

Derivación numérica

Contents

- [8.1. Introducción](#)
- [8.2. Diferencias Finitas](#)
- [8.3. Diferencias Finitas en Python](#)
- [8.4. Referencias](#)

MEC301 - Métodos Numéricos

Profesor: Francisco Ramírez Cuevas

Fecha: 26 de Septiembre 2022

8.1. Introducción

La *derivada* representa la tasa de cambio de una variable dependiente respecto de una variable independiente. Es una herramienta de uso común en diversas áreas de ingeniería, por ejemplo:

Nombre	Ecuación	Campo de estudio	Parámetro descrito	Variable dependiente	Constante de proporcionalidad
Ley de Fourier	$q = -k \frac{dT}{dx}$	Conducción de calor	Flujo de calor	Temperatura	Conductividad térmica
Ley de Fick	$J_m = -D \frac{dc}{dx}$	Difusión de masa	Flujo másico	Concentración	Difusividad
Ley de Ohm	$J_e = -\sigma \frac{dV}{dx}$	Electricidad	Flujo de corriente eléctrica	Voltaje	Conductividad eléctrica
Ley de viscosidad de Newton	$\tau = \mu \frac{du}{dx}$	Mecánica de Fluidos	Tensión de corte	Velocidad	Viscosidad dinámica
Ley de Hook	$\sigma = \epsilon \frac{\Delta L}{L}$	Elasticidad	Tensión mecánica	Deformación	Módulo de Young

En todos estos ejemplos, la variable independiente corresponde a la posición x .

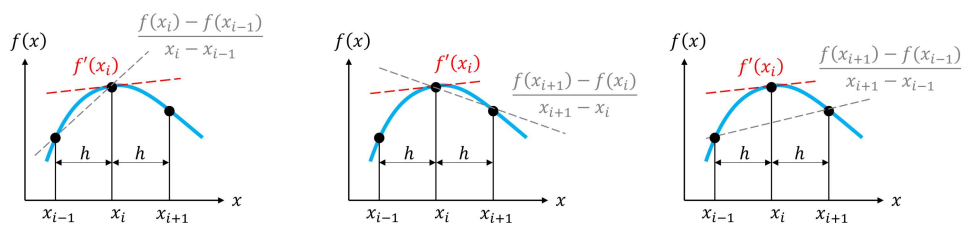
8.2. Diferencias Finitas

8.2.1. Derivada de primer orden

Matemáticamente, representamos la derivada $f'(x)$ de una función $f(x)$ en el punto $x = a$ como:

$$f'(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{f(x+a) - f(x)}{h}$$

Gráficamente, para $a = x_i$ entre dos valores igualmente espaciados x_{i-1} y x_{i+1} , con $h = x_i - x_{i-1}$, tenemos tres alternativas para aproximar $f'(x_i)$:



Esta aproximación se denomina **diferencias finitas**.

Al igual que en la unidad anterior, podemos usar series de Taylor para evaluar el error de truncamiento asociado a cada aproximación.

Consideremos la serie de Taylor de $f(x)$ centrada en x_i :

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{f(x_i)(x - x_i)^0}{0!} + \frac{f'(x_i)(x - x_i)^1}{1!} + \frac{f''(x_i)(x - x_i)^2}{2!} + \frac{f'''(x_i)(x - x_i)^3}{3!} \\ &= f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2}(x - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{6}(x - x_i)^3 + \dots \end{aligned}$$

Evaluando esta expansión en x_{i-1} ,

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i-1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2}(x_{i-1} - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{6}(x_{i-1} - x_i)^3 + \dots$$

y despejando $f'(x_i)$ nos da la **fórmula de derivada hacia atrás**:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} + O(h) \quad (8.1)$$

Similarmemente, si evaluamos la expansión en x_{i+1} ,

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)(x_{i+1} - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2}(x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{f'''(x_i)}{6}(x_{i+1} - x_i)^3 + \dots$$

y luego despejamos $f'(x_i)$, obtenemos la **fórmula de derivada hacia adelante**:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} + O(h) \quad (8.2)$$

Finalmente, consideremos la diferencia $f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})$, con $x_{i+1} - x_i = h$ y $x_{i-1} - x_i = -h$:

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

Despejando para $f'(x_i)$, obtenemos la **fórmula para derivada central**:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{x_{i+1} - x_{i-1}} + O(h^2) \quad (8.3)$$

A partir de este análisis podemos concluir que la derivada central tiene un mayor orden de precisión.

