Derivação numérica

Leonardo F. Guidi

DMPA – IM
UFRGS

Cálculo Numérico

Índice

Introdução

- Nesta seção vamos desenvolver métodos para estimar a derivada de uma função f calculada em um ponto x^*, $f'(x^*)$, a partir de valores conhecidos de f em pontos próximos ao ponto x^*.
- Uma possível abordagem para encontrar a derivada em um ponto x^* consiste em determinar uma interpolação polinomial, $p(x)$, a partir dos valores de f em pontos próximos a x^* e então estimar $f'(x^*)$ a partir de $p'(x^*)$. Essa abordagem é a mais indicada quando estamos interessados no valor da derivada para diversos pontos ou quando os pontos utilizados para construir a interpolação p não estão igualmente espaçados.
- Na situação em que a função f é conhecida em uma sequência igualmente espaçada de pontos, dispomos de outras técnicas como o cálculo das derivadas a partir de operações de diferença finita.

Introdução

- Nesta seção vamos desenvolver métodos para estimar a derivada de uma função f calculada em um ponto x^*, $f'(x^*)$, a partir de valores conhecidos de f em pontos próximos ao ponto x^*.
- Uma possível abordagem para encontrar a derivada em um ponto x^* consiste em determinar uma interpolação polinomial, $p(x)$, a partir dos valores de f em pontos próximos a x^* e então estimar $f'(x^*)$ a partir de $p'(x^*)$. Essa abordagem é a mais indicada quando estamos interessados no valor da derivada para diversos pontos ou quando os pontos utilizados para construir a interpolação p não estão igualmente espaçados.
- Na situação em que a função f é conhecida em uma sequência igualmente espaçada de pontos, dispomos de outras técnicas como o cálculo das derivadas a partir de operações de diferença finita.

Introdução

- Nesta seção vamos desenvolver métodos para estimar a derivada de uma função f calculada em um ponto x^*, $f'(x^*)$, a partir de valores conhecidos de f em pontos próximos ao ponto x^*.
- Uma possível abordagem para encontrar a derivada em um ponto x^* consiste em determinar uma interpolação polinomial, $p(x)$, a partir dos valores de f em pontos próximos a x^* e então estimar $f'(x^*)$ a partir de $p'(x^*)$. Essa abordagem é a mais indicada quando estamos interessados no valor da derivada para diversos pontos ou quando os pontos utilizados para construir a interpolação p não estão igualmente espaçados.
- Na situação em que a função f é conhecida em uma sequência igualmente espaçada de pontos, dispomos de outras técnicas como o cálculo das derivadas a partir de operações de diferença finita.

Introdução

Notação O

Notação $O(\cdot)$

A notação $f(x) = O(g(x))$ quando $x \to x_0$ significa que existem constantes positivas ε e δ tais que

$$|f(x)| \leq \delta\,|g(x)|$$

para todo x no intervalo $|x - x_0| \leq \varepsilon$.
A mesma notação utilizada na situação $x \to \infty$(ou $-\infty$) siginifica que existem constantes $\delta > 0$ e $\tilde{x} > 0$ (respectivamente $\tilde{x} < 0$) tal que a mesma desigualdade é válida para todo $x > \tilde{x}$ (respectivamente $x < \tilde{x}$).

Operações de diferença finita

A partir da definição da função $f'(x)$ através do limite

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

introduzimos a operação de diferença finita $D_{+,h}$, que transforma f em uma nova função $g_h = \left(D_{+,h} f\right)$:

$$g_h(x) = \left(D_{+,h} f\right)(x) := \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.\text{(op. diferença anterior)}$$

No limite recuperamos a função derivada de f,

$$\lim_{h \to 0} g_h(x) = f'(x).$$

Operações de diferença finita

A função derivada de f pode ser definida a partir de outros limites (e assim, determinar outras operações de diferença finita), por exemplo

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

ou ainda

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Operações de diferença finita

A função derivada de f pode ser definida a partir de outros limites (e assim, determinar outras operações de diferença finita), por exemplo

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

ou ainda

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

A cada uma dessas definições podemos associar naturalmente uma operação de diferença finita. A partir dos dois últimos limites, associamos as operações $D_{-,h}$ e $D_{0,h}$:

$$\left(D_{-,h}f\right)(x) := \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \text{(op. diferença posterior)}$$

$$\left(D_{0,h}f\right)(x) := \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}, \text{(op. diferença central)}.$$

Erros de truncamento

A diferença entre $\left(D_{+,h}f\right)(x)$ e $f'(x)$ é dada por

$$\left(D_{+,h}f\right)(x) - f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x).$$

Através da expansão em série de Taylor em torno de $h = 0$ para $f(x+h)$, notamos que a diferença assume a forma

Erros de truncamento

A diferença entre $\left(D_{+,h}f\right)(x)$ e $f'(x)$ é dada por

$$\left(D_{+,h}f\right)(x) - f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x).$$

