Métodos Numéricos

Prof. Dr. Jonatha Costa

2024

Organização

1 Diferenciação Numérica

Diferenças finitas

Diferenças finitas - Série de Taylor

MN aplicados à Engenharia: Objetivo da aula

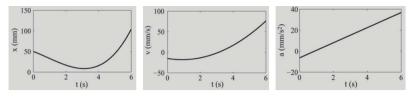
- Apresentar conceitos de diferenciação
- Revisar estruturas de operação de diferenciação
- Apresentar a interpretação gráfica de diferenciação
- Apresentar estruturas de diferenciação: progressiva, regressiva e central

Costa, JR®

Fundamentos

• É a taxa na qual uma grandeza varia.

Figura: Curvas de deslocamento mm/s



Fonte: GILAT, (2008)

- Em um circuito elétrico: a corrente elétrica(i) é a taxa de variação da carga q, a corrente em um capacitor está relacionada à derivada temporal da tensão(v).
- Na análise da condução de calor, a quantidade de fluxo de calor(ϕ) é determinada a partir da derivada da temperatura(Δt);

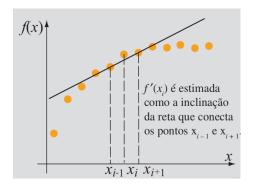
Fundamentos

- A diferenciação é usada na obtenção dos **máximos** e **mínimos** de uma função.
- A teoria de Métodos Numéricos, solução por aproximação, é usada quando a diferenciação de uma função é difícil ou impossível através de uma solução analítica.
- A diferenciação numérica é usada em um conjunto de pontos discretos, medidos ou gravados em experimentos.

Costa, JR^o Métodos Numéricos 5/

Derivada por diferenças finitas

Figura: Derivada por diferenças

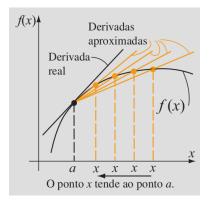


- A aproximação da derivada em um ponto x_i se baseia nos valores dos pontos na vizinhança de x_i .
- A aproximação depende da precisão dos pontos, do espaçamento entre eles e da expressão específica usada na aproximação.
- A derivada no ponto x_i é aproximada pela inclinação da reta que liga o ponto antes de x_i ao ponto após x_i .
- Problemas de ruído penalizam este tipo de aproximação.

Fonte: GILAT, (2008)

Derivada por diferenças finitas

Figura: Derivada aproximada



Definição do Cálculo

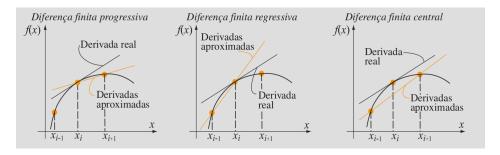
$$\left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x=a} = f'(a) = \lim_{x \to a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a}$$

- É o valor da inclinação da **reta tangente** à função em x=a, obtida com a escolha de um ponto x próximo a x=a e o cálculo da inclinação da reta que conecta os dois pontos.
- Precisão aumenta à medida que $x \to a$ tal que no imite em que o ponto x tende ao ponto a, a derivada é a inclinação da reta tangente a f(x) em x = a.
- Na aproximação de derivadas utilizando diferenças finitas, valores da função em diferentes pontos na vizinhança do ponto x = a são utilizados na estimativa da inclinação.

- 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.
- As fórmulas de diferenças finitas progressiva, regressiva e central são as mais simples aproximações da derivada por diferenças finitas.
- Diferença finita
 - Progressiva de x_{i+1} a x_i .
 - Regressiva de x_i a x_{i-1} .
 - Central de x_{i+1} a x_{i-1} .

Costa, JR^o Métodos Numéricos 8/2:

Figura: Equações de diferença para a derivada primeira



Fonte: GILAT, (2008)

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

Exemplo I

Considere a função $f(x) = x^3$. Calcule numericamente a derivada primeira no ponto x = 3 aplicando as fórmulas de diferenças finitas progressiva, regressiva e central, usando:

(a) os pontos x = 2, x = 3 e x = 4.

