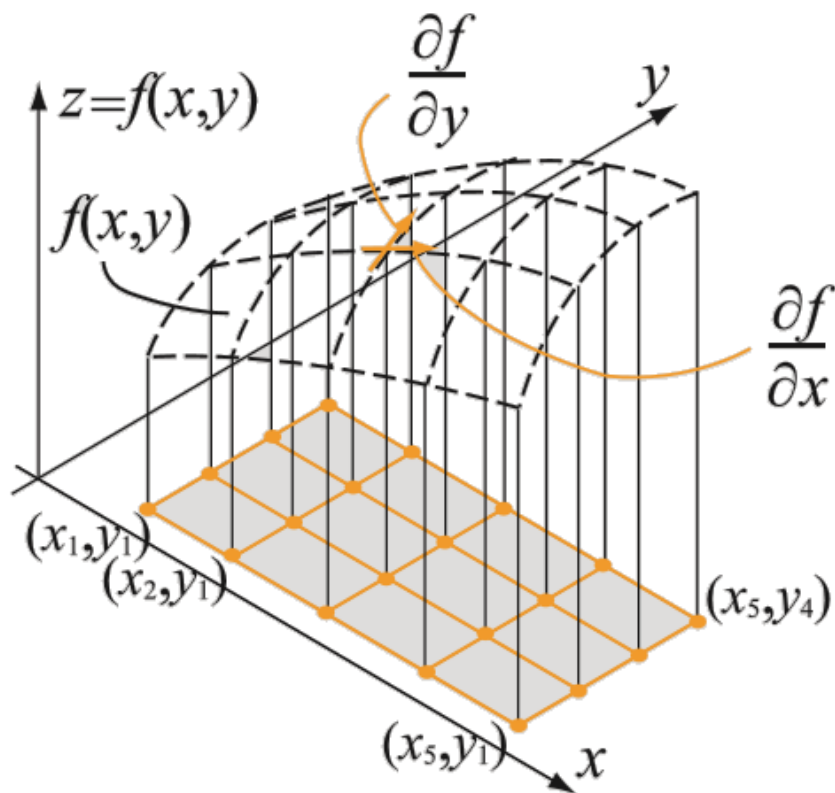




UNIVERSIDADE FEDERAL
DE ALAGOAS

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
CAMPUS SERTÃO
EIXO TECNOLOGIA



Cálculo Numérico

Prof. Dr. Alverlando Ricardo

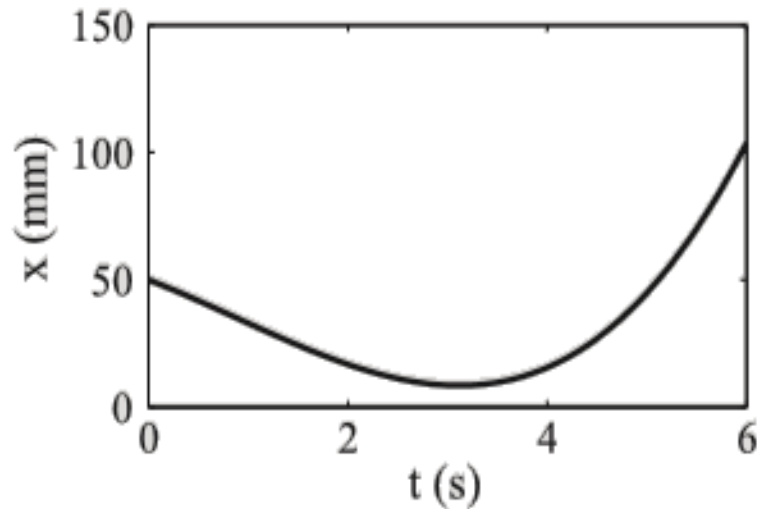
Aula 9: Parte III: **Diferenciação Numérica**

INTRODUÇÃO

INTRODUÇÃO

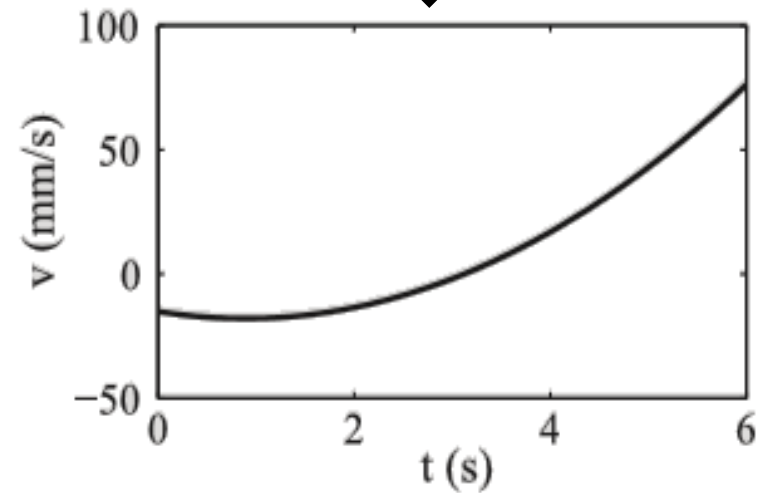
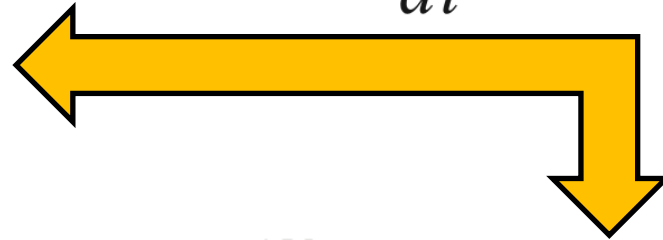
- *Em geral as **aplicações de Ciência e Engenharia** necessitam da determinação da derivada de funções.*
- *A diferenciação dá uma **medida da taxa** na qual uma grandeza varia.*
- *Muitos **modelos físicos e de engenharia** são expressos em termos de taxas.*

