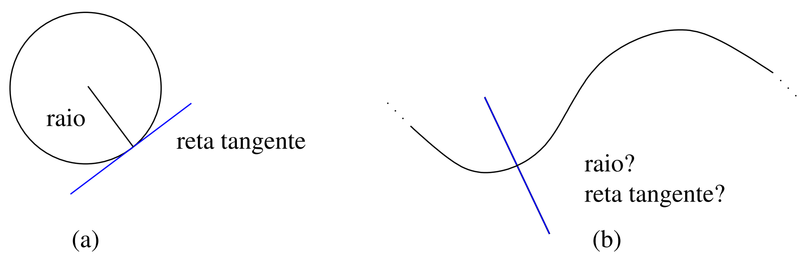
Diferenciação Numérica – Roteiro de Aula

Diogo Pinheiro Fernandes Pedrosa

Universidade Federal do Rio Grande do Norte
Centro de Tecnologia
Departamento de Engenharia de Computação e Automação
`http://www.dca.ufrn.br/~diogo`
`diogo@dca.ufrn.br`

1 Introdução

Derivada $\longrightarrow$ necessidade de se calcular a reta tangente a um ponto.



Para curvas bidimensionais este problema é resolvido pela abordagem da reta secante (figura 1).

Problemas práticos:

1. Funções sem derivada definida em $x \in \mathbb{R}$ (exemplo: $f(x) = |x|$);
2. Funções com derivadas difíceis de serem obtidas analiticamente;
3. Funções conhecidas apenas através de um conjunto de valores tabelados (forma analítica desconhecida).

Principal aplicação: implementação computacional da derivada de uma função (por exemplo, *Método de Newton* para encontrar a raiz de uma função).

2 Regra Geral

Para determinar a fórmula geral da derivada numérica de uma função $f(x)$, primeiramente tem-se que aproximá-la por um polinômio interpolador. Assim:

