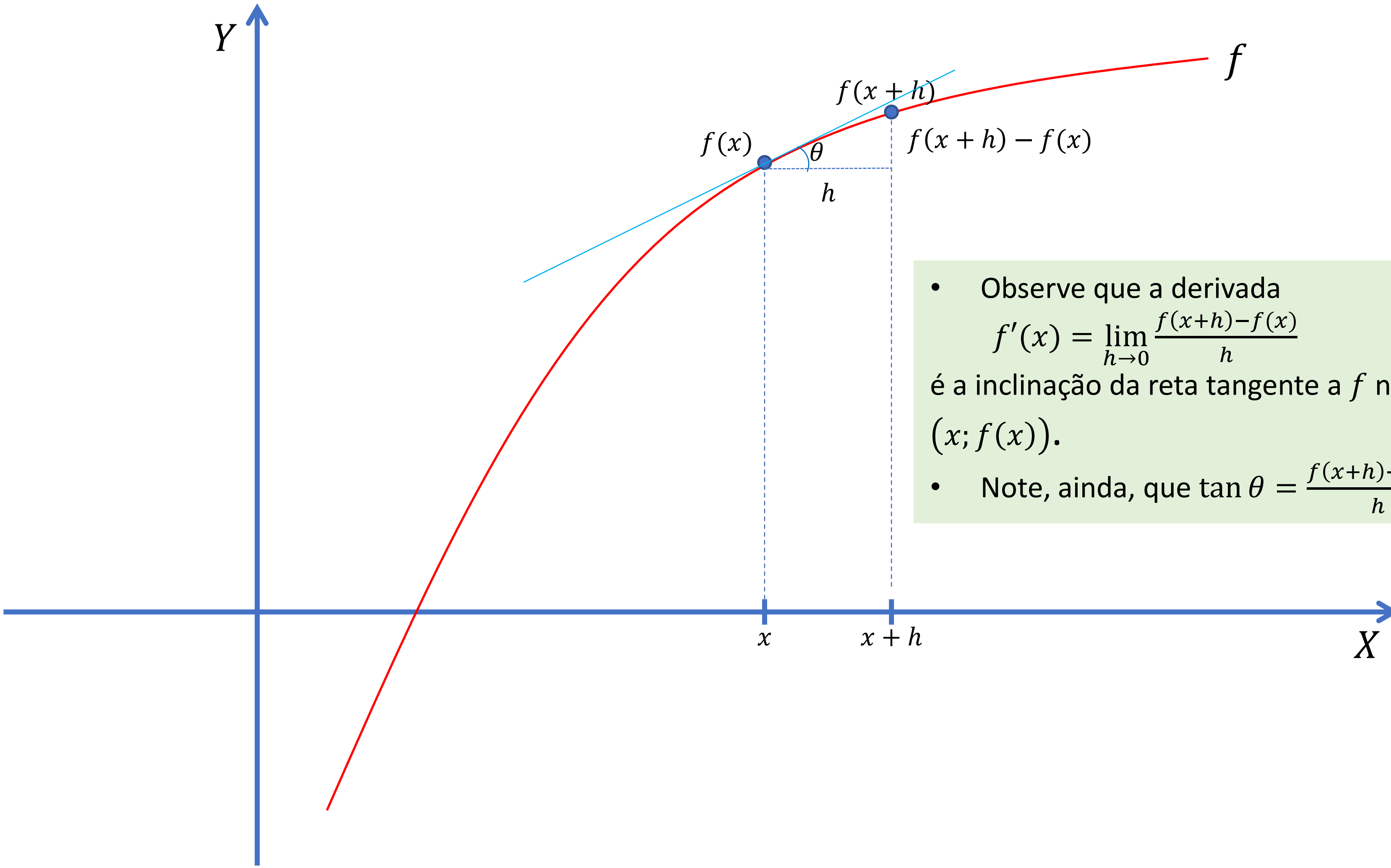
Introdução ao Cálculo Numérico

Aproximação numérica de derivadas

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

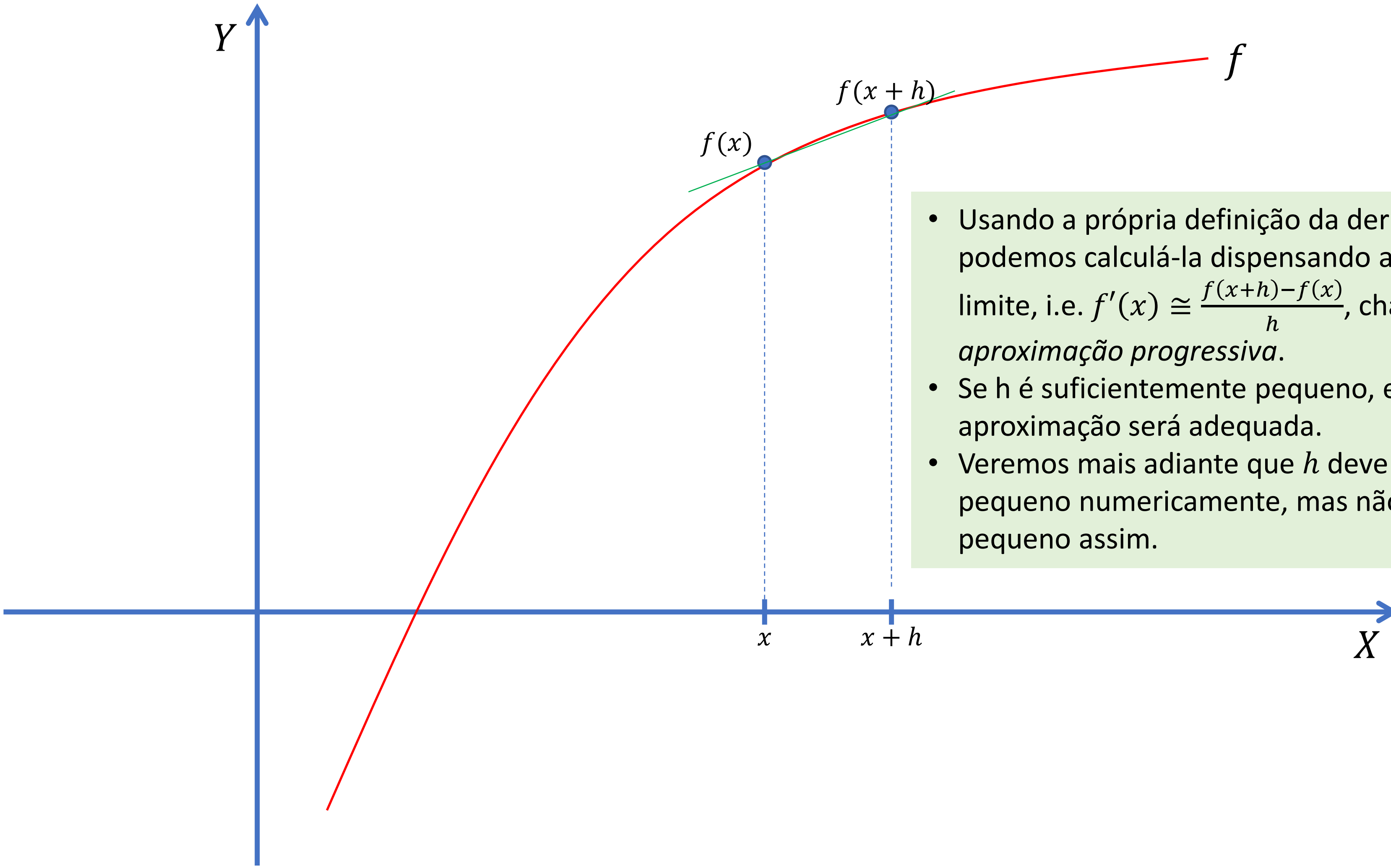
- Seja uma função $f: \begin{array}{c} \mathbb{R} \to \mathbb{R} \\ x \longmapsto f(x) \end{array}$ e a sua derivada $f'(x)$.
- A derivada $f'(x)$ pode ser custosa de se obter algebricamente ou, ainda, sua avaliação pode requerer um maior número de operações aritméticas, o que pode tornar indesejável a utilização da sua expressão analítica.
- Nesse caso, é possível utilizar-se aproximações numéricas para a mesma, como veremos a seguir.

