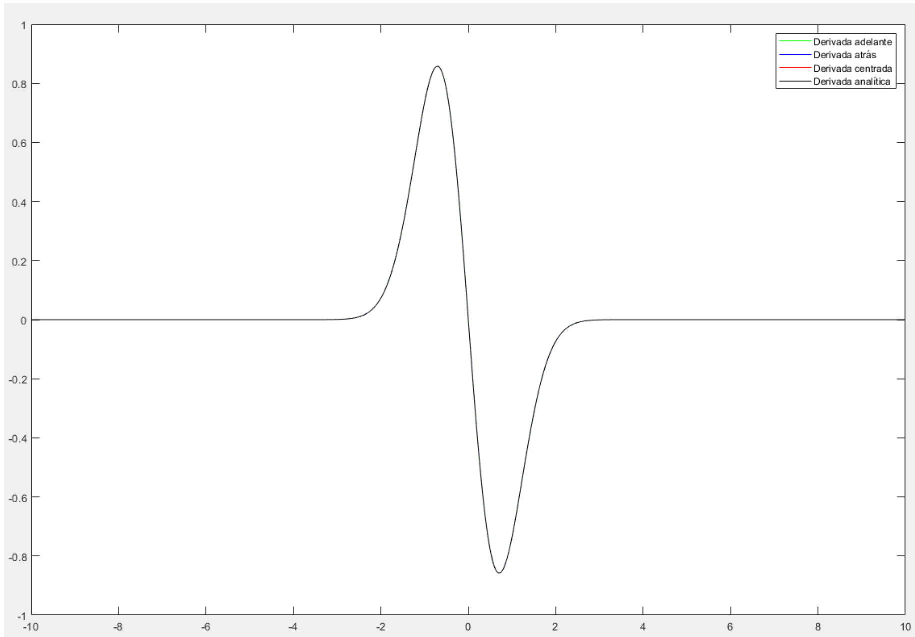

Fig 8. Prueba 8

h=0.001
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.041748 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.029172 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.034657 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 8.5776e-05
Error medio derivada hacia atrás = 8.5776e-05
Error medio derivada centrada = 6.3083e-08
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 0.0001991
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 0.0001991
Desviación estándar de la derivada centrada = 1.4877e-07
Exactitud de la derivada hacia adelante = -1.0217e-07
Exactitud de la derivada hacia atrás = 1.0217e-07
Exactitud de la derivada centrada = 5.8204e-23

Función: $f(x) = sin(2 * x^2)$
Derivada analítica: $f'(x) = cos(2 * x^2) * 4 * x$