Exemplos

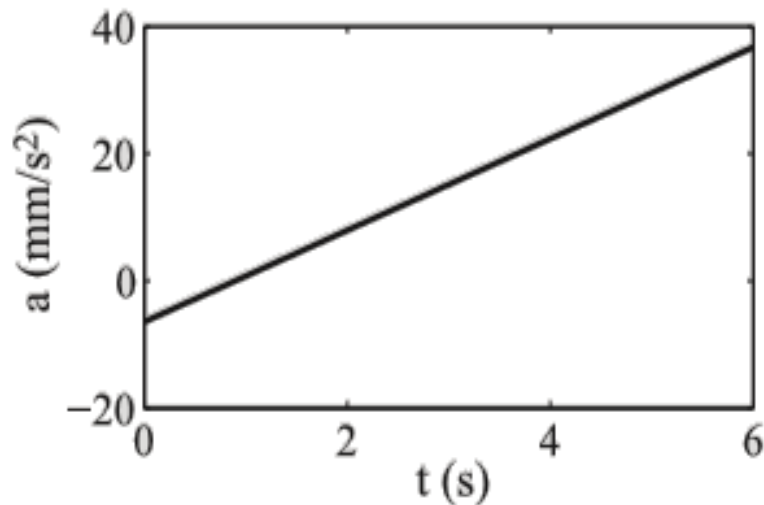
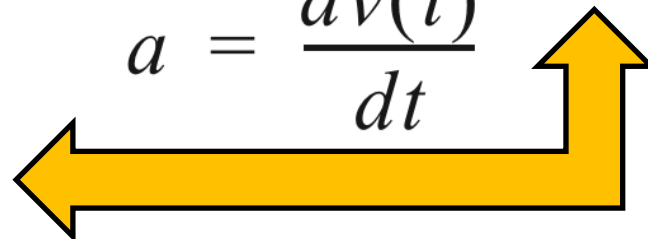


$$x = f(t)$$

$$v = \frac{df(t)}{dt}$$

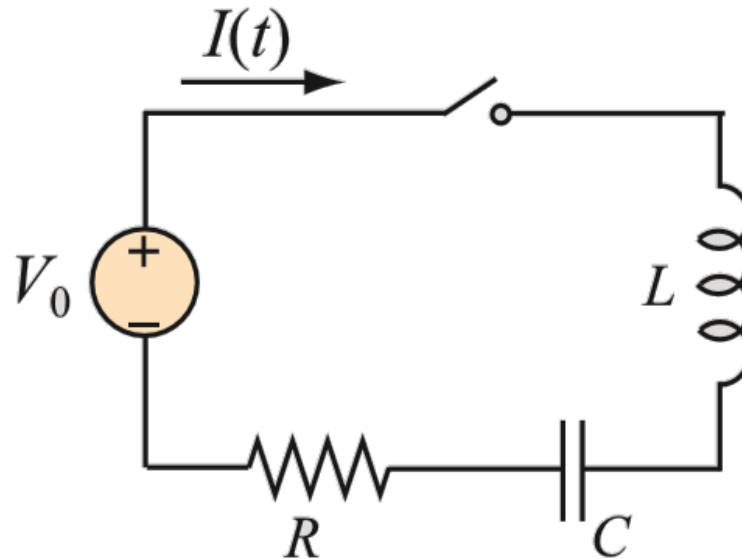


$$a = \frac{dv(t)}{dt}$$



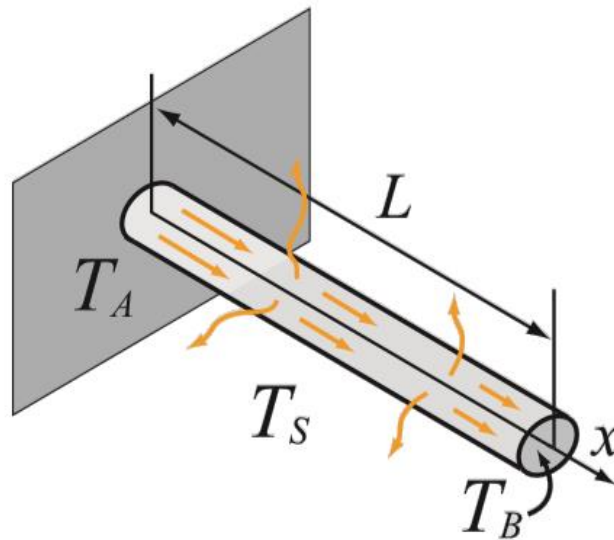
Exemplos

- Em um **circuito elétrico**, a corrente em um capacitor está relacionada à **derivada temporal da tensão**.



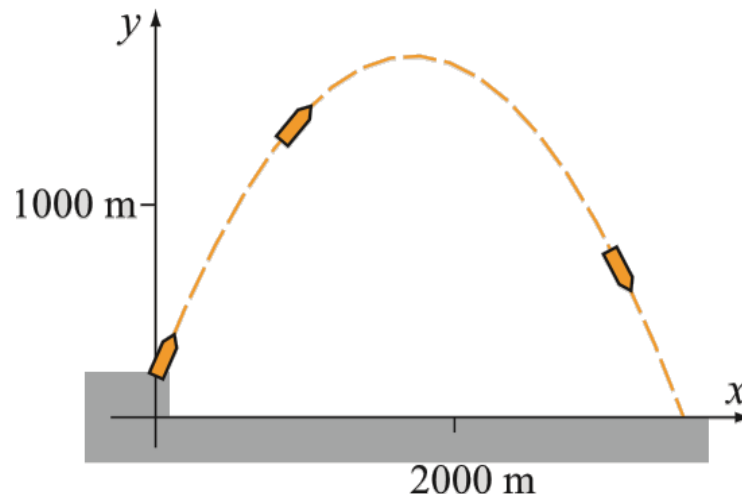
Exemplos

- Em um **circuito elétrico**, a corrente em um capacitor está relacionada à **derivada temporal da tensão**.
- Na análise da **condução de calor**, a quantidade de **fluxo de calor** é determinada a partir da **derivada da temperatura**.



Exemplos

- Em um **circuito elétrico**, a corrente em um capacitor está relacionada à **derivada temporal da tensão**.
- Na análise da **condução de calor**, a quantidade de **fluxo de calor** é determinada a partir da **derivada da temperatura**.
- A diferenciação também é usada na obtenção dos **máximos e mínimos de uma função**.

