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 24, 2023

Derivada por Método de Tres Puntos

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

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

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

$$f'(x) = \frac{f_1 - f_0}{h} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \textit{Adelante} \tag{2}$$

$$f'(x) = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad \textit{Atrás} \tag{3}$$

Derivada por el Método de 5 puntos:

$$
\begin{aligned}
f'(x) = \frac{1}{12h}[f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2] = \\
\frac{1}{12h}[f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)]
\end{aligned}
\tag{4}
$$

Derivada de Segundo Orden Por Método de 3 Puntos

$$
f''(x) = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \tag{5}
$$

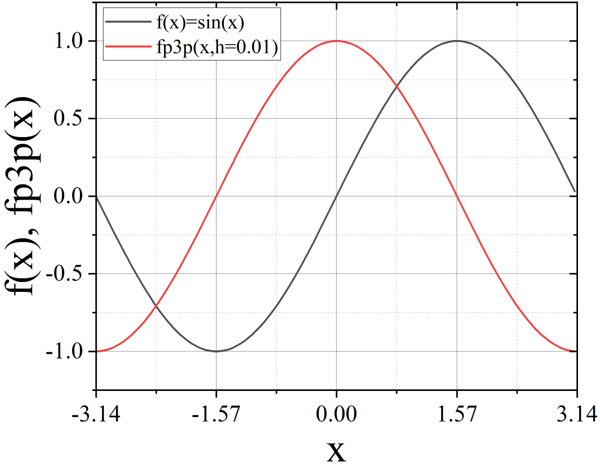
Otras fórmulas para derivadas de primer, segundo y tercer orden por los métodos de 4 y 5 puntos:

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

Nota: para valores de x cualquiera, realizar la traslación

Diferenciación Numérica

Ejemplo $f(x) = sen(x)$



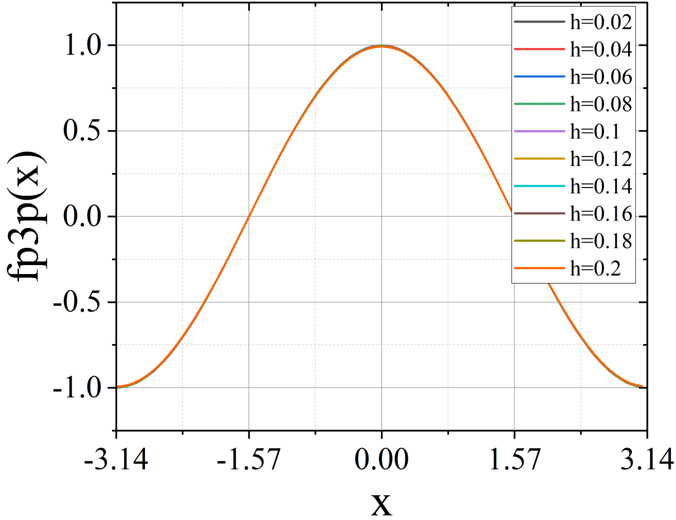
Diferenciación Numérica

```fortran
PROGRAM diff
IMPLICIT NONE
REAL, PARAMETER::PI=4.0*atan(1.0)
REAL::xini,xend,xstep,x,h,f,fp3p
INTEGER::i
INTEGER,PARAMETER::nx=200

h=0.01
xini=-pi
xend=pi
xstep=(xend-xini)/nx
OPEN(UNIT=1,FILE="der.txt")
DO i=1,nx
x=xini+xstep*(i-1)
WRITE(1,*) x,f(x),fp3p(x,h),f2p3p(x,h)
ENDDO
WRITE(*,*) "Programa Ejecutado..."
END PROGRAM
```

```fortran
REAL FUNCTION f(x)
IMPLICIT NONE
REAL::x
f=sin(x)
END FUNCTION

REAL FUNCTION fp3p(x,h)
IMPLICIT NONE
REAL::x,h,f
fp3p=(f(x+h)-f(x-h))/(2*h)
END FUNCTION

REAL FUNCTION f2p3p(x,h)
IMPLICIT NONE
REAL::x,h,f
f2p3p=(f(x+h)-2*f(x)+f(x-h))/h**2
END FUNCTION
```