Comprobemos esto con la derivada del polinomio:

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

en $x = 0.5$, y considerando $h = 0.10$.

Para comprobar el error consideraremos el valor exacto $f'(5) = -0.9125$

```
f = lambda x: -0.1*x**4 - 0.15*x**3 - 0.5*x**2 - 0.25*x + 1.2
df_exact = -0.9125

h = 0.1          # espaciamiento
xi = 0.5         # valor central
x = [xi-h, xi, xi+h] # puntos a evaluar

df_bw = (f(x[1]) - f(x[0]))/(x[1] - x[0]) # derivada hacia atrás
df_fw = (f(x[2]) - f(x[1]))/(x[2] - x[1]) # derivada hacia adelante
df_ct = (f(x[2]) - f(x[0]))/(x[2] - x[0]) # derivada central

print("f'(5) = %-5f; Error = %.5f (Derivada hacia atrás)" %
      (df_bw, abs(df_exact - df_bw)))
print("f'(5) = %-5f; Error = %.5f (Derivada hacia adelante)" %
      (df_fw, abs(df_exact - df_fw)))
print("f'(5) = %-5f; Error = %.5f (Derivada central)" %
      (df_ct, abs(df_exact - df_ct)))
```

```
f'(5) = -0.828400; Error = 0.08410 (Derivada hacia atrás)
f'(5) = -1.003600; Error = 0.09110 (Derivada hacia adelante)
f'(5) = -0.916000; Error = 0.00350 (Derivada central)
```

A partir de este resultado vemos como el error de diferencia hacia atrás y adelante es $O(h) \sim 0.1$, mientras que para diferencia central el error es $O(h^2) \sim 0.01$