– Prueba 9

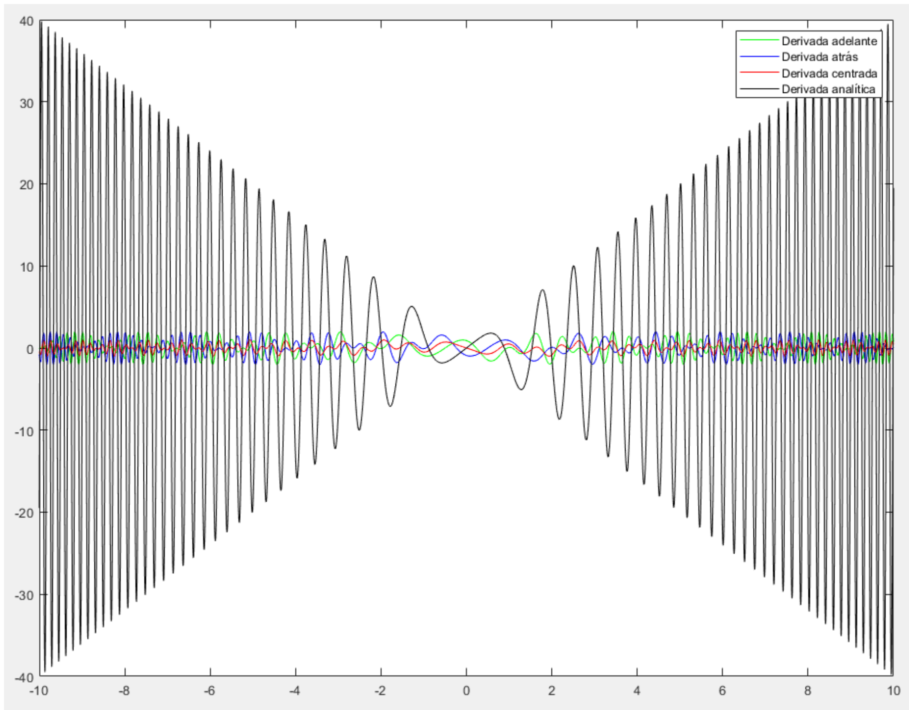

Fig 9. Prueba 9

h=1
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.043188 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.029233 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.036757 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 12.789
Error medio derivada hacia atrás = 12.789
Error medio derivada centrada = 12.7597
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 10.1771
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 10.1771
Desviación estándar de la derivada centrada = 10.1785
Exactitud de la derivada hacia adelante = 0.075693
Exactitud de la derivada hacia atrás = -0.075693
Exactitud de la derivada centrada = -2.2897e-16

– Prueba 10

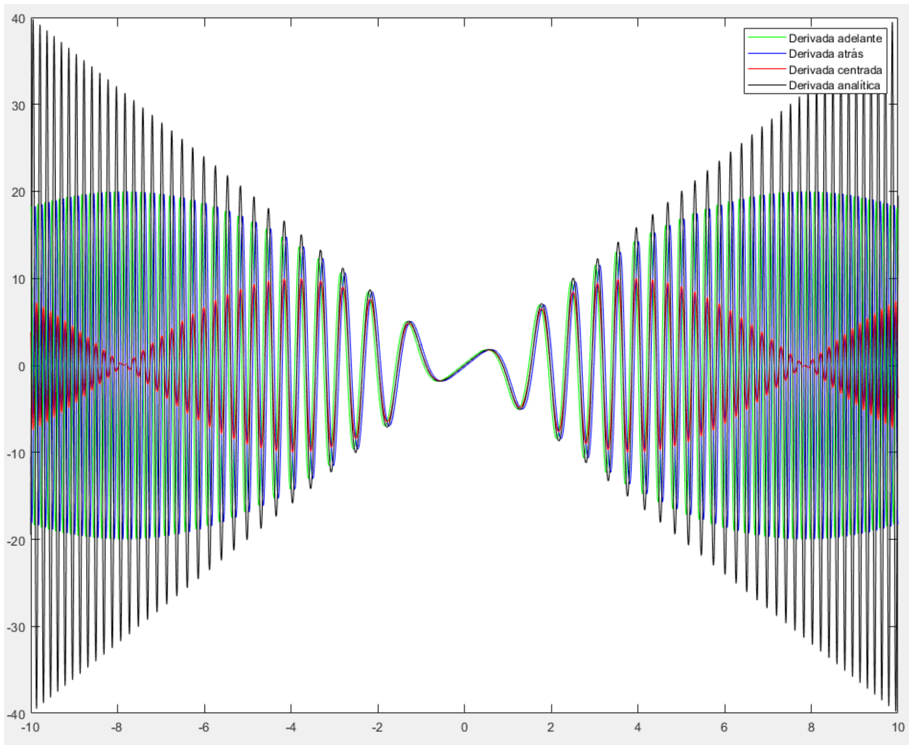

Fig 10. Prueba 10

h=0.1
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.036170 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.025542 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.025167 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 12.9853
Error medio derivada hacia atrás = 12.9853
Error medio derivada centrada = 10.0814
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 13.0182
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 13.0182
Desviación estándar de la derivada centrada = 11.8026
Exactitud de la derivada hacia adelante = 0.0032687
Exactitud de la derivada hacia atrás = -0.0032687
Exactitud de la derivada centrada = 2.127e-17

