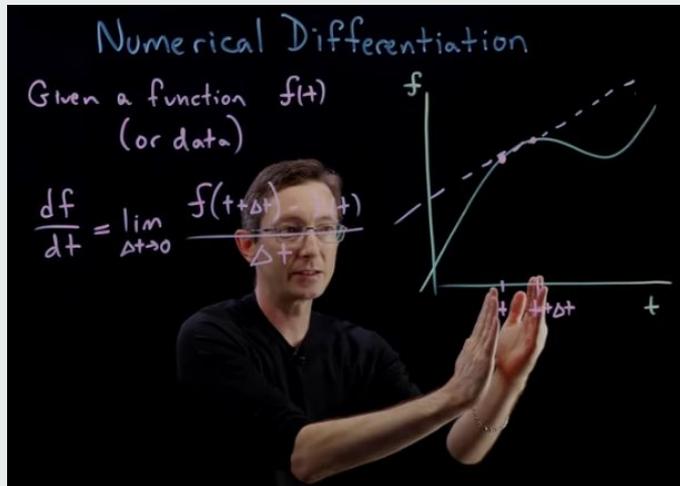




Clase 2:

Derivación numérica

Derivación numérica



Brunton, Steven

- Motivación en el marco de la materia
- Métodos de diferencias finitas
 - Progresiva
 - Regresiva
 - Central
- Errores de estimación de la derivada
- Derivada numérica aplicada a datos
- Uso de paquetes de Python
- Bibliografía

Motivación en el marco de la materia

- Sistemas dinámicos, autónomos, unidimensionales, regidos por ODE

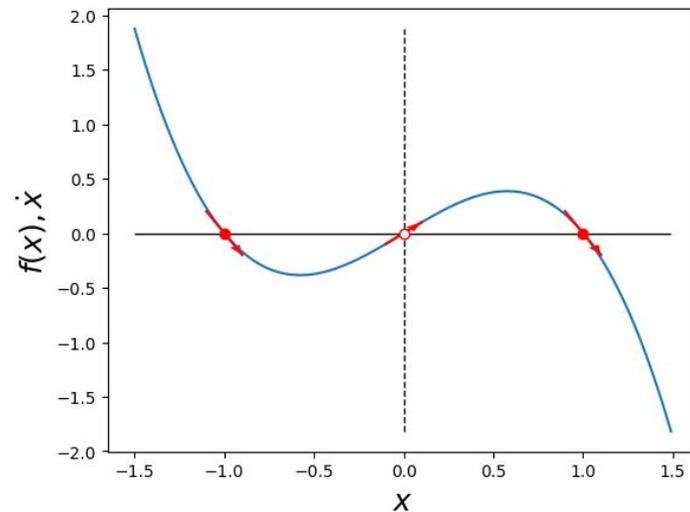
$$\dot{x} = dx/dt = f(x) \rightarrow \text{campo vector}$$

- Puntos fijos

$$\dot{x} = f(x) = 0 \rightarrow \text{raíces de } f(x)$$

- Estabilidad de puntos fijos

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x^*} = f'(x^*) \begin{cases} f'(x^*) > 0 & \text{inestable} \\ f'(x^*) < 0 & \text{estable} \end{cases}$$



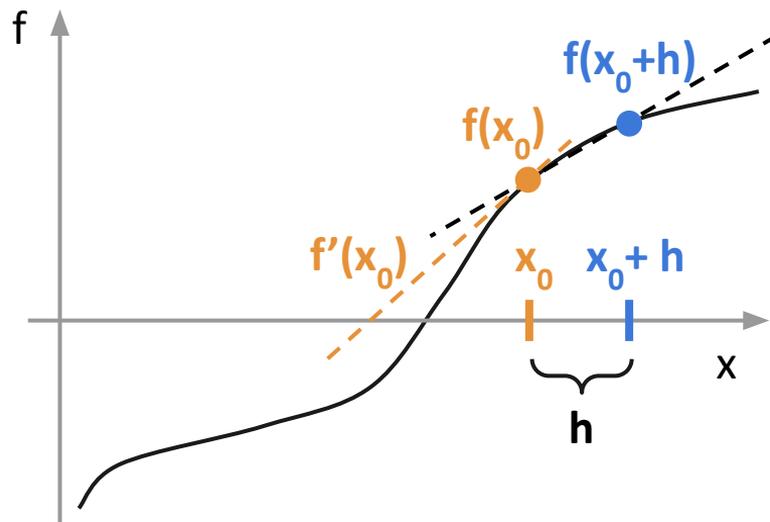
Derivada: definición matemática

Sea la función $f(x)$ continua y diferenciable en x_0 , la derivada de $f(x)$ en x_0 se define como el límite del cociente incremental

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

Cuánto más chico el h , la secante tiende a la derivada

La derivada de $f(x)$ en x_0 es la pendiente de la recta tangente a $f(x)$ en x_0



Métodos de diferencias finitas

- Método de la diferencia progresiva

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

- Método de la diferencia regresiva

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

- Método de la diferencia central

$$f'(x_0) \approx \frac{1}{2} \left(\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} + \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \right) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