Como segundo ejemplo, evaluemos el crecimiento del error en este problema a medida que aumentamos h

```
import numpy as np

xi = 0.5 # valor central
h_array = np.logspace(-5,-0,20) # arreglo de h desde 10^-5 a 10^0

# Creamos un arreglo de ceros para cada error. Este arreglo será
# completado en un loop para cada valor de "h"
error_bw = np.zeros(h_array.shape) # Error por diferencia
# hacia atrás
error_fw = np.zeros(h_array.shape) # Error por diferencia
# hacia adelante
error_ct = np.zeros(h_array.shape) # Error por diferencia
# central

# generamos un loop respecto a los índices de h_array
for j in range(len(h_array)):
    h = h_array[j]
    x = [xi-h, xi, xi+h] # puntos a evaluar
    df_bw = (f(x[1]) - f(x[0]))/(x[1] - x[0]) # derivada hacia
# atrás
    df_fw = (f(x[2]) - f(x[1]))/(x[2] - x[1]) # derivada hacia
# adelante
    df_ct = (f(x[2]) - f(x[0]))/(x[2] - x[0]) # derivada central

    # almacenamos el error de cada caso en un arreglo
    error_bw[j] = abs(df_exact - df_bw)
    error_fw[j] = abs(df_exact - df_fw)
    error_ct[j] = abs(df_exact - df_ct)
```

```
%capture showplot1
import matplotlib.pyplot as plt
from numpy import log, polyfit

plt.figure(figsize = (7, 5)) # Tamaño de figura
plt.rcParams.update({'font.size': 18}) # Tamaño de fuente

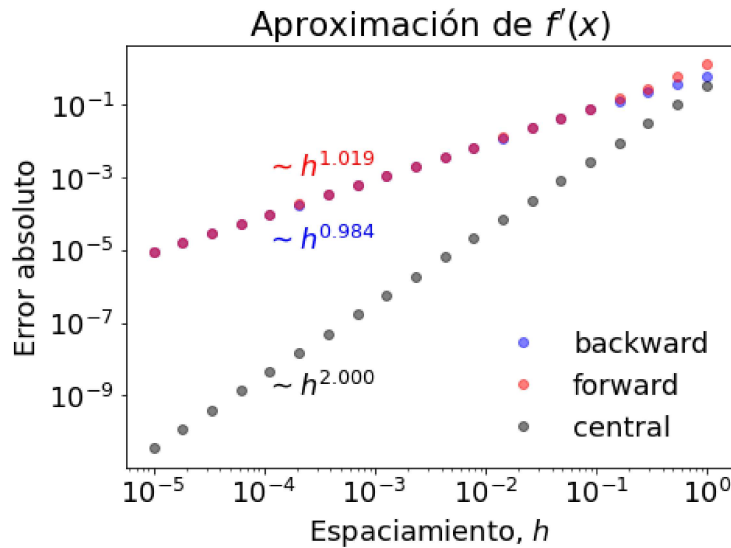
plt.plot(h_array,error_bw,'ob',label='backward',alpha=0.5)
plt.plot(h_array,error_fw,'or',label='forward',alpha=0.5)
plt.plot(h_array,error_ct,'ok',label='central',alpha=0.5)

# analizamos la pendiente del logaritmo de cada aproximación
abw = polyfit(log(h_array), log(error_bw),1)
afw = polyfit(log(h_array), log(error_fw),1)
act = polyfit(log(h_array), log(error_ct),1)

# imprimimos el valor de la pendiente en el gráfico
plt.text(1E-4,1E-5,'$\sim h^{%.3f}$' % abw[0], color='b')
plt.text(1E-4,1E-3,'$\sim h^{%.3f}$' % afw[0], color='r')
plt.text(1E-4,1E-9,'$\sim h^{%.3f}$' % act[0], color='k')

# graficamos en escala logarítmica para visualizar la pendiente
plt.xscale('log')
plt.yscale('log')
plt.xlabel('Espaciamiento, $h$')
plt.ylabel('Error absoluto')
plt.title("Aproximación de $f'(x)$")
plt.legend(frameon=False, loc='lower right')
plt.show()
```

```
showplot1()
```



8.2.2. Derivadas de segundo o mayor orden

Mediante un procedimiento similar, podemos generar aproximaciones de diferencias finitas para derivadas de mayor orden.

Por ejemplo, consideremos la suma de las expansiones $f(x_{i+1})$ y $f(x_{i-1})$ centradas en x_i ,

$$f(x_{j-1}) + f(x_{j+1}) = 2f(x_j) + h^2 f''(x_j) + \frac{h^4 f^{(4)}(x_j)}{24} + \dots$$

Despejando para $f''(x_i)$, obtenemos la fórmula para la segunda derivada por diferencia central:

$$f''(x_j) \approx \frac{f(x_{j+1}) - 2f(x_j) + f(x_{j-1}))}{h^2} + O(h^2)$$

Podemos extender nuestro resultado para determinar fórmulas de diferencias finitas para derivadas de mayor orden. A continuación mostramos un resumen con algunas de estas fórmulas:

Diferencia hacia adelante

Primera derivada

Error

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

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

Segunda derivada

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

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

Tercera derivada

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

$$f'''(x_i) = \frac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3} \quad O(h^2)$$

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4} \quad O(h)$$

$$f''''(x_i) = \frac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4} \quad O(h^2)$$

Diferencia hacia atrás

Primera derivada

Error

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

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

Segunda derivada

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

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

Tercera derivada

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

$$f'''(x_i) = \frac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4})}{2h^3} \quad O(h^2)$$