Diferenciación Numérica

Ejemplo $f(x) = sen(x)$



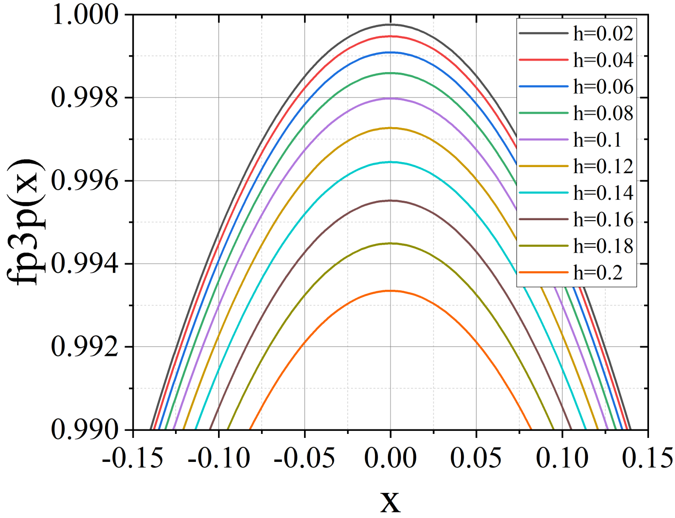
Diferenciación Numérica

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

```fortran
PROGRAM diff
IMPLICIT NONE
REAL, PARAMETER::PI=4.0*atan(1.0)
REAL::xini,xend,xstep,x,h,f,fp3p
REAL::hini,hend,hstep
INTEGER::i,j
INTEGER,PARAMETER::nx=100,nh=10
REAL,DIMENSION(nx,nh+1)::res

hini=0.02
hend=0.2
hstep=(hend-hini)/nh
xini=-pi
xend=pi
xstep=(xend-xini)/nx
OPEN(UNIT=1,FILE="der.txt")

DO j=2,nh+1
h=hini+(j-1)*hstep
DO i=1,nx
x=xini+xstep*(i-1)
res(i,1)=x
res(i,j)=fp3p(x,h)
ENDDO
ENDDO

DO i=1,nx
WRITE(1,2)(res(i,j),j=1,nh+1)
ENDDO
2 FORMAT(11F12.5)
WRITE(*,*) "Programa Ejecutado..."
END PROGRAM

REAL FUNCTION f(x)
IMPLICIT NONE
REAL::x
f=sin(x)
END FUNCTION

REAL FUNCTION fp3p(x,h)
IMPLICIT NONE
REAL::x,h,f
fp3p=(f(x+h)-f(x-h))/(2*h)
END FUNCTION
```

