Informe Laboratorio 4: Diferenciación e Integración

Santiago Uribe Pastás
Pontificia Universidad Javeriana Cali

Noviembre 2020

1. Abstract

En el siguiente documento se presenta un informe acerca de la implementación en lenguaje de programación Python de 3 métodos para aproximar la derivada de una función (diferencias finitas hacia adelante, diferencias finitas hacia atrás y diferencias centradas) y 3 métodos para integración numérica (método del rectángulo, método del trapezoide y método de Simpson). Posteriormente se presentarán los métodos utilizados para la realización de dichas implementaciones junto con los resultados y su respectivo análisis después de probar los algoritmos con diferentes funciones. Los algoritmos aqui presentados fueron ejecutados en un computador con un procesador Intel Core i5-7200U y 16 GB de RAM.

2. Introducción

Antes de entrar en materia, es importante definir que es la diferenciación y la integración. La diferenciación es una técnica para calcular una aproximación a la derivada de una función en un punto utilizando los valores y propiedades de la misma. La integración numérica es igualmente una técnica la cual sirve para aproximar el valor de una integral definida, en este informe se verán las técnicas las cuales usen cuadratura numérica.

El documento se encuentra organizado de la siguiente manera: en la sección 3 se hablara acerca de los materiales y métodos usados para la implementación de los algoritmos, en la sección 4 se presentarán los resultados obtenidos por lo algoritmos después de haberlos evaluado con diferentes funciones, en la sección 5 se hará un breve análisis sobre los resultados mostrados en la sección anterior y finalmente en la sección 6 se hablara sobre las conclusiones.

3. Materiales y métodos

Primeramente como materiales fueron usados el lenguaje de programación Python junto con librerías que facilitaron en algunos aspectos la implementación del código, como lo son *numpy* y *matplotlib*. Además se hizo uso de las diapositivas y vídeos de clase para solucionar dudas acerca de teoría y métodos de resolución.

A continuación se hablará sobre los métodos de diferenciación e integración numérica que fueron implementados.

3.1. Diferencias finitas

Este método es útil para aproximar derivadas de funciones suaves, la cual debe ser conocida analíticamente o puede ser evaluada con exactitud para un argumento dado.

Dada una función suave $\mathbb{R} \to \mathbb{R}$ se desea aproximar su primera derivada en un punto x. Considere las siguientes expansiones en series de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + ... \tag{1}$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 - ... \tag{2}$$

3.1.1. Diferencias finitas hacia adelante

Despejando $f'(x)$ en la ecuación (1) se obtiene la fórmula de diferencias finitas hacia adelante:

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

3.1.2. Diferencias finitas hacia atrás

De igual forma con la ecuación (2) se obtiene la fórmula de diferencias finitas hacia atrás:

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

3.1.3. Diferencias finitas centradas

Si se resta (2) de (1), se obtiene la fórmula de diferencias centradas:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(x)}{6}h^2 + ...$$
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

3.2. Cuadratura numérica

La formula de la cuadratura de n puntos tiene la forma:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) + R_n$$

Los puntos x_i en los cuales se evalua la función se llaman nodos, los w_i se conocen como pesos y R_n es el residuo o error. Para estimar (aproximar) la integral, simplemente se computa la suma:

$$I(f) \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \tag{3}$$

La ecuación (3) se conoce como la regla de la cuadratura. Esta regla esta basada en la interpolación polinomial entre los puntos seleccionados de la función original que se va a integrar, done los w_i se hallan de la siguiente manera:

$$w_i = \int_a^b p_i(x)dx, i \in [1, n]$$

Siendo p_i un polinomio interpolante.

Si los nodos x_i son igualmente espaciaos en el intervalo $[a, b]$ la regla de la cuadratura es conocida como Newton-Cotes. Una mejor alternativa es subdividir el intervalo original en subintervalos, a menudo llamados paneles, particionando el intervalo $[a, b]$ en paneles $[x_{i-1}, x_i]$ con $i \in [1, n]$, donde $a = x_0, \cdots, x_n = b$. Se aplican las reglas de cuadratura de orden bajo en cada panel y se suman todos los resultados parciales. Entonces las tres reglas de Newton-Cotes con cuadratura compuesta son:

3.2.1. Regla del rectángulo

Consiste en interpolar la función en el punto medio del intervalo por una constante (polinomio de grado 0):

$$I(f) \approx M_c(f) = \sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1})f(\frac{x_{i-1} + x_i}{2})$$