– Prueba 11

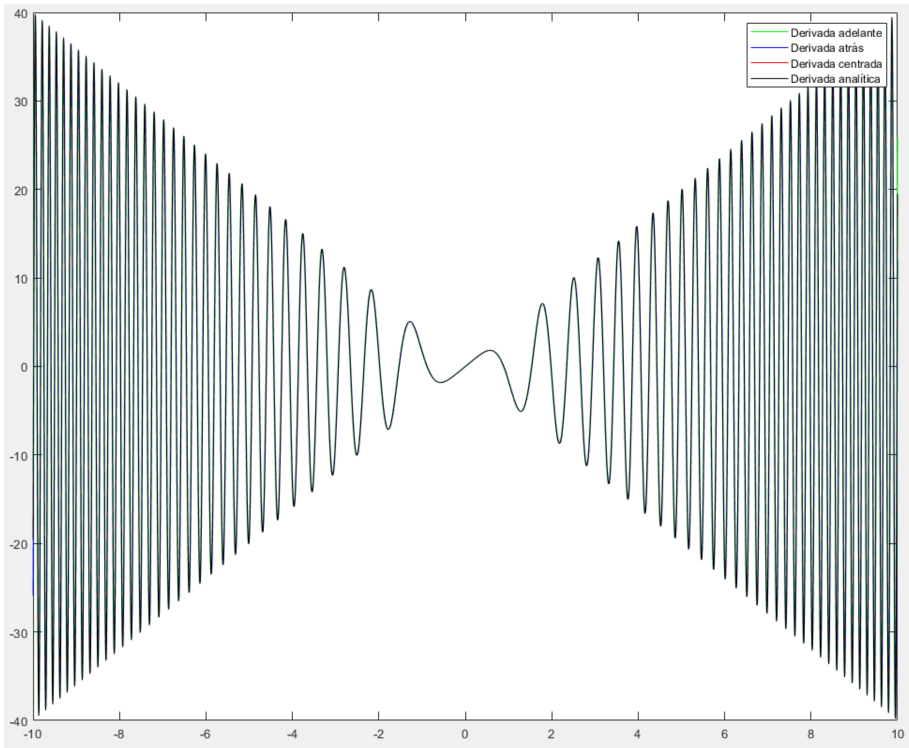

Fig 11. Prueba 11

h=0.01
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.045913 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.030630 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.036711 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 1.6973
Error medio derivada hacia atrás = 1.6973
Error medio derivada centrada = 0.1684
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 1.874
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 1.874
Desviación estándar de la derivada centrada = 0.22655
Exactitud de la derivada hacia adelante = 0.00026224
Exactitud de la derivada hacia atrás = -0.00026224
Exactitud de la derivada centrada = -2.2714e-20

– Prueba 12

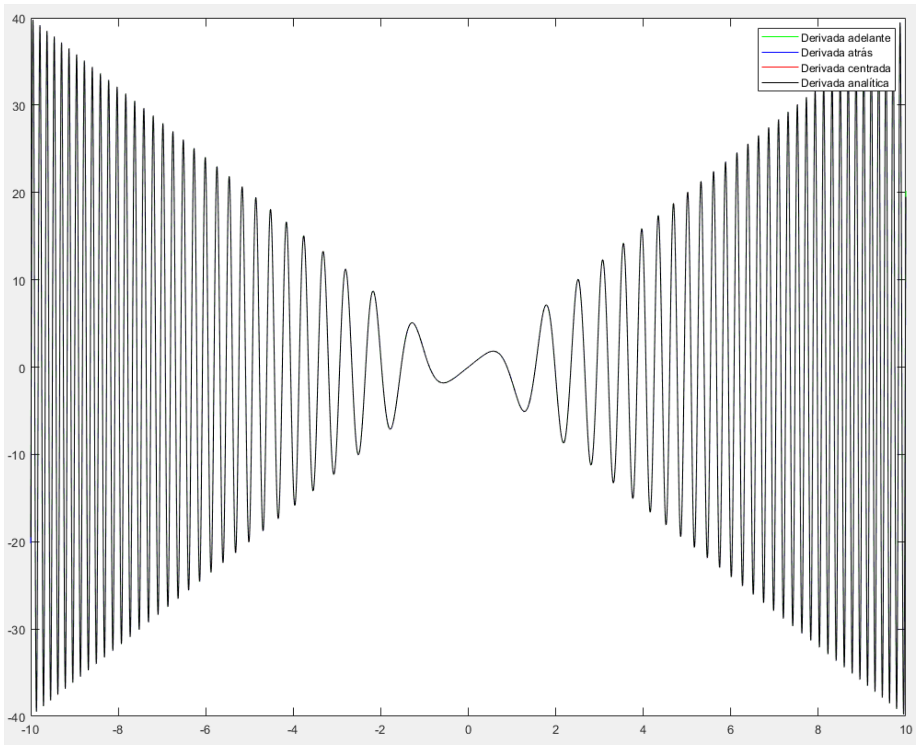

Fig 12. Prueba 12

h=0.001
Tiempo de ejecución derivada hacia adelante = 0.045607 segundos
Tiempo de ejecución derivada hacia atrás = 0.026009 segundos
Tiempo de ejecución derivada centrada = 0.026223 segundos
Error medio derivada hacia adelante = 0.17018
Error medio derivada hacia atrás = 0.17018
Error medio derivada centrada = 0.0016929
Desviación estándar de la derivada hacia adelante = 0.1881
Desviación estándar de la derivada hacia atrás = 0.1881
Desviación estándar de la derivada centrada = 0.0022806
Exactitud de la derivada hacia adelante = 2.6781e-06
Exactitud de la derivada hacia atrás = -2.6781e-06
Exactitud de la derivada centrada = 3.0389e-21

6.2 Integración numérica

Cada prueba se compara con el resultado de la función de Matlab para integración numérica.