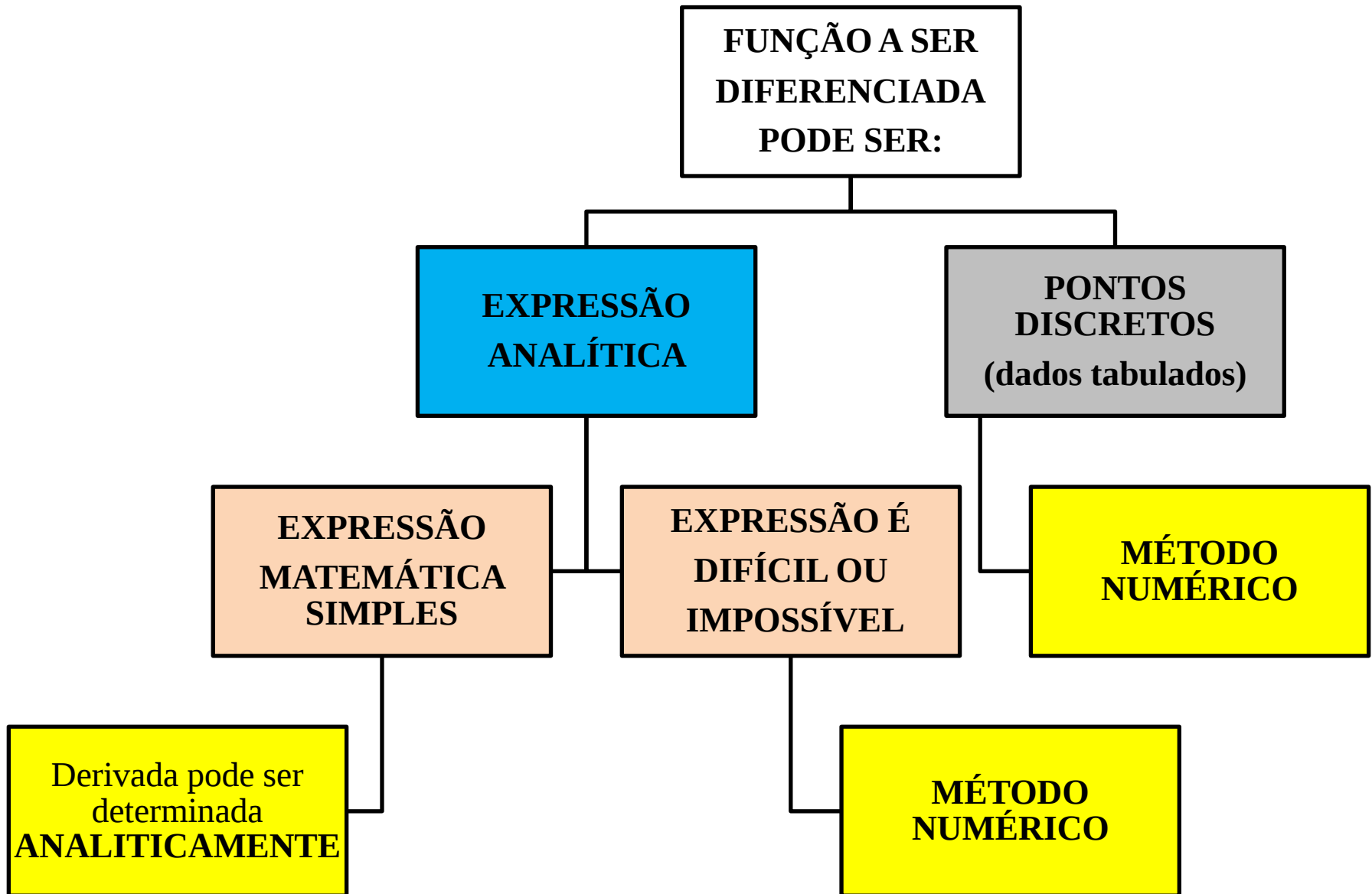


Exemplos

- Em um **circuito elétrico**, a corrente em um capacitor está relacionada à **derivada temporal da tensão**.
- Na análise da **condução de calor**, a quantidade de *fluxo de calor* é determinada a partir da **derivada da temperatura**.
- A diferenciação também é usada na obtenção dos **máximos e mínimos de uma função**.
- Resolução de **equações diferenciais**,

$$v = \sqrt{\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + \left(r\frac{d\theta}{dt}\right)^2} \quad a = \sqrt{\left[\frac{d^2r}{dt^2} - r\left(\frac{d\theta}{dt}\right)^2\right]^2 + \left[r\frac{d^2\theta}{dt^2} + 2\frac{dr}{dt}\frac{d\theta}{dt}\right]^2}$$

DIFERENCIAÇÃO NUMÉRICA



DIFERENCIAÇÃO: MÉTODO NUMÉRICO

INTERPOLAÇÃO

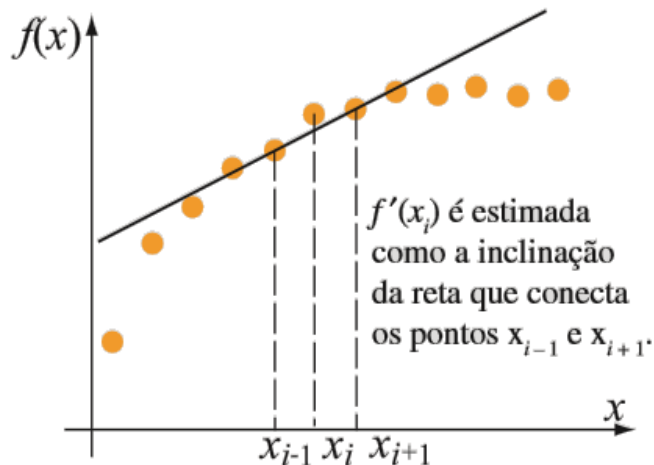
- Para um determinado **conjunto de dados**, 2 abordagens podem ser usadas no cálculo da aproximação numérica da derivada em um ponto.

INTERPOLAÇÃO

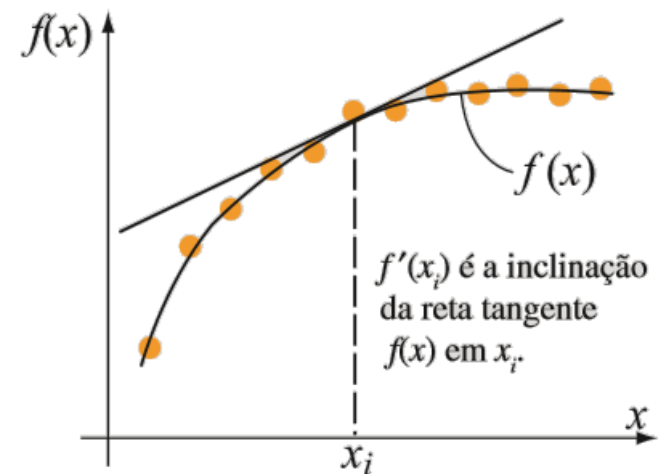
- Para um determinado **conjunto de dados**, 2 abordagens podem ser usadas no cálculo da aproximação numérica da derivada em um ponto.