Evalúo la función
en 2 puntos

Evalúo la función
en 3 puntos

Error de truncamiento

Se debe a que estamos truncando el desarrollo de Taylor a un cierto grado

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{6}(x - x_0)^3 + \dots$$

Para los métodos de la diferencia progresiva y de la diferencia regresiva, la estimación surge del polinomio de Taylor de grado 1, por lo que el error es

$$\left| \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) \right| \leq \frac{hK_2}{2}$$

Para el método de la diferencia central, la estimación surge del polinomio de Taylor de grado 2. El error es menor (si h es chico), dada la expresión

$$\left| \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - f'(x_0) \right| \leq \frac{h^2 K_3}{6}$$

Error de redondeo

Al evaluar la función tendré un error de estimación (redondeo de la máquina)

$$f(x) = \hat{f}(x) + e(x)$$

Esto hace que los métodos de diferencias finitas tengan error de redondeo

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - f'(x_0) = \frac{\hat{f}(x_0 + h) - \hat{f}(x_0)}{h} - f'(x_0) + \frac{e(x_0 + h) - e(x_0)}{h}$$

Si considero el error de redondeo acotado por un epsilon, entonces todos los métodos van a tener un error de redondeo proporcional a epsilon/h

Balance en h: que sea chico como para reducir el error de truncamiento pero no tan chico, para no tener un error de redondeo alto (la suma es el error total)

Derivada numérica aplicada a datos

Hasta ahora hablamos de derivar una función (**yo podía elegir el h**)

Qué pasa en realidad cuando trabajo con datos?

Qué forma tienen los datos?

$x = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ (lista, array)

Conozco la expresión que los describe?

“x” es una variable

x(t)?

Me puede llegar a interesar la derivada de los datos?

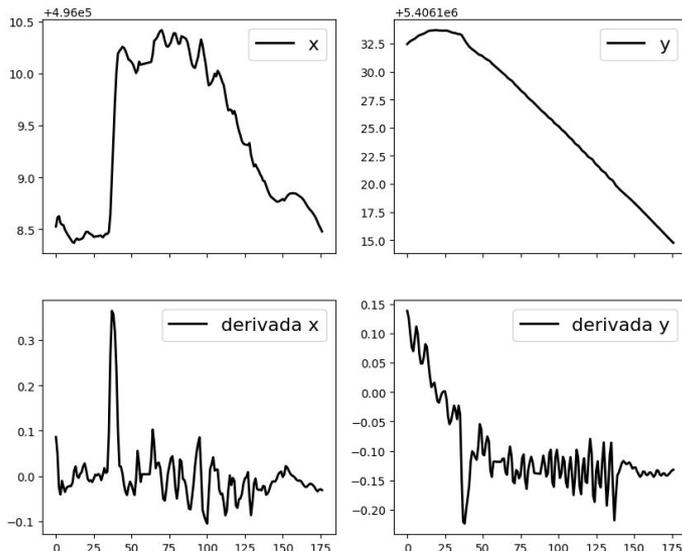
Nueva motivación para la derivada numérica:

$$\dot{x} = f(x)$$

Si tengo valores de “x” y de su derivada, puedo estimar la ODE que la describe!

Derivada numérica aplicada a datos

Vamos a ver un ejemplo en el colab en una base de datos pública de tránsito de peatones. Vamos a extraer las posiciones en “x” y en “y” y a calcular las derivadas



Cómo se comportan las derivadas?

Comparemos las fluctuaciones de acuerdo a lo esperado a partir de las posiciones

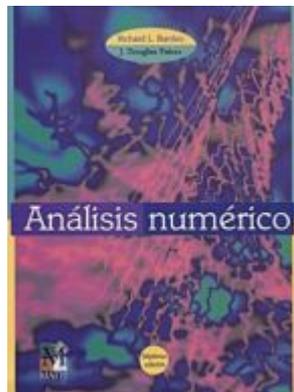
Hay un tema de ruido y robustez de la estimación que requiere resolución y vamos a ver más adelante

Funciones integradas en paquetes de Python

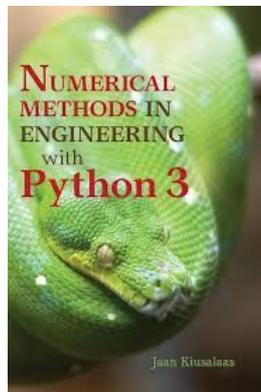
Numpy y Scipy tienen funciones para cálculo de derivada numérica

- `scipy.misc.derivative`
 - Usa el método de la diferencia central
 - Se aplica a funciones
 - Tiene problemas y será retirado en próximas versiones
- `numpy.gradient`
 - Usa el método de la diferencia central
 - Pide como entrada un array
- `numpy.diff`
 - Sólo calcula la diferencia entre elementos (n-1)

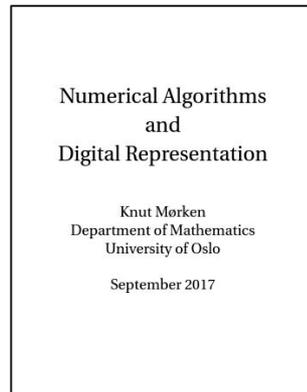
Bibliografía recomendada



Burden & Faires 2010



Kiusalaas 2013



Morken 2017

Google

stack overflow

towards
data science

YouTube

Brunton, Steven