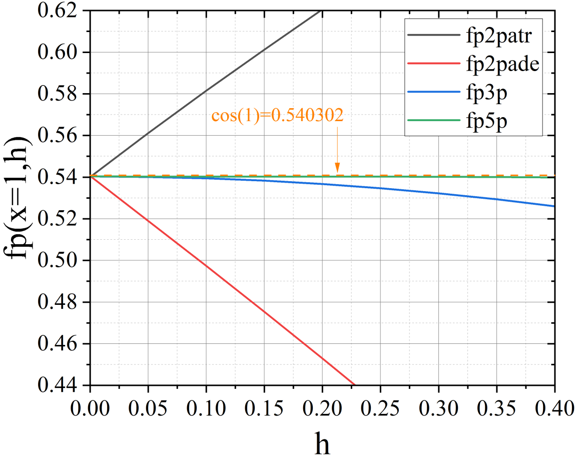
Diferenciación Numérica

Ejemplo $f(x) = sen(x)$



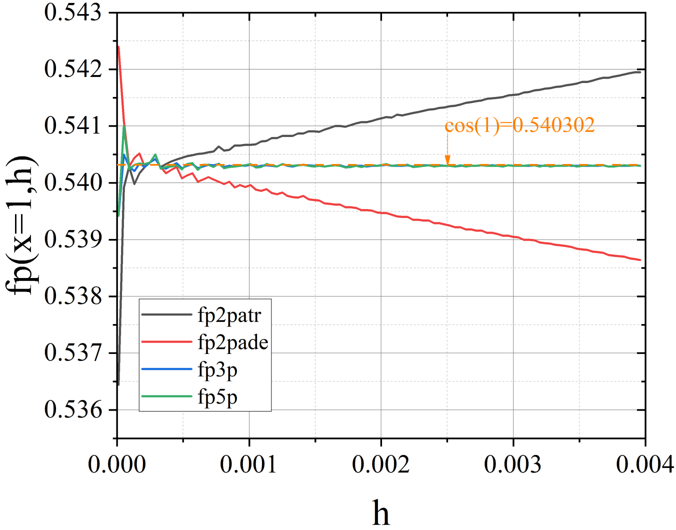
Diferenciación Numérica

Otro ejemplo: cálculo de $f'(1) = \frac{d}{dx}(sen(x))|_{x=1}$ $(f(x) = sen(x))$



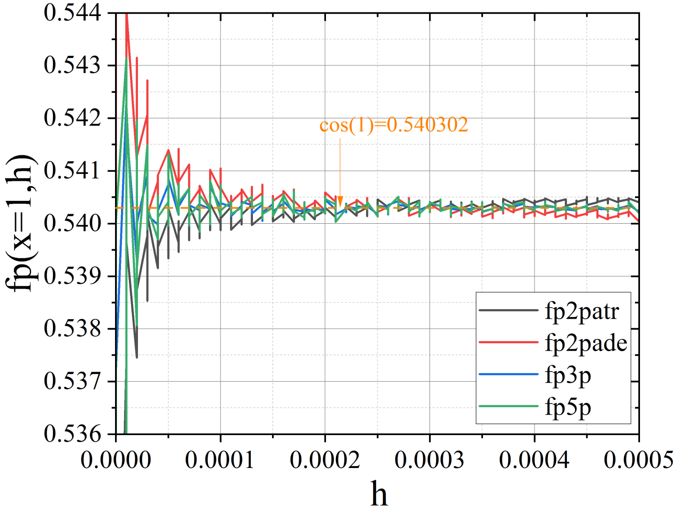
Diferenciación Numérica

Otro ejemplo: cálculo de $f'(1) = \frac{d}{dx}(sen(x))|_{x=1}$ $(f(x) = sen(x))$



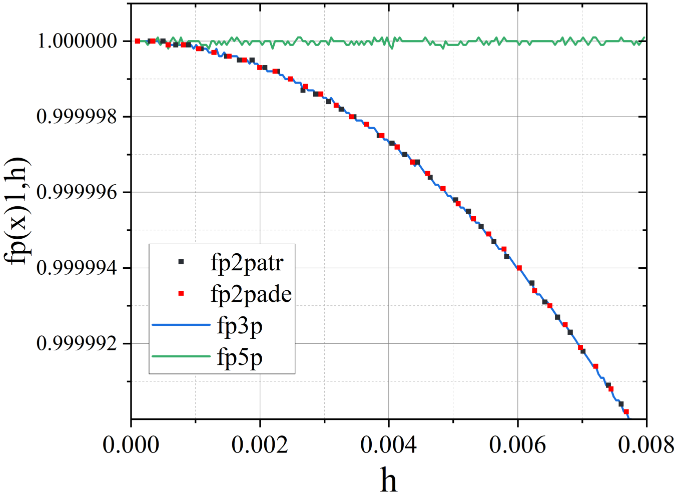
Diferenciación Numérica

Otro ejemplo: cálculo de $f'(1) = \frac{d}{dx}(sen(x))|_{x=1}$ $(f(x) = sen(x))$



Diferenciación Numérica

Otro ejemplo: cálculo de $f'(0) = \frac{d}{dx}(sen(x))|_{x=0}$ $(f(x) = sen(x))$



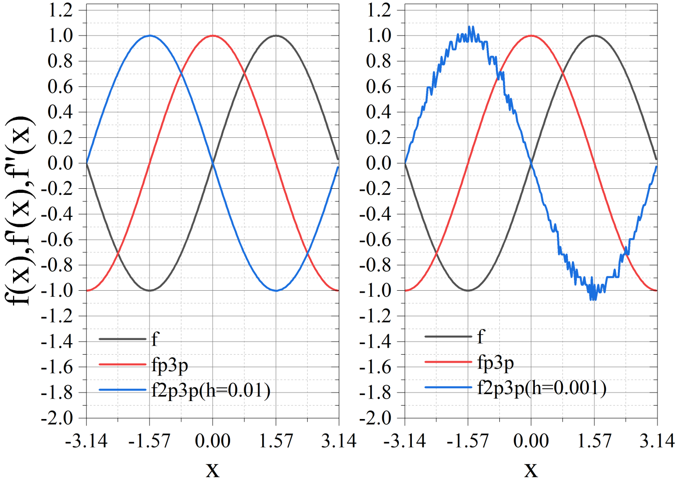
Diferenciación Numérica

Otro ejemplo: cálculo de $f'(0) = \frac{d}{dx}(sen(x))|_{x=0}$ $(f(x) = sen(x))$

	A(X)	B(Y)	C(Y)	D(Y)	E(Y)
Long Name					
Units					
Comments		fp2patr	fp2pade	fp3p	fp5p
Sparklines					
1	1E-5	1	1	1	1
2	5.0995E-4	1	1	1	1
3	0.00101	1	1	1	1
4	0.00151	1	1	1	1
5	0.00201	1	1	1	1
6	0.00251	1	1	1	1
7	0.00301	1	1	1	1
8	0.00351	1	1	1	1
9	0.00401	1	1	1	1
10	0.00451	1	1	1	1
11	0.00501	1	1	1	1
12	0.00551	0.99999	0.99999	0.99999	1
13	0.00601	0.99999	0.99999	0.99999	1