DIFERENCIAÇÃO NUMÉRICA

APROXIMAÇÃO POR DIFERENÇAS FINITAS

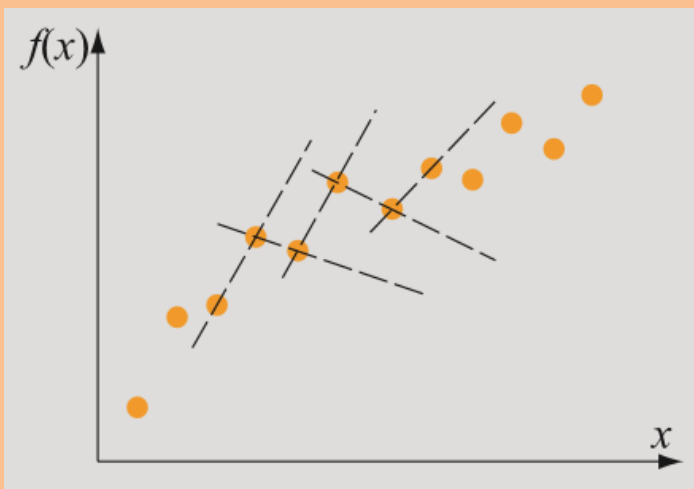


Aproximação Utilizando Expressão Analítica



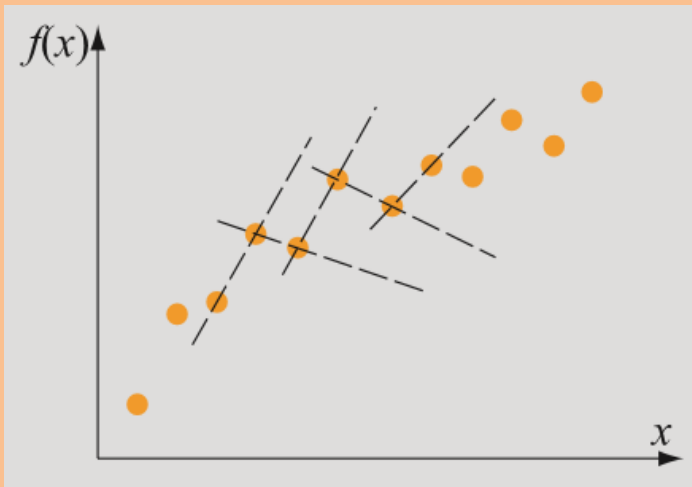
Ruído e dispersão nos dados

- *Dados a serem diferenciados obtidos de medições experimentais:* usualmente apresentam dispersão por causa de erros experimentais ou incertezas nas medições;

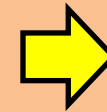


Ruído e dispersão nos dados

- *Dados a serem diferenciados obtidos de medições experimentais: usualmente apresentam dispersão por causa de erros experimentais ou incertezas nas medições;*



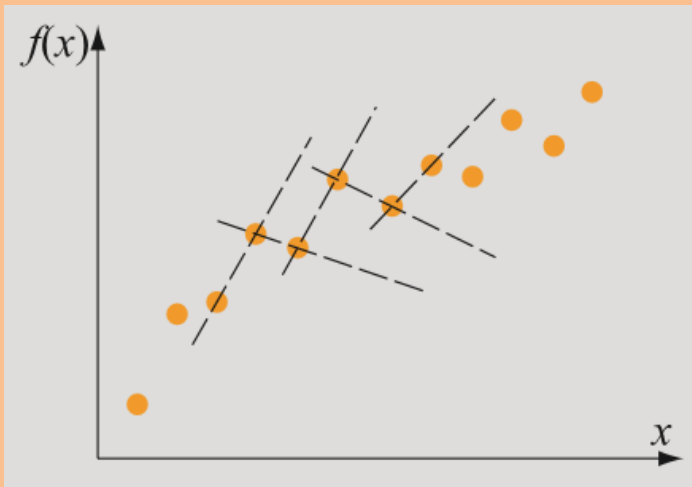
Diferenciação obtidas pela inclinação da reta que conecta dois pontos adjacentes



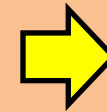
Grandes variações (positivas e negativas) serão vistas no valor da derivada de ponto a ponto.

Ruído e dispersão nos dados

- *Dados a serem diferenciados obtidos de medições experimentais: usualmente apresentam dispersão por causa de erros experimentais ou incertezas nas medições;*

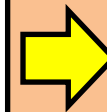


Diferenciação obtidas pela inclinação da reta que conecta dois pontos adjacentes



Grandes variações (positivas e negativas) serão vistas no valor da derivada de ponto a ponto.

Melhores resultados Usando Diferenças Finitas de ordem Superior,



Há fórmulas de diferenças finitas usando **quatro, cinco e sete pontos**.

APROXIMAÇÃO DA DERIVADA POR DIFERENÇAS FINITAS

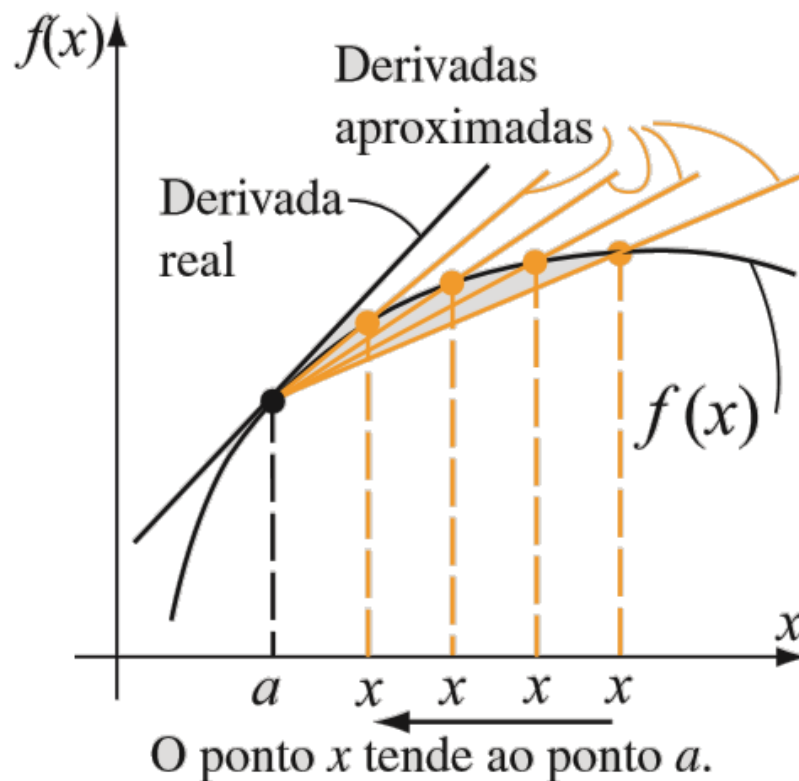
DIFERENÇAS FINITAS

- No Cálculo, a derivada $f'(x)$ de uma função $f(x)$ no ponto $x = a$ é definida como:

$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=a} = f'(a) = \lim_{x \rightarrow a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a}$$

DIFERENÇAS FINITAS

- Na aproximação de derivadas usando diferenças finitas, valores da função em diferentes pontos na vizinhança do ponto $x = a$ são usados na estimativa da inclinação



DIFERENÇAS FINITAS

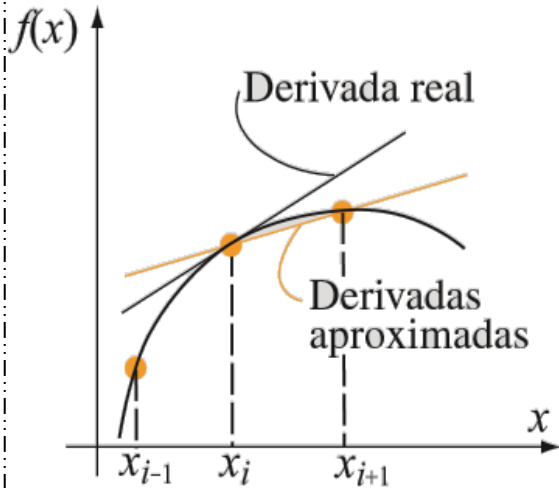
- Existem várias fórmulas de aproximação por diferenças finitas.
- Três dessas fórmulas, nas quais a derivada é calculada a partir dos valores de 2 e 3 pontos, são apresentadas:



DERIVADA POR DIFERENÇAS FINITAS A PARTIR DE 2 PONTOS

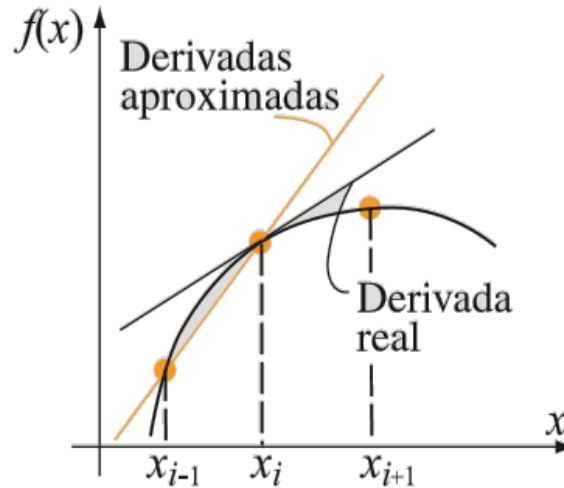
DIFERENCIAÇÃO NUMÉRICA: 2 PONTOS

Diferença finita progressiva



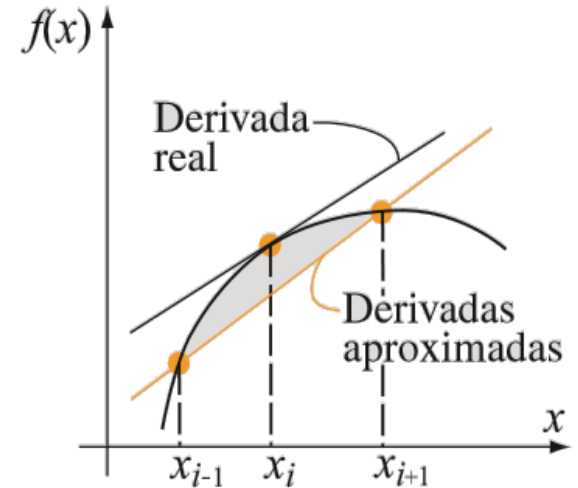
$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_i} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

Diferença finita regressiva



$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}$$

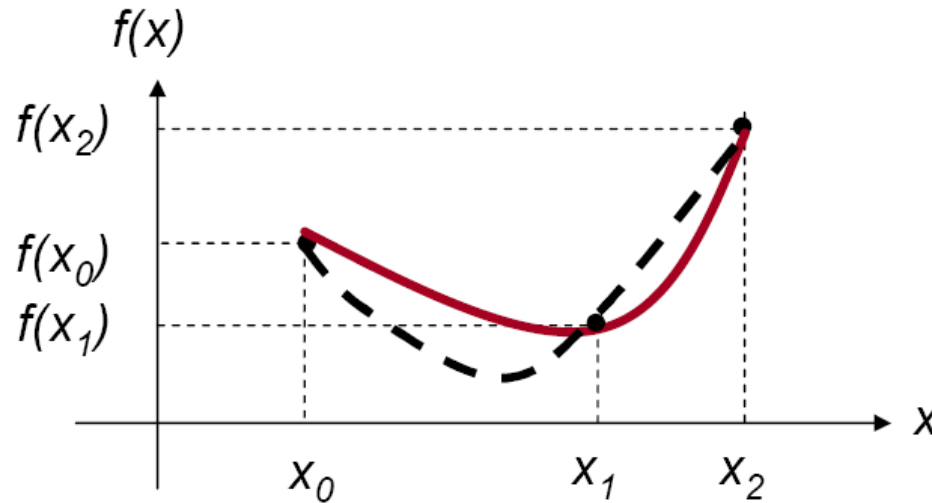
Diferença finita central



$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_i} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{x_{i+1} - x_{i-1}}$$

DERIVADA POR DIFERENÇAS FINITAS A PARTIR DE 3 PONTOS

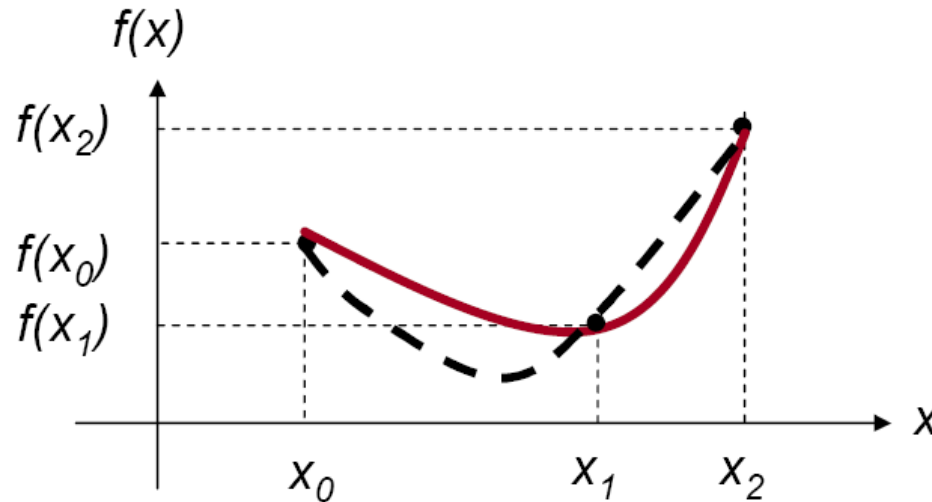
DIFERENÇAS FINITAS: 3 PONTOS



- Então, considerando o polinômio interpolador $p_n(x)$ encontrado pelo Método de Newton:

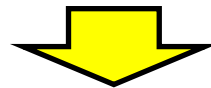
$$p_n(x) = d_0 + d_1(x - x_0) + \dots + d_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})$$

