Integração e Derivação Numéricas

TMEC-001 Cálculo Numérico

Prof. Luciano K. Araki

Integração Numérica

- Fórmulas de Newton-Cotes
  - São os esquemas mais comuns de integração numérica, baseadas na estratégia de substituir uma função complicada ou dados tabulados por uma função aproximadora simples fácil de integrar:

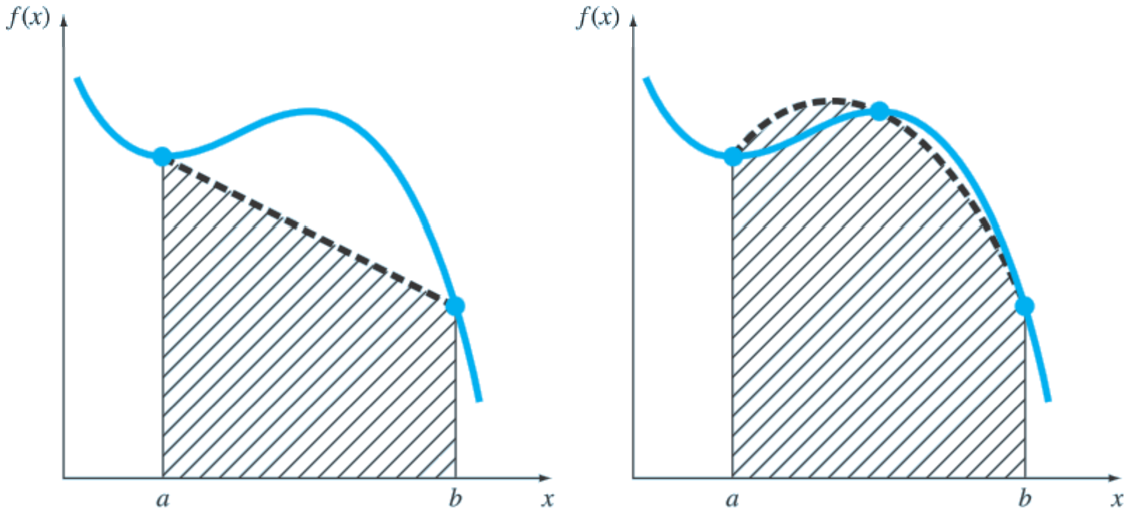
$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f_n(x)\,dx$$

em que f_n é um polinômio de grau n da forma

$$f_n(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_{n-1} x^{n-1} + a_n x^n$$

Integração Numérica

- Fórmulas de Newton-Cotes
  - A integral também pode ser aproximada usando uma série de polinômios aplicados por partes à função ou dados em segmentos de comprimento constante.



(a) (b)

Integração Numérica

- Regra do trapézio
  - A regra do trapézio é a primeira fórmula de integração fechada de Newton-Cotes. Ela corresponde ao caso no qual o polinômio aproximador é de primeiro grau:

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f_1(x)\,dx$$

Integração Numérica

- Regra do trapézio
  - Deve-se recordar que uma reta pode ser representada por

$$f_1(x) = f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a)$$

  - A área sob essa reta é uma estimativa da integral de $f(x)$ entre os extremos a e b:

$$f_1(x) = \int_a^b \left[f(a) + \frac{f(b) - f(a)}{b - a}(x - a) \right] dx$$

Integração Numérica

- Regra do trapézio
  - O resultado da integração é:

$$I = (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

que é chamada de regra do trapézio.

  - Geometricamente, a regra do trapézio é equivalente a aproximar a integral pela área do trapézio sob a reta ligando $f(a)$ e $f(b)$.

Integração Numérica

- Erro na regra do trapézio
  - Quando se emprega a integral sob um segmento de reta para aproximar a integral sob a curva, obviamente incorre-se em um erro que pode ser substancial.
  - Uma estimativa para o erro de truncamento local de uma única aplicação da regra do trapézio é:

$$E_T = -\frac{1}{12} f''(\xi)(b-a)^3$$

Integração Numérica

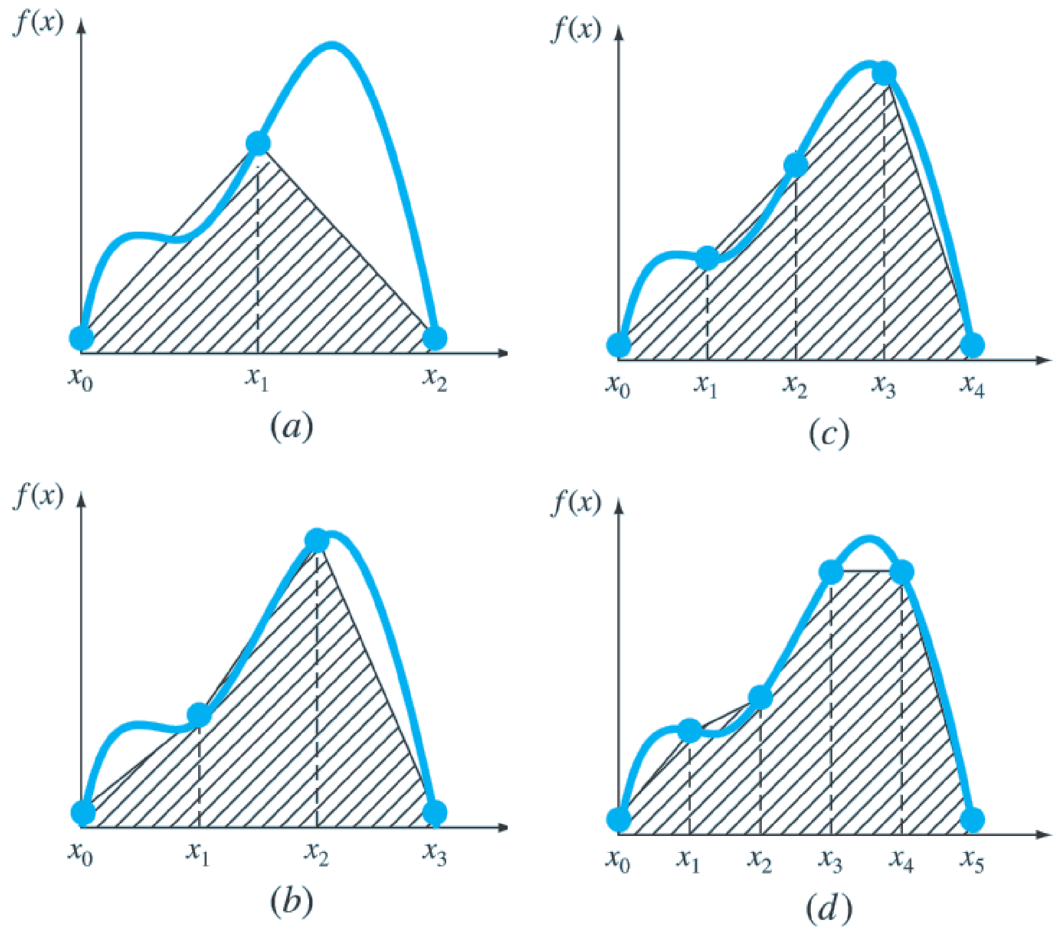
- Erro na regra do trapézio
  - Na expressão anterior, ξ está em algum ponto do intervalo entre a e b.
  - Observa-se que, se a função que está sendo integrada é linear, a regra do trapézio será exata. Caso contrário, para funções com derivadas de segunda ordem e de ordem superior não-nulas, pode ocorrer algum erro.

Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio
  - Uma forma de melhorar a acurácia da regra do trapézio é dividir o intervalo de integração entre a e b em diversos segmentos e aplicar o método a cada segmento.
  - As áreas correspondentes aos segmentos individuais podem ser somadas para fornecer a integral par ao intervalo inteiro.