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4})}{h^4} \quad O(h)$$

$$f''''(x_i) = \frac{3f(x_i) - 14f(x_{i-1}) + 26f(x_{i-2}) - 24f(x_{i-3}) + 11f(x_{i-4}) - 2f(x_{i-5})}{h^4} \quad O(h^2)$$

Diferencia central

Primera derivada

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

Error

$$O(h^2)$$

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

$$O(h^4)$$

Segunda derivada

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

$$O(h^2)$$

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

$$O(h^4)$$

Tercera derivada

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

$$O(h^2)$$

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3}))}{8h^3}$$

$$O(h^4)$$

Cuarta derivada

$$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^4}$$

$$O(h^2)$$

$$f''''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) + 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) + f(x_{i-3}))}{6h^4}$$

$$O(h^4)$$

8.2.3. Derivadas parciales

Podemos extender las fórmulas de diferencias finitas anteriores para derivadas parciales.

Por ejemplo, utilizando diferencia central:

$$\frac{\partial f_{ij}}{\partial x} = \frac{f(x_{i+1}, y_i) - f(x_{i-1}, y_i)}{2\Delta x} + O(\Delta x^2)$$

$$\frac{\partial f_{ij}}{\partial y} = \frac{f(x_i, y_{i+1}) - f(x_i, y_{i-1})}{2\Delta y} + O(\Delta y^2)$$

$$\frac{\partial^2 f_{ij}}{\partial x^2} = \frac{f(x_{i+1}, y_i) - 2f(x_i, y_i) + f(x_{i-1}, y_i)}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2)$$

8.3. Diferencias Finitas en Python

Podemos clasificar las funciones de derivadas de python, en dos tipos:

- Derivación mediante datos tabulados: `numpy.diff`, `numpy.gradient`, `scipy.interpolate.CubicSpline`.
- Derivación mediante función conocida: `scipy.misc.derivative`

8.3.1. Diferencias finitas con datos tabulados

Consideremos el siguiente set de datos tabulados x_i y $f(x_i)$ correspondientes a la función $f(x) = \sin(x)$.

```
# Valores xi tabulados (no igualmente espaciados)
xi = np.array([ 0, 0.72878679, 1.23516778, 2.0081088,
2.77801068, 3.10970675, 3.93589864, 4.14861853, 5.18938779,
5.39179938, 2*np.pi])
# Valores yi = sin(xi) tabulados
yi = np.array([ 0, 0.66596509, 0.94420348, 0.90895968,
0.35562432, 0.0318805, -0.71337743, -0.84524628, -0.88837681,
-0.77794332, 0])
```

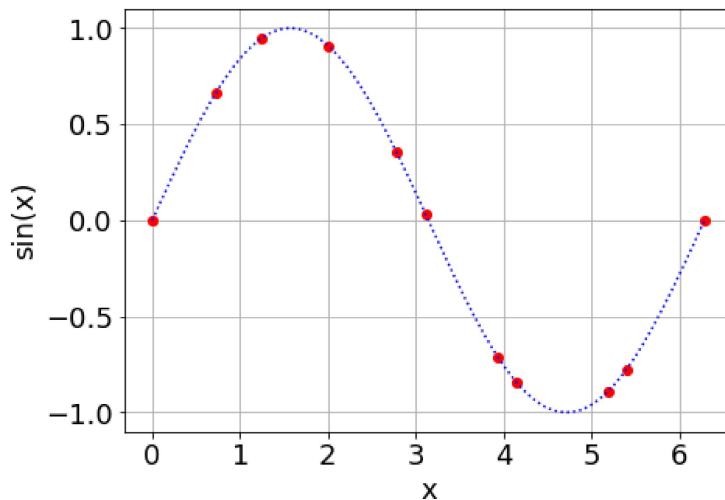
```
%%capture showplot2
import matplotlib.pyplot as plt

plt.figure(figsize = (7, 5)) # Tamaño de figura
plt.rcParams.update({'font.size': 18}) # Tamaño de fuente

# Graficamos sin(x) y junto con (xi,yi)
f = lambda x: np.sin(x)
x = np.linspace(0,2*np.pi,100)

plt.plot(xi,yi,'or') # datos tabulados
plt.plot(x,f(x),':b') # función sin(x)
plt.xlabel('x')
plt.ylabel('sin(x)')
plt.grid()
plt.show()
```

```
showplot2()
```