Compare os resultados com a derivada exata (analítica).

- Diferenciação analítica: $f'(x) = 3.x^2 = f'(3) = 3.3^2 = 27$
- (a) Diferenciação numérica:
 - * Diferenciação finita progressiva

$$\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{f(4) - f(3)}{4 - 3} = \frac{4^3 - 3^3}{1} = 37 \to Erro = \left|\frac{37 - 27}{27}.100\right| = 37,04\%$$

* Diferenciação finita regressiva:

$$\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{f(3) - f(2)}{3 - 2} = \frac{3^3 - 2^3}{1} = 19 \to Erro = \left|\frac{19 - 27}{27}.100\right| = 29,63\%$$

* Diferenciação finita central:

$$\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{f(4) - f(2)}{4 - 2} = \frac{4^3 - 2^3}{2} = 28 \to Erro = \Big|\frac{28 - 27}{27}.100\Big| = 3,704\%$$

$$\bullet \ \ Nota: Erro_{relativo} = \Big| \frac{Y_{aproximado} - Y_{real}}{Y_{real}}.100 \Big| = Y\%$$



Exemplo I

Considere a função $f(x) = x^3$. Calcule numericamente a derivada primeira no ponto x = 3 aplicando as fórmulas de diferenças finitas progressiva, regressiva e central, usando:

(a) os pontos x = 2,75, x = 3 e x = 3,25.

Compare os resultados com a derivada exata (analítica).

- Diferenciação analítica: $f'(x) = 3.x^2 = f'(3) = 3.3^2 = 27$
- (b) Diferenciação numérica:
 - * Diferenciação finita progressiva:

$$\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{f(3,25) - f(3)}{3,25 - 3} = \frac{3,25^3 - 3^3}{0,25} = 29,3125 \rightarrow Erro = \left|\frac{29,3125 - 27}{27}.100\right| = 8,565\%$$

* Diferenciação finita regressiva:

$$\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{f(3) - \tilde{f}(2,75)}{3 - 2,75} = \frac{3^3 - 2,75^3}{1} = 24,8125 \rightarrow Erro = \Big|\frac{24,8125 - 27}{27}.100\Big| = 8,102\%$$

Diferenciação finita central:

$$\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{f(3,25) - f(2,75)}{3,25 - 2,75} = \frac{3,25^3 - 2,75^3}{3,25 - 2,75} = 27,0625 \rightarrow Erro = \Big|\frac{27,0625 - 27}{27}.100\Big| = 0,2315\%$$

$$\bullet \ \ Nota: Erro_{relativo} = \Big| \frac{Y_{aproximado} - Y_{real}}{Y_{real}}.100 \Big| = Y\%$$

Conclusão: Erro depende fortemente da distância entre os pontos!

◆□ ト ◆□ ト ◆ 直 ト ◆ 直 ・ 夕 Q (~)

Figura: Solução computacional

```
X=[2,3,4]
                                 # Função filtro para localizar o ponto_p na lista
ponto_p=3
i=filter(lambda n:n == ponto p.X) # Índice de locação do ponto na lista X
i=X.index(ponto_p)
f=lambda x:x**3
                                 # Funcão de análise f(x)=x^3
df = lambda x:3*x**2
                                 # Derivada Analítica incluída manualmente
der = df(ponto p)
                                 # Derivada numérica
dprog = (f(X[i+1]) - f(X[i])) / (X[i+1]-X[i])
dcentr = (f(X[i+1]) - f(X[i-1]))/(X[i+1]-X[i-1])
dregr = (f(X[i]) - f(X[i-1])) / (X[i]-X[i-1])
print('-'*15),print(" RESULTADOS"),print('-'*15)
print("Dif.Analítica \tDif.Prog\tDif.Central\tDif.Regr")
print(f" \t{der}\t {dprog} \t {dcentr} \t {dreqr}")
# Resultados do erros
E=[]
E.append(round(abs(dprog-der)/der,2))
E.append(round(abs(dcentr-der)/der,2))
E.append(round(abs(dregr-der)/der,2))
print(f"\n Erros:\t\t {E[0]*100}%
                                       \t {E[1]*100}% \t {E[2]*100}%")
```

Figura: Resultados

```
RESULTADOS

Dif.Analitica Dif.Prog Dif.Central Dif.Regr 27 37.0 28.0 19.0 Erros: 37.0% 4.0% 30.0%
```

Fonte: Autor, (2020)

Fonte: Autor, (2020)

(*)Dados de entrada: $x = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \end{bmatrix}$ e p = 3

◆□▶ ◆□▶ ◆臺▶ ◆臺▶ · 臺 · 少久○

Em um experimento de vibração, um bloco de massa m é preso a uma mola com dureza k e a um amortecedor com coeficiente de amortecimento c. Para que o experimento tenha início, o bloco é retirado da posição de equilíbrio e solto. A posição do bloco em função do tempo é gravada em uma freqüência de 5 Hz (5 vezes por segundo). Os dados no intervalo $4 \le t \le 8s$ são dados dispostos nas colunas 1 (x-(cm)) e coluna 2(t-(s)) da matriz ao lado: Pede-se:

- (a) A velocidade do bloco é a derivada da posição em relação ao tempo. Use a fórmula de diferença finita central para calcular a velocidade nos tempos t=5s e t=6s.
- (b) Escreva uma função no Matlab/Octave (Python) que calcule a derivada de uma função descrita por um conjunto de pontos. A função deve calcular a derivada no primeiro e no último ponto usando as fórmulas de diferenças finitas progressiva e regressiva, respectivamente, e usando a fórmula de diferença finita central nos demais pontos.

Figura: x(cm) e t(s)

```
4.00000
5.87000
-4.23000
           4.20000
           4.40000
-2.55000
0.89000
           4.60000
0.67000
           4.80000
2.09000
           5.00000
3.31000
           5.20000
4.31000
           5.40000
5.06000
           5.60000
5.55000
           5.80000
5.78000
           6.00000
5.77000
           6.20000
5.52000
           6.40000
5.08000
           6.60000
4.46000
           6.80000
           7.00000
3.72000
2.88000
           7.20000
2.00000
           7.40000
1.10000
           7.60000
0.23000
           7.80000
0.59000
           8.00000
```

Fonte: (Autor,2020)

(a) Calculando a velocidade pela diferenciação finita central

t=5s
$$\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=xi} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i+1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=5} = \frac{f(5,2) - f(4,8)}{5,2-4,8} = \frac{3,31-0,67}{0,4} = 6,6 \text{ cm/s}$$

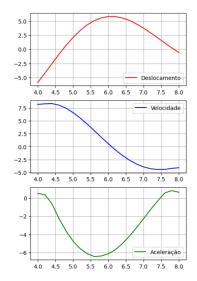
$$t=6s \frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=xi} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i+1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} \frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=6} = \frac{f(6,2) - f(5,8)}{6,2-5,8} = \frac{5,77-5,55}{0,4} = 0,55 \ cm/s$$

(b) - Script

Figura: Script e gráficos

```
# Solução utilizando vetor de zeros e atualizando-o
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
#Dados
t=np.arange(4,8.2,0.2)
x=np.array([-5.87, -4.23, -2.55, -0.89, 0.67, 2.09, 3.31, 4.31,
            5.06. 5.55. 5.78. 5.77. 5.52. 5.08. 4.46. 3.72. 2.88.
            2.00,1.10, 0.23, -0.591)
def derive(X.Y):
                                               # Derivadas
   dx=np.zeros(len(x))
                                               # Vetores de derivadas
   i=0
                                               # Primeiro elemento do vetor
   dx[i] = (Y[i+1] - Y[i]) / (X[i+1] - X[i]) # Progressiva
   i=-1
                                               # Último elemento do vetor
   dx[-1] = (Y[i] - Y[i-1]) / (X[i]-X[i-1]) # Regressiva
   for i in range(1,len(x)-1):
                                               # Elementos intermediários
       dx[i] = (Y[i+1] - Y[i-1]) / (X[i+1] - X[i-1]) # Central
    return dx
def graf(t,x,vel,acc):
   labels=['Deslocamento','Velocidade','Aceleração']
   colors=['r', 'b', 'q']
   plt.figure(figsize=(5,8))
   for i, j in enumerate([x,vel,acc]):
       plt.subplot(3,1,i+1)
       plt.plot(t.i.label = labels[i].color=colors[i])
       plt.legend(),plt.grid(True)
vel,acc = derive(t,x), derive(t,derive(t,x))
graf(t,x,vel,acc)
```

Fonte: (Autor, 2024)



イロト イ御 トイミト イミト

Diferenciação Numérica usando a expansão da série de Taylor

- A partir da expansão em série de Taylor pode-se deduzir as fórmulas de diferenças finitas progressiva, regressiva e central.
- Essas fórmulas fornecem uma estimativa da derivada em um ponto usando valores de pontos em sua vizinhança.
- O número de pontos usados nos cálculos varia com a fórmula, e os pontos podem estar à frente, atrás ou em ambos os lados do ponto onde se calcula a derivada.
- Uma vantagem do uso da expansão em série de Taylor na dedução das fórmulas está no fato de ela fornecer uma estimativa do **erro de truncamento** presente na aproximação.

Diferença finita progressiva com dois pontos para a derivada primeira

• $f(x_{i+1})$ aproximado pela série de Taylor em termos do valor da função e de suas derivadas no ponto x_i resulta em:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(x_i)}{4!}h^4 + \dots$$

 $h = x_{i+1} - x_i$ é a distância entre os pontos.

• Reescrevendo as equações com dois termos e um resíduo (ξ) (valor entre x_i e x_{i+1}) tem-se:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2$$

• Isolando-se o **termo de interesse** $f'(x_i)$ tem-se:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{f''(\xi)}{2!}h$$

• Um valor aproximado de $f'(x_i)$ introduz um erro de truncamento (discretização). Declarando como zero o termo de $f(\xi)$ o erro de truncamento é da ordem de h(escrito como O(h)), por ser este proporcional àquele.

←ロト ←団 ト ← 重 ト ・ 重 ・ 夕 Q (~)

17/28

Diferença finita progressiva com dois pontos para a derivada primeira

Portanto:

• Erro de truncamento - erro dado em função da distância entre pontos vale:

Erro de truncamento =
$$\frac{f''(\xi)}{2!}h = O(h)$$

Aproximação da derivada primeira finita progressiva por Série de Taylor

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - O(h)$$

A mesma estrutura de aproximação para a derivada primeira é usada, portanto, para:

• Diferença finita regressiva com dois pontos resultando em:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} - O(h)$$

• Diferença finita central com dois pontos resultando em:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{h} - O(h^2)$$

Na aproximação por diferença central o erro de truncamento é da ordem de h^2 . Isso indica que a aproximação por diferença central fornece uma aproximação mais precisa para a derivada!

Aproximação de derivadas finitas por **Série de Taylor** - *Derivada primeira*

- Derivada primeira com 2 pontos
 - Diferença progressiva $f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) f(x_i)}{h}$ com O(h)
 - Diferença regressiva $f'(x_i) = \frac{f(x_i) f(x_{i-1})}{h} \operatorname{com} O(h)$
 - Diferença central $f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) f(x_{i-1})}{\iota} \operatorname{com} O(h^2)$
- Derivada primeira com 3 pontos
 - Diferença progressiva $f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) f(x_{i+2})}{2h} \operatorname{com} O(h^2)$ Diferença regressiva $f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) 4f(x_{i-1}) + 3f(x_i)}{2h} \operatorname{com} O(h^2)$
- Derivada primeira com 4 pontos necessita de x_{i-2} a x_{i+1}
 - Diferença central $f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{19L} \text{ com } O(h^4)$



Aproximação de derivadas finitas por **Série de Taylor** - *Derivada segunda*

- Derivada segunda com 3 pontos
 - Diferença progressiva $f''(x_i) = \frac{f(x_i) 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})}{h^2}$ com O(h)
 - Diferença regressiva $f''(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) 2f(x_{i-1}) + f(x_i)}{h^2}$ com O(h)
 - Diferença central $f''(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2}$ com $O(h^2)$
- Derivada segunda com 4 pontos
 - Diferença progressiva $f''(x_i) = \frac{2f(x_i) 5f(x_{i+1}) + 4f(x_{i+2}) f(x_{i+3})}{h^2} \operatorname{com} O(h^2)$ Diferença regressiva $f''(x_i) = \frac{-f(x_{i-3}) + 4f(x_{i-2}) 5f(x_{i-1}) + 2f(x_i)}{h^2} \operatorname{com} O(h^2)$
- **Derivada segunda com 5 pontos** central necessita de x_{i-2} a x_{i+2}
 - Diferença central $f''(x_i) = \frac{-f(x_{i-2}) + 16f(x_{i-1}) 30f(x_i) + 16f(x_{i+1}) f(x_{i+2})}{12h^2}$ com $O(h^4)$

Aproximação de derivadas finitas por **Série de Taylor** - *Derivada terceira*

- Derivada terceira com 4 pontos
 - Diferença progressiva $f'''(x_i) = \frac{-f(x_i) + 3f(x_{i+1}) 3f(x_{i+2}) + f(x_{i+3})}{h^3} \operatorname{com} O(h)$ Diferença regressiva $f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-2}) 3f(x_{i-1}) + f(x_i)}{h^3} \operatorname{com} O(h)$ Diferença central $f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i-2}) + 2f(x_{i-1}) 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})}{2h^3} \operatorname{com} O(h^2)$
- Derivada terceira com 5 pontos
 - Diferença progressiva $f'''(x_i) = \frac{-5f(x_i) + 18f(x_{i+1}) 24f(x_{i+2}) + 14f(x_{i+3}) 3f(x_{i+4})}{2h^3}$ com $O(h^2)$
 - Diferença regressiva $f'''(x_i) = \frac{3f(x_{i-4}) 14f(x_{i-3}) + 24f(x_{i-2}) 18f(x_{i-1}) + 5f(x_i)}{2}$ com $O(h^2)$
- **Derivada terceira com 6 pontos** central necessita de x_{i-2} a x_{i+3}
 - Diferença central $f'''(x_i) = \frac{f(x_{i-3}) 8f(x_{i-2}) + 13f(x_{i-1}) 13f(x_{i+1}) + 8f(x_{i+2}) f(x_{i+3})}{843}$ com $O(h^4)$

 ${\bf Exemplo\ comparativo}$

Considere a função $f(x) = x^3$. Calcule numericamente a derivada primeira no ponto x = 3 aplicando as fórmulas de diferenças finitas progressiva, regressiva e central, usando:

- (a) os pontos x = 3, x = 4 e x = 5.
- (b) os pontos x = 3, x = 3, 25 e x = 3, 5.

Compare os resultados com a derivada exata (analítica).