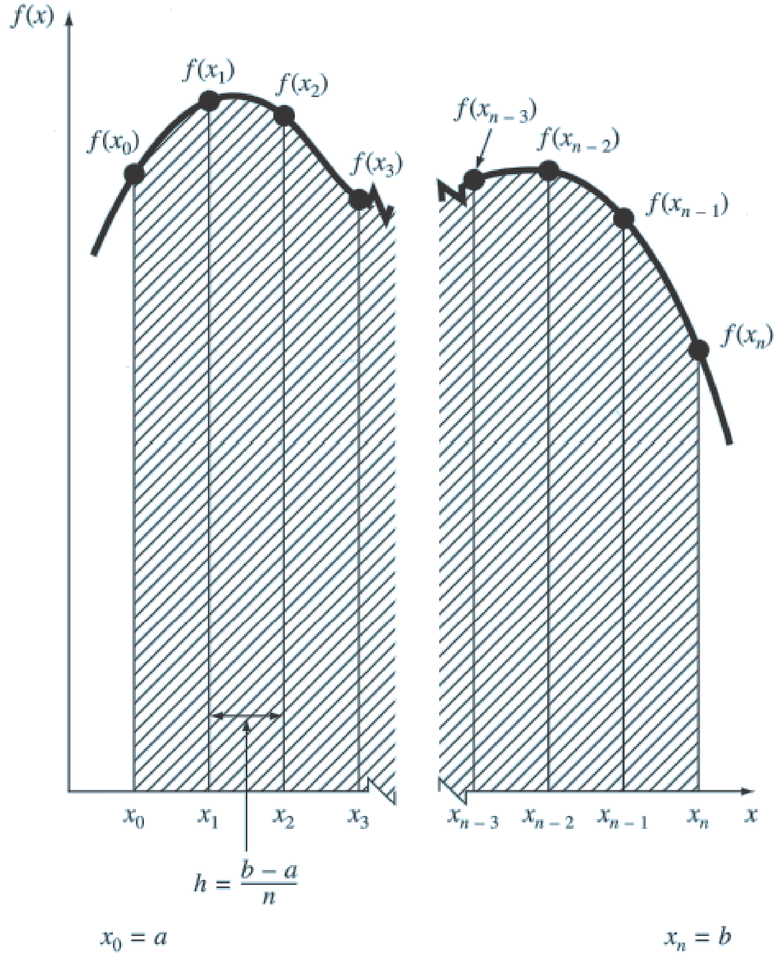
Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio



Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio



Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio
  - Considerando que existam $n + 1$ pontos igualmente espaçados, definindo n segmentos de largura

$$h = \frac{b - a}{n}$$

  - Designando a e b por x_0 e x_n, respectivamente, a integral total pode ser escrita como

$$I = \int_{x_0}^{x_1} f(x)dx + \int_{x_1}^{x_2} f(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-1}}^{x_n} f(x)dx$$

Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio
  - Substituindo-se cada integral pela regra do trapézio, obtém-se

$$I = h\frac{f(x_0)+f(x_1)}{2} + h\frac{f(x_1)+f(x_2)}{2} + \ldots + h\frac{f(x_{n-1})+f(x_n)}{2}$$

  - Agrupando-se em termos, tem-se

$$I = \frac{h}{2}\left[f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right]$$

Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio
  - Que também pode ser expressa na forma

$$I = \underbrace{(b-a)}_{\text{largura}} \underbrace{\frac{f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)}{2n}}_{\text{altura média}}$$

  - A altura média representa uma média ponderada dos valores da função.

Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio
  - O erro para a aplicação múltipla da regra do trapézio pode ser obtido pela soma dos erros individuais em cada segmento, fornecendo:

$$E_T = -\frac{(b-a)^3}{12n^3}\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)$$

  - Uma estimativa do valor médio da segunda derivada no intervalo todo é dada por

$$\bar{f}'' \approx \frac{\sum_{i=1}^{n} f''(\xi_i)}{n}$$

Integração Numérica

- Aplicação múltipla da regra do trapézio
  - Desse modo, o erro pode ser avaliado pela expressão

$$E_T = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}\bar{f}''$$

  - Observa-se, assim, que ao se dobrar o número de segmentos, o erro de truncamento será dividido por quatro.

Integração Numérica

- Regras de Simpson
  - Além de aplicar a regra do trapézio com segmentos menores, outra forma de obter uma estimativa mais acurada de uma integral é usar polinômios de grau mais elevado para ligar os pontos.
  - Por exemplo, se existir um ponto extra no ponto médio entre $f(a)$ e $f(b)$, os três pontos podem ser ligados por uma parábola.

Integração Numérica

- Regras de Simpson
  - Já se existirem dois pontos igualmente espaçados entre $f(a)$ e $f(b)$, os pontos podem ser ligados por um polinômio de terceiro grau.
  - As fórmulas que resultam em tomar as integrais desses polinômios são chamdas de Regras de Simpson (Regra de 1/3 de Simpson para um polinômio quadrático e Regra de 3/8 de Simpson para um polinômio cúbico).

Integração Numérica

- Regra de 1/3 de Simpson
  - A regra de 1/3 de Simpson é obtida quando um polinômio interpolador de segundo grau é substituído na equação geral

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b f_2(x)dx$$

  - Considera-se, então, que *a* e *b* podem designados por x_0 e x_2, e que $f_2(x)$ seja representado por um polinômio de Lagrange de segundo grau.

