Derivada Numérica

A derivada de uma função f(x) é definida como um processo de limite, o qual é matematicamente descrito por:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \qquad \text{(Eq. 1)}$$

Numericamente é impossível tomarmos o limite $\Delta x \to 0$; temos necessariamente que trabalhar com um valor de Δx *finito*. Portanto, a todo cálculo numérico de uma derivada será associado um *erro numérico*. Abaixo veremos dois métodos numéricos para calcular derivadas e estimaremos os erros associados a tais métodos.

Derivada à direita

Este método se baseia na definição formal de derivada. Para um dado valor de incremento Δx, podemos estimar a derivada da função:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} \qquad \text{(Eq. 2)}$$

A expressão a direita é chamada de quociente diferencial de Newton. Existem duas fontes de erro nessa expressão, o **erro de arredondamento** e o **erro de truncamento**. O primeiro é um erro associado à precisão numérica dos computadores, que é finita (o número de casas dos números). Comparando a expressão (2) com a (1), notamos que, quanto menor o valor de Δx, o valor estimado numericamente é mais próximo ao valor real. No entanto, numericamente não podemos tomar Δx tão pequeno quanto se queira, porque há um limite de precisão numérica. Assim, na região do Δx pequeno há o tipo de erro chamado de **erro de arredondamento**.

Por exemplo, se o nosso computador hipotético processar uma operação matemática com 4 casas decimais, temos que, para a função f(x) = x^2, f(0,1) = 0,01 e f(0,1001) = 0,01002001. Note que, usando a precisão de nosso computador, f(x) = f(x + Δx) no caso em que x = 0,01 e Δx = 0,001. Com isso, o resultado da derivada numérica seria $f'(0,1) = 0$, o que sabemos não ser verdade, já que podemos calcular essa derivada analiticamente. Isso coloca um limite inferior para o incremento Δx, e assim para a precisão da estimativa numérica da derivada.

O segundo tipo de erro podemos dizer que é "intrínseco" ao método numérico. Para estimá-lo, faremos uso da expansão em série de Taylor da função : f'(x)

$$f(x+\Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)(\Delta x)^2 + \frac{1}{6}f'''(x)(\Delta x)^3 + \ldots$$

(Eq. 3)

manipulando os termos acima, temos:

$$\frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f' + \frac{1}{2}f''\Delta x + \ldots ,$$

e assim

$$f' = \underbrace{\frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}}_{Quociente\,de\ Newton} - \frac{1}{2}f''\Delta x + \ldots .$$

Comparando a expressão acima com o método de de derivada à direita , Eq. 2, notamos que a diferença existe a partir do termo Δx. Podemos dizer que o erro ao usar a quociente de Newton para calcular a derivada é proporcional à Δx. Assim, vemos que o erro cresce linearmente com Δx e portanto devemos usar valores pequenos do incremento.

Resumindo, por um lado temos o **erro de truncamento** e pelo outro o de **arredondamento**, onde o valor ótimo será uma solução de compromisso entre os dois tipos de erro. Vemos então que deve haver um intervalo de valores dentro do qual o Δx deve variar para que a derivada numérica seja a mais próxima do valor real possível.

Derivada Centrada

Outro cálculo numérico da derivada pode ser feito baseado na declividade de dois pontos próximos, um antes e outro depois do ponto onde queremos avaliar a derivada.

A declividade da linha definida por esses dois pontos é:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} \qquad \text{(Eq. 4)}$$

que é chamada de derivada centrada.

Podemos mostrar que o erro intrínseco a este método é menor do que o erro associado ao método anterior. Para estimar o erro de truncamento, expandimos f(x) em torno de Δx (feito na Eq(3)) e em torno de − Δx:

$$f(x-\Delta x) = f(x) + f'(x)(-\Delta x) + \frac{1}{2}f''(x)(-\Delta x)^2 - \frac{1}{6}f'''(x)(\Delta x)^3 + ...$$

Subtraindo de f(x + Δx), dada pela Eq.(3), os termos de f(x − Δx) da expressão acima, notamos que os termos lineares em − Δx se cancelam. Isolando f'(x), temos:

$$f'(x) = \underbrace{\frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x}} - \frac{2}{6} f'''(x)(\Delta x)^2 + ...$$

Comparando a expressão acima com a definição do método de derivada centrada, Eq. 4, notamos que o erro de truncamento é da ordem de $(\Delta x)^2$. Para $|\Delta x| < 1$, vemos que o erro de truncamento associado ao método de derivada centrada é menor do que o erro para a derivada à direita.

