Métodos Numéricos para Engenharia

MÓDULO 14 – DERIVAÇÃO NUMÉRICA

PROFESSOR LUCIANO NEVES DA FONSECA

1ª Derivada por série de Taylor – Atrasada e Adiantada

- Seja uma função $y = f(x)$

- Podemos então estimar a derivada no ponto x_o , $f'(x_0)$, através da primeira diferença adiantada $\Delta_1 = f(x_o + h) - f(x_o)$
- o valor da função no ponto $x_0 + h$, com h pequeno, pode ser aproximado pela expansão de Taylor:

$$f(x_0 + h) = f(x_o) + h\, f'(x_0) + \cancelto{0}{\frac{h^2}{2} f''(\xi)}$$

$$\boxed{f'(x_0) \cong \frac{f(x_o + h) - f(x_o)}{h}}$$

- Podemos então estimar a derivada no ponto x_o , $f'(x_0)$, através da primeira diferença atrasada $\Delta_1 = f(x_o - h) - f(x_o)$
- o valor da função no ponto $x_0 - h$, com h pequeno, pode ser aproximado pela expansão de Taylor:

$$f(x_0 - h) = f(x_o) - h\, f'(x_0) + \cancelto{0}{\frac{h^2}{2} f''(\xi)}$$

$$\boxed{f'(x_0) \cong \frac{f(x_o) - f(x_o - h)}{h}}$$

1ª Derivada por série de Taylor – Centrada

- Seja uma função $y = f(x)$

Podemos então estimar a derivada no ponto x_o , $f'(x_0)$, através da primeira diferença centrada $\Delta_1 = f(x_o + h) - f(x_o - h)$
os valores da função nos pontos $x_0 - h$ e $x_o + \mathrm{h}$, com h pequeno, podem ser aproximados pela expansão de Taylor:

$$f(x_0 + h) = f(x_o) + h\,f'(x_0) + \cancelto{0}{\frac{h^2}{2} f''(\xi)} \qquad I \quad - \textit{equação adiantada}$$

$$f(x_0 - h) = f(x_o) - h\,f'(x_0) + \cancelto{0}{\frac{h^2}{2} f''(\xi)} \qquad II \quad - \textit{equação atrasada}$$

$(I - II)$

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) \cong f(x_o) + h\,f'(x_0) - f(x_o) + h\,f'(x_0)$$

$$\boxed{f'(x_0) \cong \frac{f(x_o + h) - f(x_o - h)}{2h}}$$

Comparação entre o cálculo da 1ª derivada, com diferenças adiantadas, atrasadas e centradas

$$f'(x_0) \cong \frac{f(x_o+h)-f(x_o)}{h}$$ adiantada

```
function y1=df1_fw(y,h)
    y1= (y(2:$)-y(1:$-1))./h
    y1=[y1 y1($)]
endfunction
```

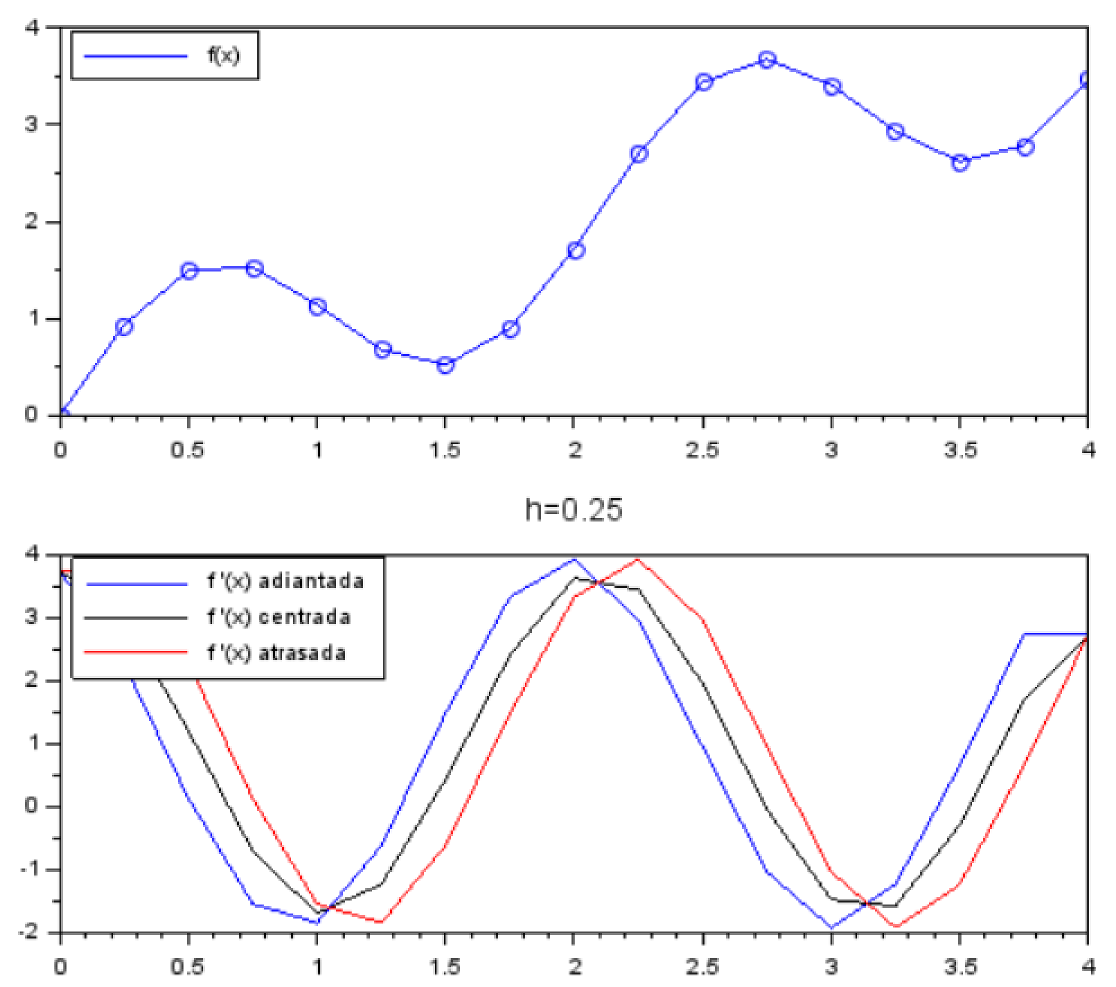
$$f'(x_0) \cong \frac{f(x_o)-f(x_o-h)}{h}$$ atrasada

```
function y1=df1_bk(y,h)
    y1=(y(2:$)-y(1:$-1))./h
    y1=[y1(1) y1]
endfunction
```

