

Curso de Física Computacional

Diferenciación numérica

M. en C. Gustavo Contreras Mayén

`curso.fisica.comp@gmail.com`

Diferenciación numérica

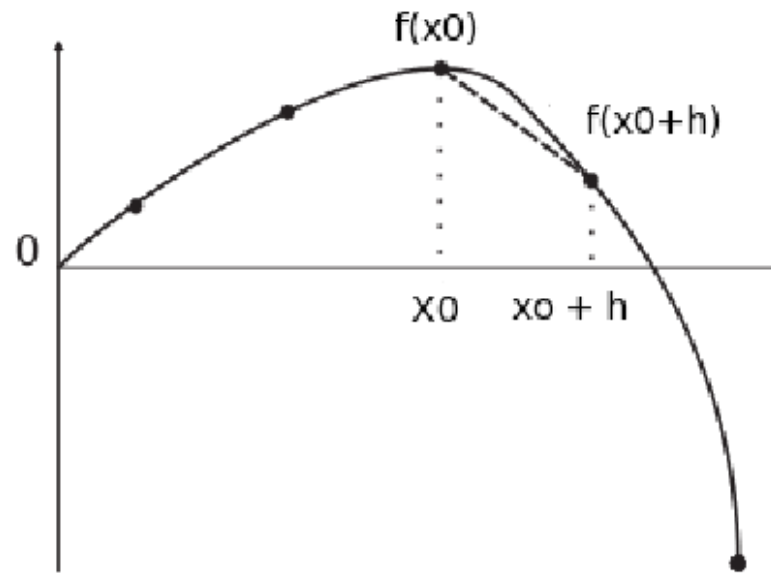
Consideremos una función $f(x)$, nuestro interés será evaluar la primera derivada de esta función en el punto $x = x_0$

Si conocemos los valores de f en $x_0 - h$, $x_0 + h$, donde h es el tamaño del intervalo entre dos puntos consecutivos en el eje x , entonces podremos aproximar $f'(x_0)$ mediante un gradiente de interpolación lineal A, B o C.

Diferencias hacia adelante

Aproximación por A

$$f'(x_0) = \frac{f(a) - f(b)}{h}$$



Diferencias hacia atrás

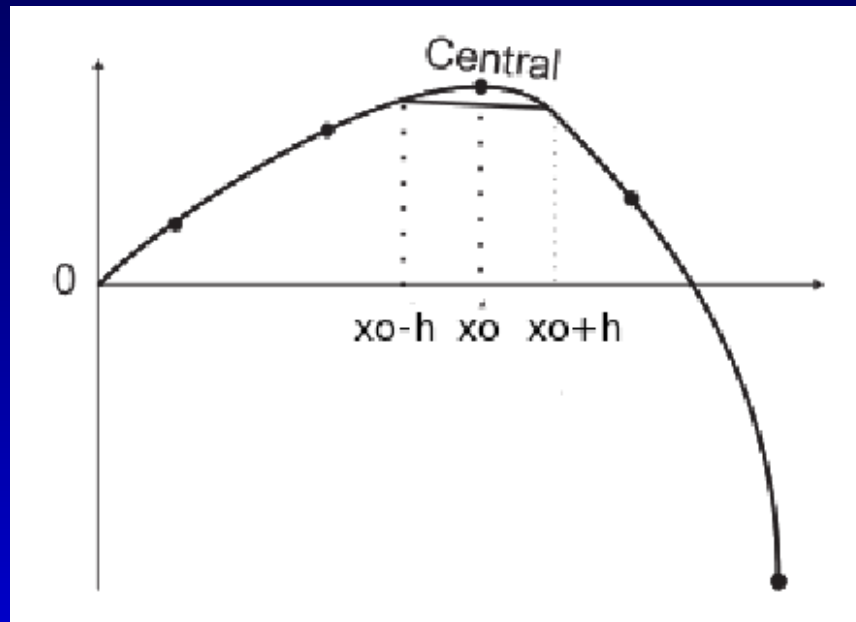
Aproximación por B

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

Diferencias centrales

Aproximación por C

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



Solución por Serie de Taylor

Cuando tenemos una función que se representa por puntos discretos, la aproximación que podemos hacer, es mediante una interpolación.

De manera análoga al caso de la integración, existen fórmulas de diferenciación numérica si derivamos las fórmulas de interpolación.

Continuamos

Para una derivada de orden p , se requieren de al menos $p + 1$ datos, para obtener una aproximación por diferencias. Veamos el caso para $f'_i = f'(x_i)$ usando

$f_i = f(x_i)$ y $f_{i+1} = f(x_{i+1})$. Los valores de f en todos los puntos distintos de x_i se desarrollan en una serie de Taylor.

La serie

Haciendo el desarrollo de Taylor de f_{i+1} alrededor de x_i , es:

$$f_{i+1} = f_i + hf'_i + \frac{h^2}{2}f''_i + \frac{h^3}{6}f'''_i + \frac{h^4}{24}f^{iv}_i + \dots$$

Serie truncada

Al truncar luego del primer término, la ecuación anterior es la aproximación por diferencias hacia adelante:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + O(h)$$

(2)

$$O(h) = -\frac{h}{2}f''_i$$

El término $O(h)$ indica que el error es aproximadamente proporcional al intervalo h de la retícula. El error también es proporcional a la segunda derivada f'' .

Aproximación por diferencias hacia atrás

La aproximación por diferencias hacia atrás de la primera derivada, utilizando f_{i-1} y f_i , se estima de la misma forma que la anterior. El desarrollo de Taylor de f_{i-1} es:

$$f_{i-1} = f_i - hf'_i + \frac{h^2}{2}f''_i - \frac{h^3}{6}f'''_i + \frac{h^4}{24}f^{iv}_i - \dots$$