Diferenciación numérica

Alfredo Villagrán Olguín

Junio, 2020

Primera derivada

En la ciencia y en la ingerniería, es común calcular derivadas e integrales. Estas operaciones pueden llegar a ser bastante complejas de calcular analíticamente. Es por eso que se buscan métodos numéricos para calcular aproximaciones a los valores exactos.

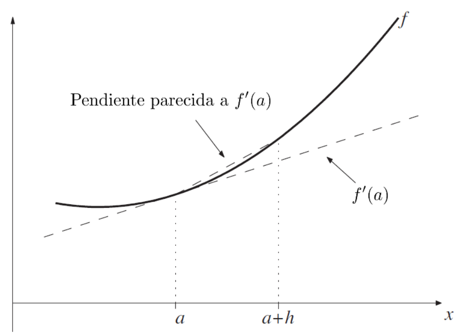

Figura 1

Para calcular la aproximación numérica a la derivada de una función, es posible utilizar la representación gráfica de una derivada: la pendiente de una tangente a una función $f(x)$. Este tipo de cálculo numérico puede lograrse considerando la función evaluada en un punto particular $x = a$, y en un punto cercano tal que $x = a + h$. En la Figura 1, puede observarse una aproximación a la derivada de la función y la derivada exacta de la función, evaluada en $x = a$. La exactitud de este método de aproximación dependerá de que h sea lo suficientemente pequeña.

Por lo tanto, es posible aproximar la derivada como se muestra a continuación

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

Esta es llamada aproximación por **diferenciación hacia adelante** de f. Otra versión puede calcularse, si se considera un punto a la izquierda de a, en vez de a la derecha. En tal caso, la aproximación resulta:

$$f'(a) \approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h}$$

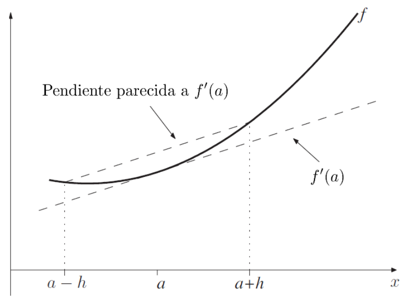

Figura 2

A ésta se le conoce como aproximación por **diferenciación hacia atrás**. Un último método, llamado aproximación por **diferenciación central** consiste en calcular:

$$f'(a) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

que resulta, a partir de observar las pendientes que se muestran en la Figura 2.

En resumen, los método de aproximación por diferenciación para calcular $f'(x)$ se muestran a continuación:

1. hacia adelante: $\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$
2. hacia atras: $\frac{f(a)-f(a-h)}{h}$
3. central: $\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$

Ejemplos numéricos

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

Calcule $f'(x)$, y evalúe en $x = 0.5$

1. Por diferenciación hacia adelante, con:
   (a) $h = 0.1$
   (b) $h = 0.01$
   (c) $h = 0.001$
   (d) $h = 0.0001$
2. Por diferenciación hacia atrás, con:
   (a) $h = 0.1$
   (b) $h = 0.01$
   (c) $h = 0.001$
   (d) $h = 0.0001$
3. Por diferenciación central, con:
   (a) $h = 0.1$
   (b) $h = 0.01$
   (c) $h = 0.001$
   (d) $h = 0.0001$

Solución

Con fines ilustrativos, recuerde que para

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

el calculo analítico de la derivada es:

$$f'(x) = -0.4x^3 - 0.45x^2 - x - 0.25$$

y

$$\boldsymbol{f'(0.5) = -0.9125}$$

1. Por diferenciación hacia adelante, con:

   (a) $h = 0.1, x = a = 0.5$

$$\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5+0.1) - f(0.5)}{0.1} \\
&\approx \frac{f(0.6) - f(0.5)}{0.1} \\
&\approx \frac{0.82464 - 0.925}{0.1} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \boldsymbol{-1.0036} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-1.0036)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \boldsymbol{9.9836\%}
\end{aligned}$$

   (b) $h = 0.01, x = a = 0.5$

$$\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5+0.01) - f(0.5)}{0.01} \\
&\approx \frac{f(0.51) - f(0.5)}{0.01} \\
&\approx \frac{0.91579 - 0.925}{0.01} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \boldsymbol{-0.92129} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.92129)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \boldsymbol{0.96329\%}
\end{aligned}$$