Integração Numérica

- Regra de 1/3 de Simpson
  - Tem-se então

$$I = \int_{x_0}^{x_2} \left[\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} f(x_0) + \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} f(x_1) + \right.$$

$$\left. \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} f(x_2) \right] dx$$

  - Depois da integração e de manipulações algébricas, obtém-se a seguinte fórmula:

$$I \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right]$$

Integração Numérica

- Regra de 1/3 de Simpson
  - A expressão anterior se constitui na segunda fórmula de integração fechada de Newton-Cotes.
  - O valor de h é obtido considerando-se

$$h = \frac{b - a}{2}$$

  - Uma dedução alternativa é obtida da integração do polinômio de Newton-Gregory.

Integração Numérica

- Regra de 1/3 de Simpson
  - A regra de 1/3 de Simpson pode também ser expressa como

$$I \approx \underbrace{(b-a)}_{\text{largura}} \underbrace{\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}}_{\text{altura média}}$$

  - Em que $a = x_0$, $b = x_2$ e x_1 é o ponto médio entre a e b.

Integração Numérica

- Regra de 1/3 de Simpson
  - É possível mostrar que a aplicação da regra de 1/3 de Simpson para um único segmento apresenta um erro de truncamento de

$$E_T = -\frac{1}{90}h^5 f^{(iv)}(\xi) = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(iv)}(\xi)$$

  - Em que ξ está em algum ponto do intervalo entre a e b.

Integração Numérica

- Regra de 1/3 de Simpson
  - Observa-se, então que a regra de 1/3 de Simpson é mais acurada que a regra do trapézio.
  - Nota-se, também, que essa regra é mais acurada que o esperado: ao invés de ser proporcional à terceira derivada, o erro é proporcional à quarta derivada.

Integração Numérica

- Aplicações múltiplas de 1/3 de Simpson
  - Do mesmo modo que o caso da regra do trapézio, a regra de Simpson pode ser melhorada dividindo-se o intervalo de integração em diversos segmentos igualmente espaçados:

$$h = \frac{b-a}{n}$$

  - A integral total pode ser representada como

$$I = \int_{x_0}^{x_2} f(x)dx + \int_{x_2}^{x_4} f(x)dx + \ldots + \int_{x_{n-2}}^{x_n} f(x)dx$$

Integração Numérica

- Aplicações múltiplas de 1/3 de Simpson
  - Substituindo cada integral individual pela regra de 1/3 de Simpson

$$I = 2h\frac{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)}{6}+2h\frac{f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)}{6}+\ldots$$
$$+2h\frac{f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+f(x_n)}{6}$$

  - E combinando os termos, obtém-se a fórmula geral

$$I = \underbrace{(b-a)}_{\text{largura}}\underbrace{\frac{f(x_0)+4\sum\limits_{i=1,3,5\ldots}^{n-1}f(x_i)+2\sum\limits_{j=2,4,6\ldots}^{n-2}f(x_j)+f(x_n)}{3n}}_{\text{altura média}}$$

Integração Numérica

- Aplicações múltiplas de 1/3 de Simpson
  - Uma estimativa de erro para a aplicação múltipla da regra de 1/3 de Simpson é obtida de forma similar àquela da regra do trapézio, somando-se os erros individuais para os segmentos e fazendo a média da derivada, resultando em

$$E_T = -\frac{(b-a)^3}{180n^4}\bar{f}^{(iv)}$$

Integração Numérica

- Regra de 3/8 de Simpson
  - De uma maneira parecida com as deduções das regras do trapézio e de 1/3 de Simpson, um polinômio de Lagrange de quarta ordem pode ser ajustado a quatro pontos e integrado

$$I = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b f_3(x)\,dx$$

fornecendo

$$I \approx \underbrace{(b-a)}_{\text{largura}} \underbrace{\frac{f(x_0)+3f(x_1)+3f(x_2)+f(x_3)}{8}}_{\text{altura média}}$$

Integração Numérica

- Regra de 3/8 de Simpson
  - Observa-se que os dois pontos interiores têm pesos de três oitavos, enquanto as extremidades têm peso de um oitavo. A regra de 3/8 de Simpson tem um erro de

$$E_T = -\frac{3}{80} h^5 f^{(iv)}(\xi) = -\frac{(b-a)^5}{6480} f^{(iv)}(\xi)$$

  - Como o denominador é maior que o da regra de 1/3 de Simpson, a regra de 3/8 é um pouco mais acurada.

