Tarefa 1

Gustavo Fernandez Vidal Vazquez - 537296

Desenvolva uma fórmula de derivada segunda na filosofia central de tal forma que o erro seja na ordem de $(\Delta_x)^4$

OBS: Para essa atividade, estou usando como padrão f_{k+i} **como sinônimo de** $f(x+i\Delta x)$

a) Combinando expansões em série de Taylor

Por expansão de série de Taylor, vamos analisar como se comporta f_{k+1}

$$f_{k+1} = f_k + f'_k\Delta x + \frac{1}{2}f''_k(\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}f'''_k(\Delta x)^3 + \frac{1}{4!}f^{iv}_k(\Delta x)^4 + \frac{1}{5!}f^{v}_k(\Delta x)^5 + \frac{1}{6!}f^{vi}_k(\Delta x)^6 + \ldots$$

Como estamos falando de derivada segunda, o sexto termo já corresponde ao erro, já que quando isolarmos o termo de derivada segunda, o grau do seu Δx será quatro. Dessa forma, precisamos zerar os termos de derivada primeira, terceira, quarta e quinta.

Para conseguir zerar, precisaremos de mais cinco fórmulas. Quatro adicionais para cancelar os termos necessários mais uma para manter a proporção da filosofia central.

$$1)\ f_{k+1} = f_k + f'_k\Delta x + \frac{1}{2}f''_k(\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}f'''_k(\Delta x)^3 + \frac{1}{4!}f^{iv}_k(\Delta x)^4 + \frac{1}{5!}f^{v}_k(\Delta x)^5 + \frac{1}{6!}f^{vi}_k(\Delta x)^6 + \ldots$$

$$2)\ f_{k-1} = f_k - f'_k\Delta x + \frac{1}{2}f''_k(\Delta x)^2 - \frac{1}{3!}f'''_k(\Delta x)^3 + \frac{1}{4!}f^{iv}_k(\Delta x)^4 - \frac{1}{5!}f^{v}_k(\Delta x)^5 + \frac{1}{6!}f^{vi}_k(\Delta x)^6 + \ldots$$

$$3)\ f_{k+2} = f_k + 2f'_k\Delta x + \frac{4}{2}f''_k(\Delta x)^2 + \frac{8}{3!}f'''_k(\Delta x)^3 + \frac{16}{4!}f^{iv}_k(\Delta x)^4 + \frac{32}{5!}f^{v}_k(\Delta x)^5 + \frac{64}{6!}f^{vi}_k(\Delta x)^6 + \ldots$$

$$4)\ f_{k-2} = f_k - 2f'_k\Delta x + \frac{4}{2}f''_k(\Delta x)^2 - \frac{8}{3!}f'''_k(\Delta x)^3 + \frac{16}{4!}f^{iv}_k(\Delta x)^4 - \frac{32}{5!}f^{v}_k(\Delta x)^5 + \frac{64}{6!}f^{vi}_k(\Delta x)^6 + \ldots$$

$$5)\ f_{k+3} = f_k + 3f'_k\Delta x + \frac{9}{2}f''_k(\Delta x)^2 + \frac{27}{3!}f'''_k(\Delta x)^3 + \frac{81}{4!}f^{iv}_k(\Delta x)^4 + \frac{243}{5!}f^{v}_k(\Delta x)^5 + \frac{729}{6!}f^{vi}_k(\Delta x)^6 + \ldots$$

$$6)\ f_{k-3} = f_k - 3f'_k\Delta x + \frac{9}{2}f''_k(\Delta x)^2 - \frac{27}{3!}f'''_k(\Delta x)^3 + \frac{81}{4!}f^{iv}_k(\Delta x)^4 - \frac{243}{5!}f^{v}_k(\Delta x)^5 + \frac{729}{6!}f^{vi}_k(\Delta x)^6 + \ldots$$

O termo do erro $(\Delta x)^6$ pode ser ignorado.

Cada equação será multiplicada por uma letra e depois precisaremos zerar os termos corretos.
$a * 1) + b * 2) + c * 3) + d * 4) + e * 5) + f * 6)$

Assim, podemos formar a seguinte expressão abaixo:

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & -1 & 8 & -8 & 27 & -27 \\ 1 & 1 & 16 & 16 & 81 & 81 \\ 1 & -1 & 32 & -32 & 243 & -243 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

O que nos dá a seguinte solução geral:

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -16d - 81f \\ -16d - 81f \\ d \\ d \\ f \\ f \end{bmatrix}$$