Función 1: $f(x) = sin(x^2)$
Resultados:

Tabla 1. Prueba 13

Método	Resultado	Error	Exactitud
Matlab	1.1673	N/A	N/A
Rectangular	1.1673	5.7489e-08	4.9248e-08
Trapezoide	1.1673	1.1498e-07	9.8496e-08
Simpson	1.1673	8.6597e-15	7.4183e-15

Función 2: $f(x) = \sqrt{1 + x^4}$
Resultados:

Tabla 2. Prueba 14

Método	Resultado	Error	Exactitud
Matlab	669.0388	N/A	N/A
Rectangular	669.0388	5.6478e-08	8.4417e-11
Trapezoide	669.0388	1.4353e-07	2.1453e-10
Simpson	669.0388	1.0193e-08	1.5236e-11

Función 3: $f(x) = x^x$
Resultados:

Tabla 3. Prueba 15

Método	Resultado	Error	Exactitud
Matlab	3057488912.7921-0.5618868i	N/A	N/A
Rectangular	3057488857.7479-0.5618869i	55.0442	1.8003e-08+3.3085e-18i
Trapezoide	3057489022.8805-0.5618869i	110.0884	3.6006e-08+6.617e-18i
Simpson	3057488912.7921-0.5618869i	7.1533e-06	2.3396e-15+4.2996e-25i

El tiempo de ejecución (en segundos) de cada algoritmo, para las distintas funciones:

Tabla 4. Tiempos de ejecución

Método	Función 1	Función 2	Función 3
Rectangular	0.026815	0.044024	0.064692
Trapezoide	0.030754	0.066734	0.085411
Simpson	0.043509	0.084635	0.098468

7 Análisis de resultados

7.1 Diferencias finitas

De las pruebas realizadas para los algoritmos de las diferencias infinitas, podemos ver que cuando el valor de h tiende a 0 el error es más pequeño, como podemos ver, el error medio del método para sacar la derivada es muy alto cuando el h es 1, sin embargo, este error va disminuyendo a medida que el h va disminuyendo. Haciendo un análisis de la exactitud, así como de las gráficas, vemos que el método por diferencia centrada es el más exacto, con la exactitud vemos que es un valor muy pequeño, lo que significa que el error relativo es muy pequeño y con las gráficas vemos que tenemos que acercarnos mucho para ver el punto en el que se separan. Por el contrario, con los otros métodos tenemos que tener un valor muy pequeño para h para ver gráficamente que se acercan a la derivada analítica.

Con respecto al análisis de tiempo de ejecución, vemos que todos los métodos tienen tiempos considerablemente bajos, y que no existe una tendencia a que alguno sea más bajo o alto que los otros dos.

7.2 Integración numérica

De las pruebas realizadas para la integración numérica, podemos observar que el método por regla de Simpson es el que tiene mejor exactitud. Sin embargo, los que tienden a tener menor tiempo de ejecución son los otros dos métodos, y de los tres, el que mejor tiempo de ejecución tiene es el de la regla del punto medio o rectangular.

8 Conclusiones

Para concluir, al momento de derivar por el método de diferencias finitas, la mejor opción es usar el método de derivada centrada, debido a que tiene buen tiempo de ejecución, y además, es la que mayor exactitud tiene. En cuanto a integración numérica, se puede usar un método u otro, dependiendo de la necesidad del programador, en caso de que se necesite eficiencia, es recomendable usar la regla del punto medio o la regla del trapezoide, por el contrario, si lo que más se requiere es exactitud y precisión, la mejor opción es la regla de Simpson.

9 Referencias

[1] Varga C, Hernan D. "Unidad 5: Diferenciación e integración". Disponible en: https://aulavirtual.javerianacali.edu.co/bbcswebdav/pid-1894958-dt-content-rid-15511026_1/courses/300CIP012-20202-A/Unidad%205%20-%20Diferenciaci%C3%B3n%20e%20integraci%C3%B3n.pdf

[2] Weisstein, Eric W. "Numerical Integration." From MathWorld–A Wolfram Web Resource. https://mathworld.wolfram.com/NumericalIntegration.html