Integração Numérica

- Regra de 3/8 de Simpson
  - A regra de 1/3 de Simpson é usualmente o método preferido, pois alcança uma acurácia de quarta ordem com três pontos ao invés dos quatro pontos necessários para a versão de 3/8 de Simpson.
  - Entretanto, a regra de 3/8 de Simpson tem utilidade especialmente quando o número de segmentos considerado é ímpar.

Integração Numérica

- Integração com segmentos desiguais
  - Até esse ponto, todas as fórmulas para integração numérica foram baseadas em dados igualmente espaçados.
  - Na prática, porém, existem muitas situações nas quais essa hipótese não é válida e precisa-se lidar com segmentos de tamanhos distintos. Por exemplo, muitas vezes dados obtidos experimentalmente não são igualmente espaçados.

Integração Numérica

- Integração com segmentos desiguais
  - Nesses casos, uma possibilidade é aplicar a regra do trapézio a cada segmento isoladamente e somar os resultados:

$$I = h_1 \frac{f(x_0) + f(x_1)}{2} + h_2 \frac{f(x_1) + f(x_2)}{2} + \ldots + h_n \frac{f(x_{n-1}) + f(x_n)}{2}$$

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - É uma técnica de integração desenvolvida para produzir integrais numéricas eficientes de funções.
  - É baseada na Extrapolação de Richardson.
  - A partir de duas estimativas de uma integral, pode-se calcular uma terceira aproximação mais acurada.

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - A estimativa e o erro associados com a aplicação múltipla da regra do trapézio podem ser representados por

$$I = I(h) + E(h)$$

em que I é o valor exato da integral, $I(h)$ é a aproximação a partir da aplicação da regra do trapézio com n segmentos com $h = (b - a)/n$ e $E(h)$ é o erro de truncamento.

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Se forem feitas duas estimativas usando tamanhos de passos h_1 e h_2, tendo-se valores exatos para o erro, então

$$I(h_1) + E(h_1) = I(h_2) + E(h_2)$$

  - Recordando-se que o erro da aplicação múltipla da regra do trapézio pode ser representado por

$$E_T = -\frac{(b-a)}{12} h^2 \bar{f}'', \quad \text{com } n = \frac{b-a}{h}$$

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Supondo que $\bar{f}''$ é constante independendemente do tamanho do passo, a razão entre os dois erros será

$$\frac{E(h_1)}{E(h_2)} = \frac{h_1^2}{h_1^2}$$

  - Esse cálculo tem o efeito importante de remover o termo $\bar{f}''$ do cálculo. Reorganizando-se, então, a razão entre os erros, tem-se

$$E(h_1) = E(h_2)\left(\frac{h_1}{h_1}\right)^2$$

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Pode-se, então, reescrever o valor da integral como

$$I(h_1) + E(h_2)\left(\frac{h_1}{h_1}\right)^2 = I(h_2) + E(h_2)$$

que pode ser resolvida originando

$$E(h_2) = \frac{I(h_1) - I(h_2)}{1 - (h_1/h_2)^2}$$

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Tem-se, então, uma estimativa para o erro de truncamento em termos das estimativas da integral e seus tamanhos de passo.
  - Pode-se, na sequência, utilizar a expressão obtida para se fornecer uma estimativa melhorada da integral:

$$I \approx I(h_2) + \frac{1}{(h_1/h_2)^2 - 1}\left[I(h_2) - I(h_1)\right]$$

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Pode-se mostrar que o erro dessa estimativa é da ordem de O(h^4). Logo, combinam-se as estimativas de duas regras do trapézio de O(h^2) para se obter uma nova estimativa de O(h^4).
  - Para o caso especial em que o intervalo é dividido pela metade ($h_2 = h_1/2$), tem-se

$$I \approx \frac{4}{3} I(h_2) - \frac{1}{3} I(h_1)$$

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Para o caso especial em que as estimativas originais pela regra do trapézio são baseadas em dividir o tamanho do passo sucessivamente por 2, a equação usada para obter acurácia O(h^6) é

$$I \approx \frac{16}{15} I_m - \frac{1}{15} I_l$$

em que I_m e I_l são as estimativas mais e menos acuradas, respectivamente.