3.2.2. Regla del trapezoide

Consiste en interpolar a función en los dos puntos finales del intervalo por una línea recta (polinomio de grado 1):

$$I(f) \approx T_c(f) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1})[f(x_{i-1}) + f(x_i)]$$

3.2.3. Regla de Simpson

Consiste en interpolar la función en tres puntos (los dos puntos finales y el punto medio) por un polinomio cuadrático:

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

4. Resultados

Para la ejecución de los algoritmos se escogieron 3 diferentes funciones con diferentes complejidades, las cuales son:

- $f_1(x) = sin(x)$
- $f_2(x) = 4x^3 + 5x^2 - 7x + 3$
- $f_3(x) = e^{cos(x)}$
- $f_4(x) = \ln(x^2)$

Es importante decir que para las gráficas de las derivadas la derivada analítica fue calculada manualmente y posteriormente graficada. También que en las gráficas de las funciones $f_1(x)$ y $f_3(x)$ el eje x se encuentra en radianes. También que se añadió $f_4(x)$ (únicamente para integración) ya que $f_3(x)$ no es integrable.

4.1. Tiempos de ejecución

En las siguientes tablas se muestra los tiempos de ejecución para los algoritmos. Cabe resaltar que en la toma de tiempos para los algoritmos de diferenciación no se toma en cuenta diferentes valores de h pues este no afecta su tiempo de ejecución.

Función	Dif. Fin. Adelante	Dif. Fin. Atrás	Dif. Fin. Centradas
$f_1(x)$	0,373	0,355	0,359
$f_2(x)$	0,370	0,374	0,379
$f_3(x)$	0,367	0,379	0,370

Tabla 1: Tiempos de ejecución para algoritmos de diferenciación

Función	Regla Rectángulo	Regla Trapezoide	Regla Simpson
$f_1(x)$	0,375	0,376	0,374
$f_2(x)$	0,374	0,361	0,372
$f_4(x)$	0,370	0,376	0,372

Tabla 2: Tiempos de ejecución para algoritmos de integración

4.2. Gráficas de Diferenciación

A continuación se presentan algunos resultados gráficos de algunas simulaciones de los algoritmos de diferenciación con las funciones y diferentes valores de h.