$$f'(x_0) \cong \frac{f(x_o+h)-f(x_o-h)}{2h}$$ centrada

```
function y1=df1_c(y,h)
    y1=(y(3:$)-y(1:$-2))./(2*h)
    y1=[(y(2)-y(1))/h  y1  (y($)-y($-1))/h ]
endfunction
```

```
--> deff("y=f(x)","y=x+sin(3*x)")

--> plot_derivada1(f,0,4,0.25)
```



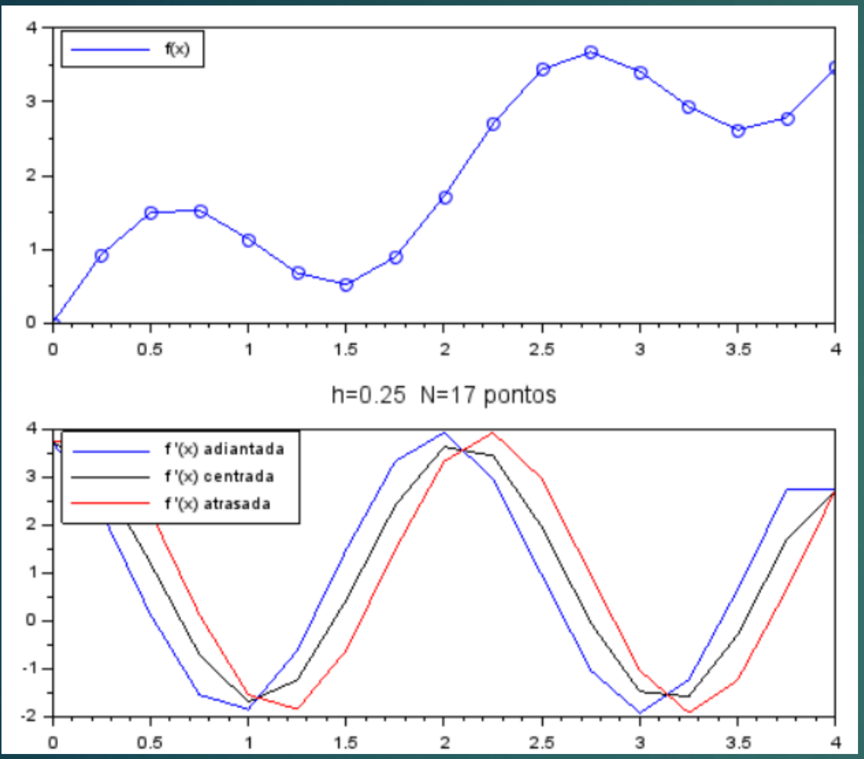
- Notar que a derivada estimada através das diferenças finitas adiantadas (linha azul) está adiantada em relação à centrada.
- Notar que a derivada estimada através das diferenças finitas atrasadas (linha vermelha) está atrasada em relação à centrada

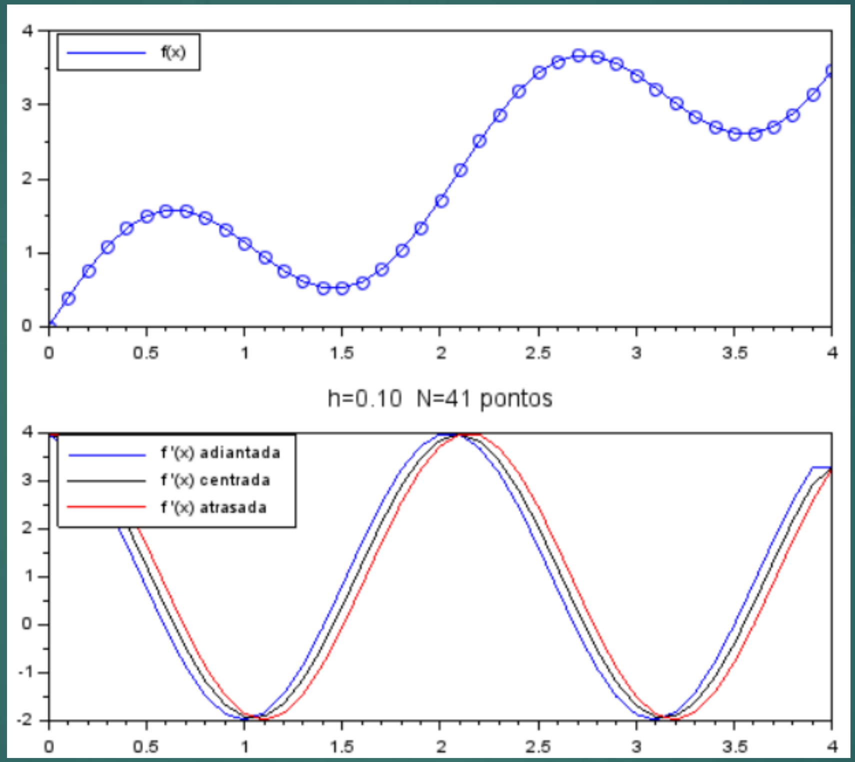
Influência do número de pontos no cálculo da 1ª derivada adiantada, atrasada e centradas