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Analogamente, dois resultados de ordem O(h^6) podem ser combinados para calcular uma integral de ordem O(h^8) usando

$$I \approx \frac{64}{63} I_m - \frac{1}{63} I_l$$

em que I_m e I_l são as estimativas mais e menos acuradas, respectivamente.

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - Generalizando-se, obtém-se a fórmula

$$I_{j,k} = \frac{4^{k-1} I_{j+1,k-1} - I_{j,k-1}}{4^{k-1} - 1}$$

onde $I_{j+1,k-1}$ e $I_{j,k-1}$ são as integrais mais e menos acuradas, respectivamente, e $I_{j,k}$ é a integral melhorada.

  - O índice k refere-se ao nível da integração, em que $k = 1$ corresponde à estimativa original pela regra do trapézio, $k = 2$ corresponde à integral de ordem $O(h^4)$ e assim por diante.

Integração Numérica

- Integração de Romberg
  - O índice j é usado para distinguir entre a estimativa mais acurada (j + 1) e a menos acurada (j). Por exemplo, para $k = 2$ e $j = 1$, tem-se

$$I_{1,2} = \frac{4I_{2,1} - I_{1,1}}{3}$$

que corresponde a uma aplicação da integral de Romberg já apresentada.

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Característica das equações de Newton-Cotes: a estimativa da integral é baseada em valores da função igualmente espaçados.
  - Consequentemente, a posição dos pontos base usados nessas equações é pré-determinada ou fixa.
  - A Quadratura Gaussiana é o nome de uma classe de técnicas que permitem que tais pontos sejam escolhidos de modo mais apropriado, visando reduzir o erro cometido.

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Método dos coeficientes indeterminados
    - A regra do trapézio pode ser expressa como

$$I \approx (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

ou, de modo mais geral, pode ser apresentada como

$$I \approx c_0 f(a) + c_1 f(b)$$

em os valores de c_0 e c_1 são constantes.

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Método dos coeficientes indeterminados
    - Percebe-se que a regra do trapézio deve fornecer resultados exatos quando a função sendo integrada é uma constante ou uma reta.
    - Duas equações simples que representam esses casos são $y = 1$ e $y = x$. Assim:

$$c_0 + c_1 = \int_{-(b-a)/2}^{(b-a)/2} 1\,dx$$

$$-c_0 \frac{(b-a)}{2} + c_1 \frac{(b-a)}{2} = \int_{-(b-a)/2}^{(b-a)/2} x\,dx$$

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Método dos coeficientes indeterminados
    - Calculando as integrais:

$$c_0 + c_1 = b - a$$

$$-c_0 \frac{(b-a)}{2} + c_1 \frac{(b-a)}{2} = 0$$

    - As duas equações com duas incógnitas podem ser resolvidas por

$$c_0 = c_1 = \frac{b-a}{2}$$

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Método dos coeficientes indeterminados
    - Quando esse resultado é substituído na forma mais geral, obtém-se a expressão

$$I = \frac{(b-a)}{2} f(a) + \frac{(b-a)}{2} f(b)$$

que equivale à regra do trapézio.

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Dedução da fórmula de Gauss-Legendre
    - Do mesmo modo que na dedução da regra do trapézio, na Quadratura Gaussiana se deseja calcular os coeficientes de uma equação da forma

$$I = c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1)$$

    - em que os c's são coeficientes desconhecidos. Entretanto, em contraste com a regra do trapézio que usa extremidades fixas a e b, os argumentos da função x_0 e x_1 não são fixados nas extremidades, mas são incógnitas.

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Dedução da fórmula de Gauss-Legendre
    - Tem-se, então, um total de quatro incógnitas, sendo necessárias quatro condições para determiná-las corretamente.
    - Do mesmo modo que no caso da regra do trapézio, pode-se obter duas dessas condições supondo-se que se calcule a integral de uma função constante e de uma função linear exatamente.
    - Estende-se, então, o mesmo raciocínio para uma função parabólica, $y = x^2$, e para uma função cúbica, $y = x^3$.

