

DERIVACION NUMERICA

FISICA COMPUTACIONAL
SEMESTRE 2021-I



- Dos formulas de derivación

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

¿Cuál de las dos es mejor? O bien ¿Cuál da un resultado más próximo al valor exacto?

Usemos un resultado del cálculo de una variable. Aproximación en serie de Taylor

$$f(x + h) = f(x) + f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2!} +$$

$$f'''(x)\frac{h^3}{3!} + \dots + f^{(n)}(x)\frac{h^n}{n!} + f^{(n+1)}(\xi)\frac{h^{n+1}}{(n+1)!}$$

Donde $x \leq \xi \leq x + h$

Esto significa que el error cometido en la aproximación con una serie de Taylor de orden n es de orden $n+1$

$$E = f^{(n+1)}(\xi)\frac{h^{n+1}}{(n+1)!}$$

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + O(h^2)$$

$$f(x+h) - f(x) = f'(x)h + O(h^2)$$

Dividimos entre h

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + O(h^2)/h$$

$$= f'(x) + O(h)$$

Esto significa que:

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

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2} + O_1(h^3)$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2} + O_2(h^3)$$

Restamos:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2f'(x)h + [O_1(h^3) - O_2(h^3)]$$

Dividimos entre $2h$ y despejamos $f'(x)$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

Problema:

- Se tienen los siguientes datos

x	$f(x)$
2.1	-1.7098
2.2	-1.3738
2.3	-1.1192
2.4	-0.9160
2.5	-0.7470
2.6	-0.6016

- CALCULAR LA PRIMERA DERIVADA EN TODOS LOS PUNTOS DE LA TABLA

X	f(x)	f'(x)
2.1	-1.7098	
2.2	-1.3738	
2.3	-1.1192	
2.4	-0.9160	
2.5	-0.7470	
2.6	-0.6016	

Deducción de fórmulas de diferencias hacia adelante y hacia atrás

Desarrollo en serie de Taylor de $f(x+h)$ y $f(x+2h)$

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2!} + f'''(x)\frac{h^3}{3!} + \dots$$

$$f(x+2h) = f(x) + f'(x)2h + f''(x)\frac{4h^2}{2!} + f'''(x)\frac{8h^3}{3!} + \dots$$

A la segunda ecuación le restamos 4 veces la primera

$$\begin{aligned} f(x+2h) - 4f(x+h) &= (1-4)f(x) + f'(x)(2h-4h) \\ &\quad + f''(x)\frac{1}{2!}(4h^2-4h^2) + f'''(x)\frac{1}{3!}(8h^3-4h^3) + \dots \end{aligned}$$

Simplificamos:

$$f(x+2h) - 4f(x+h) = -3f(x) - f'(x)2h + f'''(x)\frac{4h^3}{3!} + \dots$$

Despejamos $f'(x)$

$$f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} - f'''(x)\frac{2h^2}{3!} + \dots$$

Finalmente

$$f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} + O(h^2)$$

¿Cuál es la fórmula que incluye
 $f(x)$, $f(x-h)$ y $f(x-2h)$?

SEGUNDA DERIVADA

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2!} + \frac{f'''(x)h^3}{3!} + \frac{f^{(4)}(x)h^4}{4!} + \dots$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)h^2}{2!} - \frac{f'''(x)h^3}{3!} + \frac{f^{(4)}(x)h^4}{4!} + \dots$$

A la primera ecuación le sumamos la segunda

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + f''(x)h^2 + \frac{f^{(4)}(x)2h^4}{4!} + \dots$$

Despejamos la segunda derivada:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{f^{(4)}(x)2h^2}{4!} + \dots$$

Finalmente

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

Dedución de fórmulas de derivación usando interpolación de Lagrange:

- Considerese tres puntos

x	f(x)
x_0	$f(x_0)$
x_1	$f(x_1)$
x_2	$f(x_2)$

- Polinomio de grado 2:

$$P_2(x) = f(x_0) \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} + f(x_1) \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \\ + f(x_2) \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}$$

- Considerese que el espaciamento entre x_0 , x_1 y x_2 es constante e igual a h . Es decir:

$$x_1 = x_0 + h \quad y \quad x_2 = x_1 + h$$

- Vamos ahora a derivar $P_2(x)$ con respecto a x y evaluar la derivada en $x=x_1$

$$\frac{dP_2}{dx} = f(x_0) \frac{(x-x_2)+(x-x_1)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{(x-x_2)+(x-x_0)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2) \frac{(x-x_1)+(x-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

Al evaluarla en $x=x_1$ nos queda lo siguiente:

$$\frac{dP_2}{dx} = f(x_0) \frac{(x_1-x_2)+(x_1-x_1)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1) \frac{(x_1-x_2)+(x_1-x_0)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} +$$

$$f(x_2) \frac{(x_1-x_1)+(x_1-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

- Podemos también calcular la segunda derivada

Solución de ecuación diferencial de segundo orden

- Considerese la siguiente ecuación diferencial de segundo orden:

$$y'' - 2y' + y = te^t - t$$

En el intervalo $[0,1]$ con $h=0.01$ y con las siguientes condiciones iniciales:

$$y(0)=0$$

$$y'(0)=0$$

Esta es la nueva ecuación que se pide resolver

- Solución analítica

$$y(t) = \frac{1}{6}t^3e^t - te^t + 2e^t - t - 2$$

- PROBLEMA

Resolver la ecuación diferencial de segundo orden:

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -kx$$

con las iniciales $x(0)=0.3$, $x'(0)=0$. La constante es $k=1.3$

Resolver en el intervalo $[0,3]$ con $h=0.02$