Función `numpy.diff`. Esta función determina la diferencia entre los dos valores más cercanos en un arreglo.

En otras palabras, para un arreglo `x[0], x[1], ... x[n]`,

`numpy.diff = x[1] - x[0], x[2] - x[1], ... , x[n] - x[n-1]`.

Así, para un arreglo de tamaño N , `numpy.diff` entrega un arreglo de tamaño $N - 1$.

Si bien la función no entrega la derivada directamente, se puede usar para determinar $f'(x)$ de forma sencilla. Así, para un arreglo de valores $x_i, y_i, f'(x)$ se puede determinar por:

```
dfdx = np.diff(yi)/np.diff(xi) #  $f'(x)$ 
```

Debido a la forma en la que opera `numpy.diff`, **el resultado corresponde a diferencia hacia adelante o hacia atrás**. Esto dependiendo de como asignemos `dfdx[i]`.

Evaluemos la función `numpy.diff` en nuestro ejemplo con datos tabulados. Comparamos el resultado con el valor exacto $f'(x) = \cos(x)$.

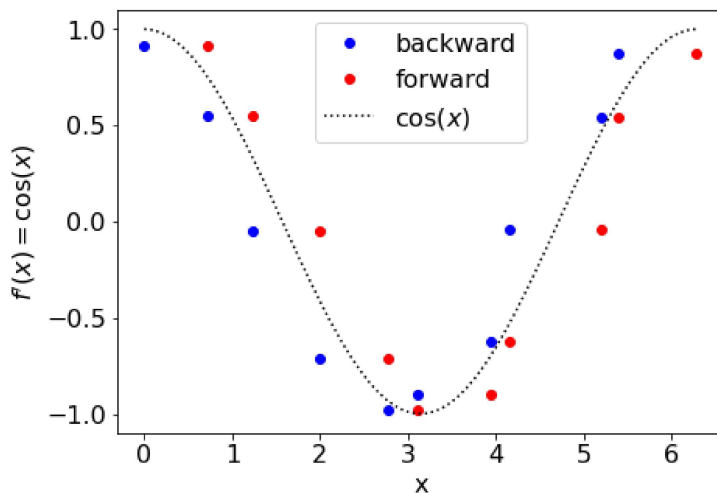
```
%%capture showplot3
# Evaluamos numpy.diff
dfdx = np.diff(yi)/np.diff(xi)

plt.figure(figsize = (7, 5))          # Tamaño de figura
plt.rcParams.update({'font.size': 16}) # Tamaño de fuente

plt.plot(xi[:-1],dfdx,'ob',label='backward')
plt.plot(xi[1:],dfdx,'or',label='forward')
plt.plot(x,np.cos(x),'k',label='$\cos(x)$')

plt.legend()
plt.xlabel('x')
plt.ylabel("$f'(x) = \cos(x)$")
plt.show()
```

```
showplot3()
```



Función `numpy.gradient`. Esta es una función más optimizada y específica para calcular derivadas. La función `gradient` calcula *directamente* la derivada de una función

```
dfdx = np.gradient(yi,xi) #  $f'(x)$ 
```

Para los valores centrales **gradient** utiliza **diferencia central**, y para los valores extremos diferencia hacia atrás o hacia adelante, es decir:

```
dfdx[0] = (y[1] - y[0]) / (x[1] - x[0]) # diferencia hacia adelante
dfdx[n] = (y[n] - y[n-1]) / (x[n] - x[n-1]) # diferencia hacia atrás
```

Así, para un arreglo de tamaño N , **numpy.gradient** entrega un arreglo de tamaño N .