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Dedução da fórmula de Gauss-Legendre
    - Pode-se determinar, então, todas as quatro incógnitas e, ainda, tem-se uma fórmula de integração linear que é exata para funções cúbicas. As quatro equações a serem resolvidas são

$$c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) = \int_{-1}^{1} 1\, dx = 2$$

$$c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) = \int_{-1}^{1} x\, dx = 0$$

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Dedução da fórmula de Gauss-Legendre

$$c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) = \int_{-1}^{1} x^2 \, dx = \frac{2}{3}$$

$$c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) = \int_{-1}^{1} x^3 \, dx = 0$$

- Ao se resolver simultaneamente as equações, obtém-se

$$c_0 = c_1 = 1$$

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Dedução da fórmula de Gauss-Legendre

$$x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}} = -0{,}5773503...$$

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0{,}5773503...$$

    - Substituindo os resultados na equação geral obtém-se a fórmula de Gauss-Legendre de dois pontos

$$I = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  – Dedução da fórmula de Gauss-Legendre
    - Chega-se, assim, ao interessante resultado de que uma simples adição da função em $x = 1/\sqrt{3}$ e fornece uma estimativa da integral que apresenta terceira ordem de acurácia.

  – Aplicação da fórmula:
    - Intervalo de integração: de – 1 a 1.
    - Transformação: $x = a_0 + a_1 x_d$

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Aplicação da fórmula
    - x_d é a nova variável relacionada à variável original.
    - Extremo inferior: $x = a$, $x_d = -1$.
    - Extremo superior: $x = b$, $x_d = 1$.
    - Solução:

$$x = \frac{(b-a)+(b-a)x_d}{2}$$

    - Derivada:

$$dx = \frac{(b-a)}{2} dx_d$$

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  - Além da fórmula com dois pontos, versões com mais pontos podem ser desenvolvidas na forma geral

$$I = c_0 f(x_0) + c_1 f(x_1) + \ldots + c_{n-1} f(x_{n-1})$$

em que n é o número de pontos

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)

Pontos (n)	Fatores de Peso	Argumentos da função	Erro de truncamento
2	$c_0 = 1{,}0000000$	$x_0 = -0{,}577350269$	$\approx f^{(iv)}(\xi)$
	$c_1 = 1{,}0000000$	$x_1 = 0{,}577350269$	
3	$c_0 = 0{,}5555556$	$x_0 = -0{,}774596669$	$\approx f^{(vi)}(\xi)$
	$c_1 = 0{,}8888889$	$x_1 = 0$	
	$c_2 = 0{,}5555556$	$x_2 = 0{,}774596669$	
4	$c_0 = 0{,}3478548$	$x_0 = -0{,}861136312$	$\approx f^{(viii)}(\xi)$
	$c_1 = 0{,}6521452$	$x_1 = -0{,}339981044$	
	$c_2 = 0{,}6521452$	$x_2 = 0{,}339981044$	
	$c_3 = 0{,}3478548$	$x_3 = 0{,}861136312$	

Integração Numérica

- Quadratura Gaussiana (Gauss-Legendre)
  – Como a Quadratura Gaussiana exige cálculos da função em pontos que não são uniformemente espaçados dentro do intervalo de integração, não é apropriada para os casos nos quais a função não é conhecida.
  – Logo, esse método não é adequado para problemas de engenharia que lidem com dados tabulados.

Derivação Numérica

- Expressões básicas
  - As expressões obtidas para a aproximação numérica de derivadas são baseadas em expansões em Séries de Taylor.
  - Tomando-se uma série de Taylor para o ponto x_{i+1} ao redor de x_i:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)[x_{i+1} - x_i] + \frac{f''(x_i)}{2!}[x_{i+1} - x_i]^2 +$$

$$+ \frac{f'''(x_i)}{3!}[x_{i+1} - x_i]^3 + \ldots$$

Derivação Numérica

- Expressões básicas
  - Isolando-se o termo relacionado à primeira derivada, obtém-se

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{[x_{i+1} - x_i]} - \frac{f''(x_i)}{2!}[x_{i+1} - x_i] - \frac{f'''(x_i)}{3!}[x_{i+1} - x_i]^2 + \ldots$$

  - Truncando-se no primeiro termo:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{[x_{i+1} - x_i]} + O(x_{i+1} - x_i)$$

Derivação Numérica

- Expressões básicas
  - Escrita de outro modo (Primeira Diferença Progressiva):

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{[x_{i+1} - x_i]} + O(h)$$

  - Analogamente, pode-se obter (Primeira Diferença Regressiva):

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{[x_i - x_{i-1}]} + O(h)$$

Derivação Numérica

- Expressões básicas
  - Tomando-se as expressões:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)[x_{i+1} - x_i] + \frac{f''(x_i)}{2!}[x_{i+1} - x_i]^2 + \ldots$$

e

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) + f'(x_i)[x_i - x_{i-1}] + \frac{f''(x_i)}{2!}[x_i - x_{i-1}]^2 + \ldots$$

