Métodos Computacionales

Derivadas

Agosto 14, 2023

S. Alexis Paz

Departamento de
QUÍMICA TEÓRICA
Y COMPUTACIONAL
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Nacional de Córdoba

¿$f'(x)$?

Podemos definir la derivada cómo

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

En el método de la secante, hicimos la aproximación:

paso

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

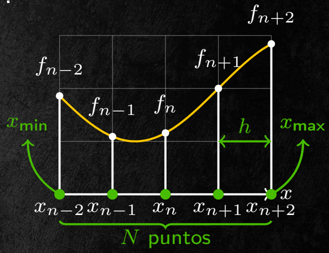
Este tipo de aproximaciones se conocen como "diferencia finita".

¿Que error tiene esta aproximación?

¿Existen otras aproximaciones posibles?

Discretizar / Grillar / Teselar

Si discretizamos x *uniformemente* entre a y b...



...con N puntos, entonces

$h = \dfrac{b-a}{N-1}$ es el paso de la grilla.

...con un paso h, entonces

hay $N = \dfrac{b-a}{h} + 1$ puntos en la grilla.

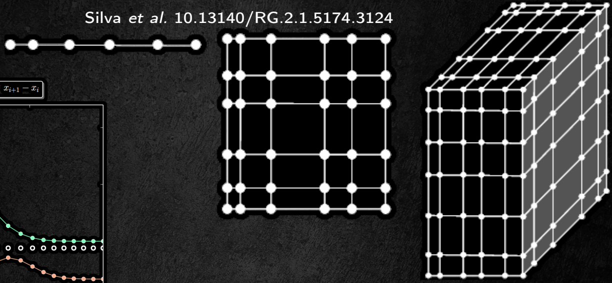
Notación

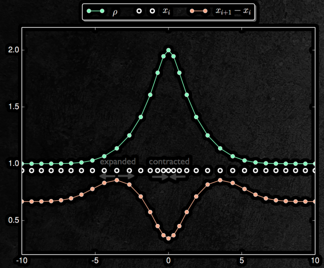
$$x_n = nh + a$$

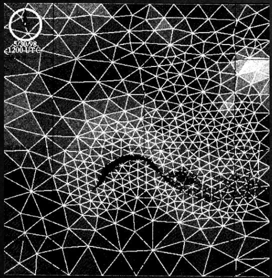
$$f_n = f(x_n)$$

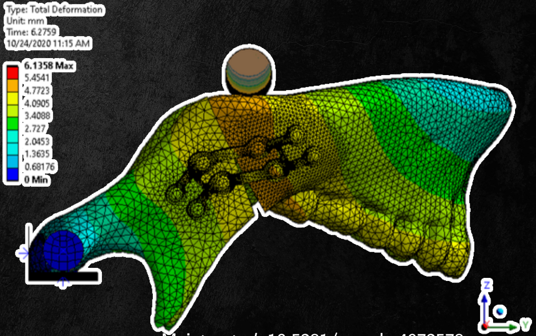
Ojo! $N \Leftarrow$ *int*$\left(\dfrac{b-a}{h} + 1\right)$ *pero entonces* $b \Leftarrow (N-1)h + a$

Silva *et al.* 10.13140/RG.2.1.5174.3124









Maintz *et al.* 10.5281/zenodo.4972578

Bacon *et al.* Mon. Weather Rev. 128 (2000) 2044

Notación de Landau / O-grande

Si $h(x)$ es una cota superior de $f(x)$ para $x > x_0$, es decir:

$$\left|f(x)\right| \leq M h(x) \quad ; \forall x \geq x_0,$$

entonces se escribe:

$$f(x) = O\big(h(x)\big) \text{ cuando } x \to \infty$$

y decimos que $f(x)$ es de orden de $h(x)$.

