Universidad de Valparaíso
CHILE

FÍSICA COMPUTACIONAL II

Ayudante: Nicolás Gatica

Correo: nicolas.gatica@alumnos.uv.cl

DIFERENCIACIÓN NUMÉRICA

- ✓Derivadas
- ✓Diferencias finitas, adelantadas, atrasadas y centradas
- ✓Errores en estimación de derivadas
- ✓Derivadas de orden superior

DERIVACIÓN NUMÉRICA

- La operación inversa a la integración es la diferenciación o derivación.

- En el caso computacional, y por el mismo razonamiento de la integración, se trabaja con derivadas numéricas.

- En general, las derivadas se pueden resolver de forma analítica, sin embargo, hay situaciones donde resulta útil el resolverlas numéricamente, como puede ser el caso de las ecuaciones diferenciales.

<u>Nota:</u> Cuando tenemos funciones difíciles o imposibles de diferenciar analíticamente o cuando tenemos sólo valores discretos resulta necesario utilizar métodos de diferenciación numérica para calcular derivadas.

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Matemáticamente, la derivada representa el cambio de la variable dependiente respecto a la independiente.

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

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = \lim_{\Delta x\to 0} \frac{f(x+\Delta x, y) - f(x,y)}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y} \lim_{\Delta y\to 0} \frac{f(x, y+\Delta y) - f(x,y)}{\Delta y}$$

DERIVACIÓN NUMÉRICA

- La 1^{ra} derivada representa la pendiente tangente a la curva.

- La 2^{da} derivada representa la concavidad de la función.

- Un valor grande en la segunda derivada significa que tiene una concavidad muy pronunciada.

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Por otra parte, las derivadas parciales se usan en funciones que dependen de más de una variable.

$$\frac{\partial f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)}{\partial x_k} = \lim_{\Delta x_k \to 0} \frac{f(x_1, x_2, \dots, x_k + \Delta x_k, \dots, x_n) - f(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\Delta x_k}$$

Al calcular una derivada parcial, las variables que no dependen de la diferencial se tratan como constantes.

Antes de seguir, resulta necesario definir algunas cosas.

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Universidad de Valparaíso CHILE

Definición: Serie de Taylor.

Sea $f(x) \in \mathbb{R}$ (también válido para $\mathbb{C}$, pero con otras reglas) una función diferenciable en el entorno de un número x_0, se puede expresar como la siguiente serie de potencias:

$$f(x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n = \frac{f(x_0)}{0!} + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + ..$$

$$\dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + \cdots$$

Es importante tener en cuenta que al truncar la serie se obtiene un polinomio aproximado de la función entorno al punto x_0.

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Definición: Serie de Maclaurin.

En particular, cuando $x_0 = 0$:

$$f(x_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x)^n = \frac{f(x_0)}{0!} + \frac{f'(x_0)}{1!}(x) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x)^2 + ..$$

$$\dots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x)^n + \cdots$$

A este caso se le conoce como Serie de Maclaurin.

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Demostración:

$$T_N(f) = \frac{f(x_0)}{0!} + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \cdots$$

Si tomamos $T_N(f)(x_0)$, es decir, $x = x_0$

$$T_N(f)(x_0) = f(x_0) + f'(x_0)(x_0 - x_0) + \cdots$$
$$T_N(f)(x_0) = f(x_0)$$

Ahora, si derivamos una vez $T_N(f)$ respecto a x:

$$T'_N(f) = f'(x_0) + \frac{2f''(x_0)}{2}(x - x_0) + \frac{3f'''(x_0)}{6}(x - x_0)^2 + \cdots$$

DERIVACIÓN NUMÉRICA

$$T'_N(f) = f'(x_0) + f''(x_0)(x - x_0) + \frac{f'''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \cdots$$

Evaluando en $x = x_0$:

$$T'_N(f)(x_0) = f'(x_0) + f''(x_0)(x_0 - x_0) + 0 + \cdots$$

Luego:

$$T'_N(f)(x_0) = f'(x_0)$$

Y de manera análoga se puede extender hasta n derivadas.