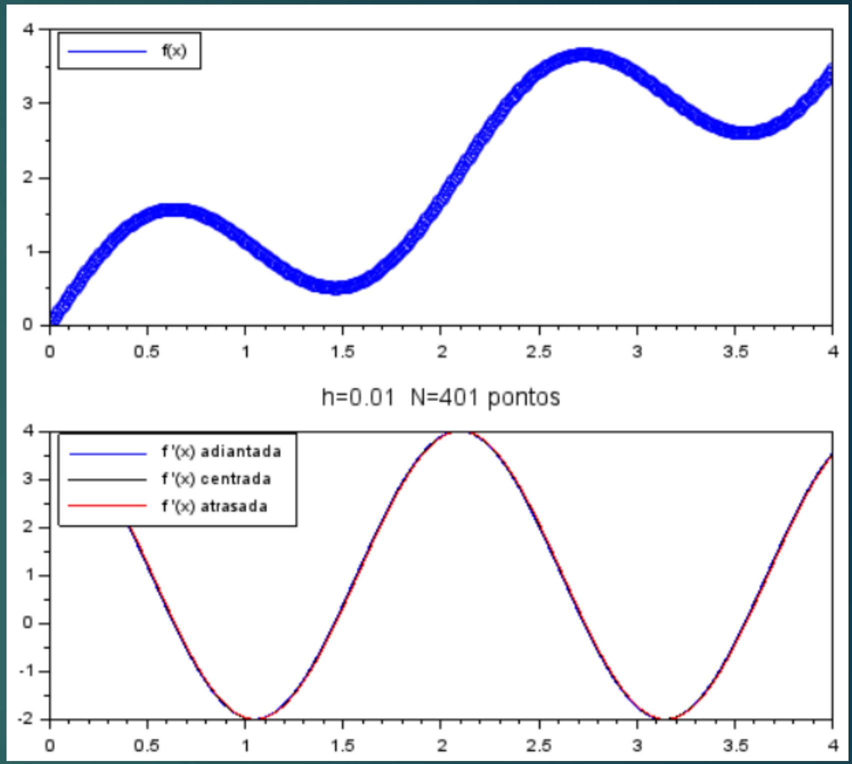
```
--> deff("y=f(x)","y=x+sin(3*x)")

--> plot_derivada1(f,0,4,0.25)
```

```
--> plot_derivada1(f,0,4,0.1)
```

```
--> plot_derivada1(f,0,4,0.01)
```







- Notar que a derivada estimada através das diferenças finitas adiantadas (linha azul) parece estar adiantada em relação à derivada centrada (linha preta)
- Notar que a derivada estimada através das diferenças finitas atrasadas (linha vermelha) parece estar atrasada em relação à derivada centrada (linha preta)
- As discrepâncias entre as derivadas estimadas diminui com a redução do passo h.

2ª Derivada por série de Taylor – Centrada

- Seja uma função $y = f(x)$
- Para conhecemos o valor da função $f''(x)$ no ponto x_0, podemos estimar o valor da função nos pontos $x_0 + h$ e $x_o - h$, com h pequeno, através das seguintes expansões de Taylor:

$$f(x_0 + h) = f(x_o) + h\,f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + \cancelto{0}{\frac{h^3}{3!} f'''(\xi)} \qquad I \;\; - equação\ adiantada$$

$$f(x_0 - h) = f(x_o) - h\,f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) - \cancelto{0}{\frac{h^3}{3!} f'''(\xi)} \qquad II \;\; - equação\ atrasada$$

$(I + II)$

$$f(x_0 + h) + f(x_0 - h) \cong f(x_o) + h\,f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0) + f(x_o) - h\,f'(x_0) + \frac{h^2}{2} f''(x_0)$$

$$\boxed{f''(x_0) \cong \frac{f(x_o + h) - 2f(x_0) + f(x_o - h)}{h^2}}$$

Cálculo da 2ª derivada, com diferenças centradas

$$f''(x_0) \cong \frac{f(x_o + h) - 2f(x_0) + f(x_o - h)}{h^2}$$

```
function y2=df2_c(y,h)
    y2=(y(3:$)-2*y(2:$-1)+y(1:$-2))./h^2
    y2=[y2(1) y2 y2($)]
endfunction
```