14	0.00651	0.99999	0.99999	0.99999	1
15	0.00701	0.99999	0.99999	0.99999	1
16	0.00751	0.99999	0.99999	0.99999	1
17	0.00801	0.99999	0.99999	0.99999	1
18	0.00851	0.99999	0.99999	0.99999	1
19	0.00901	0.99999	0.99999	0.99999	1
20	0.00951	0.99998	0.99998	0.99998	1
21	0.01001	0.99998	0.99998	0.99998	1
22	0.01051	0.99998	0.99998	0.99998	1
23	0.01101	0.99998	0.99998	0.99998	1
24	0.01151	0.99998	0.99998	0.99998	1
25	0.01201	0.99998	0.99998	0.99998	1
26	0.01251	0.99997	0.99997	0.99997	1
27	0.01301	0.99997	0.99997	0.99997	1
28	0.01351	0.99997	0.99997	0.99997	1

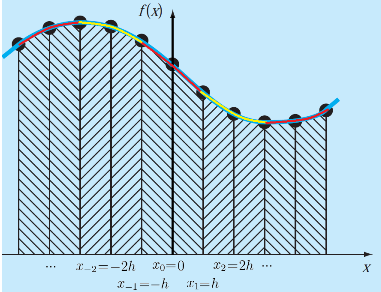
Diferenciación Numérica

$$f(x) = sen(x), f'(x) \text{ y } f''(x)$$



Integración Numérica

Problema: resolver la integral $\int_a^b f(x)dx$



Podemos crear una red de puntos con un número par de espacios:

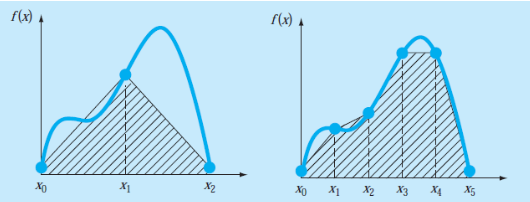
$$N = \frac{b-a}{h} \tag{6}$$

Integración Numérica

Podemos aproximar a f en el intervalo [-h,h] e integrar y posteriormente extender el resultado así:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^{a+2h} f(x)dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)dx + \ldots + \int_{b-2h}^{b} f(x)dx \tag{7}$$