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Volviendo a la diferenciación numérica, debemos recordar que el computador no puede calcular sumas o límites infinitos, ya que tiene memoria finita por lo que resulta útil obtener aproximaciones de estas.

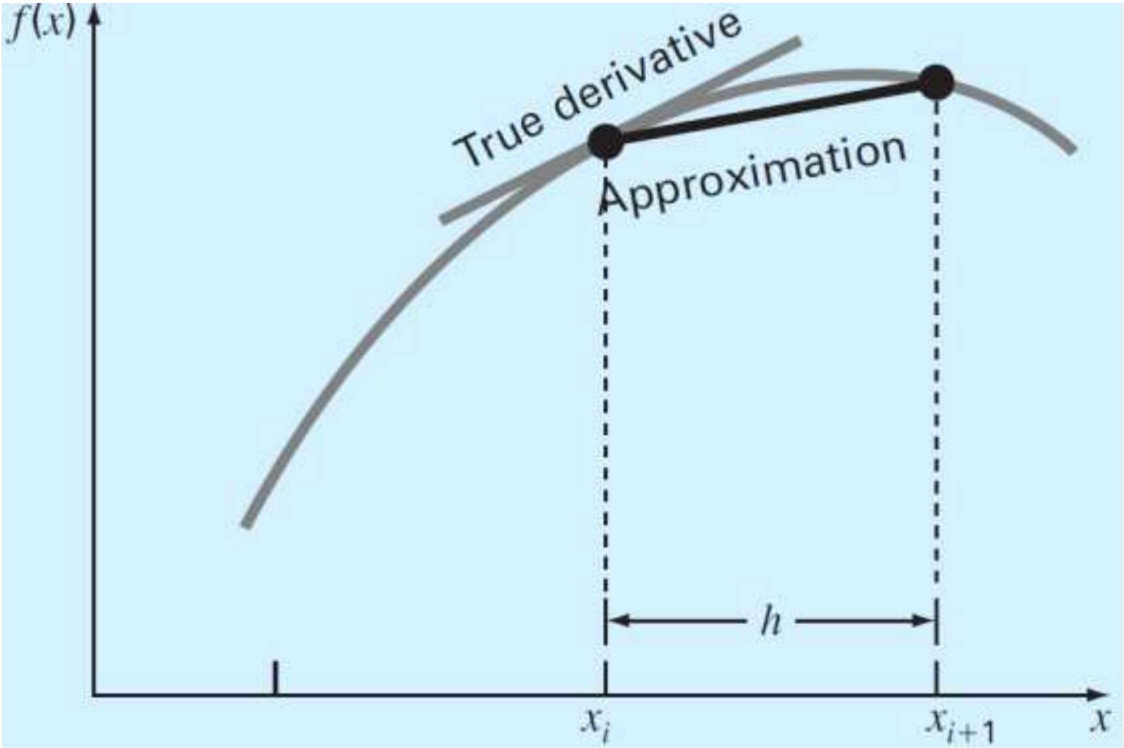
Para esto existen 3 métodos:

- Diferencias finitas adelantadas
- Diferencias finitas atrasadas
- Diferencias finitas centradas

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Diferencia finita adelantada:

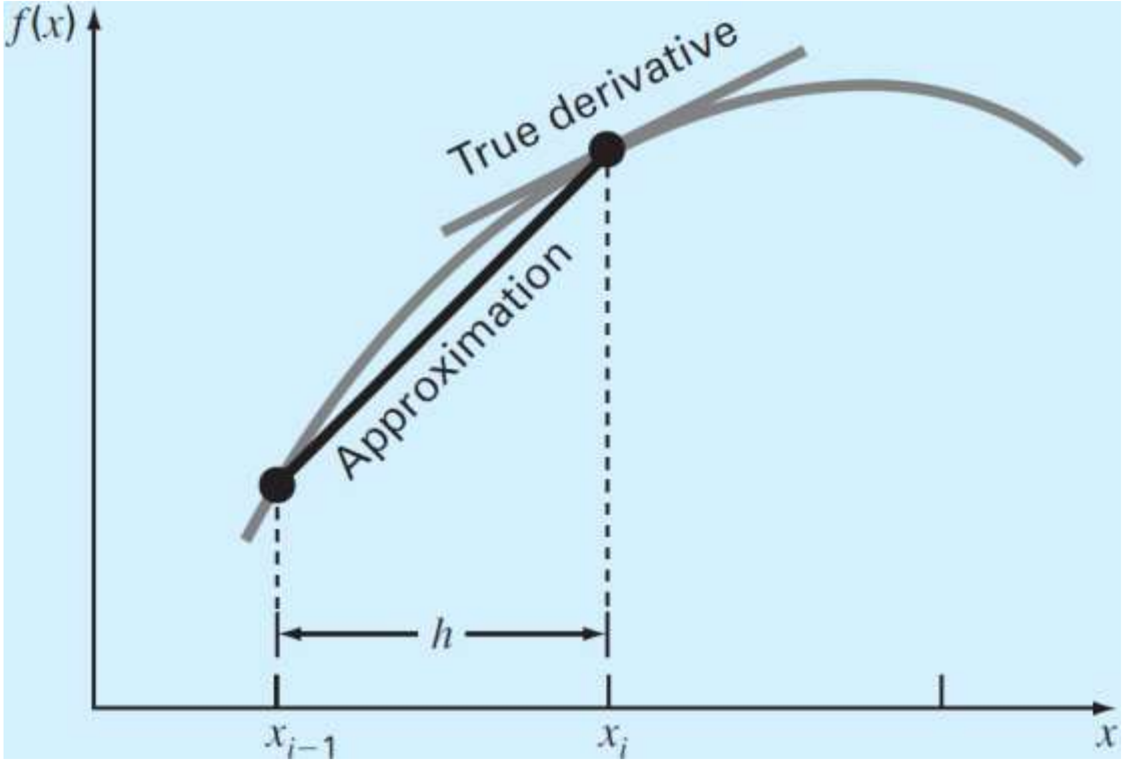
$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} - O(h) \;\; ; \quad O(h)\ es\ el\ error\ con\ orden\ de\ magnitud\ h.$$



DERIVACIÓN NUMÉRICA

Diferencia finita atrasada:

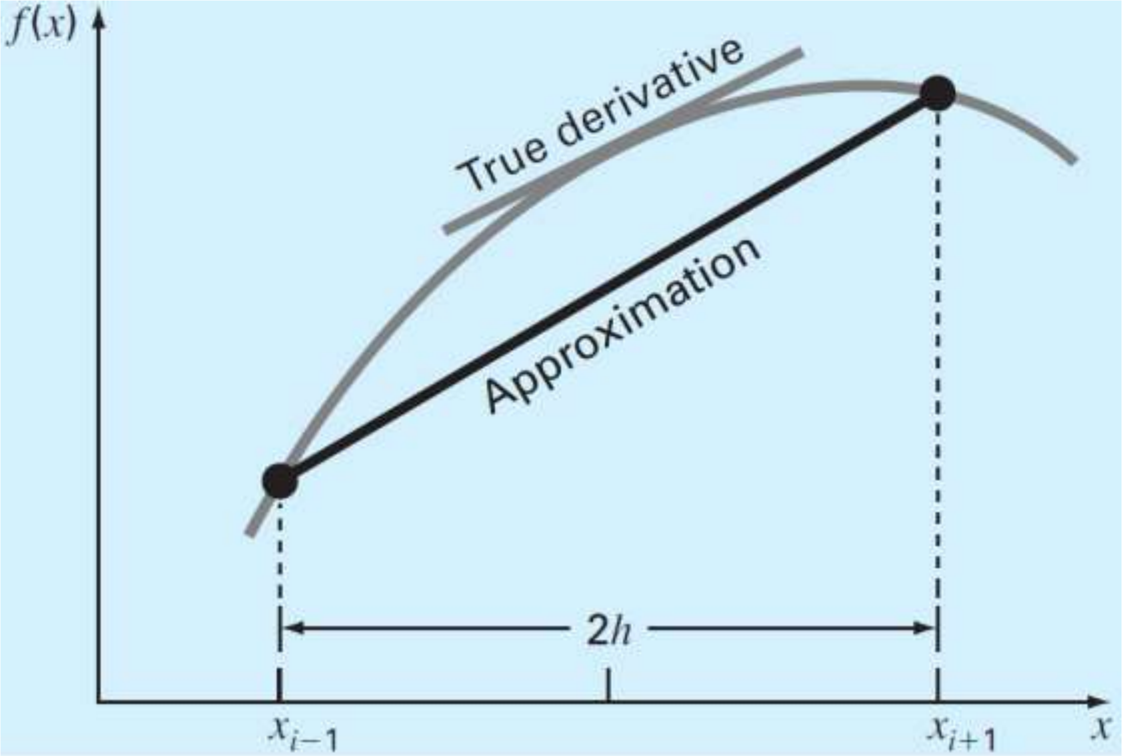
$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + O(h)$$



