Diferenciação Numérica

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

1 Introdução

O problema da derivada surgiu da necessidade de calcular a reta tangente a um pont em uma curva. Em uma circunferência, a reta tangente é perpendicular ao raio e passa por somente um ponto. No entanto, em uma curva plana esta definição não é válida pois não há o conceito de raio e o fato de uma reta passar por somente um ponto da curva não indica que esta reta é tangente, como exemplificado pela figura 1.

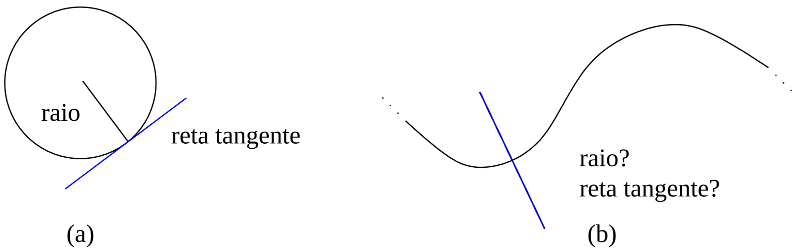

Figura 1: Definição de reta tangente em uma circunferência (a) e ausência destes conceitos em uma curva planar (b).

Para resolver este problema, supõe-se que a curva seja definida por uma função $f(x)$ e que o ponto P onde se deseja encontrar a reta tangente seja dado por $(x = a; y = f(a))$. Considera-se ainda um outro ponto Q definido por $(x = a + h; y = f(a + h))$, onde h é um pequeno incremento. A inclinação da reta secante $\overline{PQ}$ é dada por:

$$m = \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

o que pode ser visualizado na figura 2.

Considerando que o incremento h diminui progressivamente, o ponto Q aproxima-se de P. Assim, pode-se utilizar o conceito de limite para definir a inclinação da reta tangente ao ponto P.

$$m = \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

como mostrado na figura 3.

A definição de derivada de uma função em um ponto P diz que ela é igual à inclinação da reta tangente que passa por esse ponto. Assim:

$$f'(a) = \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

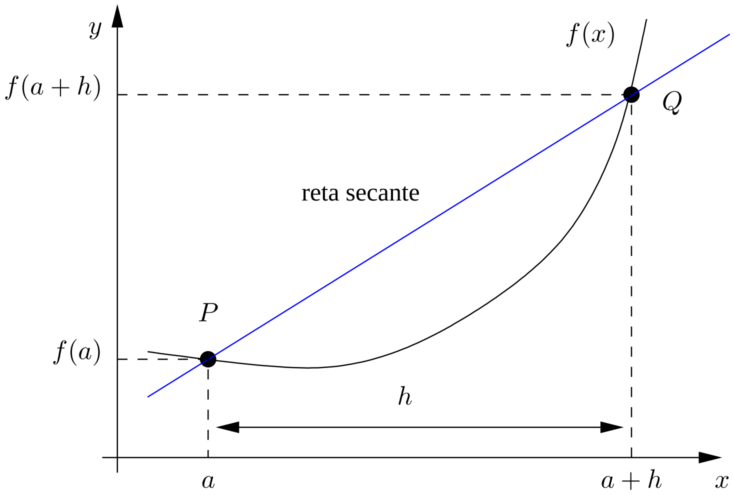

Figura 2: Reta secante entre os pontos P e Q para definição da reta tangente a um ponto em uma curva planar.

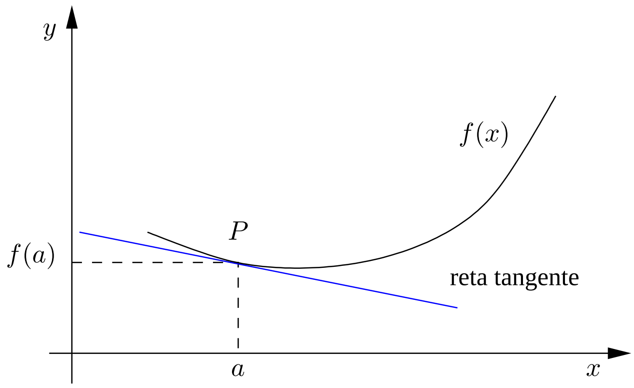

Figura 3: Reta tangente ao ponto P utilizando o conceito de limite para o cálculo da sua inclinação.

Em *Métodos Computacionais* a derivada é utilizada, por exemplo, no Método de Newton-Raphson para o cálculo de raízes de equações não-lineares. Nas disciplinas de *Cálculo* são vistas regras para determinar a forma analítica da derivada de uma função contínua, e derivável, em todo $x \in \mathbb{R}$. Entretanto, há funções que não possuem derivada em todo o conjunto dos reais, como $f(x) = |x|$, por exemplo. Neste curso será visto como calcular numericamente a derivada de uma função $f(x)$.