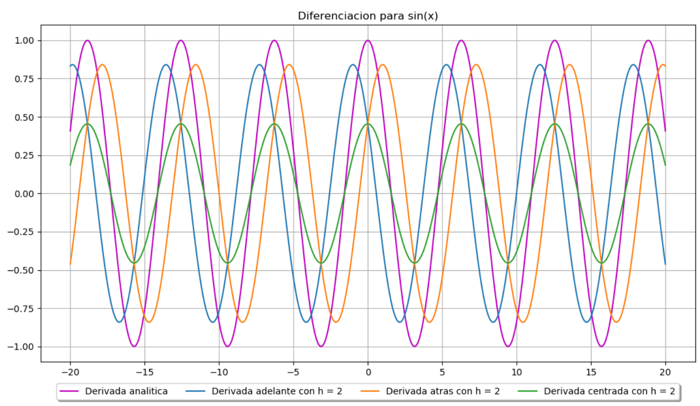

Figura 1: diferenciación para $f_1(x)$ y $h = 2$

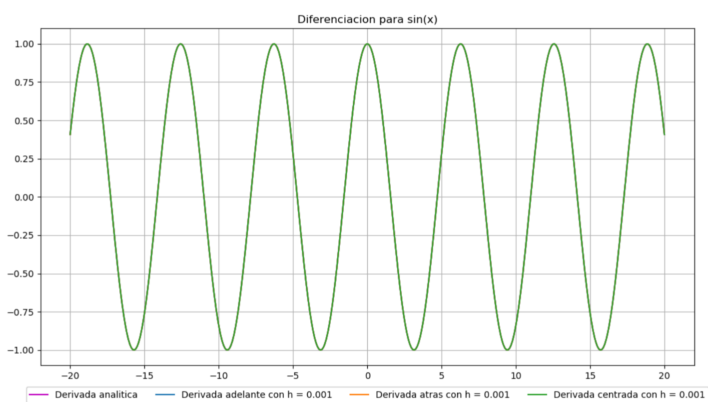

Figura 2: diferenciación para $f_1(x)$ y $h = 0{,}001$

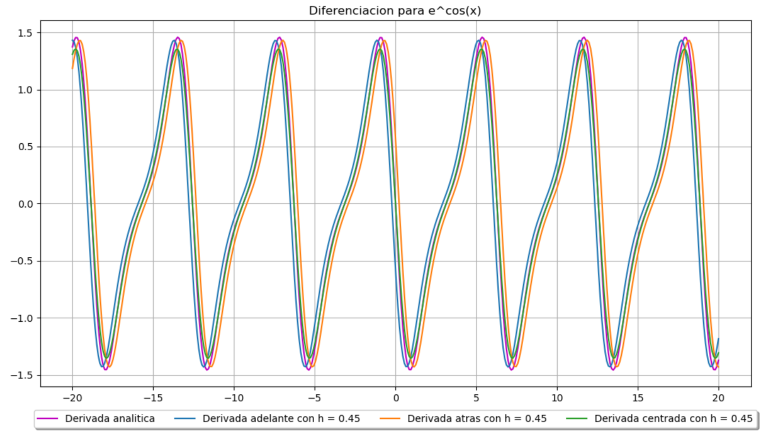

Figura 3: diferenciación para $f_3(x)$ y $h = 0{,}45$

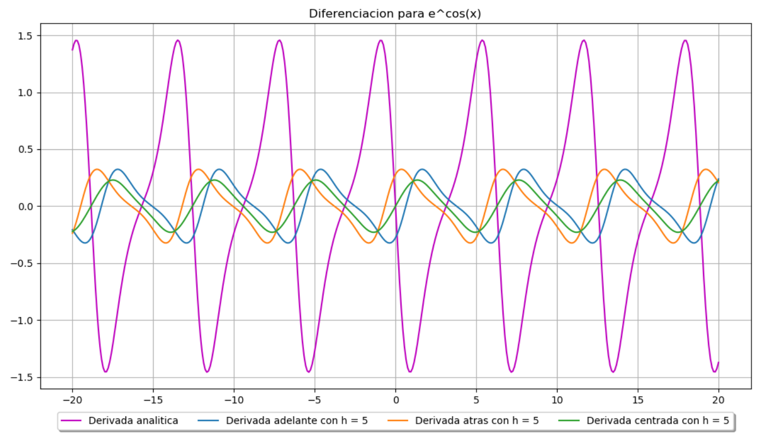

Figura 4: diferenciación para $f_3(x)$ y $h = 5$

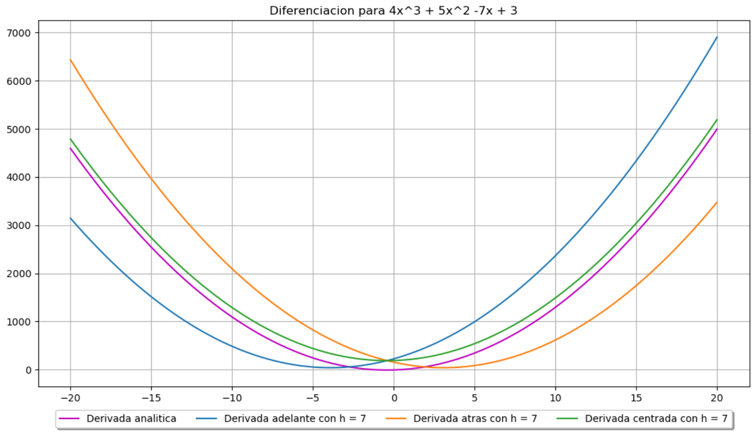

Figura 5: diferenciación para $f_2(x)$ y $h = 7$

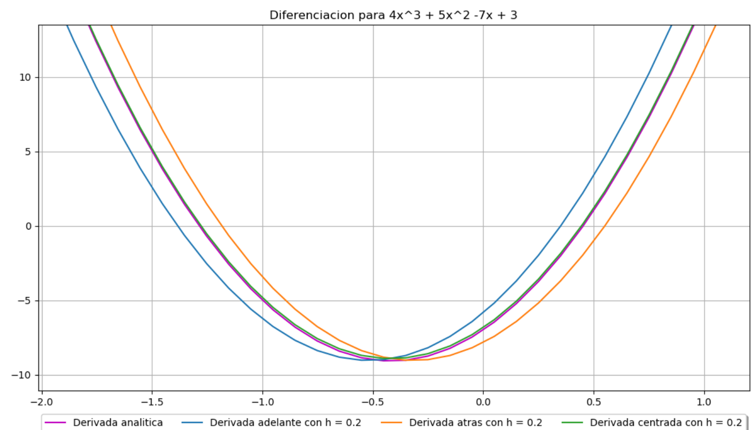

Figura 6: diferenciación para $f_2(x)$ y $h = 0{,}2$

4.3. Error promedio relativo y desviación del error

A continuación se presentan el error medio y la desviación del error para algunas de las simulaciones realizadas.

