

Química cuántica I: Series de Taylor

Prof. Jesús Hernández Trujillo Facultad de Química, UNAM

La expansión en series de Taylor de la función $y = f(x)$ alrededor del punto $x = x_0$ es

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \left(\frac{d^i f(x)}{dx^i} \right)_{x=x_0} [x - x_0]^i.$$

La serie puede ser convergente o converger más rápido cuando $x - x_0$ es pequeño. Si $x_0 = 0$, se llama serie de McLaurin.¹

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} \left(\frac{d^i f(x)}{dx^i} \right)_{x=0} x^i = f(0) + f'(0)x + \frac{1}{2}f''(0)x^2 + \dots$$

Cuando se incluyen en la expansión sólo los términos hasta el que tiene la derivada de orden n , se dice que la serie se ha truncado a ese orden:

$$f(x) \approx \sum_{i=0}^n \frac{1}{i!} \left(\frac{d^i f(x)}{dx^i} \right)_{x=x_0} [x - x_0]^i$$

Ejemplo: Realiza la expansión de la función $f(x) = e^x$ en series de McLaurin.

En este caso:

$$\begin{aligned} f(0) &= e^0 = 1 \\ f'(0) &= e^0 = 1 \\ f''(0) &= e^0 = 1 \\ &\vdots \\ f^{(n)}(0) &= e^0 = 1 \end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{6}x^3 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{1}{i!} x^i$$

A partir de este resultado es posible obtener otras series de potencias de funciones exponenciales. Por ejemplo, al sustituir x por $-x$ se obtiene:

$$e^{-x} = 1 - x + \frac{1}{2}x^2 - \frac{1}{6}x^3 + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{i!} x^i$$

Ejercicio: Verifica que

$$\text{sen } x = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{(-1)^i}{(2i+1)!} x^{2i+1}$$

¹Recordar que $0! = 1$.

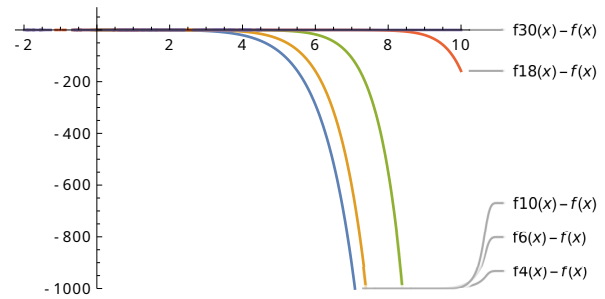
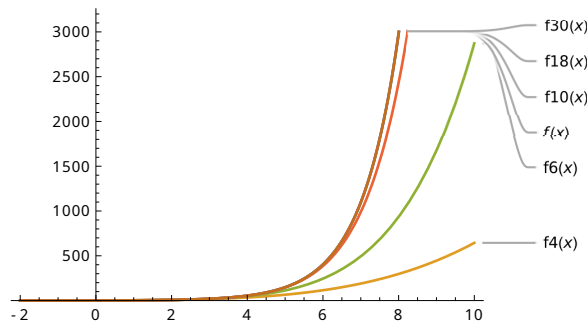
También es ilustrativo analizar algunas aproximaciones mediante sumas parciales.

Ejemplos:

■ $y = e^x$.

$$e^x \approx f_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{i!} x^i$$

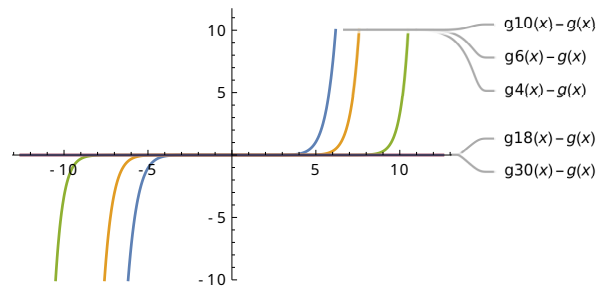
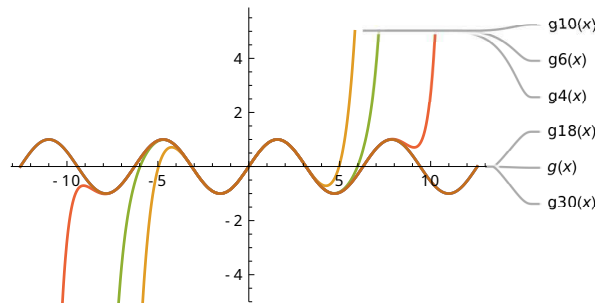
n	$e^3 - f_n(3)$	$e^9 - f_n(9)$
4	-3.710540	-7657.710000
6	-0.673037	-6427.520000
10	-0.005872	-2328.400000
18	-1.122450×10^{-8}	-19.661300
30	$-8.286100 \times 10^{-20}$	-0.000064



■ $y = \text{sen } x$.

$$\text{sen } x \approx g_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^i}{(2i+1)!} x^{2i+1}$$

n	$\text{sen}(1.5) - g_n(1.5)$	$\text{sen}(6.6) - g_n(6.6)$
4	2.136020×10^{-6}	19.979800
6	3.321130×10^{-10}	1.600680
10	1.110220×10^{-16}	0.000255
18	1.110220×10^{-16}	$-1.743050 \times 10^{-14}$
30	1.110220×10^{-16}	$-2.181590 \times 10^{-14}$



Los valores en las tablas muestran las desviaciones respecto a los valores exactos hasta las cifras mostradas. Se observa que la expansión funciona mejor a menor orden para los valores de x que está más cerca de $x_0 = 0$.