Tarefas de Diferenciação Numérica

Roberto Sérgio Ribeiro de Meneses - 520403
Tiago Barros - 520401

18/03/2024

Tarefa 01 : Desenvolva uma fórmula de derivada segunda na filosofia central de tal forma que o erro seja da ordem de $(\Delta x)^4$.

a) Combinando expansões em série de Taylor de pontos da vizinhança

1. Análise preliminar feita com a série de Taylor

(a) O termo da série de Taylor correspondente ao erro deve ser, pelo menos, $\frac{1}{5!}\Delta x^5 f^{(5)}(x)$, pois o termo que dividirá a expressão é o Δx^2 e, como o erro deve ser Δx^4, é necessário desenvolver até o termo Δx^5 aparecer.

(b) Os termos que devem ser eliminados são aqueles associados as derivadas de primeira, terceira, quarta e quinta ordem (4 termos vilões)

2. Equações a serem combinadas para eliminação dos termos indesejados

1. $f(i+1) = f(x) + \Delta x f'(x) + \frac{1}{2!}\Delta x^2 f''(x) + \frac{1}{3!}\Delta x^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}\Delta x^4 f^{(4)}(x) + \frac{1}{5!}\Delta x^5 f^{(5)}(x) + \frac{1}{6!}\Delta x^6 f^{(6)}(x)$

2. $f(i-1) = f(x) - \Delta x f'(x) + \frac{1}{2!}\Delta x^2 f''(x) - \frac{1}{3!}\Delta x^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}\Delta x^4 f^{(4)}(x) - \frac{1}{5!}\Delta x^5 f^{(5)}(x) + \frac{1}{6!}\Delta x^6 f^{(6)}(x)$

3. $f(i+2) = f(x) + 2\Delta x f'(x) + \frac{1}{2!}(2\Delta x)^2 f''(x) + \frac{1}{3!}(2\Delta x)^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}(2\Delta x)^4 f^{(4)}(x) + \frac{1}{5!}(2\Delta x)^5 f^{(5)}(x) + \frac{1}{6!}(2\Delta x)^6 f^{(6)}(x)$

4. $f(i-2) = f(x) - 2\Delta x f'(x) + \frac{1}{2!}(2\Delta x)^2 f''(x) - \frac{1}{3!}(2\Delta x)^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}(2\Delta x)^4 f^{(4)}(x) - \frac{1}{5!}(2\Delta x)^5 f^{(5)}(x) + \frac{1}{6!}(2\Delta x)^6 f^{(6)}(x)$

5. $f(i+3) = f(x) + 3\Delta x f'(x) + \frac{1}{2!}(3\Delta x)^2 f''(x) + \frac{1}{3!}(3\Delta x)^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}(3\Delta x)^4 f^{(4)}(x) + \frac{1}{5!}(3\Delta x)^5 f^{(5)}(x) + \frac{1}{6!}(3\Delta x)^6 f^{(6)}(x)$

6. $f(i-3) = f(x) - 3\Delta x f'(x) + \frac{1}{2!}(3\Delta x)^2 f''(x) - \frac{1}{3!}(3\Delta x)^3 f'''(x) + \frac{1}{4!}(3\Delta x)^4 f^{(4)}(x) - \frac{1}{5!}(3\Delta x)^5 f^{(5)}(x) + \frac{1}{6!}(3\Delta x)^6 f^{(6)}(x)$

3. Eliminação dos termos indesejados (Abordagem geral)

(a) Equação para eliminação das derivadas de primeira ordem

$$(7) \quad \alpha - \beta + 2\gamma - 2\omega + 3\psi - 3\theta = 0.$$

(b) Equação para eliminação das derivadas de terceira

$$(8) \quad \alpha + \beta + 8\gamma + 8\omega + 27\psi + 27\theta = 0.$$

(c) Equação para eliminação das derivadas de quarta ordem

$$(9) \quad \alpha + \beta + 16\gamma + 16\omega + 81\psi + 81\theta = 0.$$

(d) Equação para eliminação das derivadas de quinta ordem

$$(10) \quad \alpha - \beta + 32\gamma - 32\omega + 243\psi - 243\theta = 0.$$

Representação matricial do sistema de equações homogêneas:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & -1 & 8 & -8 & 27 & -27 \\ 1 & 1 & 16 & 16 & 81 & 81 \\ 1 & -1 & 32 & -32 & 243 & -243 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \omega \\ \psi \\ \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Utilizando o método de Gauss-Jordan, obtemos o sistema abaixo:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -16 & 0 & -81 \\ 0 & 1 & 0 & -16 & 0 & -81 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \omega \\ \psi \\ \theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Vamos atribuir valores às variáveis livres ω e θ e encontrar os valores correspondentes das demais variáveis:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \psi \end{bmatrix} = \omega \begin{bmatrix} -16 \\ -16 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \theta \begin{bmatrix} -81 \\ -81 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Assim, as variáveis usadas na eliminação dos termos indesejados são:

$$\alpha = -16\omega - 81\theta$$
$$\beta = -16\omega - 81\theta$$
$$\gamma = \omega$$
$$\psi = \theta$$