Por ejemplo, expando $f(x)$ alrededor de a:

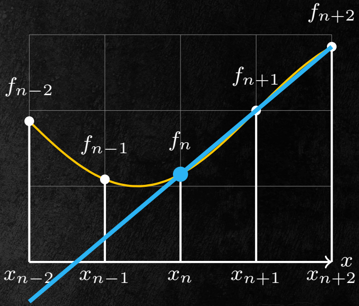
$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{f''(a)}{2}(x-a)^2 + O\Big((x-a)^3\Big)$$

o evalúo $f(x+h)$ usando una expansión desde x:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + O\Big(h^3\Big)$$

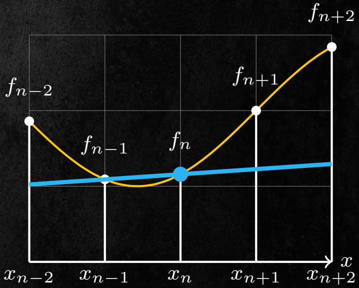
Hacia adelante:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$$



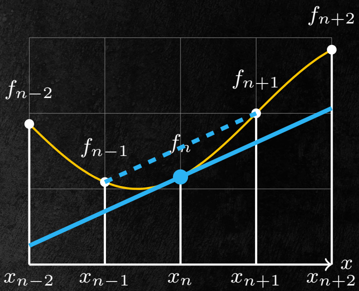
Hacia atrás:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h)$$



Tres puntos:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O\left(h^2\right)$$

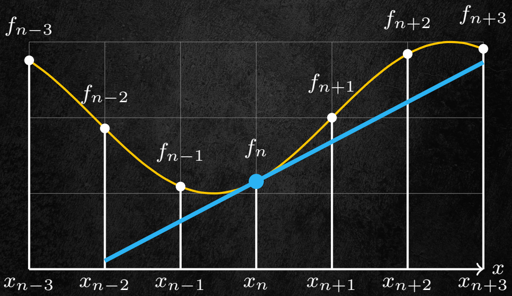


Segunda derivada:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O\left(h^2\right)$$

Cinco puntos:

$$f'(x) = \frac{1}{12h}\left[f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)\right] + O\left(h^4\right)$$



ERROR

Para un algoritmo iterativo (n es iteración)

ABSOLUTO: $\epsilon_n = |x_n - L|$

RELATIVO: $\tilde{\epsilon}_n = |x_n - L| / x_n$

```
a=1.e-16; b=1

print((a+b-b)/a)
# imprime 0.0

print((a+(b-b))/a)
# imprime 1.0
```

Para una aproximación discreta

TRUNCAMIENTO:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$$

Por usar una compu

PRECISIÓN / NUMÉRICO:

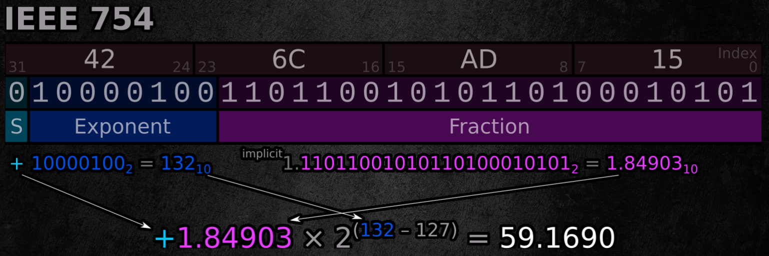
$$\pi = 3.141592653589793 + O(\epsilon_M)$$

$$\epsilon_M = 2^{-52} \approx 2.22\,10^{-16}$$

Épsilon de la máquina

Los floats de Python son números binarios de coma flotante de doble precisión (IEEE 754) que ocupan 64 bits.

```
a=2.
type(a)
# imprime <class 'float'>
```



Si el error numérico de $f(x+h)-f(x)$ es $\leq 2\epsilon_M$
Entonces el error total de la aproximación

$$f'(x) = \big(f(x+h)-f(x)\big)/h + O(h)$$

se puede estimar como $\sim 2\epsilon_M/h + ch$.