Generalização do Método de Taylor de Ordem 2 e 3 via Método de Diferenças Finitas

Profª Drª Analice Costacurta Brandi
Mestrando Ayrton de Aguiar Amaral

Optativa - Tópicos de Matemática Aplicada
Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"

Sumário

Método de Taylor

$$\text{Dado o PVI} \begin{cases} y' = f(x,y) \\ y(x_0) = y_0 \end{cases}, \quad x \in (x_0, x_n)$$

- **Taylor de Ordem 1 = Euler Explícito**

$$y_{n+1} = y_n + h\, f(x_n, y_n)$$

- **Taylor de Ordem 2**

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} f'(x_n, y_n)$$

- **Taylor de Ordem 3**

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) + \frac{h^2}{2!} f'(x_n, y_n) + \frac{h^3}{3!} f''(x_n, y_n)$$

Dedução de f'

Derivada total primeira: $f' = \dfrac{d}{dx} f(x, y(x))$.

Pelo PVI, $y' = f(x, y)$. Aplicando a regra da cadeia em $f(x, y(x))$:

$$\frac{d}{dx} f(x, y(x)) = f_x(x, y) + f_y(x, y)\,\frac{dy}{dx}.$$

Como $\dfrac{dy}{dx} = f(x, y)$, obtemos

$$\boxed{f' = f_x + f_y\, f}$$

Dedução de f''

Derivada total segunda: $f'' = \dfrac{d^2}{dx^2} f(x, y(x))$.

Derivando novamente:

$$f'' = \frac{d}{dx}\Big(f_x + f_y\, f\Big) = \underbrace{\frac{d}{dx}(f_x)}_{\text{(A)}} + \underbrace{\frac{d}{dx}(f_y\, f)}_{\text{(B)}}.$$

(A) Pela regra da cadeia:

$$\frac{d}{dx}(f_x) = f_{xx} + f_{xy}\,\frac{dy}{dx} = f_{xx} + f_{xy}\, f.$$

(B) Pela regra do produto + regra da cadeia:

$$\frac{d}{dx}(f_y\, f) = (f_{yx} + f_{yy}\tfrac{dy}{dx})f + f_y\frac{df}{dx} = (f_{xy} + f_{yy} f)f + f_y(f_x + f_y f).$$

Somando:

$$\boxed{f'' = f_{xx} + 2f_{xy} f + f_{yy} f^2 + f_x f_y + f_y^2 f}$$

Como aproximar f' e f'' para o Método de Taylor

Notação: $f_x = \dfrac{\partial f}{\partial x}$, $f_y = \dfrac{\partial f}{\partial y}$.

$$f' = f_x + f_y\, f, \qquad f'' = f_{xx} + 2f_{xy}\, f + f_{yy}\, f^2 + f_x f_y + f_y^2\, f.$$

Podemos aproximar os valores das derivadas por diferenças finitas com a série de Taylor. Para f_x e f_y, qual aproximação é melhor usar?

Ideia: aproximar $f_x, f_y, f_{xx}, f_{xy}, f_{yy}$ por **diferenças finitas centradas** (erro $\mathcal{O}(h^2)$) para usar no Taylor de ordem 2 e 3, evitando derivadas analíticas difíceis.

Vantagem: esquemas centrados têm erro de truncamento $\mathcal{O}(h^2)$ para derivadas de 1ª ordem (maior acurácia que diferenças progressivas/regressivas $\mathcal{O}(h)$).

Série de Taylor para aproximar f_x (centrada)

Dada a função $f(x,y)$ em torno de (x,y), expandindo em série de Taylor, temos

$$f(x+h,y) = f(x,y) + hf_x(x,y) + \frac{h^2}{2} f_{xx}(x,y) + \mathcal{O}(h^3) \qquad (1)$$

$$f(x-h,y) = f(x,y) - hf_x(x,y) + \frac{h^2}{2} f_{xx}(x,y) + \mathcal{O}(h^3) \qquad (2)$$

Subtraindo (2) de (1), obtemos

$$f(x+h,y) - f(x-h,y) = 2hf_x(x,y) + \mathcal{O}(h^3)$$

Assim, isolando f_x:

$$\boxed{f_x(x,y) \approx \frac{f(x+h,y) - f(x-h,y)}{2h}}$$

Série de Taylor para aproximar f_y (centrada)

Dada a função $f(x, y)$ em torno de (x, y), expandindo em série de Taylor, temos

$$f(x, y + k) = f(x, y) + kf_y(x, y) + \frac{k^2}{2} f_{yy}(x, y) + \mathcal{O}(k^3) \qquad (3)$$

$$f(x, y - k) = f(x, y) - kf_y(x, y) + \frac{k^2}{2} f_{yy}(x, y) + \mathcal{O}(k^3) \qquad (4)$$

Subtraindo (4) de (3), obtemos

$$f(x, y + k) + f(x, y - k) = 2kf_y(x, y) + \mathcal{O}(k^3)$$

Assim, isolando f_y:

$$\boxed{f_y(x, y) \approx \frac{f(x, y + k) - f(x, y - k)}{2k}}$$

Série de Taylor para aproximar f_{xx} (centrada)

Dada a função $f(x, y)$ em torno de (x, y), expandindo em série de Taylor, temos

$$f(x+h, y) = f(x, y) + hf_x(x, y) + \frac{h^2}{2} f_{xx}(x, y) + \frac{h^3}{6} f_{xxx}(x, y) + \mathcal{O}(h^4) \tag{5}$$

$$f(x-h, y) = f(x, y) - hf_x(x, y) + \frac{h^2}{2} f_{xx}(x, y) - \frac{h^3}{6} f_{xxx}(x, y) + \mathcal{O}(h^4) \tag{6}$$

Somando (5) e (6), obtemos

$$f(x+h, y) + f(x-h, y) = 2f(x, y) + h^2 f_{xx}(x, y) + \mathcal{O}(h^4)$$

Assim, isolando f_{xx}:

$$\boxed{f_{xx} \approx \frac{f(x+h, y) - 2f(x, y) + f(x-h, y)}{h^2}}$$

Série de Taylor para aproximar f_{yy} (centrada)

Dada a função $f(x, y)$ em torno de (x, y), expandindo em série de Taylor, temos

$$f(x, y+k) = f(x, y) + kf_y(x, y) + \frac{k^2}{2} f_{yy}(x, y) + \frac{k^3}{6} f_{yyy}(x, y) + \mathcal{O}(k^4) \tag{7}$$

$$f(x, y-k) = f(x, y) - kf_y(x, y) + \frac{k^2}{2} f_{yy}(x, y) - \frac{k^3}{6} f_{yyy}(x, y) + \mathcal{O}(k^4) \tag{8}$$

Somando (7) e (8), obtemos

$$f(x, y+k) + f(x, y-k) = 2f(x, y) + k^2 f_{yy}(x, y) + \mathcal{O}(k^4)$$

Assim, isolando f_{yy}:

$$\boxed{f_{yy} \approx \frac{f(x, y+k) - 2f(x, y) + f(x, y-k)}{k^2}}$$

Série de Taylor para aproximar f_{xy} (mista centrada)

Considerando a fórmula de Taylor para duas variáveis:

$$
\begin{aligned}
f(x+h, y+k) \approx\; & f(x,y) + hf_x(x,y) + kf_y(x,y) + \\
& + \tfrac{h^2}{2} f_{xx}(x,y) + hkf_{xy}(x,y) + \tfrac{k^2}{2} f_{yy}(x,y)
\end{aligned}
$$

Usando $h = k$ para simplificar:

$$
\begin{aligned}
f(x+h, y+h) &= f + hf_x + hf_y + \tfrac{h^2}{2} f_{xx} + h^2 f_{xy} + \tfrac{h^2}{2} f_{yy} + \mathcal{O}(h^3), \\
f(x+h, y-h) &= f + hf_x - hf_y + \tfrac{h^2}{2} f_{xx} - h^2 f_{xy} + \tfrac{h^2}{2} f_{yy} + \mathcal{O}(h^3), \\
f(x-h, y+h) &= f - hf_x + hf_y + \tfrac{h^2}{2} f_{xx} - h^2 f_{xy} + \tfrac{h^2}{2} f_{yy} + \mathcal{O}(h^3), \\
f(x-h, y-h) &= f - hf_x - hf_y + \tfrac{h^2}{2} f_{xx} + h^2 f_{xy} + \tfrac{h^2}{2} f_{yy} + \mathcal{O}(h^3).
\end{aligned}
$$

Agora, considerando a seguinte operação com as expansões de Taylor:

$$f(x+h, y+h) - f(x+h, y-h) - f(x-h, y+h) + f(x-h, y-h)$$

Substituindo as expansões na expressão, todos os termos em f, f_x, f_y, f_{xx}, f_{yy} se cancelam, sobrando:

$$\begin{aligned} &f(x+h, y+h) - f(x+h, y-h) - f(x-h, y+h) + f(x-h, y-h) \\ &= 4h^2 f_{xy}(x, y) + \mathcal{O}(h^4). \end{aligned}$$

Por fim, isolando f_{xy}, obtemos a fórmula da derivada mista:

$$\boxed{f_{xy}(x, y) \approx \frac{f(x+h, y+h) - f(x+h, y-h) - f(x-h, y+h) + f(x-h, y-h)}{4h^2}}$$

Resumo – fórmulas para o método de Taylor

Atualizações de Taylor para o PVI $y' = f(x, y)$

$$\text{Ordem 1 (Euler):} \quad y_{n+1} = y_n + h\,f_n$$

$$\text{Ordem 2:} \quad y_{n+1} = y_n + h\,f_n + \tfrac{h^2}{2}\,f_n'$$

$$\text{Ordem 3:} \quad y_{n+1} = y_n + h\,f_n + \tfrac{h^2}{2}\,f_n' + \tfrac{h^3}{6}\,f_n''$$

onde $f_n = f(x_n, y_n)$, $f_n' = f'(x_n, y_n)$ e $f_n'' = f''(x_n, y_n)$.

Exemplo 1

$$\begin{cases} y' = y, \quad x \in [0,1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Solução exata: $y(x) = e^x$.

Para $f(x,y) = y$ temos $f_x = 0$, $f_y = 1$, logo $f' = y$, $f'' = y$ e

$$\text{Taylor-2: } y_{n+1} = y_n\left(1 + h + \frac{h^2}{2}\right),$$

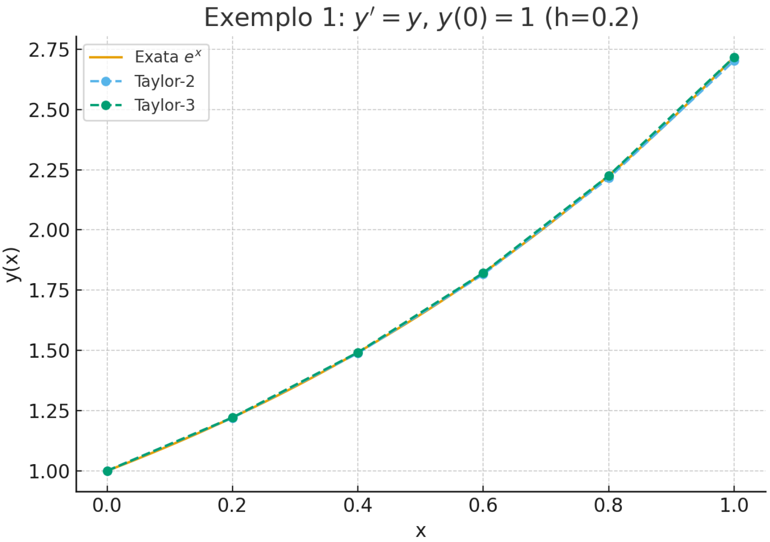
$$\text{Taylor-3: } y_{n+1} = y_n\left(1 + h + \frac{h^2}{2} + \frac{h^3}{6}\right).$$

Tabela de resultados — Exemplo 1 ($h = 0{,}2$)

x	Taylor-2	Taylor-3	Exata	$\|\text{erro}\|$ T2	$\|\text{erro}\|$ T3
0.0	1.000000	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.2	1.220000	1.221333	1.221403	0.001403	0.000069
0.4	1.488400	1.491655	1.491825	0.003425	0.000170
0.6	1.815848	1.821808	1.822119	0.006271	0.000311
0.8	2.215335	2.225035	2.225541	0.010206	0.000506
1.0	2.702708	2.717509	2.718282	0.015574	0.000772

Tabela: Exemplo 1: $y' = y$, $y(0) = 1$ com $h = 0{,}2$.

Resultados — Exemplo 1 ($h = 0{,}2$)



Exemplo 2

$$\begin{cases} y' = y + x, \quad x \in [0,1] \\ y(0) = 1 \end{cases}$$

Solução exata: $y(x) = 2e^x - x - 1$.
Aqui $f(x,y) = y + x$, logo $f_x = 1$, $f_y = 1$ e (com segundas parciais nulas)

$$f' = f_x + f_y f = 1 + (y + x), \qquad f'' = f_x f_y + f_y^2 f = 1 + (y + x).$$

$$\text{Taylor-2: } y_{n+1} = y_n + hf_n + \tfrac{h^2}{2} f_n',$$

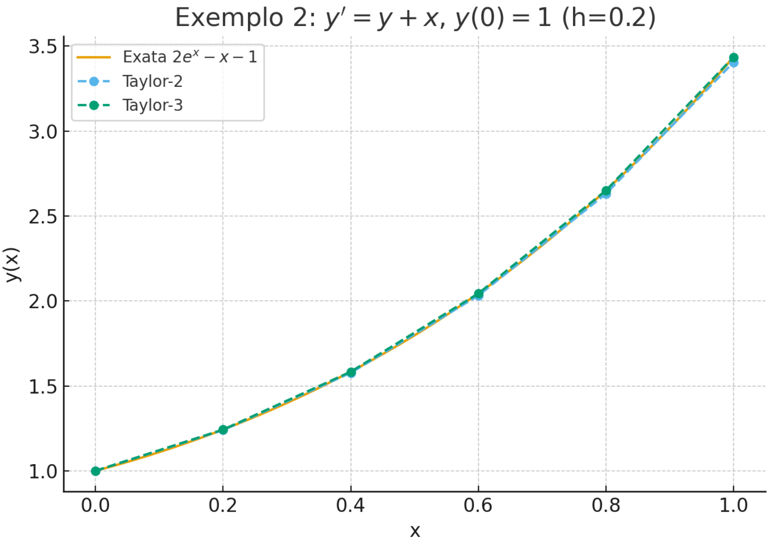
$$\text{Taylor-3: } y_{n+1} = y_n + hf_n + \tfrac{h^2}{2} f_n' + \tfrac{h^3}{6} f_n''.$$

Tabela de resultados — Exemplo 2 ($h = 0{,}2$)

x	Taylor-2	Taylor-3	Exata	$\lvert\mathrm{erro}\rvert$ T2	$\lvert\mathrm{erro}\rvert$ T3
0.0	1.000000	1.000000	1.000000	0.000000	0.000000
0.2	1.220000	1.221333	1.221403	0.001403	0.000069
0.4	1.488400	1.491655	1.491825	0.003425	0.000170
0.6	1.815848	1.821808	1.822119	0.006271	0.000311
0.8	2.215335	2.225035	2.225541	0.010206	0.000506
1.0	2.702708	2.717509	2.718282	0.015574	0.000772

Tabela: Exemplo 2: $y' = y + x$, $y(0) = 1$ com $h = 0{,}2$.

Resultados — Exemplo 2 ($h = 0{,}2$)



Implementação de um Código Genérico

Iniciaremos agora a implementação de um código genérico para os métodos de Taylor de ordem 1, 2 e 3.

Nosso objetivo é que o código obtenha soluções pelos métodos apenas pela inserção da EDO e as condições do PVI, sem necessidade de pré-tratamento algébrico. Para Taylor-2 e Taylor-3, as derivadas $f_x, f_y, f_{xx}, f_{xy}, f_{yy}$ podem ser aproximadas numericamente por diferenças finitas centradas.

Tarefa inicial: adapte o código do método de Taylor da aula anterior (PVI_Aula4_Exercício_2) para incluir Taylor-2 com f_x, f_y avaliados numericamente, pelo método de diferenças finitas.

Atividade em Sala

Utilizando o código adaptado e o PVI

$$\begin{cases} y' = sen(x), \quad x \in [0, 10] \\ y(0) = -1 \end{cases} \qquad \text{(solução exata: } y(x) = -\cos x\text{)}$$

1. Plote a solução para $h = 0{,}5$ e $h = 0{,}125$ usando Taylor-2 com derivadas analíticas e numéricas.
2. Plote os erros absolutos de Taylor-2 (analítico vs. numérico) para os mesmos h.
3. Analise a relação custo-benefício de usar derivadas numéricas por diferenças finitas em vez de derivadas analíticas. (O ganho de não derivar analiticamente compensa o erro adicional das aproximações numéricas de f', f''?)

Tarefa

Faça um código genérico (qualquer PVI) com Taylor-1/2/3 aproximando $f_x, f_y, f_{xx}, f_{xy}, f_{yy}$ por diferenças finitas. E, resolva:

$$\begin{cases} y' = 4x\sqrt{y}, & x \in [0,2] \\ y(0) = 1 \end{cases} \qquad \text{(solução exata: } y(x) = (1+x^2)^2\text{)}$$

1. Plote a solução analítica e as numéricas (três métodos) para $h = 0{,}2,\ 0{,}1,\ 0{,}05$.
2. Plote os erros absolutos dos três métodos para cada h.

(Poste seu código junto!)

Tarefa (continuação)

Substitua o PVI e repita:

$$\begin{cases} y' = \dfrac{sen(x)}{y}, \quad x \in [0, \pi] \\ y(0) = 1 \end{cases} \qquad \text{(solução exata: } y(x) = \sqrt{3 - 2\cos x}\text{)}$$

1. Plote a solução analítica e as numéricas (três métodos) para $h = \pi/5$, $\pi/10$, $\pi/20$.
2. Plote os erros absolutos dos três métodos para cada h.