Evaluemos la función **numpy.gradient** en nuestro ejemplo con datos tabulados.

Comparamos el resultado con el valor exacto $f'(x) = \cos(x)$.

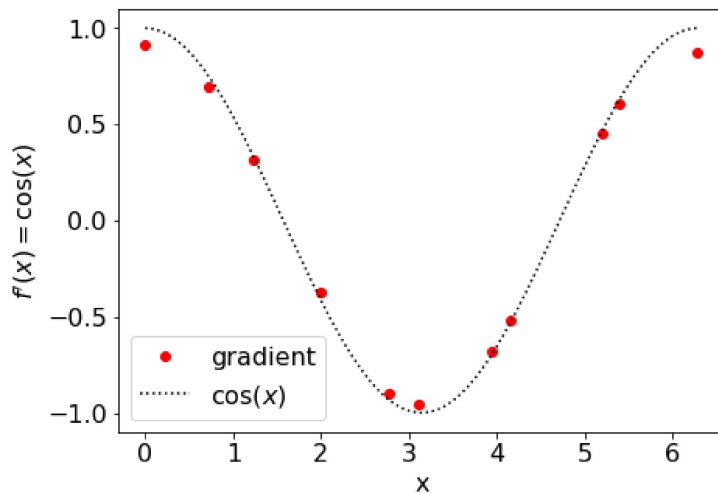
```
%capture showplot4
# Evaluamos numpy.diff
dfdx = np.gradient(yi,xi)

plt.figure(figsize = (7, 5)) # Tamaño de figura
plt.rcParams.update({'font.size': 16}) # Tamaño de fuente

plt.plot(xi,dfdx,'or',label='gradient')
plt.plot(x,np.cos(x),':k',label='$\cos (x)$')

plt.legend()
plt.xlabel('x')
plt.ylabel("$f'(x) = \cos(x)$")
plt.show()
```

```
showplot4()
```



Una tercera alternativa para determinar la derivada es mediante la función **CubicSpline** de **scipy.interpolate**. A diferencia de **diff** y **gradient**, **CubicSpline** permite determinar derivadas de segundo y tercer orden directamente.

```
from scipy.interpolate import CubicSpline
dfdx = CubicSpline(xi,yi).derivative(1) # función  $f'(x)$  a partir de spline cúbico
dfdx2 = CubicSpline(xi,yi).derivative(2) # función  $f''(x)$  a partir de spline cúbico
dfdx3 = CubicSpline(xi,yi).derivative(3) # función  $f'''(x)$  a partir de spline cúbico
```

NOTA En el ejemplo estamos generando una variable de tipo **callable**. Es decir, si queremos saber $f'(x_i)$ debemos ejecutar `dfdx(xi)`

Debido a que `CubicSpline` está basada en un polinomio de orden 3, la función aproximada tiene un error del orden $O(h^4)$. Así, la primera derivada de `CubicSpline` tiene un error del orden $O(h^3)$, la segunda $O(h^2)$, y la tercera $O(h)$.

Alternativamente, según lo revisado en la unidad de [interpolación](#), podemos usar `CubicSpline` para determinar la derivada mediante:

```
from scipy.interpolate import CubicSpline
y = CubicSpline(xi,yi) # función  $f(x)$  a partir de spline cúbico
dfdx = y(xi,1) #  $f'(xi)$ 
```

