JÓVENES EN LA CIENCIA
REVISTA DE DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

DIFFERENTIATION OF DISCRETE AND EXPERIMETNAL DATA

Acevedo Mancera Kevin Alberto (1), PhD Shulika Oleksiy V (2)

1 [Licenciatura en Ingeniería Mecatrónica, Universidad de Guanajuato] | [kevin.aceman@gmail.com]

2 [Departamento de Ingeniería Electrónica, División de Ingenierías, Campus Irapuato Salamanca, Universidad de Guanajuato] | [oshulika@ugto.mx]

Resumen

Se indagará en los métodos numéricos existentes para la diferenciación de datos obtenidos en experimentos y funciones dadas. Se hará una comparación de los métodos en términos de complejidad, la dificultad de implementar y la precisión del resultado obtenido. Por último, se mostrará la utilidad de la diferenciación numérica de alto orden para analizar el comportamiento de un fenómeno óptico con datos experimentales.

Abstract

We inquire the existing numerical methods for differentiation of experiment data and given functions. A detailed comparison between the methods in terms of complexity, difficulty to implement and precision of the output will be done. Finally, it will be shown the use of high order numerical differentiation in the analysis of the behavior of an optic phenom with experimental data.

Palabras Clave Diferenciación; Error de truncamiento; Orden; Serie de Taylor; Precisión.

INTRODUCCIÓN

La diferenciación numérica se encarga de un problema del cálculo diferencial, en el cual se desea conocer una de las derivadas de una función definida analíticamente, o definida por pares de datos de algún experimento o muestra. La diferenciación numérica no es un proceso particularmente preciso debido a que entra en conflicto con errores de redondeo (MATLAB y PYTHON con errores de redondeo $\epsilon = 1\times 10^{-16}$) o errores inherentes debido a la interpolación para encontrar la curva que se ajuste a los datos. Por esta razón encontrar la derivada de una función, nunca puede ser calculada con la misma precisión que la función misma. Para ello se han propuesto varias técnicas, algunas de ellas muy sofisticadas. Una de las maneras de encontrar la derivada involucra aproximar la función localmente a un polinomio y después diferenciarlo. Una herramienta igualmente útil es la expansión en series de Taylor de $f(x)$ alrededor de un punto de interés, el cual tiene la ventaja de proveernos con la información acerca del error asociado a esta aproximación.

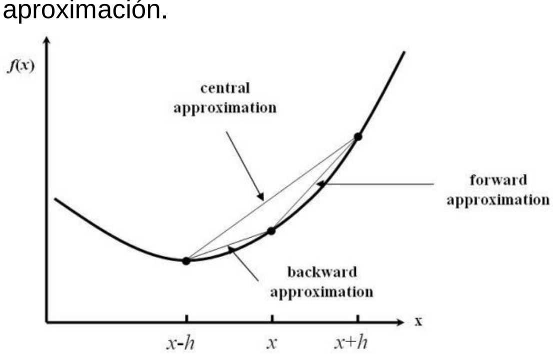


IMAGEN 1: Aproximación numérica de la derivada usando el método de diferencia central.

MATERIALES Y MÉTODOS

Método de diferencias finitas

Recordando de las clases de cálculo diferencial sabemos que la derivada de una función es expresada en términos de límites como:

$$f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h} \quad . \qquad (0.1)$$

Para un h muy pequeño, el límite se acerca a la primera derivada de $f(x)$. Para un valor fijo de h, esto se le conoce como *aproximación por diferencias finitas.* Otras aproximaciones de la derivada se formulan a partir de la expansión es series de Taylor de una función alrededor de algún punto x_0.

Sea:

$$f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \frac{h^3}{6} f^{(3)}(x_0) + \ldots \qquad (0.2)$$

Reacomodando términos despejando para $f'(x_0)$ tenemos:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f^{(2)}(x_0) - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(x_0) + \ldots$$
(0.3)

Donde el termino h^2 y cualquier otra potencia mayor se desprecian al ser muy pequeña.

Los métodos de diferencias finitas centradas son muy precisos y no tienen ninguna restricción ya que no presentan problemas con funciones no analíticas, máximos y mínimos entre otros, su uso es muy popular debido a su fácil implementación, por esta razón suele ser el algoritmo default usado por las librerías como **numdifftools** de Python.

Fórmulas de diferencias centrales

Si la función $f(x)$ puede ser evaluada entre los valores que yacen a la izquierda y a la derecha de x, entonces la mejor fórmula de dos puntos involucrará abscisas escogidas simétricamente a los lados de x.

Considere la función $f(x)$

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

Además, que existe un numero $c = c(x)$ tal que

$$f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{h^2 f^{(3)}(c)}{6}$$

Donde

$$\mathbf{O}(h^2) = \frac{h^2 f^{(3)}(c)}{6}$$

Es llamado **error de truncamiento.**

Es posible obtener aproximaciones numéricas de orden mayor al utilizar más términos de la expansión en series de potencia de Taylor.