- Inicialmente, considere o gráfico abaixo:



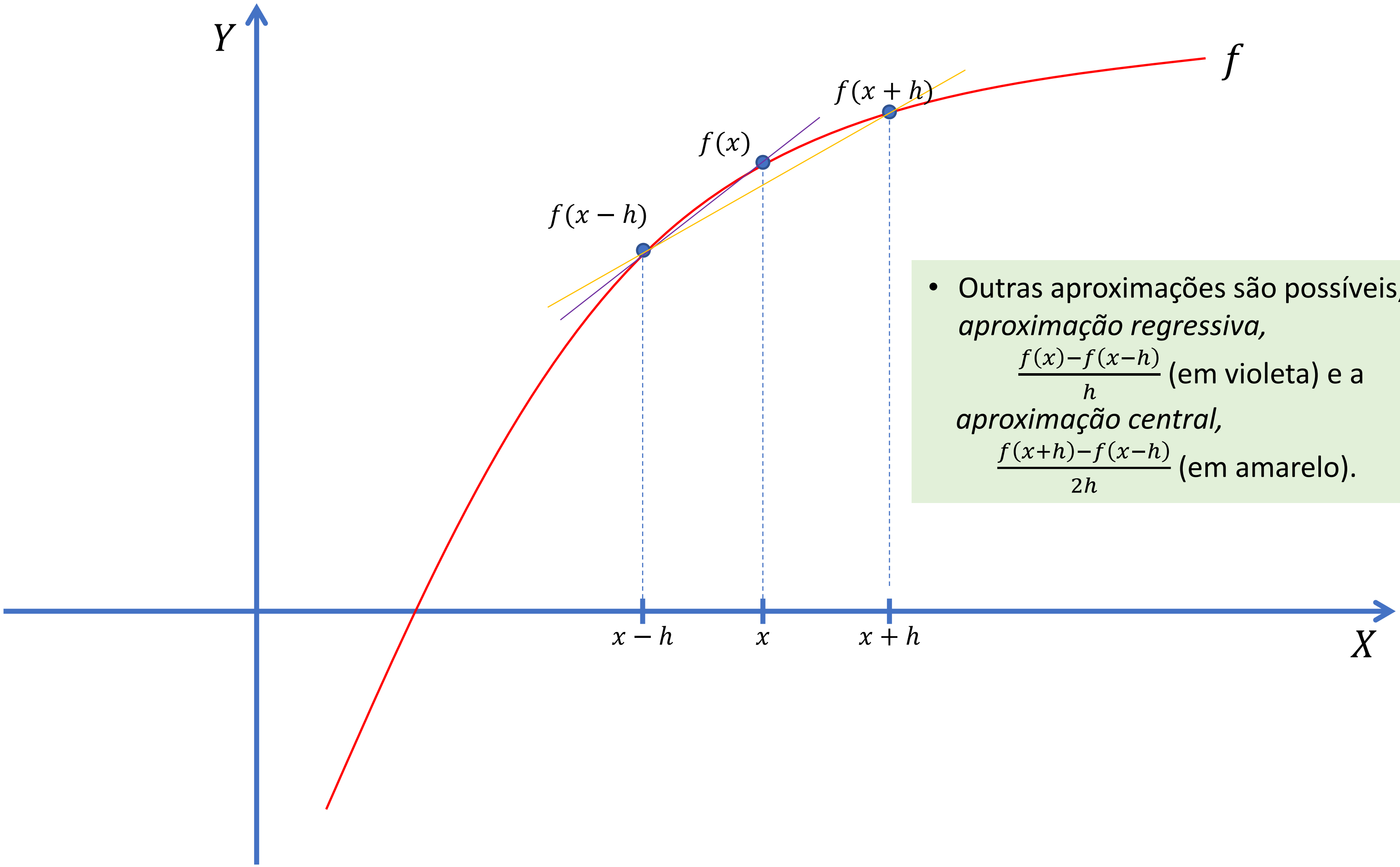
- Observe que a derivada
$$f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$
é a inclinação da reta tangente a f no ponto $\big(x; f(x)\big)$.
- Note, ainda, que $\tan\theta = \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$.

