Ayudantía III: Derivación Numérica

Física Computacional III — Licenciatura en Astrofísica con mención en Ciencia de Datos

Profesor: Omar Fernández
Ayudante: Nicolás Campos

April 15, 2025

Marco Teórico: Derivación Numérica

En cálculo diferencial, la derivada de una función $f(x)$ en un punto x se define como el límite:

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \tag{1}$$

En computación científica, este límite se aproxima utilizando métodos de *diferencias finitas*, ya que trabajar con $h \to 0$ es inviable en sistemas con precisión finita. Esto se debe a que los computadores utilizan representaciones numéricas discretas (por ejemplo, punto flotante), lo que impone límites a la exactitud de los cálculos.

La derivación numérica es una herramienta fundamental en física computacional porque permite estimar derivadas cuando no se dispone de una expresión analítica de la función, sino solo de datos discretos (como observaciones o resultados de simulaciones). Esta técnica es clave para el cálculo de gradientes, tasas de cambio, flujos, y otros conceptos derivados, todos esenciales en problemas de física y astrofísica.

Fórmulas Clásicas de Diferencias Finitas

- **Diferencia hacia adelante (forward):**

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

- **Diferencia hacia atrás (backward):**

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h) \tag{3}$$

- **Diferencia centrada (central):**

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \tag{4}$$

Cada esquema presenta un **error de truncamiento**, que depende de la magnitud de h y de las derivadas de orden superior de la función. Además, si h es muy pequeño, aparece el **error de redondeo**, generado por la precisión finita del computador. Esta doble fuente de error implica que existe un valor *óptimo* de h que minimiza el error total, concepto que se explora en la parte práctica de esta ayudantía.

Análisis del Error Total y h Óptimo

El error total asociado a la derivación numérica puede descomponerse como:

$$\varepsilon_{\text{total}}(h) = \varepsilon_{\text{aprox}}(h) + \varepsilon_{\text{redondeo}}(h) \tag{5}$$

Donde:

- $\varepsilon_{\text{aprox}} \approx \frac{h}{2} f''(x)$ para forward difference
- $\varepsilon_{\text{redondeo}} \approx \frac{\varepsilon_m}{h}$, siendo ε_m el error de máquina

Minimizando el error total, se obtiene el valor óptimo de h:

$$h_{\text{opt}} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_m}{f''(x)}} \tag{6}$$

Este resultado permite elegir inteligentemente el paso h para minimizar el error numérico en simulaciones computacionales.

Ejercicio 1: Cálculo teórico a mano

Calcular la derivada numérica de la función $f(x) = \ln(x)$ en $x_0 = 1.5$ utilizando la fórmula de diferencia centrada:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h},$$

para $h = 0{,}1$. Comparar con el valor exacto $f'(x_0) = \frac{1}{x_0}$.

Solución:

- $f(1.6) = \ln(1.6) \approx 0.4700$
- $f(1.4) = \ln(1.4) \approx 0.3365$
- Aproximación:
$$f'(1.5) \approx \frac{0.4700 - 0.3365}{2 \times 0.1} = \frac{0.1335}{0.2} = 0.6675$$
- Valor exacto:
$$f'(1.5) = \frac{1}{1.5} = 0.6667$$
- Error absoluto: $|0.6675 - 0.6667| \approx 8 \times 10^{-4}$

Extensión: Calcular también el error de redondeo y el error de aproximación teórico usando:

$$\varepsilon_{\text{aprox}} \approx \frac{h^2}{24} f'''(x), \quad \varepsilon_{\text{redondeo}} \approx \frac{\varepsilon_m}{h}$$

con $\varepsilon_m \approx 10^{-16}$ y $f'''(x) = \frac{2}{x^3}$.

Ejercicio 2: Gradiente de temperatura en un disco protoplanetario

Contexto

Un **disco protoplanetario** es una estructura de gas y polvo que orbita alrededor de una estrella joven. En estos discos ocurren procesos fundamentales para la formación de planetas. La temperatura del disco varía con la distancia radial, y su gradiente afecta la migración de planetas, la estabilidad del disco y la evolución del polvo.

Estudiar el **gradiente de temperatura** nos permite modelar mejor la física de estos sistemas y compararla con observaciones astronómicas (ej. datos de ALMA o VLT).

Modelo simplificado

El perfil radial de temperatura se puede modelar como:

$$T(r) = T_0 \left(\frac{r}{r_0}\right)^{-q}, \tag{7}$$

con $T_0 = 150$ K, $r_0 = 1$ AU y $q = 0.5$.

Objetivo

Calcular la derivada numérica dT/dr usando diferencias centradas y comparar con la derivada analítica:

$$\frac{dT}{dr} = -q\frac{T_0}{r_0} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{-q-1}. \tag{8}$$

Implementación en Python

El estudiante debe programar lo siguiente:

1. Crear arreglo de $r \in [1, 50]$ AU
2. Calcular $T(r)$ y su derivada numérica usando: $f'(r) \approx \frac{f(r+h)-f(r-h)}{2h}$
3. Comparar con la derivada analítica
4. Graficar ambas curvas y el error

Visualización adicional: Mapa 2D de Temperatura

Una forma útil de interpretar el perfil térmico del disco es generar un mapa bidimensional utilizando coordenadas polares. Se puede convertir la temperatura $T(r)$ a una imagen en coordenadas cartesianas con el siguiente esquema:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

R, Theta = np.meshgrid(np.linspace(1, 50, 300), np.linspace(0, 2*np.pi, 300))
T = 150 * (R / 1)**-0.5
X = R * np.cos(Theta)
Y = R * np.sin(Theta)

plt.pcolormesh(X, Y, T, shading='auto', cmap='inferno')
plt.colorbar(label='Temperatura [K]')
plt.title('Distribución de Temperatura en el Disco')
plt.axis('equal')
plt.xlabel('x [AU]')
plt.ylabel('y [AU]')
plt.show()
```

Esto permite obtener una imagen térmica del disco, útil para comparar visualmente con observaciones astronómicas.

Discusión

- Analizar la dependencia del error con el paso h
- Reflexionar sobre la importancia de estimar gradientes en discos para comprender su estructura y evolución