Usando $\omega = 5$, $\theta = -1$ Com estes valores, as equações combinadas, ou seja

$$\begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \psi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 5 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Com estes valores, as equações combinadas, ou seja

$$\alpha(1) + \beta(2) + \gamma(3) + \omega(4) + \psi(5) + \theta(6)$$

resultam em uma única equação

$$f_{i+1} + f_{i-1} + 5 * f_{i+2} + 5 * f_{i-2} - 1 * f_{i+3} - 1 * f_{i-3} =$$
$$\frac{1}{2!} * f_i" * (1 * 1 + 1 * 1 + 4 * 5 + 4 * 5 + 9 * (-1) + 9 * (-1) + \frac{1}{6!} * f_i^{VI} * (1 + 1 + 64 * 4 + 64 * 4 - 729 - 729)$$

Calculando as multiplicações chegamos em:

$$f_{i+1} + f_{i-1} + 5 * f_{i+2} + 5 * f_{i-2} - 1 * f_{i+3} - 1 * f_{i-3} = \frac{1}{2!} * f_i" * 24 + \frac{1}{6!} * f_i^{VI} (\Delta x)^6 * (-944)$$

Isolando o f_i'' temos:

$$f_i" = \frac{f_{i+1}+f_{i-1}+5*f_{i+2}+5*f_{i-2}-1*f_{i+3}-1*f_{i-3}}{12(\Delta x)^2} + 944\frac{*f_i^{VI}(\Delta x)^6}{6!*12(\Delta x)^2}$$

Logo, chegamos a seguinte fórmula da derivada segunda:

$$f_i" = \frac{f_{i+1}+f_{i-1}+5*f_{i+2}+5*f_{i-2}-1*f_{i+3}-1*f_{i-3}}{12(\Delta x)^2}$$

Com o erro de:

$$944\frac{*f_i^{VI}(\Delta x)^6}{6!*12(\Delta x)^2}$$

b) Usando polinômio de interpolação de Newton

1. Análise preliminar feita com a série de Taylor

A análise premiliar é igual a da série taylor, então temos os seguintes pontos amostrais:

$$f(x_i)f(x_{i+1})f(x_{i+2})f(x_{i+3})f(x_{i+4})f(x_{i+5}))$$

2. Construção do polinômio de interpolação de Newton

O polinômio de interpolação de Newton que passa por N+1 pontos amostrais igualmente espaçados é dado por:
$g(s) = \sum_{k=1}^{N} \binom{s}{k} * \Delta^k * f_0$
onde

$$\binom{s}{k} = \frac{s!}{k!(s-k)!}$$

e
$\Delta^k * f_0 = f_i$ se $k = 0$
$\Delta^k * f_0 = \Delta^{k-1} * f_{i+1}$ - $\Delta^{k-1} * f_i$ se $k > 0$
Para esta questão temos que N=5, o que significa que o polinômio de interpolação passará por 6 pontos

$g(s) = \sum_{k=0}^{5} \binom{s}{k} * \Delta^k * f_0$
$g(s) = \frac{s!}{0!(s)!}\Delta^0 * f_0 + \frac{s!}{1!(s-1)!}\Delta^1 * f_0 + \frac{s!}{2!(s-2)!}\Delta^2 * f_0 + \frac{s!}{3!(s-3)!}\Delta^3 * f_0 + \frac{s!}{4!(s-4)!}\Delta^4 * f_0 + \frac{s!}{5!(s-5)!}\Delta^5 * f_0$

3. Mudança de variável e cálculo da derivada usando a regra da cadeia

Uma análise dos dois eixos abaixo, que mostram os valores das coordenadas dos pontos amostrais nos respectivos sistema de coordenadas, nos permite escrever expressões que relacionam um sistema com o outro. Assim,

$x(s) = x_i + s\Delta$

$s(x) = \frac{1}{\Delta x}(x - x_i)$

A função f(x) a ser derivada é aproximada pelo polinômio de interpolação de Newton, que é expresso como uma função de x por meio da mudança de variável da equação anterior. Dessa maneira, temos:

$$f(x) \approx g(s(x))$$

A equação anterior pode ser explicitamente escrita como função de x, substituindo-se a equação $s(x) = \frac{1}{\Delta x}(x - x_i)$ na equação g(s). No entanto, para calcular a derivada de f(x) em relação à variável x, essa substituição explícita não é necessária, bastando aplicar a regra da cadeia. Portanto, podemos escrever