2 Diferenciação Numérica

Dado um intervalo $[a, b]$, uma função $f(x)$ derivável neste intervalo e uma abscissa $x_k \in (a, b)$. Seja um incremento h de valor reduzido e diferente de 0. A aproximação da derivada da função $f(x)$ em $x = x_k$ é dada por:

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

observando que se $h > 0$, esta fórmula é chamada de diferença superior e, caso $h < 0$, ela é a fórmula da diferença inferior (ver figura 4).

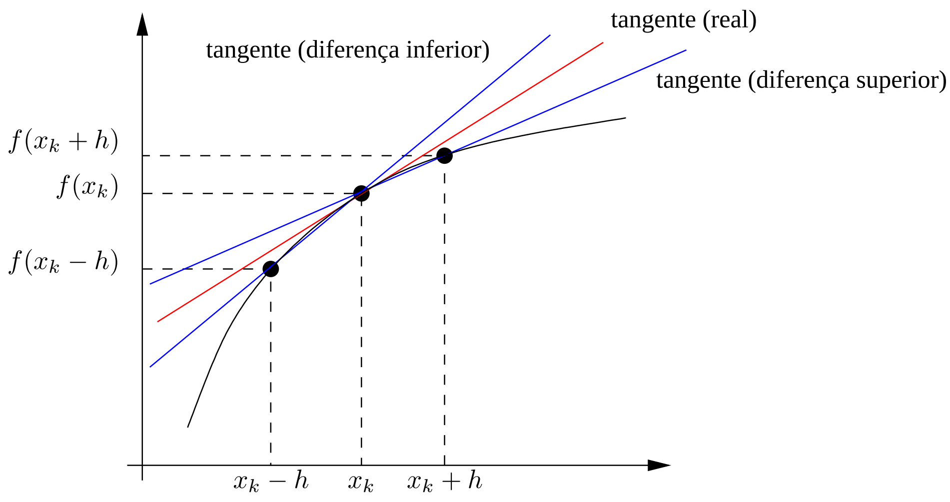

Figura 4: Derivadas numéricas de $f(x)$ em x_k.

Exemplo 1 *Dado* $f(x) = \ln x$, *calcular a derivada numérica utilizando a fórmula da diferença superior para* $x = 1.8$ *e* h *igual a* 0.1, 0.01 *e* 0.001, *respectivamente. Compare com o valor real da derivada.*

A derivada analítica de $f(x) = \ln x$ é $f'(x) = 1/x$. Assim, para $x = 1.8$, $f'(1.8) = 0.555556$. A derivada numérica para $h = 0.1$ é:

$$f'(1.8) \cong \frac{\ln(1.8+0.1) - \ln(1.8)}{0.1} = 0.540672$$

Para $h = 0.01$ tem-se:

$$f'(1.8) \cong \frac{\ln(1.8+0.01) - \ln(1.8)}{0.01} = 0.554018$$

E, por fim, para $h = 0.001$:

$$f'(1.8) \cong \frac{\ln(1.8+0.001) - \ln(1.8)}{0.001} = 0.555401$$

Pode-se notar que com a diminuição do valor de h o valor da derivada numérica aproxima-se do valor calculado analiticamente. Entretanto, por menor que seja o valor do incremento, ela ainda apresentará um erro de arredondamente relativamente grande. Normalmente, uma maneira de encontrar a derivada numérica com erros menores é através da utilização de vários pontos. Isto permitirá que se encontre uma fórmula geral para determinar a derivada.

2.1 Fórmula Geral

Supondo que x_0, x_1, x_2, $\ldots$, x_n sejam $(n+1)$ números diferentes em algum intervalo $[a,\, b]$ e que a função $f(x)$ seja diferenciável em todos os pontos $(x_i, f(x_i))$, com $i = 0, 1, 2, \ldots, n$, o polinômio interpolador de Lagrange que se aproxima dessa função é:

$$f(x) \cong \sum_{i=0}^{n} b_i \cdot p_i(x)$$

onde:

$$p_i(x) = \prod_{j=0\ j\neq i}^{n} (x - x_j)$$

$$b_i = \frac{f(x_i)}{p_i(x_i)}$$

Dessa forma, a derivada de $f(x)$ é dada por:

$$f'(x) \cong \sum_{i=0}^{n} b_i \cdot p'_i(x)$$

que é chamada de fórmula dos $(n+1)$ pontos. De um modo geral, quanto maior for a quantidade de pontos utilizados maior será a precisão. Entretanto, por razões de praticidade, utiliza-se fórmulas de 3 e 5 pontos. Para a fórmula de 3 pontos têm-se:

$$\begin{array}{lcl}
p_0(x) = (x - x_1)(x - x_2) & \rightarrow & p'_0(x) = 2x - x_1 - x_2 \\
p_1(x) = (x - x_0)(x - x_2) & \rightarrow & p'_1(x) = 2x - x_0 - x_2 \\
p_2(x) = (x - x_0)(x - x_1) & \rightarrow & p'_2(x) = 2x - x_0 - x_1
\end{array}$$