DIFERENÇAS FINITAS: 3 PONTOS

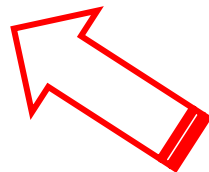


Para 3 pontos:

$$p_2(x) = d_0 + d_1(x - x_0) + d_2(x - x_0)(x - x_1)$$



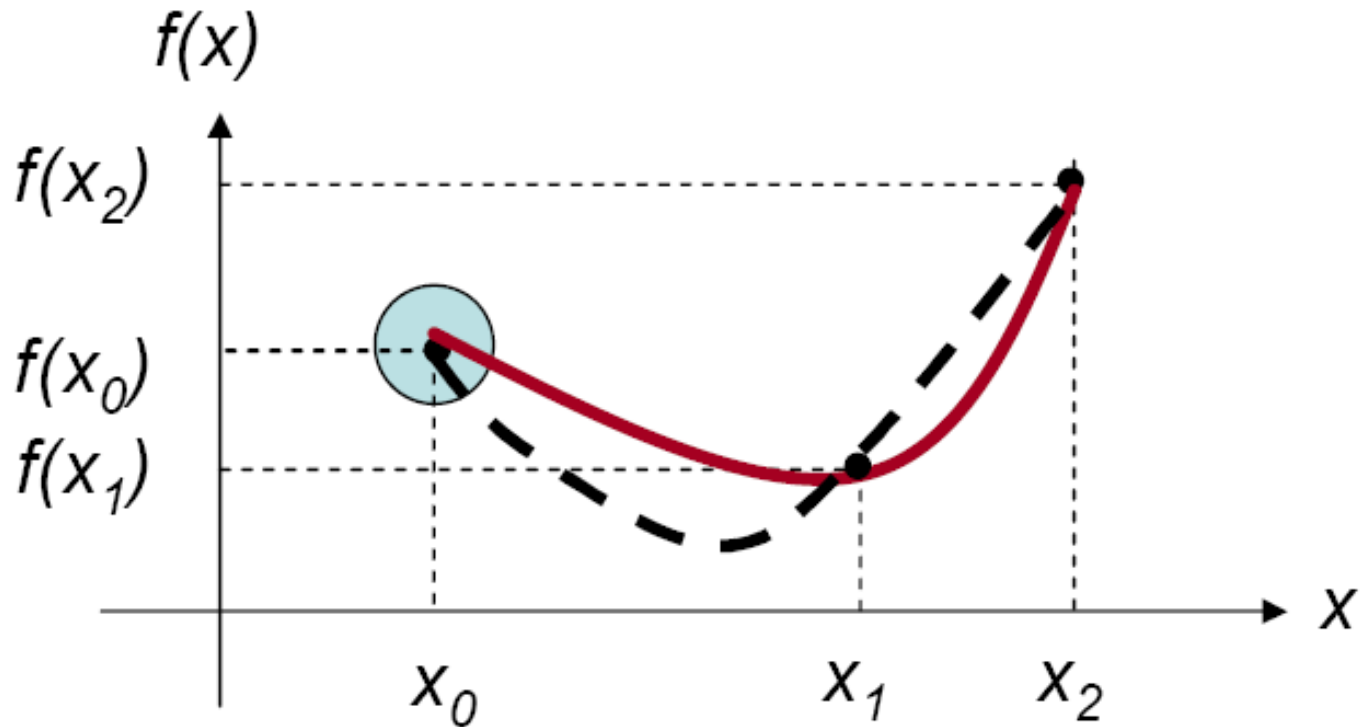
$$d = f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$



Operador diferença dividida

Diferenças Finitas Avançadas

- Neste caso, o valor de x é avaliado no ponto inicial x_0 .



Diferenças Finitas Avançadas

- Para um polinômio de grau $n = 2$:

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2][(x - x_0) + (x - x_1)]$$

Fazendo $x = x_0$:

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](x_0 - x_1)$$

Diferenças Finitas Avançadas

- Considerando que os pontos estão igualmente espaçados, tem-se:

$$x_1 - x_0 = h; \quad x_2 - x_1 = h; \quad x_2 - x_0 = 2h$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} + \left[\frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} - \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} \right] \left(\frac{x_0 - x_1}{x_2 - x_0} \right)$$

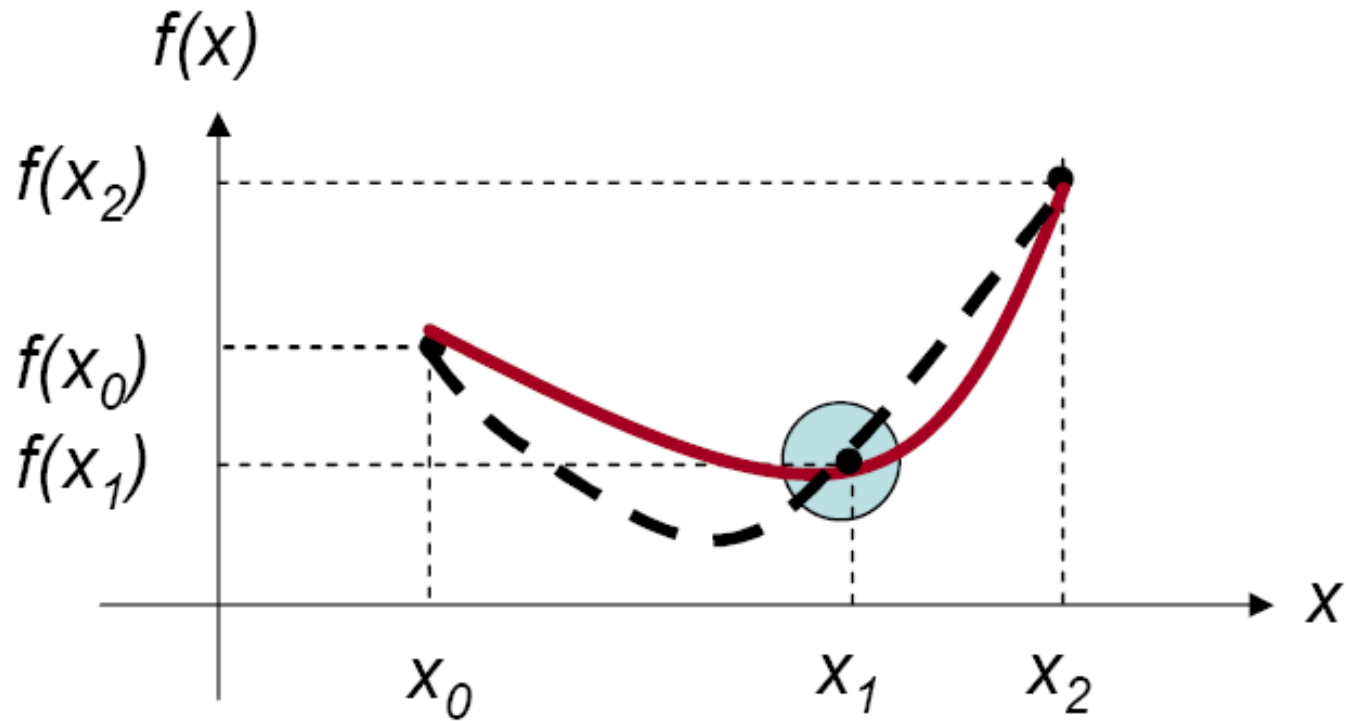
$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_1 - f_0}{h} + \left[\frac{f_2 - f_1}{h} - \frac{f_1 - f_0}{h} \right] \left(\frac{-h}{2h} \right)$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{4f_1 - f_2 - 3f_0}{2h}$$



Diferenças Finitas Centrais

- Neste caso, o valor de x é avaliado no ponto central x_1 .