- Inicialmente, considere o gráfico abaixo:



- Usando a própria definição da derivada, podemos calculá-la dispensando a notação de limite, i.e. $f'(x) \cong \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$, chamada de *aproximação progressiva*.
- Se h é suficientemente pequeno, essa aproximação será adequada.
- Veremos mais adiante que h deve ser pequeno numericamente, mas não tão pequeno assim.

- Inicialmente, considere o gráfico abaixo:



- Outras aproximações são possíveis, como a *aproximação regressiva,* $\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$ (em violeta) e a *aproximação central,* $\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ (em amarelo).

Aproximação numérica de derivadas

- As expressões para as aproximações numéricas da derivada $f'(x)$ podem ser obtidas a partir de expansões em séries de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \cdots \quad (1)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \cdots \quad (2)$$

- A *aproximação progressiva*, $D_+(h)$, é obtida a partir de (1), subtraindo $f(x)$ dos dois lados da equação e dividindo por h:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h)$$

e, descartando os termos de ordem $O(h)$, vem

$$D_+(h) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

- O *erro de truncamento* da aproximação progressiva é de ordem $O(h)$.

- A *aproximação regressiva*, $D_-(h)$, é obtida a partir de (2), subtraindo $f(x)$ dos dois lados da equação e dividindo por $-h$:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h)$$

e, descartando os termos de ordem $O(h)$, vem

$$D_-(h) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}.$$

- O *erro de truncamento* da aproximação regressiva é de ordem $O(h)$.

- A *aproximação central*, $D_0(h)$, é obtida subtraindo (2) de (1) e dividindo por $2h$:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

e, descartando os termos de ordem $O(h^2)$, vem

$$D_0(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

- O *erro de truncamento* da aproximação central é de ordem $O(h^2)$.

- Agora, observe que quaisquer dessas aproximações tem um erro de truncamento que é devido ao descarte de termos na série de Taylor.
- Quando essas aproximações forem calculadas num computador em aritmética de ponto-flutuante (precisão finita), ocorrerão arredondamentos.
- Logo,

$$\mathrm{fl}(D_{\blacksquare}(h)) = D_{\blacksquare}(h)(1+\varepsilon).$$

- Além disso, note que a avaliação das expressões $f(x)$, $f(x+h)$ e $f(x-h)$ também incorrem em erros de arredondamento δ, de onde podemos escrever

$$|\mathrm{fl}(f(x)) - f(x)| \leq \delta \tag{3}$$

$$|\mathrm{fl}(f(x+h)) - f(x+h)| \leq \delta \tag{4}$$

$$|\mathrm{fl}(f(x-h)) - f(x-h)| \leq \delta \tag{5}$$

- Considerando a aproximação progressiva

$$D_+(h) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

e as inequações (3)-(5), vem

$$\mathrm{fl}(D_+(h)) = \frac{\mathrm{fl}\big(f(x+h)\big) - \mathrm{fl}(f(x))}{h}(1+\varepsilon).$$