La aproximación más simple considera los intervalos [-h,0] y [0,h] separadamente y asume que f es lineal:



Integración Numérica

Esto es expandir f en series de Taylor hasta la derivada de primer orden ($f = f_0 + f'x$):

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \int_{-h}^{0} (f_0 + f'x)dx + \int_{0}^{h} (f_0 + f'x)dx$$

usando (2) y (3):

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = [f_0 x + \frac{f_0 - f_{-1}}{h}\frac{x^2}{2}]\Big|_{-h}^{0} + [f_0 x + \frac{f_1 - f_0}{h}\frac{x^2}{2}]\Big|_{0}^{h}$$

de donde:

Integración Numérica

Regla Trapezoidal

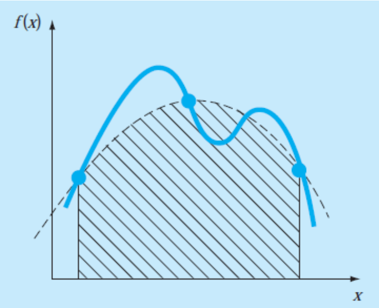
$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \frac{h}{2}[f_{-1} + 2f_0 + f_1] \tag{8}$$

Expandiendo:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2}[f(a) + 2f(a+h) + f(a+2h)] + \\ \frac{h}{2}[f(a+2h) + 2f(a+3h) + f(a+4h)] + \ldots \\ + \frac{h}{2}[f(b-2h) + 2f(b-h) + f(b)] \\ = \frac{h}{2}[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih)]\end{aligned}$$

Integración Numérica

Una mejor aproximación $\rightarrow$ expansión de Taylor hasta la derivada de segundo orden:



$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \int_{-h}^{h} (f_0 + f'x + f''\frac{x^2}{2})dx \qquad (9)$$

Usando las ecuaciones (1) y (5)

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \int_{-h}^{h} (f_0 + \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}x + \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2}\frac{x^2}{2})dx \quad (10)$$

se obtiene la **Regla de Simpson**

$$\int_{-h}^{h} f(x)dx = \frac{h}{3}[f_{-1} + 4f_0 + f_1] \quad (11)$$

Extendiendo el resultado:

Integración Numérica

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}[f(a) + 4f(a+h) + f(a+2h)] +$$

$$\frac{h}{3}[f(a+2h) + 4f(a+3h) + f(a+4h)] + \ldots$$

$$+\frac{h}{3}[f(b-2h) + 4f(b-h) + f(b)]$$

$$= \frac{h}{3}[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{N/2-1} f(a+2ih) + 4\sum_{i=1}^{N/2} f(a+(2i-1)h)] \tag{12}$$

Integración Numérica

$\int_a^b f(x)dx$ se puede aproximar a:

$$= \frac{h}{2}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih)\right]$$

(Regla trapezoidal)

$$= \frac{h}{3}\left[f(a) + f(b) + 2\sum_{i=1}^{N/2-1} f(a+2ih) + 4\sum_{i=1}^{N/2} f(a+(2i-1)h)\right]$$

(Regla de Simpson)

Cuadratura Adaptativa:

$\int_a^b f(x)dx$ se aproxima utilizando reglas de cuadratura estática en subintervalos refinados adaptativamente de la región de integración.
Generalmente, los algoritmos adaptativos son tan eficientes y eficaces como los algoritmos tradicionales para integrandos “bien comportados", pero también son eficaces para integrandos “mal comportados" en los que los algoritmos tradicionales pueden fallar.

Integración Numérica

Actividad: escribir un programa que realice una comparación de los métodos del trapecio y Simpson para realizar la integral:

$$\int_0^1 e^x dx$$

para ello, evalue el resultado de las integrales numéricas como una función del número de intervalos y realice un gráfico. Use el valor exacto como valor de referencia.