- Diferenciação analítica: $f'(3) = 3.3^2 = 27$
- Diferenciação numérica com três pontos:
 - (a) os pontos x=3, x=4 e x=5. $\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) f(x_{i+2})}{2h} = \frac{-3f(3) + 4f(4) f(5)}{2(4-3)} = \frac{-3.(27) + 4.(64) (125)}{2(4-3)} = 25 \rightarrow Erro = \left| \frac{25 27}{27} .100 \right| = 7,4\%$
 - (b) os pontos x = 3, x = 3, 25 e x = 3, 5. $\frac{df(x)}{dx}\Big|_{x=3} = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) f(x_{i+2})}{2h} = \frac{-3f(3) + 4f(3, 25) f(3, 5)}{2(3, 25 3)} = \frac{-3 \cdot (27) + 4 \cdot (3, 25^3) (3, 5^3)}{2(0, 25)} = \frac{-3 \cdot$

Considere a função $f(x) = x^3$. Calcule numericamente a derivada primeira no ponto x = 3 aplicando as fórmulas de diferenças finitas progressiva, regressiva e central, usando:

- Para os pontos x = 3, x = 4 e x = 5, tem-se:
 - Resultado de 37 com erro de 37,04% Diferença finita progressiva com 2 pontos
 - $\bullet\,$ Resultado de 25 com erro de 7,04% Diferença finita progressiva com 3 pontos
- Para os pontos x = 3, x = 3, 25 e x = 3, 5, tem-se:
 - \bullet Resultado de 26,875 com erro de 0,46% Diferença finita progressiva com 2 pontos
- Os resultados mostram que a diferença finita progressiva com três pontos fornece uma derivada primeira muito mais precisa do que a diferença finita progressiva com dois pontos.
- Para h = 1, o erro cai de 37,04% para 7,4%.
- Para h = 0, 25, o erro cai de 8,57% para 0,46%.

Costa, JR®

Considere a função $f(x) = \frac{2^x}{x}$. Calcule numericamente a derivada segunda no ponto x = 2 aplicando a fórmula de diferença central com três pontos, usando:

- (a) os pontos x = 1,8, x = 2 e x = 2,2.
- (b) os pontos x = 1,9, x = 2 e x = 2,1.
 - Solução analítica A derivada segunda da função $f(x) = \frac{2^x}{x}$ é

$$f''(x) = \frac{2^x [ln(2)^2]}{x} - \frac{2 \cdot 2^x [ln(2)]}{x^2} + \frac{2 \cdot 2^x}{x^3}$$

de modo que o valor da derivada em x = 2 é f''(2) = 0,5746.

Diferenciação numérica

Figura: Solução python f''(x)

```
import sympy as sp
f=lambda x:(2**x)/x
def derivada(k,ordem=1):
    x = sp. Symbol('x')
    fun = k(x)
    dh=sp.diff(fun,x,ordem)
    return sp.lambdify(x,dh,'numpy')
df = derivada(f,2)
df(2)
```

0.5746116667165122

Fonte: Autor, (2024)

Considere a função $f(x) = \frac{2^x}{x}$. Calcule numericamente a derivada segunda no ponto x = 2 aplicando a fórmula de diferença central com três pontos, usando:

- (a) os pontos x = 1.8, x = 2 e x = 2.2.
- (b) os pontos x = 1,9, x = 2 e x = 2,1.
 - Diferenciação numérica

Figura: Solução Python itens 'a' e 'b'

```
a,b =[1.8,2,2.2],[1.9,2,2.1]
def der_st(X):
    h=X[0]-X[1]
    y=[2**x/x for x in X]
    df=(y[0]-2*y[1]+y[2])/h**2 # central
    return round(df,6)
print(der_st(a), der_st(b))
0.577482 0.575324
```

Fonte: Autor, (2024)

- Erro do item (a): $erro = \frac{0.577482 0.5746}{0.5746}.100 = \mathbf{0.5016\%}$
- Erro do item (b): $erro = \frac{0.575324 0.5746}{0.5746}.100 = 0.126\%$

Os resultados mostram que a fórmula da derivada central com três pontos fornece uma aproximação bastante precisa para o valor da derivada segunda.

Exercícios

- Veja a lista de exercícios na web
- Veja a lista de códigos em: https://github.com/jonathacosta/NM