- Então, o erro absoluto entre a derivada $f'(x)$ e a sua aproximação $\mathrm{fl}(D_+(h))$ é dado por:

$$
\begin{aligned}
|f'(x) - \mathrm{fl}(D_+(h))| &= \left| f'(x) - \frac{\mathrm{fl}\big(f(x+h)\big) - \mathrm{fl}\big(f(x)\big)}{h}(1+\varepsilon) \right| \\
&= \left| f'(x) - \left(\frac{\mathrm{fl}\big(f(x+h)\big) - \mathrm{fl}\big(f(x)\big)}{h} + \frac{f(x+h) - f(x+h)}{h} + \frac{f(x) - f(x)}{h} \right)(1+\varepsilon) \right| \\
&= \left| f'(x) + \left(-\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{\mathrm{fl}\big(f(x+h)\big) - f(x+h)}{h} + \frac{\mathrm{fl}\big(f(x)\big) - f(x)}{h} \right)(1+\varepsilon) \right| \\
&\le \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right| + \left(\left| \frac{\mathrm{fl}\big(f(x+h)\big) - f(x+h)}{h} \right| + \left| \frac{\mathrm{fl}\big(f(x)\big) - f(x)}{h} \right| \right) |1+\varepsilon| + \left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right| \varepsilon
\end{aligned}
$$

Como o termo $\left| f'(x) - \frac{f(x+h)-f(x)}{h} \right|$ é limitado por $M = \frac{1}{2} \max_{x \le \zeta \le x+h} |f''(\zeta)|$ (pela série de Taylor) e usando as inequações (3)-(5), podemos escrever

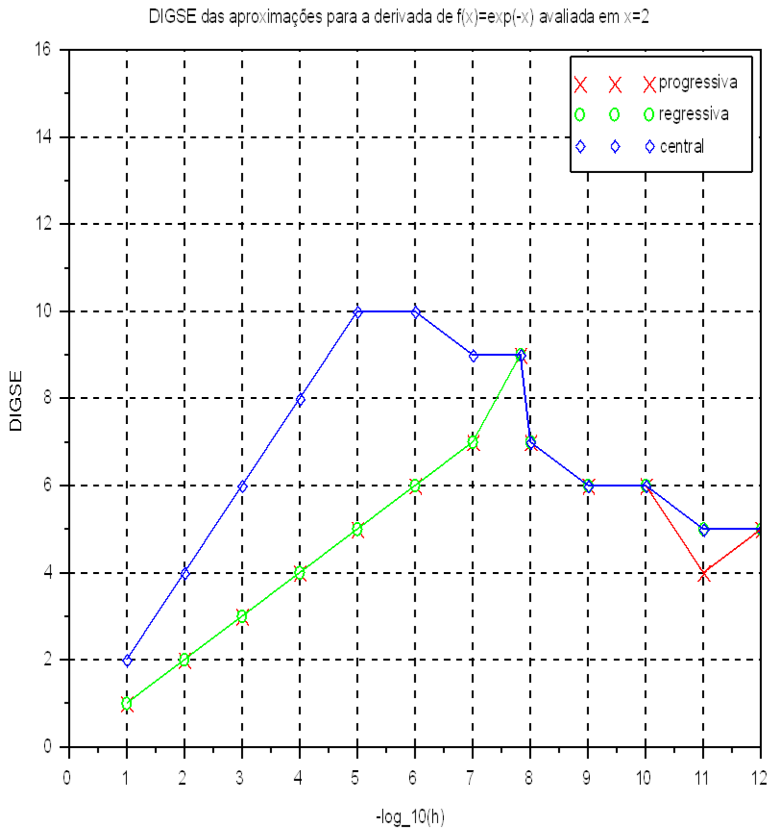
$$
|f'(x) - \mathrm{fl}(D_+(h))| \le Mh + \left(2\left|\frac{\delta}{h}\right|\right)|1+\varepsilon| + |f'(x)|\varepsilon \qquad (6)
$$