(c) $h = 0.001, x = a = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5 + 0.001) - f(0.5)}{0.1} \\
&\approx \frac{f(0.501) - f(0.5)}{0.1} \\
&\approx \frac{0.92409 - 0.925}{0.1} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.91338} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.91338)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &\mathbf{= 0.096438\%}
\end{aligned}
$$

(d) $h = 0.0001, x = a = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5 + 0.0001) - f(0.5)}{0.1} \\
&\approx \frac{f(0.5001) - f(0.5)}{0.1} \\
&\approx \frac{0.92491 - 0.925}{0.0001} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.91259} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.91259)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &\mathbf{= 0.0098630\%}
\end{aligned}
$$

2. Por diferenciación hacia atrás, con:

(a) $h = 0.1, x = a = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5) - f(0.5 - 0.1)}{0.1} \\
&\approx \frac{f(0.5) - f(0.4)}{0.1} \\
&\approx \frac{0.925 - 1.0078}{0.1} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \boldsymbol{-0.82840} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.82840)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{9.2164\%}
\end{aligned}
$$

(b) $h = 0.01, x = a = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5) - f(0.5 - 0.01)}{0.01} \\
&\approx \frac{f(0.5) - f(0.49)}{0.01} \\
&\approx \frac{0.925 - 0.93404}{0.01} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \boldsymbol{-0.90378} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.90378)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0.95562\%}
\end{aligned}
$$

(c) $h = 0.001, x = a = 0.5$

$$\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5) - f(0.5 - 0.001)}{0.001} \\
&\approx \frac{f(0.5) - f(0.499)}{0.001} \\
&\approx \frac{0.925 - 0.92591}{0.001} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.91163} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.91163)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0.095342\%}
\end{aligned}$$

(d) $h = 0.0001, x = a = 0.5$

$$\begin{aligned}
f'(a) &\approx \frac{f(a) - f(a-h)}{h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5) - f(0.5 - 0.0001)}{0.0001} \\
&\approx \frac{f(0.5) - f(0.4999)}{0.0001} \\
&\approx \frac{0.925 - 0.92509}{0.0001} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.91241} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.91241)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0.0098630\%}
\end{aligned}$$

3. Por diferenciación central, con:

(a) $h = 0.1, x = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(x) &\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5+0.1) - f(0.5-0.1)}{(2)(0.1)} \\
&\approx \frac{f(0.6) - f(0.4)}{0.2} \\
&\approx \frac{0.82464 - 1.0078}{0.2} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.916} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.916)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0.38356\%}
\end{aligned}
$$

(b) $h = 0.01, x = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(x) &\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5+0.01) - f(0.5-0.01)}{(2)(0.01)} \\
&\approx \frac{f(0.51) - f(0.49)}{0.02} \\
&\approx \frac{0.91579 - 0.93404}{0.02} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.91253} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.91253)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0.0032877\%}
\end{aligned}
$$

(c) $h = 0.001, x = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(x) &\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5+0.001) - f(0.5-0.001)}{(2)(0.001)} \\
&\approx \frac{f(0.501) - f(0.499)}{0.002} \\
&\approx \frac{0.92409 - 0.92591}{0.002} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.9125} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.9125)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0\%}
\end{aligned}
$$

(d) $h = 0.0001, x = 0.5$

$$
\begin{aligned}
f'(x) &\approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \\
f'(0.5) &\approx \frac{f(0.5+0.0001) - f(0.5-0.0001)}{(2)(0.0001)} \\
&\approx \frac{f(0.5001) - f(0.4999)}{0.0002} \\
&\approx \frac{0.92491 - 0.92509}{0.0002} \\
\boldsymbol{f'(0.5)} &\approx \mathbf{-0.9125} \\
\epsilon_t &= \left| \frac{f'_{real} - f'_{calculada}}{f'real} \right| 100\% \\
&= \left| \frac{(-0.9125) - (-0.9125)}{(-0.9125)} \right| 100\% \\
\boldsymbol{\epsilon_t} &= \mathbf{0\%}
\end{aligned}
$$

Como puede observarse en todos los cálculos, entre más pequeño es el valor de h menor es el error en el cálculo. Sin embargo, puede observarse que el método por **Diferenciación Central** es el que estima una aproximación con menor error, cuando se comparan los tres métodos entre sí con el mismo valor de h. Es por esto, que es el que más se utiliza en la práctica.