DERIVACIÓN NUMÉRICA

Diferencia finita centrada:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - O(h^2) \quad ; \quad O(h^2)\ es\ el\ error\ con\ orden\ de\ magnitud\ h^2$$



DERIVACIÓN NUMÉRICA

Primera derivada:

Adelantada:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad ; \quad Magnitud\ del\ error: h$$

Atrasada:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \quad ; \quad Magnitud\ del\ error: h$$

Centrada:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad ; \quad Magnitud\ del\ error: h^2$$

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Primera derivada más exacta:

Adelantada:

$$f'(x_0) = \frac{4f(x_0 + h) - 3f(x_0) - f(x + 2h)}{2h} \quad ; \; Magnitud\ error: h^2$$

Atrasada:

$$f'(x_0) = \frac{3f(x_0) - 4f(x_0 - h) + f(x_0 - 2h)}{2h} \quad ; \; Magnitud\ error: h^2$$

Centrada:

$$f'(x_0) = \frac{8f(x_0 + h) - 8f(x_0 - h) - f(x_0 + 2h) + f(x_0 - 2h)}{12h} ; Magnitud\ error: h^4$$

DERIVACIÓN NUMÉRICA

Segunda derivada:

Adelantada:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2} \quad ; \quad Magnitud\ de\ error: h$$

Atrasada:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 2f(x_0 - h) + f(x_0)}{h^2} \quad ; \quad Magnitude\ error: h$$

Centrada:

$$f''(x_0) == \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} \quad ; \quad Magnitud\ de\ error: h^2$$

SPLINES

✓<u>Ejercicio 1:</u>

Considere la función:

$$f(x) = 3e^{x}\sin(x^3)$$

a) Calcular $f'(4)$ por diferencias finitas adelantadas, atrasadas y centradas.

b) Comparar cada uno de los tres resultados anteriores con el valor real $f'(4) = 3231.52905$.

SPLINES

✓Ejercicio 2:

Considere la función:

$$f(x) = 3e^{x}\sin(x^{3})$$

a) Calcular $f'(4)$ por diferencias finitas adelantadas, atrasadas y centradas con mayor exactitud que el ejercicio anterior.

b) Comparar cada uno de los tres resultados anteriores con el valor real $f'(4) = 3231.52905$.

SPLINES

✓<u>Ejercicio 3:</u>

Considere la función:

$$f(x) = 3e^{x}\sin(x^{3})$$

a) Calcular $f''(4)$ por diferencias finitas adelantadas, atrasadas y centradas.

b) Comparar cada uno de los tres resultados anteriores con el valor real $f''(4) = -339348.86643$.