

Métodos Computacionales

Derivadas

Agosto 14, 2023

S. Alexis Paz



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



hecho con idiogram

¿ $f'(x)$?

Podemos definir la derivada como

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

En el método de la secante, hicimos la aproximación:

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

paso



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

¿Que error tiene esta aproximación?

¿Existen otras aproximaciones posibles?

Notación de Landau / O-grande

$h(x)$ es cota superior de $f(x)$ si existe x_0 y $M > 0$ tal que:

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

entonces decimos que $f(x)$ es de orden de $h(x)$ y se escribe:

$$f(x) = O(h(x))$$

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

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

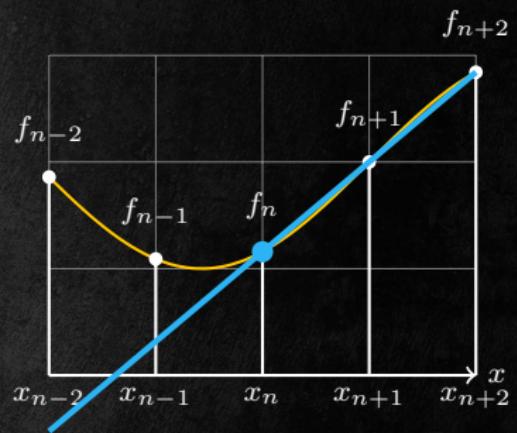
o evalúo $f(x + h)$ usando una expansión desde x :

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



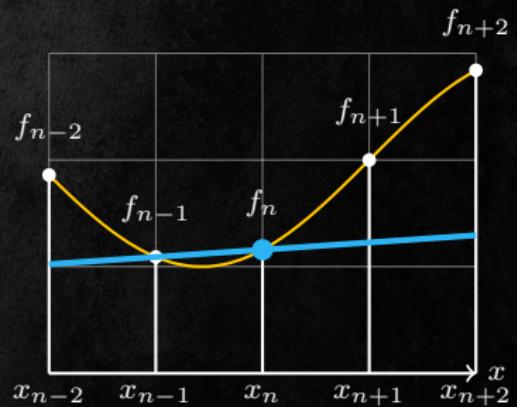
Hacia adelante:

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



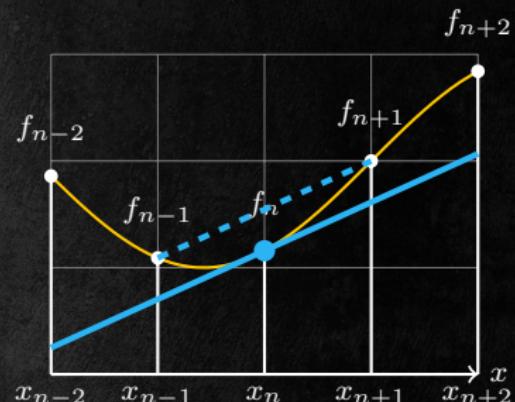
Hacia atrás:

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



Tres puntos:

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



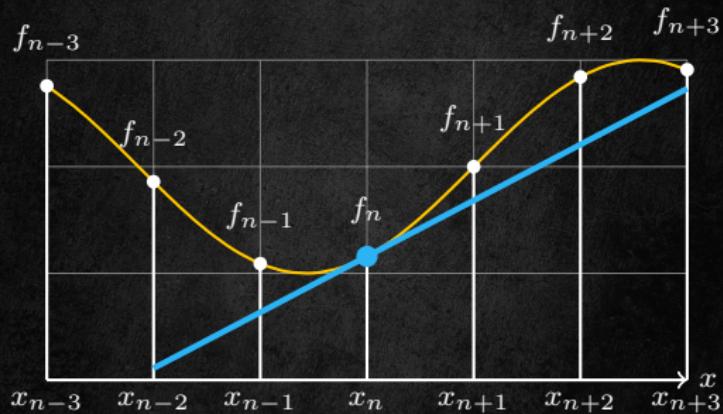
Segunda derivada:

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

¿Interpretación geométrica? Ver interpolación polinómica de Lagrange.

Cinco puntos:

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



¿Polinomio de Lagrange con más de 6 puntos? Oscilaciones...

Mejor Hermite o splines cúbicos

ERROR

Para un algoritmo iterativo (n es iteración)

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

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

Para una aproximación discreta

TRUNCAMIENTO:

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

```
a=1.e-16; b=1  
  
print((a+b-b)/a)  
# imprime 0.0  
  
print((a+(b-b))/a)  
# imprime 1.0
```

Por usar una compu

PRECISIÓN / NUMÉRICO:

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

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

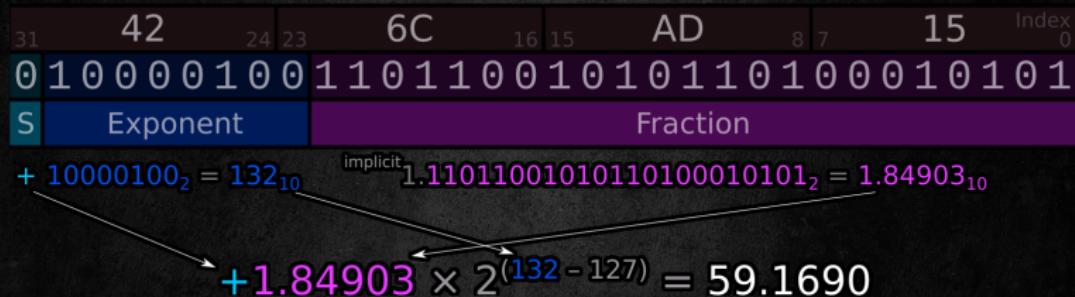


Épsilon de la máquina

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'>
```

IEEE 754



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

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

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