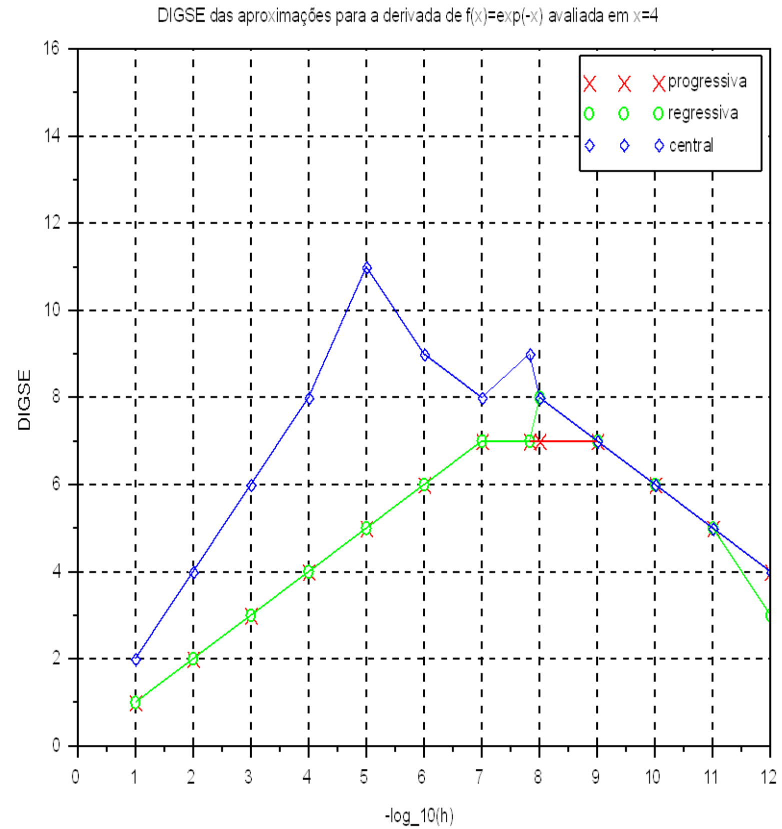
- A inequação (6) é importante pois ela mostra que, se h for pequeno demais, o erro na aproximação para a derivada poderá ser maior do que o esperado, como mostra o exemplo abaixo:
  - Seja $f(x) = x^2 - 4$ e a sua derivada avaliada em x=4, cujo valor exato é 8. A tabela a seguir mostra as aproximações numéricas para a derivada e os seus correspondentes erros relativos, para diferentes valores de h:

h	$D_+(h)$	e_R	$D_-(h)$	e_R	$D_0(h)$	e_R
10^{-4}	8,000 099 999	$1{,}25 \times 10^{-5}$	7,999 900 000	$1{,}25 \times 10^{-5}$	8,000 000 000	$1{,}10 \times 10^{-13}$
10^{-8}	7,999 999 951	$6{,}08 \times 10^{-9}$	7,999 999 951	$6{,}08 \times 10^{-9}$	7,999 999 951	$6{,}08 \times 10^{-9}$
10^{-12}	8,000 711 205	$8{,}89 \times 10^{-5}$	8,000 711 205	$8{,}89 \times 10^{-5}$	8,000 711 205	$8{,}89 \times 10^{-5}$
$\sqrt{\varepsilon_M}$	8,000 000 000	0	8,000 000 000	0	8,000 000 000	0

- Analisando a tabela anterior, podemos observar que:
  - A aproximação central, $D_{\mathbf{0}}(h)$, é, no mínimo, igual às demais e, para h grande, melhor do que elas, já que o seu erro de *truncamento* é menor;
  - À medida que h diminui, percebe-se que as aproximações diminuem seu erro relativo até um certo valor e, após, o erro relativo aumenta, como esperado, de acordo com a equação (6).

- Logo, há certamente um valor ótimo de h para garantir uma boa aproximação da derivada; nesse caso, usando $h = \sqrt{\varepsilon_M}$, obtém-se erro relativo nulo, conforme mostrado na última linha da tabela.
- Porém, dependendo da função e do ponto onde ela é avaliada, o valor de h que deve ser usado pode ser outro, como mostram os gráficos a seguir, ainda que a escolha $\sqrt{\varepsilon_M}$ fornece sempre um valor adequado.





Como pode-se observar, a aproximação central fornece melhores resultados; mas também há um ponto ótimo a partir do qual as aproximações passam a perder sua qualidade numérica.

Aproximação numérica de derivadas

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS