Física Computacional

ano letivo: 2021/2022

docente: Nuno Castro [nuno.castro@fisica.uminho.pt]

Licenciatura em Física e Licenciatura / Mestrado Integrado em Engenharia Física

6ª aula (11/11/2021)

Universidade do Minho
Escola de Ciências

Derivada de 1ª ordem

As várias fórmulas de derivação numérica obtêm-se fazendo combinações simples da expansão em série de Taylor da função nos pontos próximos do ponto onde se pretende calcular a derivada...

$$f_{k+1} = f_k + f'_k(x_{k+1} - x_k) + \frac{1}{2} f''_k (x_{k+1} - x_k)^2 + \cdots$$

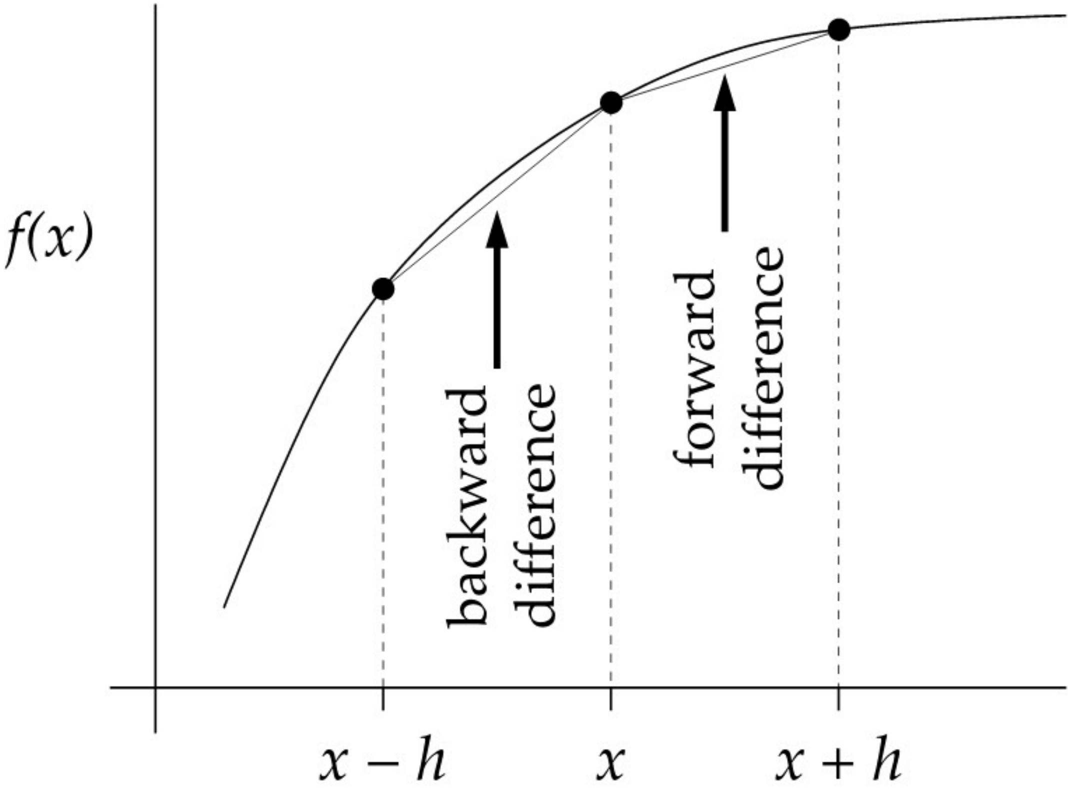
Derivada de 1ª ordem
(2 pontos)

$$f_{k+1} = f_k + f'_k(x_{k+1} - x_k) + \frac{1}{2} f''_k (x_{k+1} - x_k)^2 + \cdots$$

$$\Downarrow \quad h = x_{k+1} - x_k$$

$$f'_k = \frac{f_{k+1} - f_k}{h} + \mathcal{O}(h)$$

Derivada de 1ª ordem (2 pontos)



Derivada de 1ª ordem (3 pontos)

$$f_{k+1} = f_k + f'_k h + \frac{1}{2} f''_k h^2 + \cdots$$

$$-\quad f_{k-1} = f_k - f'_k h + \frac{1}{2} f''_k h^2 + \cdots$$

$$f'_k = \frac{f_{k+1} - f_{k-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

Derivada de 1ª ordem
(5 pontos)

$$-\quad f_{k+2} = f_k + f_k'(2h) + \frac{1}{2}f_k''(2h)^2 + \frac{1}{6}f_k'''(2h)^3 + \frac{1}{24}f_k''''(2h)^4 + \cdots$$

$$+8\quad f_{k+1} = f_k + f_k'h + \frac{1}{2}f_k''h^2 + \frac{1}{6}f_k'''h^3 + \frac{1}{24}f_k''''h^4 + \cdots$$

$$-8\quad f_{k-1} = f_k - f_k'h + \frac{1}{2}f_k''h^2 - \frac{1}{6}f_k'''h^3 + \frac{1}{24}f_k''''h^4 + \cdots$$

$$+\quad f_{k-2} = f_k - f_k'(2h) + \frac{1}{2}f_k''(2h)^2 - \frac{1}{6}f_k'''(2h)^3 + \frac{1}{24}f_k''''(2h)^4 + \cdots$$

$$f_k' = \frac{f_{k-2} - 8f_{k-1} + 8f_{k+1} - f_{k+2}}{12h} + \mathcal{O}(h^4)$$

Derivada de 2ª ordem (3 pontos)

$$f_{k+1} = f_k + f'_k h + \frac{1}{2} f''_k h^2 + \frac{1}{6} f'''_k h^3 + \frac{1}{24} f''''_k h^4 + \cdots$$

$$+ \quad f_{k-1} = f_k - f'_k h + \frac{1}{2} f''_k h^2 - \frac{1}{6} f'''_k h^3 + \frac{1}{24} f''''_k h^4 + \cdots$$

$$f''_k = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Derivada de 2ª ordem
(5 pontos)

$$-\quad f_{k+2} = f_k + f_k'(2h) + \frac{1}{2}f_k''(2h)^2 + \frac{1}{6}f_k'''(2h)^3 + \frac{1}{24}f_k''''(2h)^4 + \cdots$$

$$+16\quad f_{k+1} = f_k + f_k'h + \frac{1}{2}f_k''h^2 + \frac{1}{6}f_k'''h^3 + \frac{1}{24}f_k''''h^4 + \cdots$$

$$+16\quad f_{k-1} = f_k - f_k'h + \frac{1}{2}f_k''h^2 - \frac{1}{6}f_k'''h^3 + \frac{1}{24}f_k''''h^4 + \cdots$$

$$-\quad f_{k-2} = f_k - f_k'(2h) + \frac{1}{2}f_k''(2h)^2 - \frac{1}{6}f_k'''(2h)^3 + \frac{1}{24}f_k''''(2h)^4 + \cdots$$

$$f_k'' = \frac{-f_{k-2} + 16f_{k-1} - 30f_k + 16f_{k+1} - f_{k+2}}{12h^2} + \mathcal{O}(h^4)$$

Cálculo numérico de derivadas

Derivadas parciais:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x+h/2, y) - f(x-h/2, y)}{h}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f(x, y+h/2) - f(x, y-h/2)}{h}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{f(x+h/2, y+h/2) - f(x-h/2, y+h/2) - f(x+h/2, y-h/2) + f(x-h/2, y-h/2)}{h^2}$$

sumpy: derivadas algébricas em python

In [1]:
```
from sympy import Symbol, Derivative

x= Symbol('x')

function= x**4 + 7*x**3 + 8

deriv= Derivative(function, x)
deriv.doit()

```

Out[1]: $4x^3 + 21x^2$

Integração numérica

- Para integrar numericamente uma função o procedimento, qualquer que seja a regra usada, é:
  - Escolher um conjunto discreto de pontos x_i;
  - Atribuir, de acordo com a regra de integração escolhida, um peso w_i a cada ponto x_i;
  - Calcular o integral fazendo uma soma ponderada:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_i w_i f(x_i)$$

Regra dos retângulos

- A maneira mais simples fazer esta soma ponderada é dividir o domínio de integração em N intervalos de largura $h = (b - a)/N$ e considerar que o integral da função num desses intervalos é dado simplesmente através do produto do valor da função no ponto médio do intervalo pela largura do intervalo:

$$\int_a^b f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{N-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) \underbrace{h}_{w_i} \qquad (x_0 \equiv a, x_N \equiv b)$$

Regra dos retângulos

- Este método corresponde a aproximar a área abaixo da função por uma série de rectângulos

Regra dos retângulos

- Este método de cálculo do integral não é muito eficaz, pois só com intervalos muito pequenos se comete um erro pequeno...
- Para melhorar o processo, considere-se o integral apenas num dos intervalos

$$I_j = \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx$$

- Se se expandir *f(x)* em série de Taylor em torno de x_j e se desprezarem todos os termos de ordem superior à primeira, vem

$$I_j \simeq \int_{x_j}^{x_{j+1}} \left(f(x_j) + f'(x_j)(x - x_j)\right) dx$$

Regra do trapézio

- Recorrendo à fórmula de 2 pontos para a derivada:

$$I_j \simeq \int_{x_j}^{x_{j+1}} \left(f(x_j) + \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{h}(x - x_j) \right) dx =$$

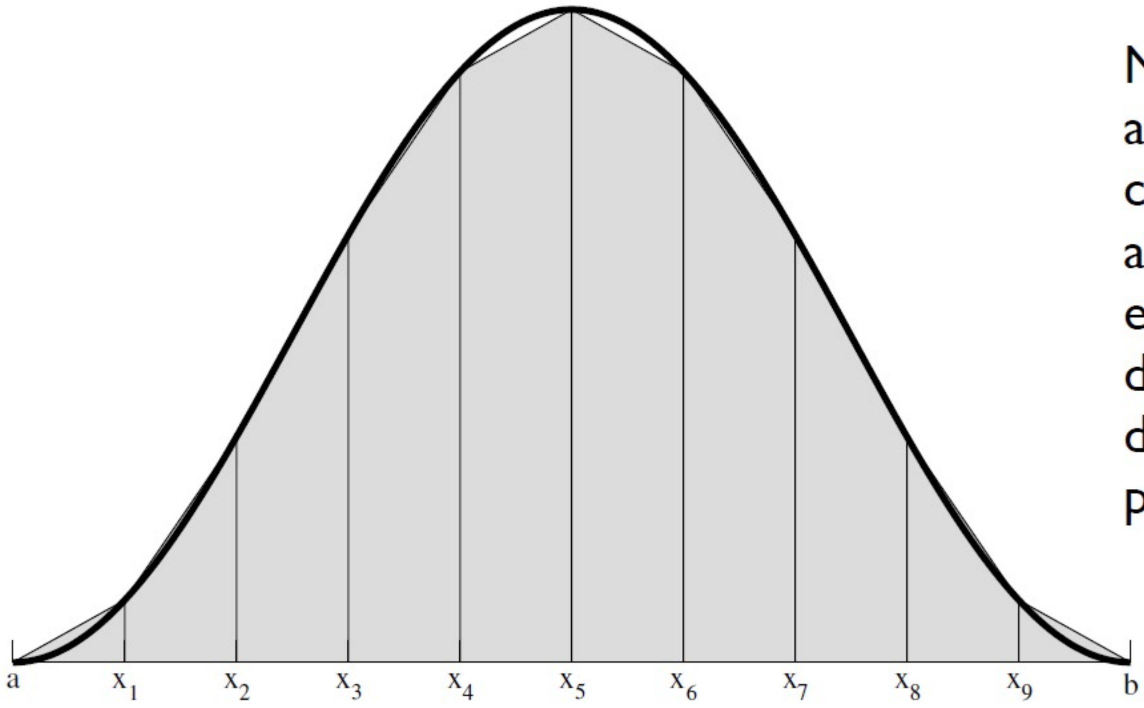
$$= hf(x_j) + \frac{f(x_{j+1}) - f(x_j)}{h}\frac{h^2}{2} = h\frac{f(x_j) + f(x_{j+1})}{2} + \mathcal{O}(h^3)$$

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=0}^{N-1} I_j \simeq \frac{h}{2}\sum_{j=0}^{N-1} (f(x_j) + f(x_{j+1}))$$

$$\boxed{\int_a^b f(x)dx \simeq \frac{h}{2}\left(f(a) + 2\sum_{j=1}^{N-1} f(x_j) + f(b) \right)} + \mathcal{O}(h^2)$$

Regra do trapézio

Esta regra de integração é conhecida como **regra do trapézio** e corresponde a aproximar a área abaixo da função por uma soma das áreas de vários trapézios:



Na prática,
a regra do trapézio consiste em aproximar a função entre os extremos de cada intervalo de largura *h* por uma recta...

Regra do trapézio

Dados os valores da velocidade de um objecto, obter uma estimative da distância percorrida no interval de tempo [0,3].

Time (s)	0.0	1.0	2.0	3.0
Velocity (m/s)	0.0	10	12	14

$$Distância = \int_0^3 V(t)dt = \frac{1}{2}((10+0)+(12+10)+(14+12))$$

$$= 5 + 11 + 13 = 29 \text{ m}$$

Regra de Simpson

Para melhorar a regra do trapézio basta melhorar a aproximação. A **regra de Simpson** consiste em aproximar a função entre os extremos de cada intervalo por uma parábola. Esta regra de integração pode ser deduzida de uma forma bastante simples. Considere-se o integral apenas no intervalo entre x_{j-1} e x_{j+1} (são precisos 3 pontos para definir uma parábola...)

$$I_j = \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} f(x)dx$$

$$\simeq \int_{x_{j-1}}^{x_{j+1}} \left(f(x_j) + f'(x_j)(x - x_j) + \frac{1}{2} f''(x_j)(x - x_j)^2 \right) dx$$

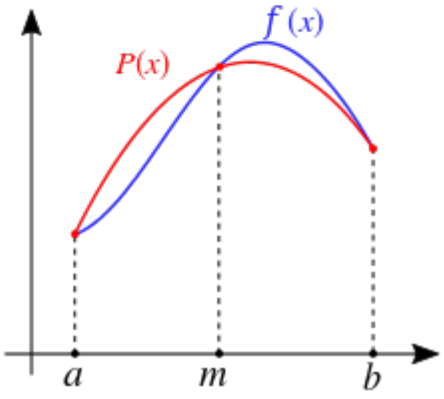
Regra de Simpson

- A Fórmula de Simpson faz uma aproximação de f(x) pelo polinómio P (x) de grau 2 que admite o mesmo valor de f (x) em a, b, e no ponto central m = (a + b) / 2

- Pode-se utilizar interpolação por polinómios de Lagrange para encontrar uma expressão para essa função polinomial.

$$P(x) = f(a)\frac{(x-m)(x-b)}{(a-m)(a-b)} + f(m)\frac{(x-a)(x-b)}{(m-a)(m-b)} + f(b)\frac{(x-a)(x-m)}{(b-a)(b-m)}$$

$$\boxed{\int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b P(x)\,dx = \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right]}$$



Integração numérica

- A regra de Simpson é a regra de integração unidimensional mais conhecida. Uma das razões para o seu sucesso é o facto de produzir resultados melhores que o esperado, pois a primeira correcção a esta regra - a inclusão do termo de terceira ordem da série de Taylor - é nula, sendo preciso incluir o termo de quarta ordem para obter uma melhoria

- Seguindo o processo de obtenção das regras do trapézio e de Simpson, é possível obter formas mais "precisas" para o cálculo dos integrais (**regras de Newton-Cotes**). Mas a regra de Simpson é um bom compromisso entre simplicidade da formulação e precisão!

- Note-se que a regra do Trapézio é uma fórmula exacta se a função integranda for um polinómio do primeiro grau, enquanto a regra de Simpson é exacta se a função integranda for um polinómio de segundo (ou terceiro...) grau