Analicemos el ejemplo con datos tabulados usando `CubicSpline`

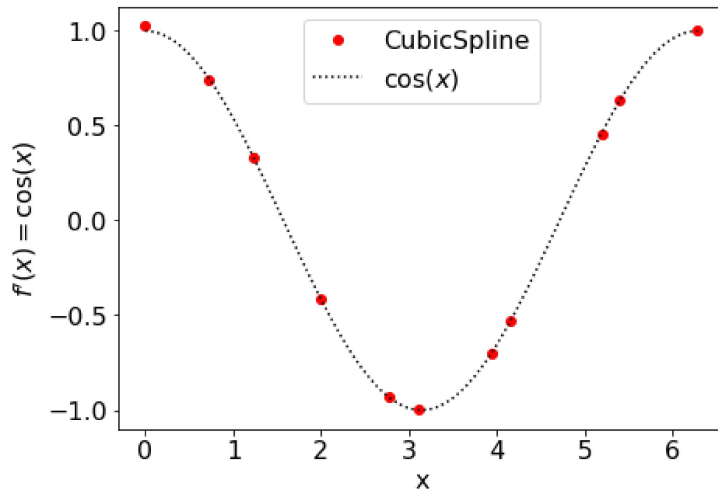
```
%%capture showplot5
from scipy.interpolate import CubicSpline
# generamos una función de interpolación
dfdx = CubicSpline(xi,yi).derivative(1)

plt.figure(figsize = (7, 5)) # Tamaño de figura
plt.rcParams.update({'font.size': 16}) # Tamaño de fuente

plt.plot(xi,dfdx(xi), 'or', label='CubicSpline')
plt.plot(x,np.cos(x), ':k', label='$\cos(x)$')

plt.legend()
plt.xlabel('x')
plt.ylabel("$f'(x) = \cos(x)$")
plt.show()
```

```
showplot5()
```



8.3.2. Derivada de una función conocida

Si la función a derivar es conocida, podemos usar `scipy.misc.derivative` para determinar la derivada. La derivada es aproximada mediante diferencia central.

```
from scipy.misc import derivative
dfdx = derivative(fun, x0, dx=h)
```

donde:

- `fun`: función a derivar en formato *callable*
- `x0`: valor donde se evalúa la derivada, formato *float*
- `dx`: espaciamiento h . Por defecto `dx=1`

La función solo admite un valor tipo *float* para evaluar la derivada. Sin embargo, es una buena alternativa para determinar la derivada en un punto x_0 , sin la necesidad de generar un arreglo.

Por ejemplo, analicemos la derivada de $f(x) = \sin(x)$ en $x_0 = \pi/3$, a medida que reducimos el espaciamiento h . Como valor exacto tenemos

$$f'(\pi/3) = \cos(\pi/3) = 1/2$$

```
from scipy.misc import derivative

f = lambda x: np.sin(x)           # función en formato
callable                          # callable
h_array = np.array([0.5,0.4,0.3,0.2,0.1]) # arreglo de
espaciamento h                  # espaciamento h
x0 = np.pi/3                    # punto de evaluación de
la derivada                      # punto de evaluación de
dfd_x_exact = 0.5                # valor exacto de la
derivada                         # valor exacto de la

for h in h_array:
    dfdx = derivative(f,x0,dx=h)
    print('h = %.3f, dfdx = %.3f, error = %.3e' % (h, dfdx,abs(dfdx
- dfdx_exact)))
```

```
h = 0.500, dfdx = 0.479, error = 2.057e-02
h = 0.400, dfdx = 0.487, error = 1.323e-02
h = 0.300, dfdx = 0.493, error = 7.466e-03
h = 0.200, dfdx = 0.497, error = 3.327e-03
h = 0.100, dfdx = 0.499, error = 8.329e-04
```

8.4. Referencias

- Kong Q., Siau T., Bayen A. M. **Chapter 2: Numerical Differentiation** in [Python Programming and Numerical Methods – A Guide for Engineers and Scientists](#), 1st Ed., Academic Press, 2021
- Chapra S., Canale R. **Capítulo 23: Diferenciación numérica** en *Métodos Numéricos para Ingenieros*, 6ta Ed., McGraw Hill, 2011

By Francisco V. Ramirez-Cuevas

© Copyright 2022.