Diferenças Finitas Centrais

- Para um polinômio de grau $n = 2$:

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2][(x - x_0) + (x - x_1)]$$

Fazendo $x = x_1$:

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](x_1 - x_0)$$

Diferenças Finitas Centrais

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} + \left[\frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} - \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} \right] \left(\frac{x_1 - x_0}{x_2 - x_0} \right)$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_1 - f_0}{h} + \left[\frac{f_2 - f_1}{h} - \frac{f_1 - f_0}{h} \right] \left(\frac{h}{2h} \right)$$

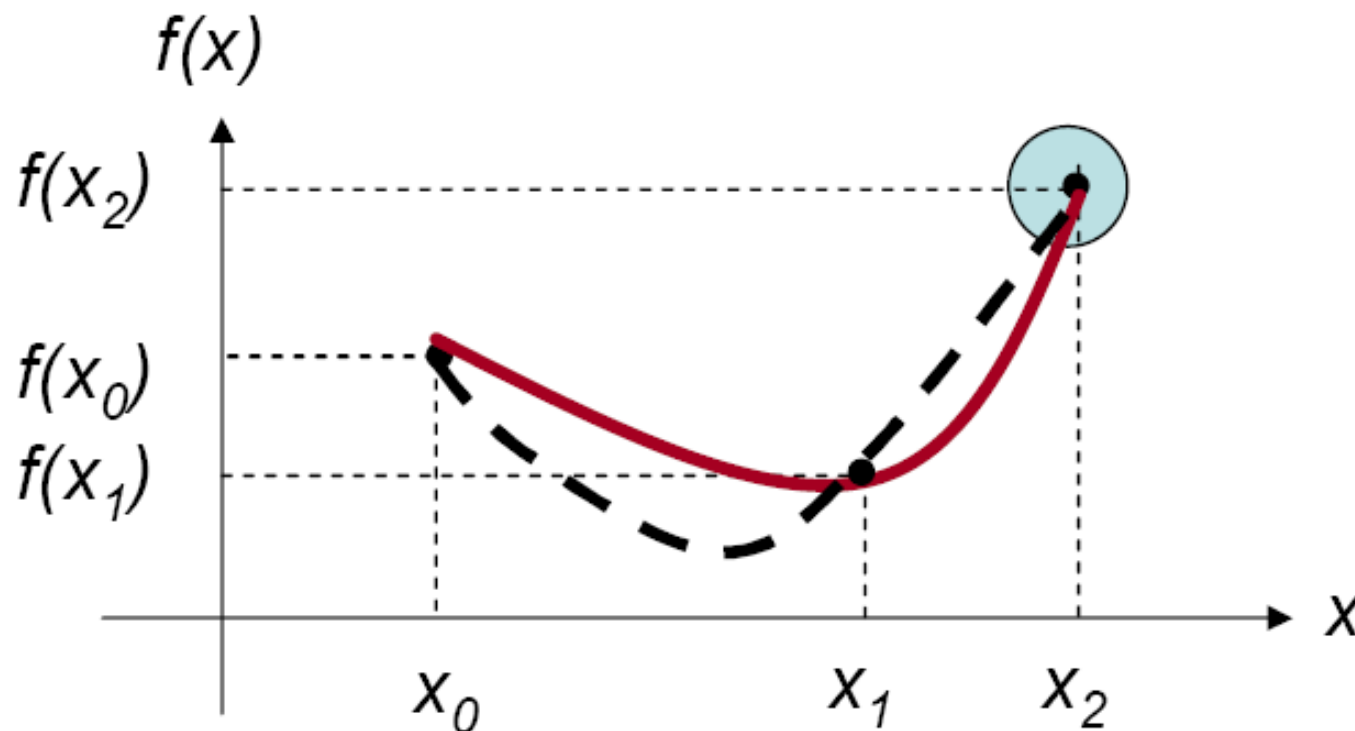
$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_1 - f_0}{h} + \frac{1}{2} \left[\frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h} \right]$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_2 - f_0}{2h}$$



Diferenças Finitas Atrasadas

- Neste caso, o valor de x é avaliado no ponto final x_2 .



Diferenças Finitas Atrasadas

- Para um polinômio de grau $n = 2$:

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2][(x - x_0) + (x - x_1)]$$

Fazendo $x = x_2$:

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = f[x_0, x_1] + f[x_0, x_1, x_2](x_2 - x_0)(x_2 - x_1)$$

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_0 - 4f_1 + 3f_2}{2h}$$



Formulário: Diferenças Finitas 3 pontos

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{4f_1 - f_2 - 3f_0}{2h}$$



➤ *Diferença Avançadas com três pontos*

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_2 - f_0}{2h}$$



➤ *Diferença Central com três pontos*

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_0 - 4f_1 + 3f_2}{2h}$$



➤ *Diferença Atrasada com três pontos*

Questionamento:

- Qual a melhor aproximação para o Métodos das Diferenças Finitas?
 - Avançadas;
 - Centrais;
 - Atrasadas.

EXEMPLO

- Determinar o valor da derivada da função representada pelos pontos abaixo, utilizando os 3 métodos (avançado, central e atrasado) no ponto $x=2$:

x	f(x)
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

Sabendo que $f(x) = x \cdot e^x$ compare os 3 métodos com o valor real da derivada.

EXEMPLO

- Utilizando a Regra da Cadeia:

$$f(x) = x \cdot e^x \qquad f'(x) = (x+1) \cdot e^x$$

- Para $x = 2$:

$$f'(2) = (2+1) \cdot e^2 = 3 \cdot e^2 = 22,167$$

EXEMPLO

■ Método das Diferenças Finitas Avançadas

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{4f_1 - f_2 - 3f_0}{2h}$$



x	f(x)
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

$h = 0,1 \Rightarrow$ pontos igualmente espaçados

EXEMPLO

■ Método das Diferenças Finitas Avançadas

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{4f_1 - f_2 - 3f_0}{2h}$$



x	f(x)
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

$h = 0,1 \Rightarrow$ pontos igualmente espaçados

$$f'(2.0) = \frac{1}{2 \cdot 0.1} [-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.0323$$

$$|ER_e| = \left| \frac{22,167 - 22,0323}{22,167} \right| = 0,006$$

EXEMPLO

■ Método das Diferenças Finitas Centrais

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_2 - f_0}{2h}$$



x	f(x)
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

$h = 0,1 \Rightarrow$ pontos igualmente espaçados

$$f'(2.0) = \frac{1}{2 \cdot 0.1} [f(2.1) - f(1.9)] = 22.2287$$

$$|ER_e| = \left| \frac{22,167 - 22,2287}{22,167} \right| = 0,002$$

EXEMPLO

■ Método das Diferenças Finitas Atrasadas

$$\frac{\partial p_n}{\partial x} = \frac{f_0 - 4f_1 + 3f_2}{2h}$$



x	f(x)
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

$h = 0,1 \Rightarrow$ pontos igualmente espaçados

$$f'(2.0) = \frac{1}{2 \cdot 0.1} [f(1.8) - 4f(1.9) + 3f(2.0)] = 22.0545$$

$$|ER_e| = \left| \frac{22,167 - 22,0545}{22,167} \right| = 0,005$$

CONSIDERAÇÕES

- Em geral, a precisão do processo de diferenciação numérica depende:
 - Do ponto escolhido no intervalo;
 - Da ordem da derivada a ser aproximada. Considerando o mesmo polinômio interpolador, quanto maior o grau da derivada, maior o erro;
 - Do tamanho de h . Quanto menor o valor de h , menor o erro.