Una aproximación de cuarto orden es dada con la formula siguiente:

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h} + \frac{f^{(5)}(c)h^4}{30}$$

Donde el error de truncamiento es

$$\mathbf{O}(h^4) = \frac{f^{(5)}(c)h^4}{30}$$

Derivada de paso complejo

Derivado complejo de pasos

La derivación de la aproximación de derivada en pasos complejos se logra reemplazando h por un número complejo en la expansión en series de Taylor visto en la sección anterior. La derivada de primer orden de pasos complejos evita el problema del error de redondeo con pasos pequeños porque no hay

sustracción. Sin embargo, la función de diferenciar necesita ser analítica. Este método no funciona si la función no soporta números complejos o implican funciones no analíticas tales como, por ejemplo: máximos y/o mínimos.

Librería Numdifftools

Numdifftools es una suite de herramientas escritas en Python para resolver problemas de diferenciación numérica de una o más variables. Las diferencias finitas son usadas de una manera adaptativa en conjunto con la metodología de la extrapolación de Richardson para maximizar la precisión del resultado.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Métodos convencionales

Se derivo la función $f(x) = sin(x)$ utilizando los métodos convencionales: Diferencias centradas, método complejo; utilizando diferentes órdenes y observando el error que presentan ante la solución exacta de la derivada.

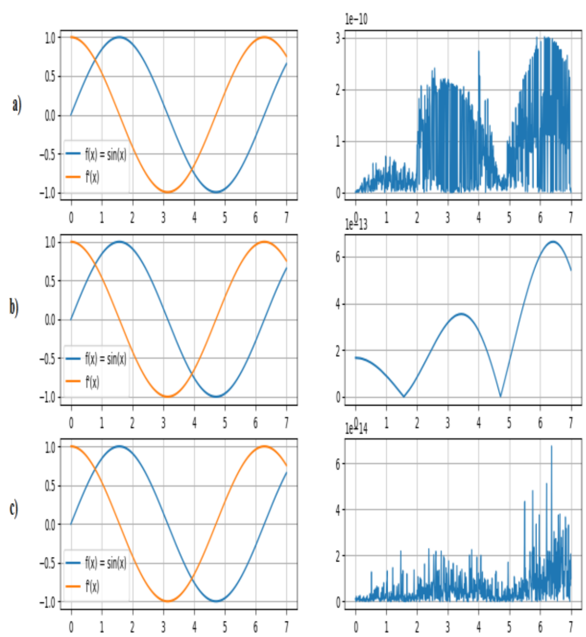


IMAGEN 2: a) Derivada utilizando una diferencia centrada de 4to orden, el error promedio es de 7.77e-11; b) Derivada utilizando un método complejo de 2do orden, el error promedio es de

2.70e-13; Derivada utilizando una diferencia centrada de orden 16, el error promedio es de 5.55435502899e-15.

Derivada de muestras de datos

Se calculará la derivada en un punto de interés usando una interpolación por mínimos cuadrados dados uno pares de datos de un experimento.

Tabla 1: Pares de datos de una medición.

x	$f(x)$
1.5	1.0628
1.9	1.3961
2.1	1.5432
2.4	1.7349
2.6	1.8423
3.1	2.0397

Se desea calcular la derivada en el punto $f'(2)$ se encontrará un polinomio que se continuo en los tres puntos más cercanos a al punto de interés $x = 2$, los cuales son: Que pasa por los puntos $x = 1.9,\ 2.1\, y\, 2.4$.

$$P(x) = b_1 + b_2 x + b_3 x^2$$

Por motivos de extensión del documento el método para encontrar el polinomio será omitido. El polinomio resultante es dado por:

$$P(x) = -0.1930x^2 + 1.5075x - 0.7714$$

Nótese que este polinomio solo modela el comportamiento en los tres puntos seleccionados y no en todos los datos.

La derivada del polinomio interpolado estará dada por:

$$P'(x) = -0.386x + 1.5075$$

Al sustituir el punto de interés $x = 2$ obtenemos:

$$P'(2) = -0.386(2) + 1.5075 = 0.7355$$

Ahora se compara el resultado de la derivada de $f'(2)$ si se hubiera ajustado la curva con todos los datos de la curva.

$$P_{all}(x) = -0.192568180544x^2 + 1.49784048913x - 0.752070267078$$

$$f_{all}'(2) = -0.38513636108x + 1.49784048913 = 0.727567767$$

Observamos que hay una diferencia de ocho milésimas entre el valor de la derivada obtenido usando solo tres puntos de los datos y usando todos los datos. Aunque el segundo polinomio representa de manera más exacta todos los datos, el acercamiento usando solo tres puntos puede ser más preciso para encontrar una la derivada.

Derivada de alto orden de un polinomio de Lagrange Interpolado

Para comprobar la precisión de una derivada de alto obtendremos una serie de puntos obtenidos de una función altamente no lineal y se interpolará utilizando el polinomio de Lagrange.

La función de la cual tomamos los puntos es igual a $f(x) = cos(\frac{x^2}{3} + 4)$, esto nos servirá para conocer la solución exacta de la derivada

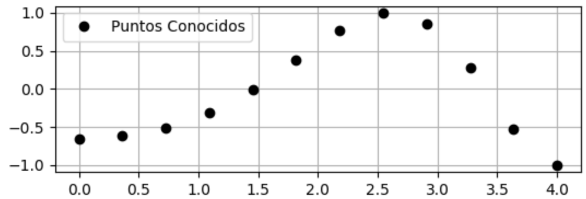


IMAGEN 3: Puntos conocidos a interpolar.