$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} \approx \frac{dg(s)}{ds}\frac{ds(x)}{dx}$

onde pela equação $s(x)$:

$\frac{ds(x)}{dx} = \frac{1}{\Delta x}$

Assim, a equação da derivada da primeria pode ser reescrita como :

$f'(x) = \frac{df(x)}{dx} \approx \frac{1}{\Delta x} * \frac{dg(s)}{ds}$

Aplicando a regra da cadeira sucessivamente, temos:

$f''(x) = \frac{d^2 f(x)}{dx^2} \approx \frac{1}{\Delta x^2} * \frac{d^2 g(s)}{ds^2}$

Calculando a derivada de segunda ordem da expressão de g(s) na equação g(s), e substituindo na equação anterior temos

$$f'' = \frac{1}{\Delta x^2} * (\Delta^2 f_0 + (s - \frac{1}{3}) * (\Delta^3 f_0) + (\frac{1}{2}s^2 - \frac{3}{2}s + \frac{11}{2}) * (\Delta^4 * f_0) + (\frac{1}{6}s^3 - s^2 + \frac{7}{4} * s - \frac{5}{6}) * (\Delta^5 * f_0))$$

4. Dedução da expressão para cálculo da derivada terceira no ponto xi

A equação anterior é a expressão da derivada de segunda ordem, com relação a x, do polinômio de interpolação em qualquer posição x(s). Assim, se quisermos a derivada no ponto x_i, basta substituir s = 0. Portanto:

$$f'' = \frac{1}{\Delta x^2} * (\Delta^2 f_0 + (0 - \frac{1}{3}) * (\Delta^3 f_0) + (\frac{1}{2} * 0 - \frac{3}{2} * 0 + \frac{11}{2}) * (\Delta^4 * f_0) + (\frac{1}{6} * 0 - 0 + \frac{7}{4} * 0 - \frac{5}{6}) * (\Delta^5 * f_0))$$

$$f'' = \frac{1}{\Delta x^2} * (\Delta^2 f_0 + (-\frac{1}{3}) * (\Delta^3 f_0) + (\frac{11}{2}) * (\Delta^4 * f_0) + (-\frac{5}{6}) * (\Delta^5 * f_0))$$

Sabendo que:

$\Delta^k * f_i = f_i$ se $k = 0$

$\Delta^k * f_i$ = $\Delta^{k-1} * f_{i+1}$ - $\Delta^{k-1} * f_i$ se $k > 0$
Vamos calcular $\Delta^2 * f_0$

$$\begin{aligned}\Delta^2 * f_0 &= \Delta^1 * f_1 - \Delta^1 * f_0 \\ &= [\Delta^0 * f_2 - \Delta^0 * f_1] - [\Delta^0 * f_1 - \Delta^0 * f_0] \\ &= [f_2 - f_1] - [f_1 - f_0] \\ &= f_2 - 2 * f_1 + f_0\end{aligned}$$

Vamos calcular $\Delta^3 * f_0$

$$\begin{aligned}\Delta^3 * f_0 &= \Delta^2 * f_1 - \Delta^2 * f_0 \\ &= [f_3 - 2 * f_2 + f_1] - [f_2 - 2 * f_1 + f_0]\end{aligned}$$

$= f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0$
Vamos calcular $\Delta^4 * f_0$

$$\Delta^4 * f_0 = \Delta^3 * f_1 - \Delta^3 * f_0$$

$$= [f_4 - 3f_3 + 3f_2 - f_1] - [f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0]$$

$$= f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0$$

Vamos calcular $\Delta^5 * f_0$

$$\Delta^5 * f_0 = \Delta^4 * f_1 - \Delta^4 * f_0$$

$$= [f_5 - 4f_4 + 6f_3 - 4f_2 + f_1] - [f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0]$$

$$= f_5 - 5f_4 + 10f_3 - 10f_2 + 5f_1 + f_0$$

Agora, vamos substituir para encontrar a derivada segunda:

$$f'' = \frac{1}{\Delta x^2} * (f_2 - 2 * f_1 + f_0 + (-\frac{1}{3}) * (f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0) + (\frac{11}{2}) * (f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0) + (-\frac{5}{6}) * (f_5 - 5f_4 + 10f_3 - 10f_2 + 5f_1 - f_0))$$

$$= \frac{1}{\Delta x^2} * (-\frac{5}{6}f_5 + \frac{29}{3}f_4 - \frac{92}{3}f_3 + \frac{130}{3}f_2 - \frac{175}{6}f_1 + \frac{23}{3}f_0)$$