Derivação Numérica

- Expressões básicas
  – Considerando-se o passo $h = x_{i+1} - x_i = x_{i-1} - x_i$ e subtraindo as equações anteriores, obtém-se

$$f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}) = 2f'(x_i)h + 2\frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \ldots$$

  – Isolando-se a primeira derivada, tem-se

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \frac{f'''(x_i)}{6}h^2 + \ldots$$

Derivação Numérica

- Expressões básicas
  - Obtém-se, assim, a expressão para a primeira diferença central:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2)$$

  - Expressões para outras aproximações de derivadas são obtidas de modo similar.

Derivação Numérica

- Diferenças progressivas:
  - Derivadas de primeira ordem:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h)$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} + O(h^2)$$

Derivação Numérica

- Diferenças progressivas
  - Derivadas de segunda ordem:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} + O(h)$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2} + O(h^2)$$

Derivação Numérica

- Diferenças progressivas
  - Derivadas de terceira ordem:

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+2}) + 3f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h^3} + O(h)$$

$$f'''(x_i) = \frac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3} + O(h^2)$$

Derivação Numérica

- Diferenças progressivas
  - Derivadas de quarta ordem

$$f^{(iv)}(x_i) = \frac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4} + O(h)$$

$$f^{(iv)}(x_i) = \frac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4}$$

$$+ O(h^2)$$

Derivação Numérica

- Diferenças regressivas:
  - Derivadas de primeira ordem

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h)$$

$$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h} + O(h^2)$$

Derivação Numérica

- Diferenças regressivas
  - Derivadas de segunda ordem:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} + O(h)$$

$$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^2} + O(h^2)$$

Derivação Numérica

- Diferenças regressivas
  - Derivadas de terceira ordem:

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_i) - 3f(x_{i-1}) + 3f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^3} + O(h)$$

$$f'''(x_i) = \frac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4})}{2h^3} + O(h)$$

Derivação Numérica

- Diferenças regressivas
  - Derivadas de quarta ordem:

$$f^{(iv)}(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4})}{h^4} + O(h)$$

$$f^{(iv)}(x_i) = \frac{3f(x_i) - 14f(x_{i-1}) + 26f(x_{i-2}) - 24f(x_{i-3}) + 11f(x_{i-4}) - 2f(x_{i-5})}{h^4}$$

$$+ O(h^2)$$

Derivação Numérica

- Diferenças centrais
  - Derivadas de primeira ordem:

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2)$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h} + O(h^4)$$

Derivação Numérica

- Diferenças centrais
  - Derivadas de segunda ordem:

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + O(h^2)$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{12h^2} + O(h^4)$$

Derivação Numérica

- Diferenças centrais
  - Derivadas de terceira ordem:

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{2h^3} + O(h^2)$$

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3})}{8h^3} +$$

$$+ O(h^4)$$

Derivação Numérica

- Diferenças centrais
  - Derivadas de quarta ordem:

$$f^{(iv)}(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^4} + O(h^2)$$

$$f^{(iv)}(x_i) = \frac{1}{6h^4}\left[- f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) - 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})\right] + O(h^4)$$

Derivação Numérica

- Extrapolação de Richardson
  - Existem algums modos principais para melhorar estimativas de derivadas:
    - Diminuir o tamanho do passo *h*.
    - Usar uma fórmula de ordem mais elevada, que emprega mais pontos.
    - Empregar Extrapolações de Richardson, que consiste em utilizar duas estimativas obtidas para uma dada derivada para se calcular uma terceira estimativa mais acurada.

Derivação Numérica

- Extrapolação de Richardson
  - A metodologia empregada para a derivação numérica é análoga àquela utilizada para o caso de integrais (integração de Romberg).
  - Dessa forma, considerando-se que $h_2 = h_1/2$, tem-se que a primeira Extrapolação de Richardson fornece a seguinte aproximação da derivada:

$$D = \frac{4}{3}D(h_2) - \frac{1}{3}D(h_1)$$

Derivação Numérica

- Extrapolação de Richardson
  - Pode-se, então, empregar o mesmo algoritmo fornecido para a integração de Romberg (que consiste no emprego da Extrapolação de Richardson para o caso de integrais) para se estimar as derivadas numericamente, obtendo altas ordens de acurácia.