Através da expansão em série de Taylor em torno de $h = 0$ para $f(x+h)$, notamos que a diferença assume a forma

$$\begin{aligned} \left(D_{+,h}f\right)(x) - f'(x) &= \frac{f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + O(h^3) - f(x)}{h} - f'(x) \\ &= \frac{h}{2}f''(x) + O(h^2) = O(h). \end{aligned}$$

Erros de truncamento

A diferença entre $\left(D_{+,h}f\right)(x)$ e $f'(x)$ é dada por

$$\left(D_{+,h}f\right)(x) - f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} - f'(x).$$

Através da expansão em série de Taylor em torno de $h=0$ para $f(x+h)$, notamos que a diferença assume a forma

$$\begin{aligned}\left(D_{+,h}f\right)(x) - f'(x) &= \frac{f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(x)+O(h^3)-f(x)}{h} - f'(x) \\ &= \frac{h}{2}f''(x)+O(h^2) = O(h).\end{aligned}$$

De modo análogo, a diferença entre a operação $D_{-,h}$ e a derivada $f'(x)$ também é $O(h)$. Porém, a diferença entre a operação $D_{0,h}f$ e $f'(x)$ é $O(h^2)$:

Erros de truncamento

$$
\begin{aligned}
\left(D_{0,h}f\right)(x) - f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f'(x) \\
&= \frac{1}{2h}\left[\left(f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + O(h^3)\right)\right. \\
&\quad \left. - \left(f(x) + (-h)f'(x) + \frac{(-h)^2}{2}f''(x) + O(h^3)\right)\right] - f'(x) \\
&= \frac{1}{2h}\left[2hf'(x) + O\left(h^3\right)\right] - f'(x) \\
&= O(h^2).
\end{aligned}
$$

Erros de truncamento

Exemplo

Vamos estudar a derivação numérica da função exponencial $f(x) = e^x$, em particular $f(1) = e = 2.718281\ldots$ De acordo com a definição dos operadores de diferença finita podemos montar a seguinte tabela:

h	$g_{+,h}(1)$	$g_{-,h}(1)$	$g_{0,h}(1)$	$g_{+,h}(1) - e$	$g_{-,h}(1) - e$	$g_{0,h}(1) - e$
0.4	3.3423	2.2404	2.791352	0.624	-0.478	0.0731
0.2	3.0092	2.4637	2.736440	0.291	-0.254	0.0182
0.1	2.8588	2.5865	2.722815	0.141	-0.131	0.00453
0.05	2.7874	2.6514	2.719414	0.0691	-0.0669	0.00113

onde $g_{+,h}(x) = \left(D_{+,h}f\right)(x)$ e a mesma notação é utilizada nas demais aproximações.

Erros de arredondamento

Vamos tomar como exemplo a operação de diferença finita $D_{+,h}$:

$$\left(D_{+,h}f\right)(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{f_1 - f_0}{h},$$

onde, por economia de notação, representamos $f(x+h) = f_1$ e $f(x) = f_0$.

Erros de arredondamento

Vamos tomar como exemplo a operação de diferença finita $D_{+,h}$:

$$\left(D_{+,h}f\right)(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{f_1 - f_0}{h},$$

onde, por economia de notação, representamos $f(x+h) = f_1$ e $f(x) = f_0$.

Se a operação for realizada em uma máquina, tipicamente, os valores f_1 e f_0 serão representados por pontos flutuantes $\hat{f}_1$ e $\hat{f}_0$ respectivamente.

Erros de arredondamento

Vamos tomar como exemplo a operação de diferença finita $D_{+,h}$:

$$\left(D_{+,h}f\right)(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{f_1 - f_0}{h},$$

onde, por economia de notação, representamos $f(x+h) = f_1$ e $f(x) = f_0$.

Se a operação for realizada em uma máquina, tipicamente, os valores f_1 e f_0 serão representados por pontos flutuantes $\hat{f}_1$ e $\hat{f}_0$ respectivamente.

Internamente a função $\left(D_{+,h}f\right)(x)$ é representada pelo resultado das operações em ponto flutuante $\left(\hat{f}_1 \ominus \hat{f}_0\right) \oslash h$.

Erros de arredondamento

Levando em conta que $|\hat{f}_1 - f_1| \leq \delta$ e $|\hat{f}_0 - f_0| \leq \delta$, a diferença entre o valor da derivada de f em x e o ponto flutuante $\left(\hat{f}_1 \ominus \hat{f}_0\right) \oslash h$ é dada em valor absoluto por

$$
\begin{aligned}
\left| f'(x) - \frac{\hat{f}_1 - \hat{f}_0}{h} \right| &= \left| f'(x) - \frac{\hat{f}_1 - \hat{f}_0}{h} + \frac{f_1 - f_1}{h} + \frac{f_0 - f_0}{h} \right| \\
&= \left| f'(x) - \frac{f_1 - f_0}{h} - \frac{\hat{f}_1 - f_1}{h} + \frac{\hat{f}_0 - f_0}{h} \right| \\
&\leq \left| f'(x) - \frac{f_1 - f_0}{h} \right| + \left| \frac{\hat{f}_1 - f_1}{h} + \frac{\hat{f}_0 - f_0}{h} \right| \\
&\leq c_1 h + \frac{K}{h} \left(\left| \hat{f}_1 - f_1 \right| + \left| \hat{f}_0 - f_0 \right| \right) \\
&\leq c_1 h + \frac{K}{h} \delta.
\end{aligned}
$$

Extrapolação de Richardson

Vamos rever o caso do operador de diferença finita $D_{0,h}$ com um maior número de termos na expansão:

$$\begin{aligned}\left(D_{0,h}f\right)(x) &\doteq \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \\ &= f'(x)+c_2h^2+O(h^4)\end{aligned}$$

onde $c_2 = \dfrac{f^{(3)}(x)}{3!}$, ou seja, c_2 independe de h.

