Prof. Dr. Caio¹, Prof. Akira²

Este texto foi baseado em [1].

1. Diferenciação numérica

Consideremos uma função $f \in C^{\infty}(\mathbb{R})$. Com o intuito de simplificar a notação, vamos definir: $f(x_{i-1}) = f_{i-1}$, $f(x_i) = f_i$ e $f(x_{x+i}) = f_{i+1}$, com $i \in \mathbb{N} \cup \{0\}$. A figura 1 mostra a representação gráfica para esta função.

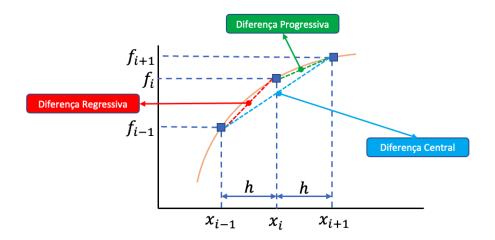


Figura 1: Representação gráfica da função f.

Expandindo a função em série de Taylor em torno de x_i e obtemos:

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + E_{tr}(h), (1)$$

 $^{^{1}}$ caiofrs@insper.edu.br.

²pauloafe@insper.edu.br.

em que

$$E_{tr}(h) = \frac{h^2}{2!} f_i'' \tag{2}$$

é o erro de truncamento. Da equação (1), podemos escrever:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + \mathcal{O}(h) \tag{3}$$

que é a **primeira diferença aproximada progressiva**. Analogamente, expandindo a função f_{i-1} em série de Taylor:

$$f_{i-1} = f_i - hf_i' + E_{tr}(h), (4)$$

sendo que E_{tr} tem a mesma forma que (2). Realizando o truncamento adequado, conseguimos escrever a **primeira diferença aproximada regressiva**, dada por:

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + \mathcal{O}(h).$$
 (5)

Subtraindo a equação 1 da equação 4, obtemos a **primeira diferença aproximada central**, dada por:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \tag{6}$$

Note que o erro de truncamento para a primeira diferença regressiva é a mesma que a apresentada na equação (2). No entanto, o erro da primeira diferença aproximada central é uma ordem superior:

$$E_{tr}(h) = -\frac{h^2}{6}f_i^{""}. (7)$$

Logo, esta acaba sendo mais precisa em termos de convergência do que as anteriores. Em outras palavras, caso utilizemos a metade do passo na discretização (i.e., h/2), para as diferenças regressiva e progressiva, obteríamos um erro duas vezes menor. No entanto, para a diferença central, obteríamos um erro quatro vezes menor.

Tomando agora os pontos x_i , x_{i+1} e x_{i+2} e, consequentemente, temos respectivamente, f_i , f_{i+1} e f_{i+2} . Realizando a expansão em série de Taylor de f_{i+2} :

$$f_{i+2} = f_i + 2hf_i' + \frac{4h^2}{2!}f_i'' + E_{tr}(h), \tag{8}$$

com

$$E_{tr}(h) = \frac{8h^3}{3!}. (9)$$

Multiplicando (1) por quatro e subtraindo (8), obtemos a **primeira diferença** aproximada progressiva de três pontos, dada por:

$$f_i' = \frac{-f_{i+1} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2h} + \mathcal{O}(h^2). \tag{10}$$

Agora, vamos considerar os pontos x_{i-2} , x_{i-1} e x_i e, respectivamente, f_{i-2} , f_{i-1} e f_i . Novamente, utilizando a série de Taylor temos que

$$f_{i-2} = f_i - 2hf_i' + \frac{4h^2}{2!} - E_{tr}(h), \tag{11}$$

com E_{tr} igual à expressão (9). Fazendo $-4 \times$ eq. (4) - eq. (11), conseguimos:

$$f_i' = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} + \mathcal{O}(h^2), \tag{12}$$

chamada de primeira diferença aproximada regressiva de três pontos.

Novamente, realizando considerando as seguintes expansões em série de Taylor:

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + h^2 \frac{f_i''}{2} + \dots, (13)$$

$$f_{i-1} = f_i - hf_i' + h^2 \frac{f_i''}{2} + \dots, (14)$$

e

$$f_{i-2} = f_i - 2hf_i' + 2h^2 \frac{f_i''}{2} + \dots, (15)$$

Somando eq. (13) e eq. (14), temos

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2), \tag{16}$$

que é a chamada **segunda diferença aproximada central**. Por fim, fazendo eq. 15 menos duas vezes eq. 14, obtemos a **segunda diferença aproximada regressiva**, dada por

$$f_i'' = \frac{f_{i-2}2f_{i-1} + f_i}{h^2} + \mathcal{O}(h). \tag{17}$$

2. Diferenciação numérica para equações diferenciais parciais (EDPs)

Podemos extrapolar o que deduzimos para o caso de uma variável para equações com várias variáveis. Similarmente ao caso unidimensional, podemos entender as derivadas parciais como a inclinação da reta no espaço como ilustrado na figura 2.

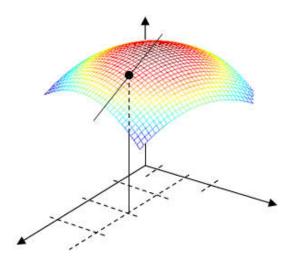


Figura 2: Interpretação geométrica para o caso em duas dimensões.

Agora, o passo no espaço terá que ser definido em em duas direções: $\Delta x = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ e $\Delta y = y_{i+1} - y_i = y_i - y_{i-1}$. Utilizando a notação apresentada anteriormente, temos que $f(x_i, y_j) = f_{i,j}$. Analogamente, ao que fizemos para o caso 1D, a **primeira diferença progressiva** é dada por:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i, y_i} = \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x), \tag{18}$$

a primeira diferença central é dada por:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i, y_j} = \frac{f_{i+1, j} - f_{i-1, j}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \tag{19}$$

e a **primeira diferença regressiva** por:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x_i, y_j} = \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x). \tag{20}$$

Analogamente, na direção y temos que a **primeira diferença progressiva** é dada por:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x_{i}, y_{j}} = \frac{f_{i, j+1} - f_{i, j}}{\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y), \tag{21}$$

a primeira diferença central é dada por:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x_i, y_j} = \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y^2), \tag{22}$$

e a **primeira diferença regressiva** por:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x_i, y_j} = \frac{f_{i,j} - f_{i,j-1}}{\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y). \tag{23}$$

As derivadas segunda são, por sua vez, dadas por:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x_i, y_j} = \frac{f_{i+1, j} - 2f_{i, j} + f_{i-1, j}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$
(24)

е

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{x_i, y_j} = \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \mathcal{O}(\Delta y^2). \tag{25}$$

A derivada mista é dada por

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x_i, y_i} = \frac{f_{i+1, j+1} - f_{i-1, j+1} - f_{i+1, j-1} + f_{i-1, j-1}}{4\Delta x \Delta y} + \mathcal{O}(\Delta x \Delta y).$$
 (26)

2.1. Convergência e estabilidade

Definição 1 (Convergência). Quando $\Delta x \to 0$ e $\Delta y \to 0$, os resultados por diferenças finitas se aproximam da solução verdadeira.

Definição 2 (Estabilidade). Os erros em qualquer estágio do cálculo não são amplificados, mas sim, atenuados à medida que os cálculos progridem.

Ressalta-se que métodos explicítos tem problemas de estabilidade. Consequentemente, uma das soluções é a utilização de métodos implícitos.

Referências

[1] S. Chapra, R. Canale, Numerical Methods for Engineers, McGraw Hill, 2016.