Resumo de Fórmulas

<i>Derivada primeira</i>		
Método	Fórmula	Erro de truncamento
Diferença progressiva com dois pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$	$O(h)$
Diferença progressiva com três pontos	$f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{2h}$	$O(h^2)$
Diferença regressiva com dois pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{h}$	$O(h)$
Diferença regressiva com três pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-1}) + 3f(x_i))}{2h}$	$O(h^2)$
Diferença central com dois pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}$	$O(h^2)$
Diferença central com quatro pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{12h}$	$O(h^4)$

Resumo de Fórmulas

<i>Derivada segunda</i>		
Método	Fórmula	Erro de truncamento
Diferença progressiva com três pontos	$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2}))}{h^2}$	$O(h)$
Diferença progressiva com quatro pontos	$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i+1}) + 4f(x_{i+2}) - f(x_{i+3}))}{h^2}$	$O(h^2)$
Diferença regressiva com três pontos	$f''(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 2f(x_{i-1}) + f(x_i))}{h^2}$	$O(h)$
Diferença regressiva com quatro pontos	$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i-3}) + 4f(x_{i-2}) - 5f(x_{i-1}) + 2f(x_i))}{h^2}$	$O(h^2)$
Diferença central com três pontos	$f''(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1}))}{h^2}$	$O(h^2)$
Diferença central com cinco pontos	$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i-2}) + 16f(x_{i-1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{12h^2}$	$O(h^4)$

Resumo de Fórmulas

<i>Derivada terceira</i>		
Método	Fórmula	Erro de truncamento
Diferença progressiva com quatro pontos	$f'''(x_i) = \frac{-f(x_i) + 3f(x_{i+1}) - 3f(x_{i+2}) + f(x_{i+3})}{h^3}$	$O(h)$
Diferença progressiva com cinco pontos	$f'''(x_i) = \frac{-5f(x_i) + 18f(x_{i+1}) - 24f(x_{i+2}) + 14f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+4})}{2h^3}$	$O(h^2)$
Diferença regressiva com quatro pontos	$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-2}) - 3f(x_{i-1}) + f(x_i)}{h^3}$	$O(h)$
Diferença regressiva com cinco pontos	$f'''(x_i) = \frac{3f(x_{i-4}) - 14f(x_{i-3}) + 24f(x_{i-2}) - 18f(x_{i-1}) + 5f(x_i)}{2h^3}$	$O(h^2)$
Diferença central com quatro pontos	$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i-2}) + 2f(x_{i-1}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})}{2h^3}$	$O(h^2)$
Diferença central com seis pontos	$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i-3}) - 8f(x_{i-2}) + 13f(x_{i-1}) - 13f(x_{i+1}) + 8f(x_{i+2}) - f(x_{i+3})}{8h^3}$	$O(h^4)$

Resumo de Fórmulas

Derivada quarta

Método	Fórmula	Erro de truncamento
Diferença progressiva com cinco pontos	$f^{iv}(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+3}) + f(x_{i+4})}{h^4}$	$O(h)$
Diferença progressiva com seis pontos	$f^{iv}(x_i) = \frac{3f(x_i) - 14f(x_{i+1}) + 26f(x_{i+2}) - 24f(x_{i+3}) + 11f(x_{i+4}) - 2f(x_{i+5})}{h^4}$	$O(h^2)$
Diferença regressiva com cinco pontos	$f^{iv}(x_i) = \frac{f(x_{i-4}) - 4f(x_{i-3}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-1}) + f(x_i)}{h^4}$	$O(h)$
Diferença regressiva com seis pontos	$f^{iv}(x_i) = \frac{-2f(x_{i-5}) + 11f(x_{i-4}) - 24f(x_{i-3}) + 26f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-1}) + 3f(x_i)}{h^4}$	$O(h^2)$
Diferença central com cinco pontos	$f^{iv}(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})}{h^4}$	$O(h^2)$
Diferença central com sete pontos	$f^{iv}(x_i) = \frac{f(x_{i-3}) + 12f(x_{i-2}) - 39f(x_{i-1}) + 56f(x_i) + 39f(x_{i+1}) + 12f(x_{i+2}) - f(x_{i+3})}{6h^4}$	$O(h^4)$

DIFERENCIAÇÃO PARCIAL NUMÉRICA

DIFERENCIAÇÃO PARCIAL NUMÉRICA

- *Os métodos de diferenciação apresentados consideraram funções de apenas uma variável independente;*
- *No entanto, muitos problemas na engenharia e na ciência envolvem funções de muitas variáveis independentes, pois aplicações na vida real são bidimensionais ou tridimensionais.*
- *A Diferenciação Parcial Numérica pode ser feita seguindo a mesma ideia que anteriormente.*

DIFERENCIAÇÃO PARCIAL NUMÉRICA

- Aproximação para a derivada parcial no ponto (x_i, y_i) usando a fórmula de **diferença AVANÇADA com dois pontos:**

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x = x_i \\ y = y_i}} = \frac{f(x_{i+1}, y_i) - f(x_i, y_i)}{h_x}$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x = x_i \\ y = y_i}} = \frac{f(x_i, y_{i+1}) - f(x_i, y_i)}{h_y}$$

DIFERENCIAÇÃO PARCIAL NUMÉRICA

- Aproximação para a derivada parcial no ponto (x_i, y_i) usando a fórmula de **diferença ATRASADA com dois pontos**:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x = x_i \\ y = y_i}} = \frac{f(x_i, y_i) - f(x_{i-1}, y_i)}{h_x}$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x = x_i \\ y = y_i}} = \frac{f(x_i, y_i) - f(x_i, y_{i-1})}{h_y}$$

DIFERENCIAÇÃO PARCIAL NUMÉRICA

- Aproximação para a derivada parcial no ponto (x_i, y_i) usando a fórmula de **diferença CENTRAL** com dois pontos:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{\substack{x = x_i \\ y = y_i}} = \frac{f(x_{i+1}, y_i) - f(x_{i-1}, y_i)}{2h_x}$$

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{\substack{x = x_i \\ y = y_i}} = \frac{f(x_i, y_{i+1}) - f(x_i, y_{i-1})}{2h_y}$$

...CONTINUA