Extrapolação de Richardson

Vamos rever o caso do operador de diferença finita $D_{0,h}$ com um maior número de termos na expansão:

$$\begin{aligned}\left(D_{0,h}f\right)(x) &\doteq \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \\ &= f'(x)+c_2h^2+O(h^4)\end{aligned}$$

onde $c_2 = \dfrac{f^{(3)}(x)}{3!}$, ou seja, c_2 independe de h.
Dessa forma, a operação de diferença finita com espaçamento $2h$, $\left(D_{0,2h}f\right)(x)$, é tal que

$$\begin{aligned}\left(D_{0,2h}f\right)(x) &\doteq \frac{f(x+2h)-f(x-2h)}{2(2h)} \\ &= f'(x)+c_2(2h)^2+O(h^4).\end{aligned}$$

Extrapolação de Richardson

A diferença entre a ação dessas duas operações aplicadas a uma função f pode ser descrita na segunda ordem em h como

$$\left(D_{0,2h}f\right)(x) - \left(D_{0,h}f\right)(x) = 3c_2h^2 + O(h^4).$$

Ou seja, é possível descrever o termo c_2h^2 através das duas operações de diferença finita mais termos de ordem h^4:

$$c_2h^2 = \frac{\left(D_{0,2h}f\right)(x) - \left(D_{0,h}f\right)(x)}{3} + O(h^4).$$

A substituição desse último termo em qualquer das aproximações para a derivada de f resulta em uma operação de diferença finita envolvendo cinco pontos : $x-2h, x-h, x, x+h$ e $x+2h$:

Extrapolação de Richardson

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= \left(D_{0,h}f\right)(x) - \frac{\left(D_{0,2h}f\right)(x) - \left(D_{0,h}f\right)(x)}{3} + O(h^4) \\
&= \frac{4\left(D_{0,h}f\right)(x) - \left(D_{0,2h}f\right)(x)}{3} + O(h^4) \\
&\doteq \left(D_{1,h}f\right)(x) + O(h^4).
\end{aligned}
$$

Extrapolação de Richardson

$$\begin{aligned} f'(x) &= \left(D_{0,h}f\right)(x) - \frac{\left(D_{0,2h}f\right)(x) - \left(D_{0,h}f\right)(x)}{3} + O(h^4) \\ &= \frac{4\left(D_{0,h}f\right)(x) - \left(D_{0,2h}f\right)(x)}{3} + O(h^4) \\ &\doteq \left(D_{1,h}f\right)(x) + O(h^4). \end{aligned}$$

Essa técnica é denominada *extrapolação de Richardson*, através dela é possível construir operações de diferença finita com maior precisão.

Extrapolação de Richardson

No exemplo que acabamos de estudar:

$$\begin{aligned}\left(D_{1,h}f\right)(x) &\doteq \frac{4\left(D_{0,h}f\right)(x)-\left(D_{0,2h}f\right)(x)}{3}\\ &= \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}.\end{aligned}$$

Extrapolação de Richardson

No exemplo que acabamos de estudar:

$$
\begin{aligned}
\left(D_{1,h}f\right)(x) &\doteq \frac{4\left(D_{0,h}f\right)(x)-\left(D_{0,2h}f\right)(x)}{3} \\
&= \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}.
\end{aligned}
$$

A diferença anterior pode ser escrita como $f'(x)-\left(D_{1,h}f\right)(x)=c_4h^4+O(h^6)$, onde c_4 é também um termo que independe de h.

Extrapolação de Richardson

No exemplo que acabamos de estudar:

$$\begin{aligned}\left(D_{1,h}f\right)(x) &\doteq \frac{4\left(D_{0,h}f\right)(x)-\left(D_{0,2h}f\right)(x)}{3}\\ &= \frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}.\end{aligned}$$

A diferença anterior pode ser escrita como $f'(x)-\left(D_{1,h}f\right)(x)=c_4h^4+O(h^6)$, onde c_4 é também um termo que independe de h. E assim considerando a operação com espaçamento duplo $\left(D_{1,2h}f\right)(x)=f'(x)+c_4(2h)^4+O(h^6)$ podemos dar prosseguimento a extrapolação e determinar a operação $D_{2,h}$ tal que

$$\left(D_{2,h}f\right)(x) \doteq \frac{16\left(D_{1,h}f\right)(x)-\left(D_{1,2h}f\right)(x)}{15}$$

e $f'(x)-\left(D_{2,h}f\right)(x)=O(h^6)$.