Dessa forma:

$$\begin{aligned}
f'(x) \quad \cong \quad & \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}(2x - x_1 - x_2) + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}(2x - x_0 - x_2) + \\
& + \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}(2x - x_0 - x_1) \qquad (1)
\end{aligned}$$

Assumindo que os números do intervalo são igualmente espaçados por um incremento h, então há três situações para a fórmula dos 3 pontos. A primeira é quando:

$$\begin{cases} x_0 = x_k \\ x_1 = x_k + h \\ x_2 = x_k + 2h \end{cases} \qquad (2)$$

cuja derivada numérica de $f(x)$ no ponto $(x_k, f(x_k))$ é obtida através da substituição dos termos na equação geral 1, o que resulta em:

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

De maneira similar, o segundo tipo de espaçamento ocorre quando:

$$\begin{cases} x_0 = x_k - h \\ x_1 = x_k \\ x_2 = x_k + h \end{cases} \qquad (4)$$

que resulta na seguinte fórmula geral:

$$f'(x_k)\frac{1}{2h}\left[f(x_k + h) - f(x_k - h)\right] \qquad (5)$$

E por fim, o último tipo de espaçamento para a fórmula dos três pontos é:

$$\begin{cases} x_0 = x_k - 2h \\ x_1 = x_k - h \\ x_2 = x_k \end{cases} \tag{6}$$

com a seguinte fórmula geral:

$$f'(x_k) \cong \frac{1}{2h}\left[f(x_k - 2h) - 4f(x_k - h) + 3f(x_k)\right] \tag{7}$$

Embora estas equações deêm a aproximação para a derivada $f'(x_k)$, a equação 5 possui erro menor que as outras duas. As aproximações dadas pelas equações 3 e 7 são úteis quando se trabalha com pontos próximos ao extremo do intervalo, uma vez que informações sobre $f(x)$ fora deste intervalo pode não estar disponível.

Exemplo 2 *Os valores de $f(x) = x \cdot \mathrm{e}^x$ são tabelados a seguir:*

x	$f(x)$
1.8	10.889365
1.9	12.703199
2.0	14.778112
2.1	17.148957
2.2	19.855030

Calcular o valor de $f'(2.0)$ utilizando as aproximações dadas pelas equações 3, 5 e 7. Comparar os resultados encontrados com o verdadeiro valor da derivada.

A derivada analítica de $f(x)$ é $f'(x) = (x+1)\cdot\mathrm{e}^x$. O que resulta em $f'(2.0) = 22.167168$. Pela tabela, percebe-se que o incremento h tem valor igual a 0.1. Dessa forma, utilizando a equação 3 tem-se:

$$f'(2.0) \cong \frac{1}{2\cdot 0.1}\left[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)\right] = 22.032305$$

O erro absoluto é igual a $\|22.032305 - 22.167168\| = 0.134863$.

Para a equação 5 o resultado é:

$$f'(2.0) \cong \frac{1}{2\cdot 0.1}\left[f(2.1) - f(1.9)\right] = 22.228787$$

com erro absoluto igual a $\|22.228787 - 22.167168\| = 0.061619$.

E, por fim, para a equação 7 tem-se:

$$f'(2.0) \cong \frac{1}{2\cdot 0.1}\left[f(1.8) - 4f(1.9) + 3f(2.0)\right] = 22.054521$$

com o seguinte erro absoluto: $\|22.054521 - 22.167168\| = 0.112647$.

Assim, percebe-se que para a aproximação da derivada utilizando a fórmula geral dada pela equação 5 o erro encontrado será menor, embora ele sempre existirá.

A derivação numérica é considerada instável, uma vez que valores pequenos de h necessários para reduzir o erro de truncamento também levam a um crescimento do erro de arredondamento. Apesar desta característica de instabilidade, as fórmulas encontradas são úteis para aproximar as soluções de equações ordinárias e diferenciais parciais.

3 Exercícios

1. Use a fórmula de três pontos mais precisa para calcular cada um dos dados de entrada nas tabelas a seguir. Calcule os erros absolutos.

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

x	$f(x)$	$f'(x)$
1.1	9.025013	
1.2	11.02318	
1.3	11.46374	
1.4	16.44465	

   (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	

2. Deduza e utilize as fórmulas dos 5 pontos para determinar, tão precisamente quanto possível, aproximações para cada dado de entrada nas tabelas a seguir. Calcule também os erros absolutos:

   (a) 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	

(b) 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	

3. **Exercício Prático:** suponha um carro andando em uma estrada reta. Use os seguintes dados para prever a velocidade para cada instante de tempo relacionado.

Tempo (s)	Distância (m)
0	0
3	225
5	383
8	623
10	742
13	993

Referências

[1] *Análise Numérica*; Richard L. Burden, J. Douglas Faires; Thomson; 2003.

[2] *Cálculo 1 – Funções de uma Variável*; Geraldo Ávila; Quarta edição; Livros Técnicos e Científicos Editora S.A.; 1981.