Fazendo d = 5 e f = -1 temos

$$\begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \\ f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 5 \\ 5 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Multiplicando as fórmulas pelas constantes e somando, já isolando a derivada segunda, temos a seguinte fórmula:

$$f_{k+1} + f_{k-1} + 5f_{k+2} + 5f_{k-2} - f_{k+3} - f_{k-3} = 10f_k + 12f_k''(\Delta x)^2$$

Daí, basta isolar o termo de derivada segunda:

$$f_k'' = \frac{f_{k+1} + f_{k-1} + 5f_{k+2} + 5f_{k-2} - f_{k+3} - f_{k-3} - 10f_k}{12(\Delta x)^2}$$

b) Usando polinômio de interpolação de Newton

Precisamos de 7 pontos para expandir com a mesma fórmula:

$$x_{k+1}, x_{k+2}, x_{k+3}, x_{k+4}, x_{k+5}, x_{k+6}, x_{k+7}$$

gerando uma analogia com a reta S.

$$0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$$

usando:

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

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

Como temos que $f(x) \approx g(s(x))$, chegamos que

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

onde $\frac{ds(x)}{dx} = \frac{1}{dx}$. Daí:

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

Então, basta achar $g(s)$.

Temos que o polinômio de interpolação que passa por N+1 pontos amostrais é:

$$g(s) = \sum_{K=0}^{N} \binom{s}{k} \Delta^k f_0$$

onde

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

Assim, para N = 6 (passa pelos 7 pontos):

$g(s) = \Delta^0 f_0 + s\Delta^1 f_0 + \frac{1}{2}(s^2 - s)\Delta^2 f_0 + \frac{1}{6}(s^3 - 3s^2 + 2s)\Delta^3 f_0 + \frac{1}{24}(s^4 - 6s^3 + 11s^2 - 6s)\Delta^4 f_0 + \frac{1}{120}(s^5 - 10s^4 + 35s^3 - 50s^2 + 24s)\Delta^5 f_0 + \frac{1}{720}(s^6 - 15s^5 + 85s^4 - 225s^3 + 274s^2 - 120s)\Delta^6 f_0$

derivando duas vezes:

$g''(s) = \Delta^2 f_0 + (s-1)\Delta^3 f_0 + \frac{1}{24}(12s^2 - 36s + 22)\Delta^4 f_0 + \frac{1}{120}(20s^3 - 120s^2 + 210s - 100)\Delta^5 f_0 + \frac{1}{720}(30s^4 - 300s^3 + 1020s^2 - 1350s + 548)\Delta^6 f_0$

daí:

$$f''(x) = \frac{g''(s)}{(\Delta x)^2}$$

fazendo $s = 3$ temos:

$$f''(x) = \frac{\Delta^2 f_0 + 2\Delta^3 f_0 + \frac{1}{24}(22)\Delta^4 f_0 + \frac{1}{120}(-10)\Delta^5 f_0 + \frac{1}{720}(8)\Delta^6 f_0}{(\Delta x)^2}$$

simplificando:

$$f''(x) = \frac{\Delta^2 f_0 + 2\Delta^3 f_0 + \frac{11}{12}\Delta^4 f_0 - \frac{1}{12}\Delta^5 f_0 + \frac{1}{90}\Delta^6 f_0}{(\Delta x^2)}$$

Colocando $\frac{1}{12}$ em evidência em cima:

$$f''(x) = \frac{12\Delta^2 f_0 + 24\Delta^3 f_0 + 11\Delta^4 f_0 - \Delta^5 f_0 + \frac{2}{15}\Delta^6 f_0}{12(\Delta x)^2}$$

Para terminar, temos os seguintes termos:
$\Delta^2 f_0 = f_2 - 2f_1 + f_0$
$\Delta^3 f_0 = f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0$
$\Delta^4 f_0 = f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0$
$\Delta^5 f_0 = f_5 - 5f_4 + 10f_3 - 10f_2 + 5f_1 - f_0$
$\Delta^6 f_0 = f_6 - 6f_5 + 15f_4 - 20f_3 + 15f_2 - 6f_1 + f_0$

Basta substituir e verificar.

c) Testando em C++

Executando o código, temos a seguinte tabela:

```
Iter: 0 Delta: 0.25 f(x): 20.48 f''(x): 44.9852 Error: 0.0326313
Iter: 1 Delta: 0.125 f(x): 20.48 f''(x): 45.0682 Error: 0.00183982
Iter: 2 Delta: 0.0625 f(x): 20.48 f''(x): 45.0732 Error: 0.000112078
Iter: 3 Delta: 0.03125 f(x): 20.48 f''(x): 45.0735 Error: 6.96007e-06
```

que pode ser comparada com o resultado do WolframAlpha:
`45.073544887997461683494173000766423650971100960779622183218897607`