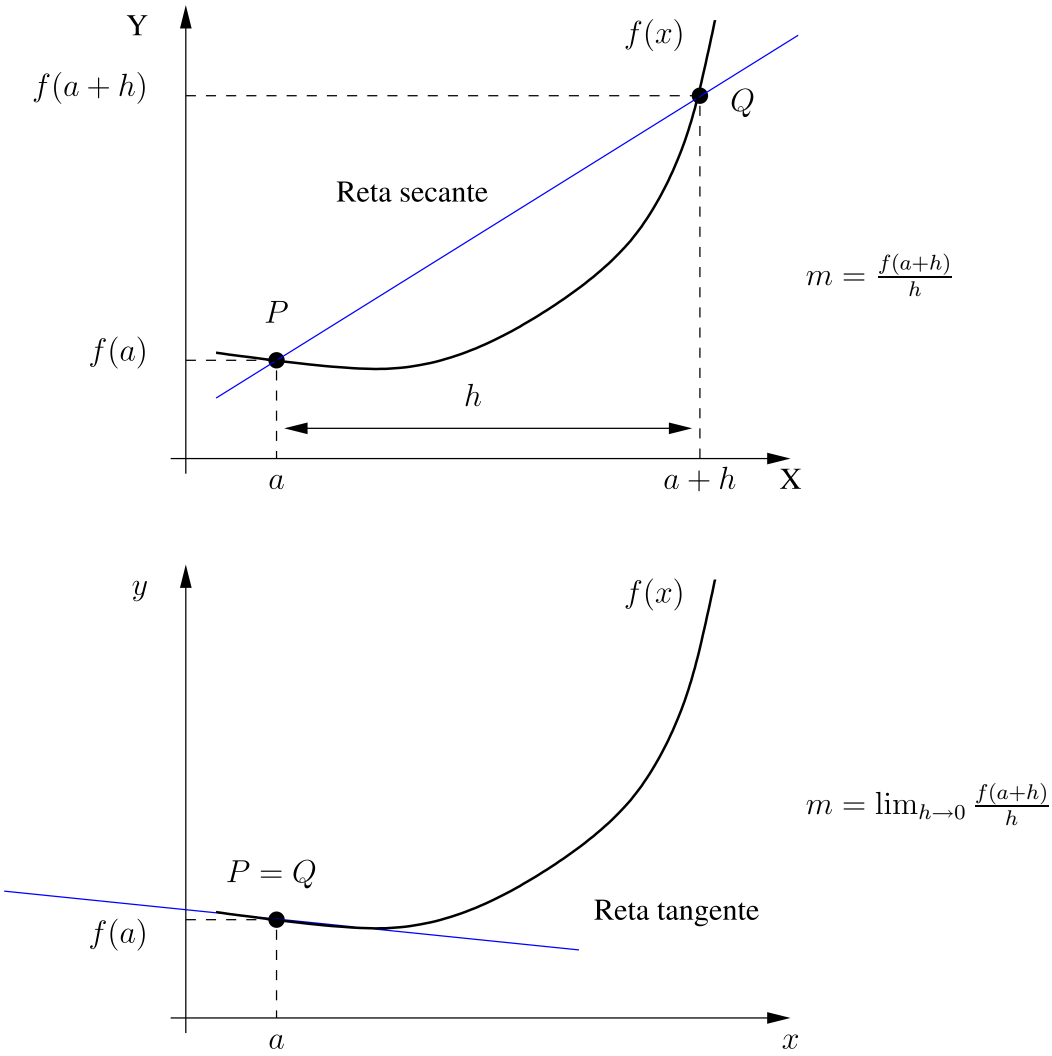


Figura 1: Reta secante e definição de reta tangente em uma curva bidimensional.

$$f(x) \cong \beta_0 p_0(x) + \beta_1 p_1(x) + \ldots + \beta_n p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \beta_k p_k(x)$$

onde:

$$p_k(x) = \prod_{j=0,\ j \neq k} (x - x_j) \qquad \text{e} \qquad \beta_k = \frac{f(x_k)}{p_k(x_k)}$$

com $k = 0, 1, 2, \ldots, n$.

Dessa maneira, a derivada de $f(x)$ pode ser definida como:

$$f'(x) \cong \beta_0 p_0'(x) + \beta_1 p_1'(x) + \ldots + \beta_n p_n'(x) = \sum_{k=0}^{n} \beta_k p_k'(x)$$

2.1 Fórmulas das Diferenças Superior e Inferior

Utilizam apenas dois pontos para avaliação da derivada. Assim, têm-se:

$$f(x) \cong \beta_0 p_0(x) + \beta_1 p_1(x)$$

com $p_0(x) = x - x_1$ e $p_1(x) = x - x_0$.

Porém:

$$f'(x) \cong \beta_0 p_0'(x) + \beta_1 p_1'(x)$$

com $p_0'(x) = 1$ e $p_1'(x) = 1$.

Sendo $\beta_0 = \frac{f(x_0)}{p_0(x_0)}$ e $\beta_1 = \frac{f(x_1)}{p_1(x_1)}$, tem-se:

$$f'(x) \cong \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0}$$

Uma condição importante para definir as fórmulas das diferenças é que os pontos avaliados devem estar igualmente espaçados entre si, por uma distância h, no eixo x. Assim, sendo $x_1 - x_0 = h$, tem-se:

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

que resulta em:

$$f'(x_0) \cong \frac{1}{h}\left[f(x_0 + h) + f(x_0)\right]$$

igulando-se assim à inclinação da reta secante (figura 1).

Caso se tenha $(n+1)$ pontos separados por h nos seus valores de x (x_0, x_1, x_2, …, x_n) pode-se definir uma fórmula mais geral:

$$f'(x_k) \cong \frac{1}{h}\left[f(x_k + h) + f(x_k)\right]$$

Observação:

1. Se $h > 0$, a equação geral é chamada de *fórmula da diferença superior*;
2. Se $h < 0$, a equação geral é chamada de *fórmula da diferença inferior.*

Uma comparação entre os resultados obtidos por estas fórmulas está na figura 2.

Exemplo: dado $f(x) = \ln(x)$ e $x_k = 1,8$, calcular a derivada numérica e o erro absoluto para valores de h iguais a $0,1$, $0,01$ e $0,001$. Trabalhar com cinco casas decimais.

Para verificar o erro absoluto, deve-se encontrar a derivada analítica da função:

$$f(x) = \ln(x) \longrightarrow f'(x) = \frac{1}{x}$$

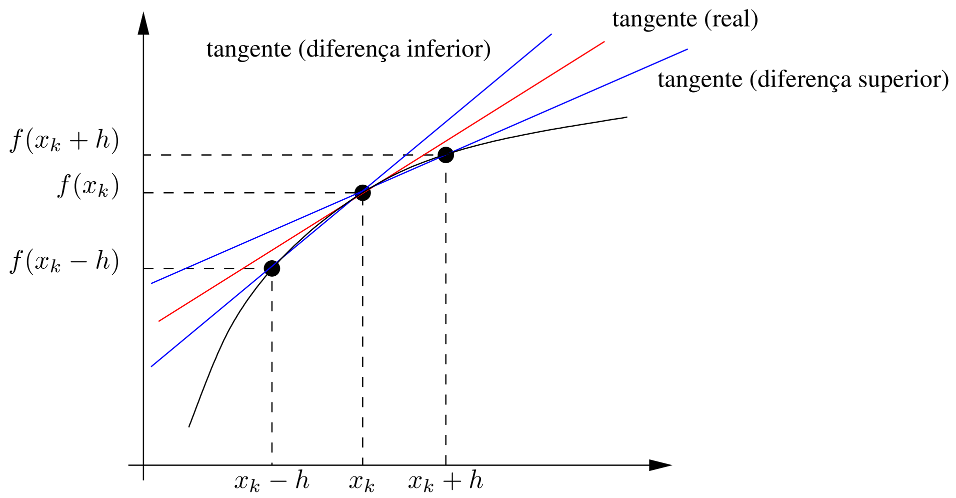


Figura 2: Comparação entre a derivada real e as derivadas numéricas dadas pelas fórmulas das diferenças superior e inferior.

Assim, a derivada real da função em $x_k = 1,8$ é:

$$f'(1,8) = \frac{1}{1,8} = 0,55556$$

Para $h = 0,1$:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{0,1}\left[f(1,8 + 0,1) - f(1,8)\right] = 0,54067$$

$$e_a = |0,55556 - 0,54067| = 0,01488$$

Para $h = 0,01$:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{0,01}\left[f(1,8 + 0,01) - f(1,8)\right] = 0,55402$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55402| = 0,00154$$

Para $h = 0,001$:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{0,001}\left[f(1,8 + 0,001) - f(1,8)\right] = 0,55540$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55540| = 0,00016$$

Para melhorar a precisão dos resultados pode-se fazer com que o valor de h seja bastante reduzido. Entretanto, a diminuição desse valor pode resultar em aumento significativo dos erros de arredondamento.

Uma outra alternativa seria manter h suficientemente pequeno, sem implicar em erros de arredondamento, e utilizar mais pontos para a avaliação das fórmulas das derivadas. As fórmula mais utilizadas são as que utilizam 3 pontos.

2.2 Fórmulas dos Três Pontos

Para três pontos de avaliação, o polinômio interpolador é:

$$f(x) \cong \beta_0 p_0(x) + \beta_1 p_1(x) + \beta_2 p_2(x)$$

com

$$\begin{aligned} p_0(x) &= (x - x_1)(x - x_2) = x^2 - (x_1 + x_2)x + x_1 x_2 \\ p_1(x) &= (x - x_0)(x - x_2) = x^2 - (x_0 + x_2)x + x_0 x_2 \\ p_2(x) &= (x - x_0)(x - x_1) = x^2 - (x_0 + x_1)x + x_0 x_1 \end{aligned}$$

e com coeficientes $\beta_0 = \frac{f(x_0)}{p_0(x_0)}$, $\beta_1 = \frac{f(x_1)}{p_1(x_1)}$ e $\beta_2 = \frac{f(x_2)}{p_2(x_2)}$.

Dessa forma, a derivada é:

$$f'(x) \cong \beta_0 p_0'(x) + \beta_1 p_1'(x) + \beta_2 p_2'(x)$$

com

$$\begin{aligned} p_0'(x) &= 2x - x_1 - x_2 \\ p_1'(x) &= 2x - x_0 - x_2 \\ p_2'(x) &= 2x - x_0 - x_1 \end{aligned}$$

Sendo os três pontos igualmente espaçados por h, ou seja:

$$\begin{cases} x_0 \\ x_1 = x_0 + h \\ x_2 = x_0 + 2h \end{cases}$$

tem-se:

$$f'(x) \cong \frac{f(x_0)}{2h^2}(2x - 2x_0 - 3h) - \frac{f(x_1)}{h^2}(2x - 2x_0 - 2h) + \frac{f(x_2)}{2h^2}(2x - 2x_0 - h)$$

Assim, através desta fórmula, pode-se calcular a derivada numérica para cada um dos três pontos avaliados:

$$\begin{aligned} f'(x_1) &\cong \frac{1}{2h}\left[-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)\right] \\ f'(x_2) &\cong \frac{1}{2h}\left[f(x_2) - f(x_0)\right] \\ f'(x_3) &\cong \frac{1}{2h}\left[f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)\right] \end{aligned}$$

No entanto, tendo $(n+1)$ pontos igualmente espaçados por h, pode-se generalizar estas três equações de forma a calcular a derivada de três formas diferentes para um valor x_k qualquer. Para isso, deve-se seguir a seguinte regra:

1. Se $k = 0$ (fórmula I):

$$f'(x_k) \cong \frac{1}{2h}\left[-3f(x_k) + 4f(x_k + h) - f(x_k + 2h)\right]$$

2. Se $0 < k < n$ (fórmula II):

$$f'(x_k) \cong \frac{1}{2h}\left[f(x_k + h) - f(x_k - h)\right]$$

3. Se $k = n$ (fórmula III):

$$f'(x_k) \cong \frac{1}{2h}\left[f(x_k - 2h) - 4f(x_k - h) + 3f(x_k)\right]$$

Exemplo: dado $f(x) = \ln(x)$ e $x_k = 1,8$, calcular a derivada numérica e o erro absoluto para valores de h iguais a $0,1$, $0,01$ e $0,001$ utilizando as fórmulas dos três pontos. Trabalhar com cinco casas decimais.

