Física Computacional

Escuela de Física

M.R.Fulla[1]

[1]Escuela de Física, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

marlonfulla@yahoo.com- Oficina:21-408

https://sites.google.com/view/fiscomunalmed/

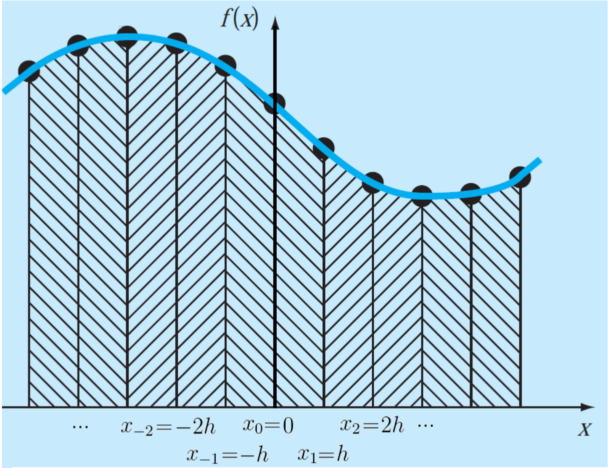
October 19, 2023

Gran mayoría de sistemas físicos:

- Determinación de raíces
- Diferenciación
- Integración (Cuadratura)

Objetivo: supongamos que deseamos conocer $f'(0)$ de una $f(x)$ $\rightarrow$ resultados generalizables a otras x mediante una traslación.

Diferenciación Numérica



$$f_n = f(x_n) \qquad x_n = nh \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$$

Diferenciación Numérica

Usando series de Taylor $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n$ alrededor de x_0:

$$f(x) = f + xf' + \frac{x^2}{2!}f'' + \frac{x^3}{3}f''' + \ldots \qquad f, f', f''|_{x_0=0}$$

Si calculamos:

$$f_{\pm 1} = f \pm hf' + \frac{h^2}{2}f'' \pm \frac{h^3}{6}f''' + \mathcal{O}(h^4) \tag{1}$$

$$f_{\pm 2} = f \pm 2hf' + 2h^2 f'' \pm \frac{4h^3}{3}f''' + \mathcal{O}(h^4) \tag{2}$$

Diferenciación Numérica

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

usando las ecuaciones (1):

$$f_1 - f_{-1} = 2hf' + 2\frac{h^3}{6}f''' + \mathcal{O}(h^4)$$

$$\rightarrow f' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}f''' + \mathcal{O}(h^3)$$

Si $h \rightarrow 0$, entonces:

Derivada por Método de Tres Puntos

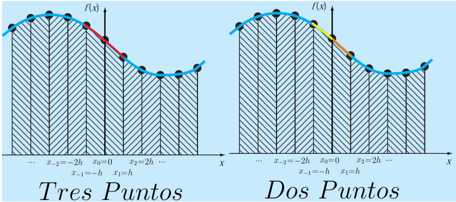
$(x_{-1} = -h,\ x_0 = 0,\ x_1 = h))$:

$$\boxed{f' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}} \tag{3}$$

Exacta para polinomios de grado 2.

Diferenciación Numérica

Derivada por Método de Dos Puntos



De las ecuaciones (1):

$$f_1 = f_0 + hf' + \mathcal{O}(h^2) \qquad \text{y} \qquad f_{-1} = f_0 - hf' + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\boxed{f' = \frac{f_1 - f_0}{h} + \mathcal{O}(h)} \qquad \text{(Adelante)}$$

$$\boxed{f' = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} + \mathcal{O}(h)} \qquad \text{(Atrás)}$$

Diferenciación Numérica

Es posible mejorar la fórmula de tres puntos introduciendo más términos:

de las ecuaciones (2):

$$f_2 = f_0 + 2hf' + 2h^2f'' + \frac{4}{3}h^3f''' + \mathcal{O}(h^4)$$

$$f_{-2} = f_0 - 2hf' + 2h^2f'' - \frac{4}{3}h^3f''' + \mathcal{O}(h^4)$$

Sustrayéndolas:

$$f_2 - f_{-2} = 4hf' + \frac{8}{3}h^3f''' + \mathcal{O}(h^4) \tag{4}$$

Diferenciación Numérica

de las ecuaciones (1):

$$f_1 = f_0 + hf' + \frac{h^2}{2}f'' + \frac{h^3}{6}f''' + \mathcal{O}(h^4)$$

$$f_{-1} = f_0 - hf' + \frac{h^2}{2}f'' - \frac{h^3}{6}f''' + \mathcal{O}(h^4)$$

Sustrayéndolas:

$$f_1 - f_{-1} = 2hf' + \frac{h^3}{3}f''' + \mathcal{O}(h^4)$$

junto con el resultado (4):

Derivada por el Método de 5 puntos:

$$\boxed{f' = \frac{1}{12h}[f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2] + \mathcal{O}(h^4)} \tag{5}$$

Diferenciación Numérica

También es posible calcular derivadas de orden superior, por ejemplo, si usamos las ecuaciones (1) y las sumamos, se obtiene:

$$f_1 + f_{-1} = 2f_0 + h^2 f'' + \mathcal{O}(h^4)$$

de donde:

$$f'' = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^4)$$

Derivada de Segundo Orden Por Método de 3 Puntos

$$\boxed{f'' = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}} \tag{6}$$

Actividad

1. Demostrar las siguientes relaciones generalizadas para el cálculo aproximado de derivadas utilizando expansión en series de Taylor:

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Derivada por Método de Tres Puntos

$(x_{-1} = x - h,\ x_0 = x,\ x_1 = x + h))$:

$$f'(x) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \tag{7}$$

Derivada por Método de dos Puntos $(x_{-1} = x - h,\ x_0 = x$, y $x_1 = x + h)$:

$$f'(x) = \frac{f_1 - f_0}{h} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \textit{Adelante} \tag{8}$$

$$f'(x) = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad \textit{Atrás} \tag{9}$$

Derivada por el Método de 5 puntos:

$$f'(x) = \frac{1}{12h}[f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2] = \\ \frac{1}{12h}[f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)] \tag{10}$$

Derivada de Segundo Orden Por Método de 3 Puntos

$$f''(x) = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \tag{11}$$

Actividad

Otras fórmulas para derivadas de primer, segundo y tercer orden por los métodos de 4 y 5 puntos:

	4 Puntos	5 Puntos
hf'	$\pm\frac{1}{6}(-2f_{\mp 1} - 3f_0 + 6f_{\pm 1} - f_{\pm 2})$	$\frac{1}{12}(f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2)$
$h^2 f''$	$f_{-1} - 2f_0 + f_1$	$\frac{1}{12}(-f_{-2} + 16f_{-1} - 30f_0 + 16f_1 - f_2)$
$h^3 f'''$	$\pm(-f_{\mp 1} + 3f_0 - 3f_{\pm 1} + f_{\pm 2})$	$\frac{1}{2}(-f_{-2} + 2f_{-1} - 2f_1 + f_2)$

Nota: para valores de x cualquiera, realizar la traslación

Actividad

2. Escribir un programa en lenguaje FORTRAN para calcular la derivada numérica de una función en un punto x.

3. Tome como ejemplo las funciones trigonométricas seno y coseno y grafíquelas (esto es, construya una tabla con valores igualmente espaciados de x en la primera columna y en las otras, la correspondiente derivada en ese punto utilizando las diferentes fórmulas presentadas). Utilice para ese propósito MATLAB u OCTAVE.