Método	Error Promedio	Desv. Error
Dif. Fin. Adelante	0,3606	0,8743
Dif. Fin. Atrás	0,3606	0,8743
Dif. Fin. Centrada	0,0130	0,0073

Tabla 3: Error promedio y desviación del error para las técnicas de diferenciación para $f_3(x)$ y $h = 0,2$

Método	Error Promedio	Desv. Error
Dif. Fin. Adelante	2,5473	39,5784
Dif. Fin. Atrás	2,5473	39,5784
Dif. Fin. Centrada	1,1817	17,2459

Tabla 4: Error promedio y desviación del error para las técnicas de diferenciación para $f_2(x)$ y $h = 2$

Método	Error Promedio	Desv. Error
Dif. Fin. Adelante	0,0016	0,0045
Dif. Fin. Atrás	0,0016	0,0045
Dif. Fin. Centrada	$1,66 \cdot 10^{-7}$	$7,07 \cdot 10^{-13}$

Tabla 5: Error promedio y desviación del error para las técnicas de diferenciación para $f_1(x)$ y $h = 0{,}001$

4.4. Valores integración

En la siguiente tabla se muestran los resultados de los algoritmos de integración numérica. Para $f_1(x)$ se evaluó en el intervalo $[0, \frac{\pi}{6}]$ con $n = 20$, para $f_2(x)$ se evaluó en el intervalo $[-7, 25]$ con $n = 30$ y para $f_4(x)$ se evaluó en el intervalo $[2, 10]$ con $n = 40$.

Función	Valor Real	Regla Rectángulo	Regla Trapezoide	Regla Simpson
$f_1(x)$	0,13397	0,13398	0,13396	0,13397
$f_2(x)$	412.917,3	412.550,4	413.651,1	412.917,3
$f_4(x)$	27,279	27,280	27,276	27,279

Tabla 6: Valores de integración para las funciones con diferentes métodos

5. Análisis de Resultados

Como se puede apreciar en las gráficas de diferenciación cuando se tiene un valor alto de h la aproximación del calculo de la derivada es bastante lejano al valor real (derivada analítica), en cambio, para valores de h bastante pequeños el algoritmo da una respuesta bastante aproximada, esto nos indica que en cuanto el valor de h este mas cercano a 0 la aproximación de la derivada sera mucho mejor, esto obedece al calculo de derivadas con limites:

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

Esto también se puede verificar en las tablas de errores donde para valores de h pequeños el error es bastante mínimo, casi insignificante.

Por parte de la integración numérica, se puede apreciar en la Tabla 6 que en comparación con el valor real todas los métodos hacen aproximaciones bastante buenas, sin embargo, el mejor método es el de la regla de Simpson. Cabe resaltar que para estos métodos entre mas alto sea el valor de n se tendrá mejores aproximaciones para la integral.

6. Conclusión

Como se pudo observar en los diferentes métodos de diferenciación todos estos obtienen una buena aproximación con la condición de ingresar un valor de h bastante pequeño (cercano a 0). Sin embargo, se sugiere usar las diferencias finitas centradas pues este método tiene precisión de orden 2. La aproximación de las derivadas por diferencias finitas desempeña un papel central en los métodos de diferencias finitas del análisis numérico para la resolución de ecuaciones diferenciales, por lo que un buen algoritmo facilita estos cálculos. Por el lado de la integración numérica ésta toma gran importancia principalmente por la imposibilidad de realizar la integración de forma analítica de algunas funciones. Es decir, integrales que requerirían de un gran conocimiento y manejo de matemática avanzada pueden ser resueltas de una manera más sencilla mediante este método numérico. De igual forma el error de aproximación depende del método utilizado junto con el numero de paneles (n) que se escojan. Es importante decir que este método numérico también sirve para integrales múltiples.

Referencias

[1] "Mathematical functions - NumPy v1.19 Manual", numpy.org, 2008. [Online]. Available: https://numpy.org/doc/stable/reference/routines.math.html.