Como visto no exemplo anterior, a derivada analítica da função é:

$$f'(x) = \frac{1}{x} \longrightarrow f'(1,8) = \frac{1}{1,8} = 0,55556$$

Para $h = 0,1$:

- Usando a fórmula I:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,1}\left[-3f(1,8) + 4f(1,8 + 0,1) - f(1,8 + 0,2)\right] = 0,55454$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55454| = 0,00102$$

- Usando a fórmula II:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,1}\left[f(1,8 + 0,1) - f(1,8 - 0,1)\right] = 0,55613$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55613| = 0,00057$$

- Usando a fórmula III:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,1}\left[3f(1,8 - 0,2) - 4f(1,8 - 0,1) + 3f(1,8)\right] = 0,55425$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55425| = 0,00131$$

Para $h = 0,01$:

- Usando a fórmula I:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,01}\left[-3f(1,8) + 4f(1,8 + 0,01) - f(1,8 + 0,02)\right] = 0,55554$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55554| = 0,00002$$

- Usando a fórmula II:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,01}\left[f(1,8+0,01) - f(1,8-0,01)\right] = 0,55556$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55556| = 0,0$$

- Usando a fórmula III:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,01}\left[3f(1,8-0,02) - 4f(1,8-0,01) + 3f(1,8)\right] = 0,55554$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55554| = 0,00002$$

Para $h = 0,001$:

- Usando a fórmula I:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,001}\left[-3f(1,8) + 4f(1,8+0,001) - f(1,8+0,002)\right] = 0,55556$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55556| = 0,0$$

- Usando a fórmula II:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,001}\left[f(1,8+0,001) - f(1,8-0,001)\right] = 0,55556$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55556| = 0,0$$

- Usando a fórmula III:

$$f'(1,8) \cong \frac{1}{2 \cdot 0,001}\left[3f(1,8-0,002) - 4f(1,8-0,001) + 3f(1,8)\right] = 0,55556$$

$$e_a = |0,55556 - 0,55556| = 0,0$$

3 Exercícios

1. Use as fórmulas de três pontos para calcular cada um dos dados de entrada nas tabelas a seguir. Verifique também os erros absolutos. Lembrar-se que para funções trigonométricas, a calculadora deve ser modificada para operar em radianos.

   (a) Para $f(x) = e^{2x}$:

x	$f(x)$	$f'(x)$
$1,1$	$9,025013$	
$1,2$	$11,023180$	
$1,3$	$13,463740$	
$1,4$	$16,444650$	

(b) Para $f(x) = x \cdot \ln(x)$:

x	$f(x)$	$f'(x)$
$8,1$	$16,94410$	
$8,3$	$17,56492$	
$8,5$	$18,19056$	
$8,7$	$18,82091$	

(c) Para $f(x) = x\cos(x) - x^2\sin(x)$:

x	$f(x)$	$f'(x)$
$2,9$	$-4,827866$	
$3,0$	$-4,240058$	
$3,1$	$-3,496909$	
$3,2$	$-2,596792$	

(d) Para $f(x) = 2[\ln(x)]^2 + 3\sin(x)$:

x	$f(x)$	$f'(x)$
$2,0$	$3,6887983$	
$2,1$	$3,6905701$	
$2,2$	$3,6688192$	
$2,3$	$3,6245909$	

(e) Para $f(x) = \tan(x)$:

x	$f(x)$	$f'(x)$
$2,1$	$-1,7098470$	
$2,2$	$-1,3738230$	
$2,3$	$-1,1192140$	
$2,4$	$-0,9160143$	
$2,5$	$-0,7470223$	
2.6	-0.6015966	

(f) Para $f(x) = \mathrm{e}^{x/3} + x^2$:

x	$f(x)$	$f'(x)$
$-3,0$	$9,367879$	
$-2,8$	$8,233241$	
$-2,6$	$7,180350$	
$-2,4$	$6,209329$	
$-2,2$	$5,320305$	
$-2,0$	$4,513417$	