MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS

O método das diferenças finitas é um procedimento matemático usado para obter soluções numéricas de equações diferenciais. A ideia básica é usar a série de Taylor para obter uma fórmula de derivação da função. Considere a expansão de Taylor da função $f(x)$ no ponto x_0:

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{k=0}^{n} \frac{1}{n!} \frac{d^n f(x_0)}{dx^n} (x - x_0)^k \\ &= f(x_0) + \frac{1}{1!} f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x - x_0)^2 \\ &+ \frac{1}{3!} f^{(3)}(x_0)(x - x_0)^3 + \cdots + \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0)(x - x_0)^n + R_n(x) \end{aligned} \tag{1}$$

onde $R_n(x)$ representa o erro que se comete ao trucar a série no n-enésimo termo e pode ser estimado usando a fórmula de Lagrange:

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)(x - x_0)}{(n+1)!}. \tag{2}$$

ξ é um número situado no intervalo (x, x_0). Fazendo $x - x_0 = h$, temos que $x = x_0 + h$. Substituindo estes valores em (1), obtemos

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{1}{1!} f'(x_0)h + \frac{1}{2!} f''(x_0)h^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)h^3 + O(h^4) \tag{3}$$

Permutando h por $-h$, podemos escrever (3) como

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - \frac{1}{1!} f'(x_0)h + \frac{1}{2!} f''(x_0)h^2 - \frac{1}{3!} f'''(x_0)h^3 + O(h^4) \tag{4}$$

onde h é o incremento feito à variável x. Usando as equações (3) e (4) podemos calcular $f'(x)$ de três modos diferentes como uma diferença quociente e um termo de erro, obtido ao se desprezar os termos restantes da expansão de Taylor. Esses três métodos são conhecidos como *diferenças finitas progressivas, diferenças finitas regressivas e diferenças finitas centradas*. A fórmula da diferença finita progressiva é obtida a partir da Equação (3) isolando $f'(x_0)$ e desprezando os termos de $O(h^2)$, ou seja,

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + O(h^2), \tag{5}$$

onde $O(h^2)$ é o erro que se comete ao desprezar os termos restantes da expansão de Taylor univariada. Derivando (5) novamente e usando (5) na fórmula resultante, obtemos uma fórmula para $f''(x_0)$, ou seja,

$$\begin{aligned} f''(x_0) &= \frac{f'(x_0+h) - f'(x_0)}{h} = \frac{\frac{f(x_0+h+h) - f(x_0+h)}{h} - \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}}{h} \\ &= \frac{f(x_0+2h) - 2f(x_0+h) + f(x_0)}{h^2}. \end{aligned} \tag{6}$$

Repetindo este procedimento recursivamente, chegamos na fórmula geral para a derivada n-ésima usando o método das diferenças finitas progressivas:

$$f^{(n)}(x_0) = \frac{\sum_{k=0}^{n} (-1)^k \binom{n}{k} f(x_0 + (n-k)h)}{h^n}. \tag{7}$$

O coeficiente $\binom{n}{k}$ é dado por

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!\,(n-k)!}.$$

A *diferença finita regressiva* é obtida a partir da Equação (4) com procedimento similar ao usada para a *diferença finita progressiva*, ou seja,

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h} + O(h^2). \tag{8}$$

Derivando (8), obtemos

$$f''(x_0) = \frac{f'(x_0) - f'(x_0-h)}{h} \tag{9}$$

Usando (8) em (9), obtemos uma fórmula para calcular a derivada segunda usando o método das diferenças finitas regressivas, ou seja,

$$\begin{aligned} f''(x_0) &= \frac{f'(x_0) - f'(x_0-h)}{h} = \frac{\frac{f(x_0) - f(x_0-h)}{h} - \frac{f(x_0-h) - f(x_0-h-h)}{h}}{h} \\ &= \frac{f(x_0) - 2f(x_0-h) + f(x_0-2h)}{h^2}. \end{aligned} \tag{10}$$

Pela aplicação recursiva de (8), chega-se na fórmula geral para a derivada n-ésima de $f(x_o)$ usando o método das diferenças finitas regressivas:

$$f^{(n)}(x_0) = \frac{\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \binom{n}{k} f(x_0 - kh)}{h^n}. \tag{11}$$

Na obtenção do método das diferenças finitas centradas usando as equações ((3) e (4), geralmente na literatura, substituímos o $h \to h/2$, ou seja,

$$f\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) = f(x_0) + \frac{1}{1!}f'(x_0)\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2!}f''(x_0)\left(\frac{h}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_0)\left(\frac{h}{2}\right)^3 + O\left(\left(\frac{h}{2}\right)^4\right) \tag{12}$$

$$f\left(x_0 - \frac{h}{2}\right) = f(x_0) - \frac{1}{1!}f'(x_0)\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2!}f''(x_0)\left(\frac{h}{2}\right)^2 - \frac{1}{3!}f'''(x_0)\left(\frac{h}{2}\right)^3 + O(h^4) \tag{13}$$

Subtraindo (13) de (12), obtemos a fórmula para $f'(x_0)$ usando o método da *diferença finita centrada*:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h/2) - f(x_0 - h/2)}{h} + O(h^3). \tag{14}$$

Observe que na fórmula (14) o erro é de terceira ordem e, portanto, é a fórmula que apresenta o menor erro.

Para obtermos $f''(x_0)$ usando o método da diferença finita centrada, usamos um procedimento análogo aos descritos anterioriormente, isto é,

$$\begin{aligned} f''(x_0) &= \frac{f'\left(x_0 + \frac{h}{2}\right) - f'\left(x_0 - \frac{h}{2}\right)}{h} \\ &= \frac{\frac{f\left(x_0 + \frac{h}{2} + \frac{h}{2}\right) - f(x_0)}{h} - \frac{f(x_0) - f\left(x_0 - \frac{h}{2} - \frac{h}{2}\right)}{h}}{h} \\ &= \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2}. \end{aligned} \tag{15}$$

Pela aplicação sucessiva do recurso recursivo podemos generalizar (15) para derivadas de ordem n usando o método da diferença finita centrada:

$$f^{(n)}(x_0) = \frac{\sum_{k=0}^{n}(-1)^k \binom{n}{k} f\left(x_0 + \left(\frac{n}{2} - k\right)h\right)}{h^n}. \tag{16}$$

Exercícios

1. Encontre os 5 primeiros termos da série de Taylor da função $f(x) = sen(x)$ no ponto $x_0 = \frac{\pi}{2}$.
2. Calcule a derivada primeira da função $f(x) = cosx$ no ponto $x_0 = 3.0$ usando os métodos das diferenças finitas progressiva, retrógada e centrada. Compare os resultados obtidos com o resultado exato.