Usando las herramientas de interpolación de la librería Scipy aproximamos los puntos conocidos a un Polinomio de Lagrange.

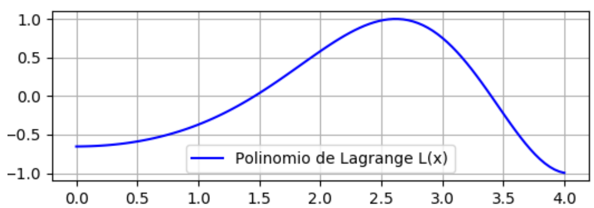


IMAGEN 4: Polinomio de Lagrange

Compararemos el error entre la aproximación por el polinomio y la función original, así como la derivada por un método central y un método complejo.

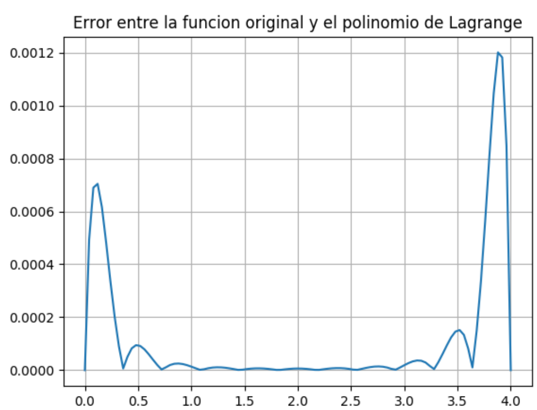


IMAGEN 5: Error entre la función original y el polinomio de Lagrange

El polinomio de Lagrange contiene 12 términos por cada uno de los puntos que lo definen.

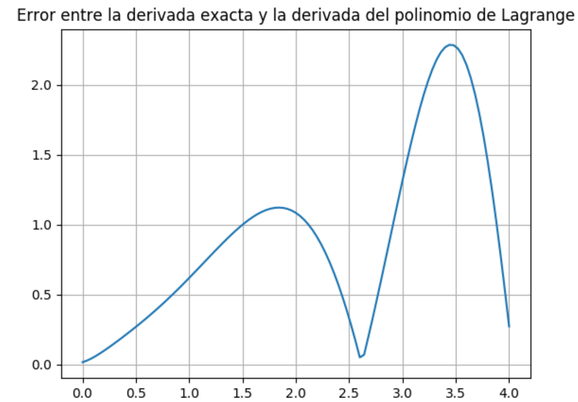
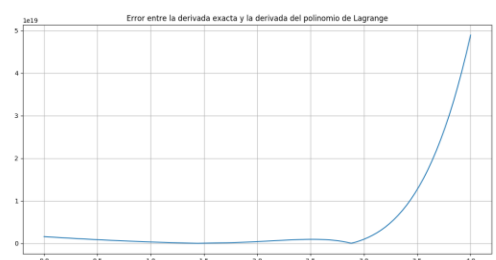


IMAGEN 5: Error entre la derivada exacta y la derivada obtenida al diferenciar numéricamente el polinomio de Lagrange.

En la imagen 5 observamos como el polinomio de Lagrange lleva un error acarreado el cual se observa en la imagen 4. El polinomio de Lagrange se derivó usando un método de diferencias centradas de 16vo orden. Se observa como el método falla en las zonas donde la función crece muy rápido, pero se acerca al valor real cerca del máximo local de la función original.

Utilizaremos un método complejo y reduciremos el paso a h=0.001 para observar la diferencia.

IMAGEN 6: Error entre la derivada exacta y la derivada utilizando un método complejo.



Aunque este método parece reducir el error en la mayor parte del intervalo falla considerablemente en la parte decreciente de la curva de manera divergente.

CONCLUSIONES

Se observa que los métodos complejos muestran una superioridad ante funciones analíticas bien definidas utilizando pasos muy pequeños (h) sin embargo los métodos de diferencias centradas mostraron ser más estables cuando las funciones crecen de manera rápida. La región donde los métodos son más precisos es cerca de los máximos y mínimos de las funciones.

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a la Universidad de Guanajuato por el interés de apoyar a los estudiantes que, como yo, estamos interesados por la ciencia y la investigación. También quiero agradecer a mi familia y amigos por el apoyo incondicional que he recibido por parte de ellos.

REFERENCIAS

[1] Griewank, A., & Walther, A. (2008). *Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation*. Society for Industrial and Applied Mathematics.

[2] Listmann, K. D., & Zhao, Z. (2013, July). A comparison of methods for higher-order numerical differentiation. In *Control Conference (ECC), 2013 European* (pp. 3676-3681). IEEE.

[3] Kopecky, Karen A., (2007). Numerical Differentiation: Lecture Notes. Eco 613/614

[4] Kiusalaas, J. (2013). *Numerical methods in engineering with Python 3*. Cambridge university press.