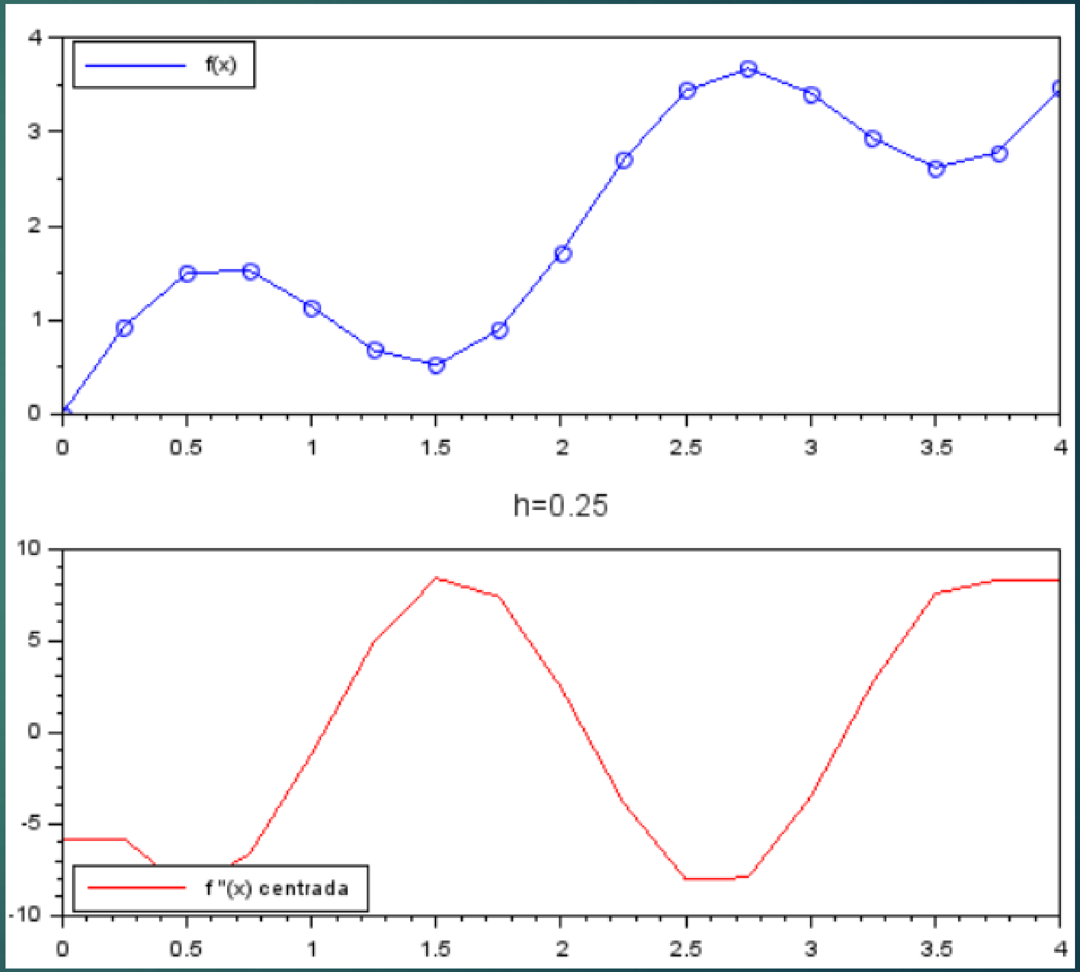
```
--> deff("y=f(x)","y=x+sin(3*x)")

--> plot_derivada2(f,0,4,0.25)
```

I − equação adiantada

$$f''(x_0) \cong \frac{f(x_o + 2h) - 2f(x_0 + 1) + f(x_o)}{h^2}$$

II − equação atrasada

$$f''(x_0) \cong \frac{f(x_o) - 2f(x_0 - 1) + f(x_o - 2)}{h^2}$$



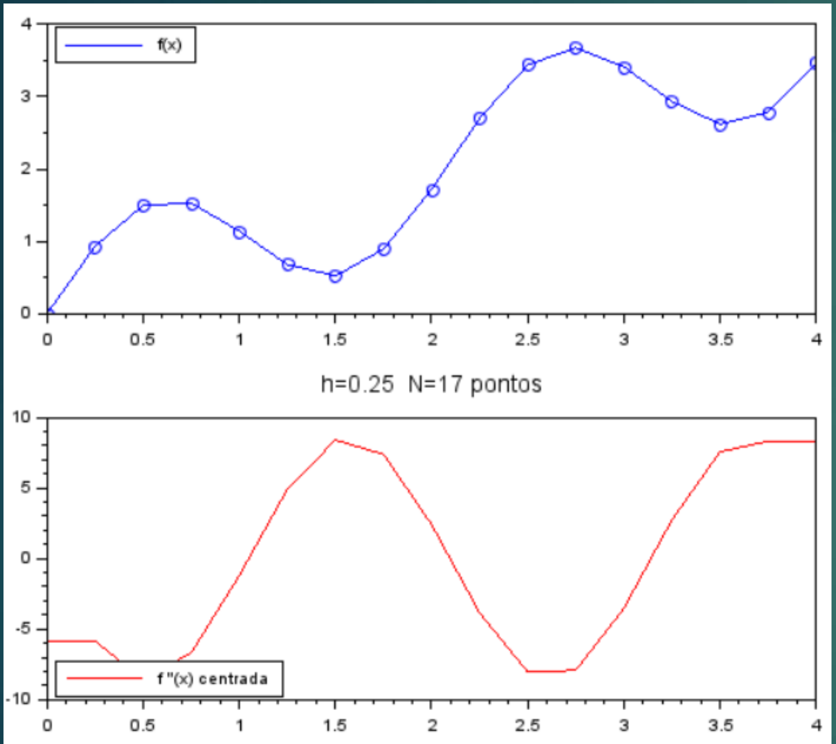
- Não podemos calcular a diferença centrada para a primeira amostra (usamos a adiantada)
- Não podemos calcular a diferença centrada para a última amostra (usamos a atrasada)

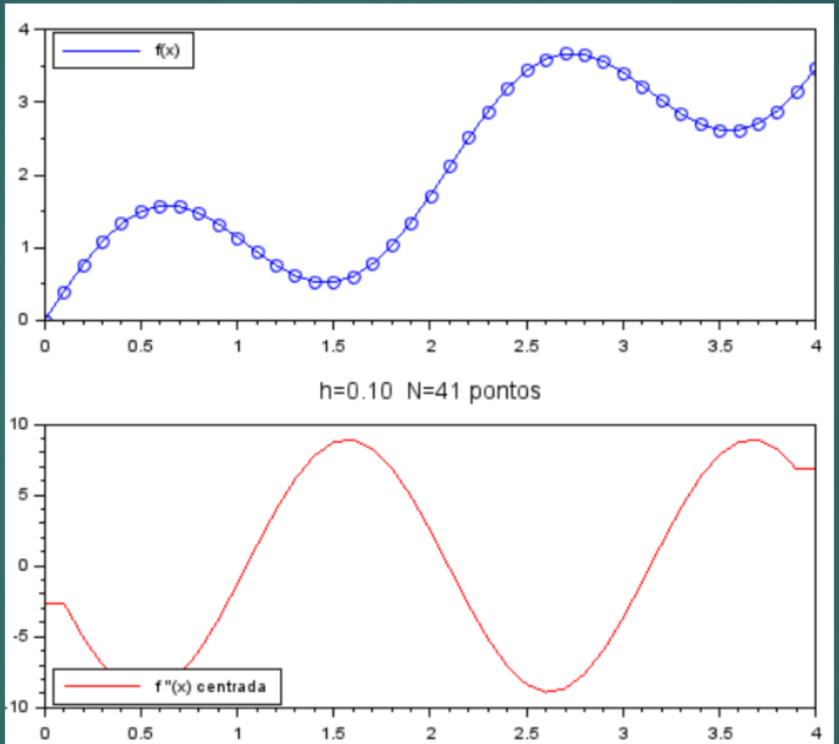
Influência do número de pontos no cálculo da 2ª derivada centrada

```
--> deff("y=f(x)","y=x+sin(3*x)")

--> plot_derivada2(f,0,4,0.25)
```

```
--> plot_derivada2(f,0,4,0.1)
```

```
--> plot_derivada2(f,0,4,0.01)
```





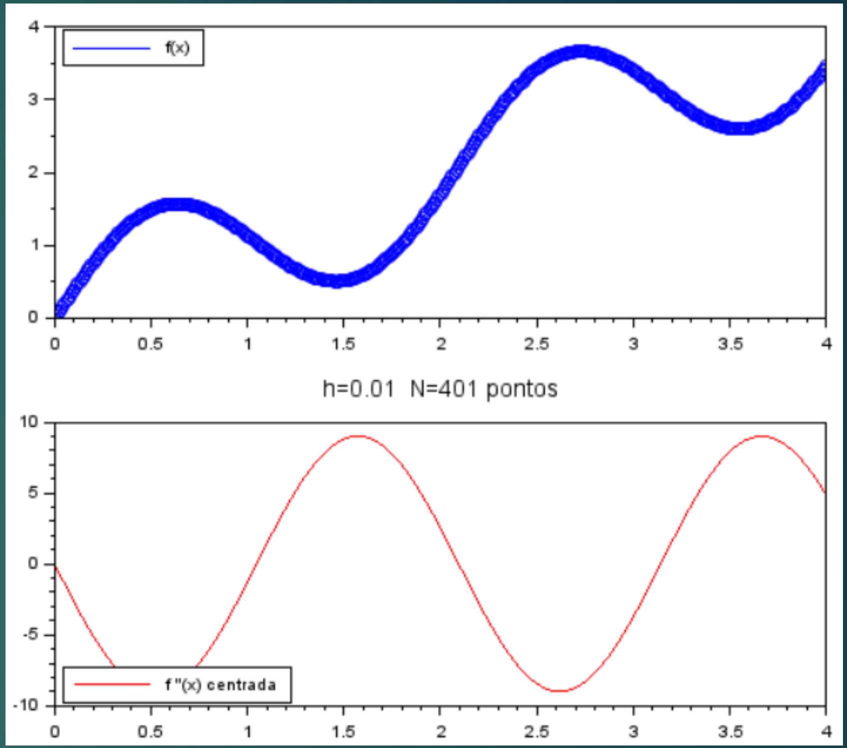


Tabela de derivadas por diferenças finitas (Chapra)

	Diferenças Atrasadas	Diferenças Centradas	Diferenças Adiantadas	Erro
f'	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}$	$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}$	$O(h^2)$
f''	$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2}$	$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2}$	$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2}$	$O(h^2)$
f'''	$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+2}) + 3f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h^3}$	$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{2h^3}$	$f'''(x_i) = \frac{f(x_i) - 3f(x_{i-1}) + 3f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^3}$	$O(h^2)$
f''''	$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4}$	$f''''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^4}$	$f''''(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4})}{h^4}$	$O(h^2)$

- As fórmulas apresentadas se referem ao cálculo com erro proporcional a h^2 .
- Nas três colunas, são apresentadas fórmulas atrasadas, centradas e adiantadas. Normalmente damos preferência às fórmulas centradas. No entanto as fórmulas adiantadas são importantes para o cálculo das primeiras amostras , e as fórmulas atrasadas para o cálculo das últimas amostras das derivadas.

Derivação por ajuste de polinômios

- Seja uma função $f(x)$, definida no intervalo [a,b]
- Caso se queira aproximar $f'(x)$ no intervalo [a,b], podemos primeiro ajustar um polinômio $p_n(x)$ de ordem (n) à n+1 pontos $\left(x_i, f(x_i)\right)$ da função $f(x)$.
- A aproximação pode ser por Lagrange, Newton ou Vandermonde, até 8 pontos de controle (polinômio de ordem 7), ou por mínimos quadrados ordem 7, caso se tenha mais que 8 pontos de controle, de modo a se evitar o wiggling
- Uma vez ajustado o polinômio, podemos dizer que $p_n(x)$ aproxima $f(x)$ no intervalo [a,b]
- Então, podemos também dizer que $p_n'(x)$ aproxima $f'(x)$ no intervalo [a,b]
- E que $p_n''(x)$ aproxima $f''(x)$ no intervalo [a,b], e assim por diante
- As derivadas analíticas de polinômios podem ser obtidas de forma trivial

```
function ps1=derivat_fga(ps)
    a = coeff(ps)
    N=length(a)
    ps1=(a(2:N).*[1:N-1])*(s^[0:N-2])'
endfunction
```

```
--> deff ('y=f(x)','y=x+sin(3*x)');
```

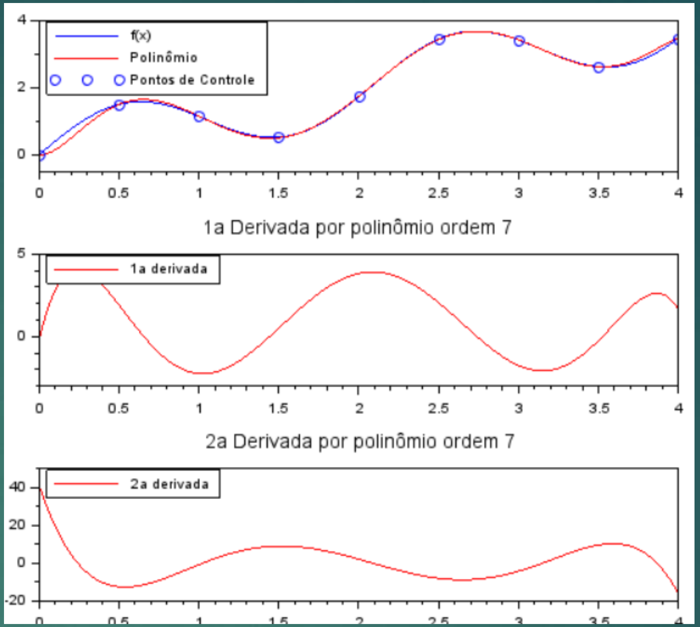
```
function [u_d,u_d2,u]=derivada_pol(f,a,b,h)
    x=[a:h:b]
    y=feval(x,f)
    n=length(x)
    ordem=n-1;
    if (n<=8) then
        u=PolinomioVandermonde(x,y)
    else
        ordem=7
        u=PolinomioMQ(x,y,ordem)
    end
    u_d = derivat_fqa(u)
    u_d2 = derivat_fqa(u_d)
endfunction
```

```
--> deff('y=f(x)','y=x+sin(3*x)');

--> [u_d,u_d2,u]=derivada_pol(f,0,4,0.7)
 u_d  =

   11.693977
  -44.412744
   45.402749
  -16.652405
   1.9950153
 u_d2  =

  -44.412744
   90.805498
  -49.957216
   7.9800611
 u  =

   0.
   11.693977
  -22.206372
   15.134250
  -4.1631014
   0.3990031
```

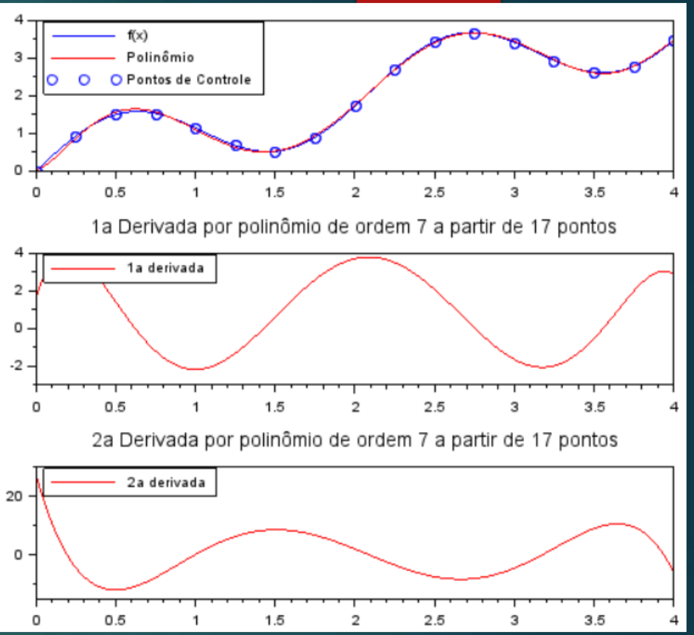
```
--> deff ('y=f(x)','y=x+sin(3*x)');
```

```
function Plot_derivada_pol(f,a,b,h)
    x=[a:h:b]
    y=feval(x,f)
    n=length(x)
    ordem=n-1;
    [u_d,u_d2,u]=derivada_pol(f,a,b,h)
    str=sprintf("Derivada por polinômio ordem %d",ordem)
    subplot(311)
        xi=linspace(a,b,1000)
        plot(xi,f(xi))
        plot(xi,horner_fga(u,xi),'r')
        scatter(x,y)
        legend("f(x)","Polinômio","Pontos de Controle",2)
    subplot(312)
        plot(xi,horner_fga(u_d,xi),'r')
        legend("1a derivada",2)
        xtitle("1a " + str)
    subplot(313)
        plot(xi,horner_fga(u_d2,xi),'r')
        legend("2a derivada",2)
        xtitle("2a " + str)
endfunction
```

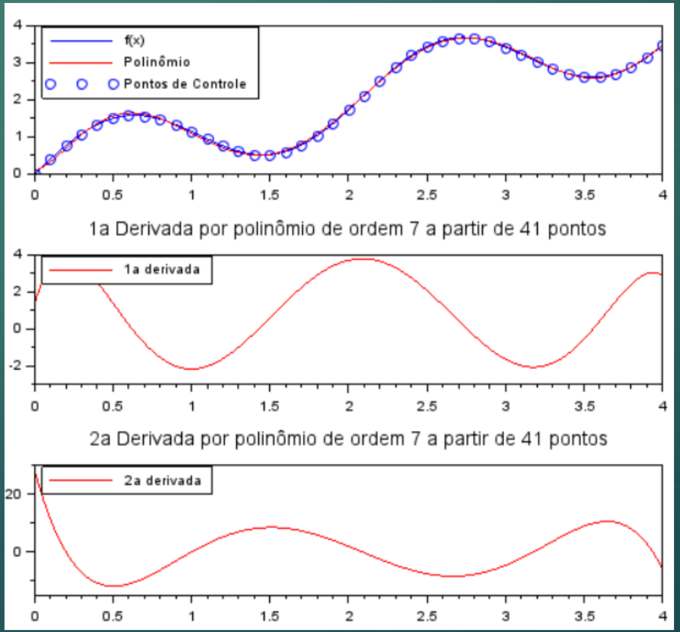
```
--> Plot_derivada_pol(f,0,4,0.5)
```



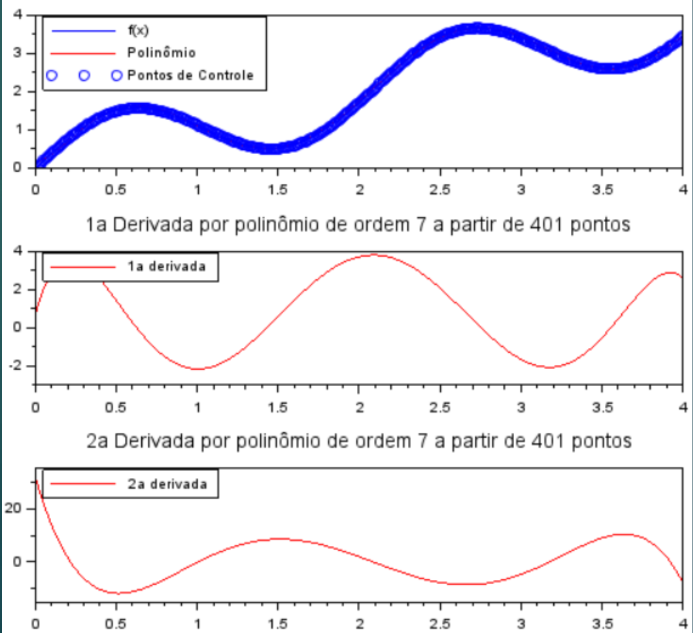

```
--> Plot_derivada_pol(f,0,4,0.25)
```




```
--> Plot_derivada_pol(f,0,4,0.1)
```



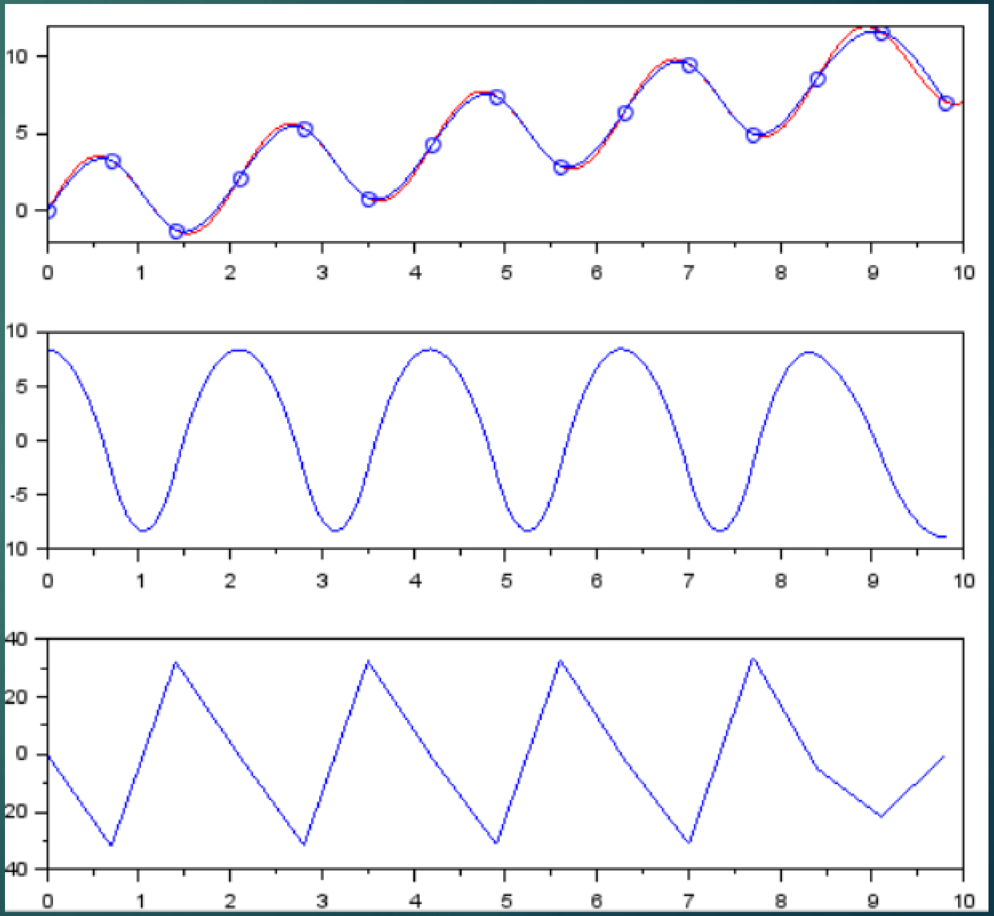

```
--> Plot_derivada_pol(f,0,4,0.01)
```



Podemos ajustar um polinômio cúbico
a cada 3 amostras (splines), e então derivar

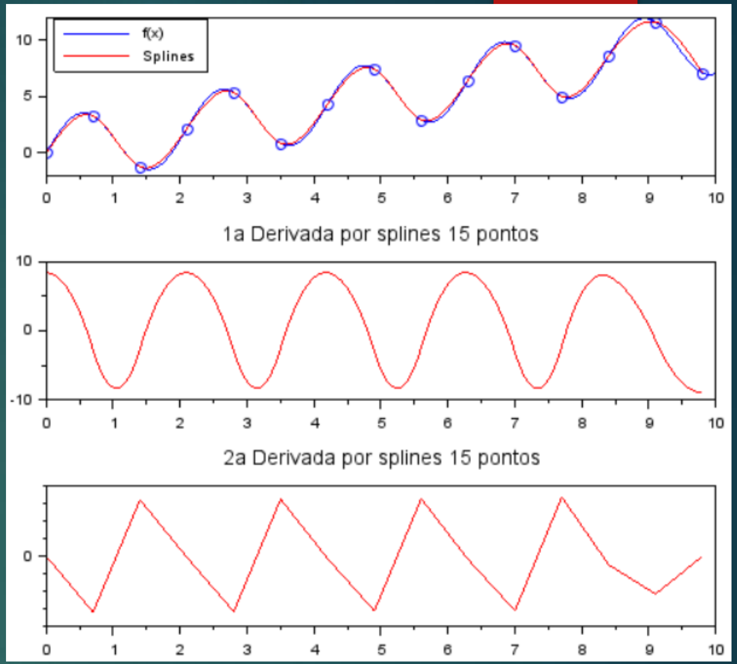
```
function [u_d,u_d2,u]=derivada_splines(f,a,b,h)
    x=[a:h:b]
    clear u_d u_d2
    u=SplineCubica(x,f(x))
    for (i=1:length(x)-1)
        u_d(3*i:-1:3*i-2)=derivat_fga([u(4*i);u(4*i-1);u(4*i-2);u(4*i-3)])
        u_d2(2*i:-1:2*i-1)=derivat_fga([u_d(3*i);u_d(3*i-1);u_d(3*i-2)])
    end
endfunction
```

```
--> deff('y=f(x)','y=x+3*sin(3*x)');

--> [u,u_d,u_d2]=derivada_splines(f,0,10,0.7);

--> x=[0:0.7:10];

--> xp=linspace(0,10,1000);

--> subplot(311)

--> plot(xp,f(xp),'r')

--> plot(xp,horner_spcubica(u,x,xp))

--> scatter(x,f(x))

--> subplot(312)

--> plot(xp,horner_spquadratica(u_d,x,xp))

--> subplot(313)

--> plot(xp,horner_splinear(u_d2,x,xp))

--> subplot(311)
```



```
function Plot_derivada_splines(f,a,b,h)
    x=[a:h:b]
    [u_d,u_d2,u]=derivada_splines(f,a,b,h)
    str=sprintf("Derivada por splines %d pontos",length(x))
    xp=linspace(a,b,1000)
    subplot(311)
     plot(xp,f(xp))
     plot(xp,horner_spcubica(u,x,xp),'r')
     scatter(x,f(x))
     legend("f(x)","Splines",2)
    subplot(312)
     plot(xp,horner_spquadratica(u_d,x,xp),'r')
     xtitle("1a " + str)
    subplot(313)
     plot(xp,horner_splinear(u_d2,x,xp),'r')
     xtitle("2a " + str)
endfunction
```

```
--> Plot_derivada_splines(f,0,10,0.7)
```




```
--> Plot_derivada_splines(f,0,10,0.2)
```