Medida numérica do Erro associado a cada método

Para ter uma estimativa do erro associado a utilização da derivada numérica, podemos comparar valores utilizando uma função que tem sua derivada conhecida analiticamente. Assim, o erro é dado por

$$erro = \frac{|f'_{AN}(x) - f'_{NUM}(x)|}{|f'_{NUM}(x)|},$$

onde $f'_{AN}(x)$ e $f'_{NUM}(x)$ são as derivada analítica e numérica de f(x), respectivamente.

Note que, multiplicando o erro por 100, temos a porcentagem de erro que acompanha a derivada numérica.

Exemplo

Como demonstração, usaremos a função f(x) dada por

$$f(x) = \frac{\sin(x^2)e^{x/3}}{\sqrt{x^2+4}}.$$

Os gráficos abaixo ilustram os métodos de derivada à direita (figuras 1 e 2) e derivada centrada (figuras 3 e 4), ambos com x = 0,6 e Δx = 0,4.

Primeiramente, a figura 1 mostra a derivada à direita, onde a curva em vermelho representa f(x) e a curva em azul representa a derivada de f(x).

A figura 2 mostra um zoom no ponto x com a curva da derivada calculada pelo método descrito acima. Em azul a derivada calculada numericamente, só que agora com um deslocamento em y para passar pelo ponto (f(x),x).

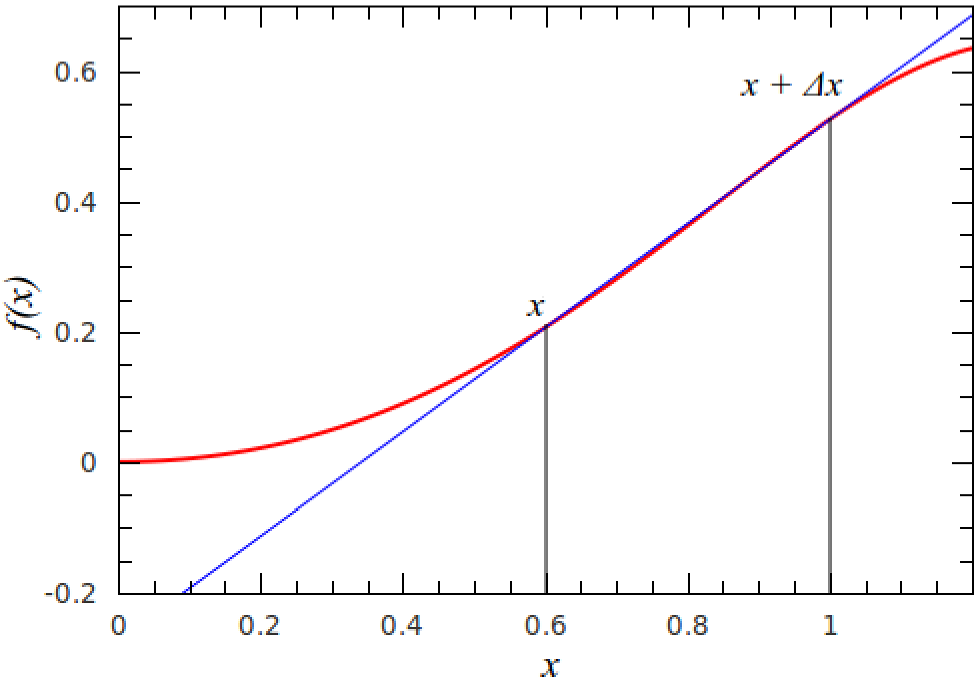

Figura 1 - Derivada à direita

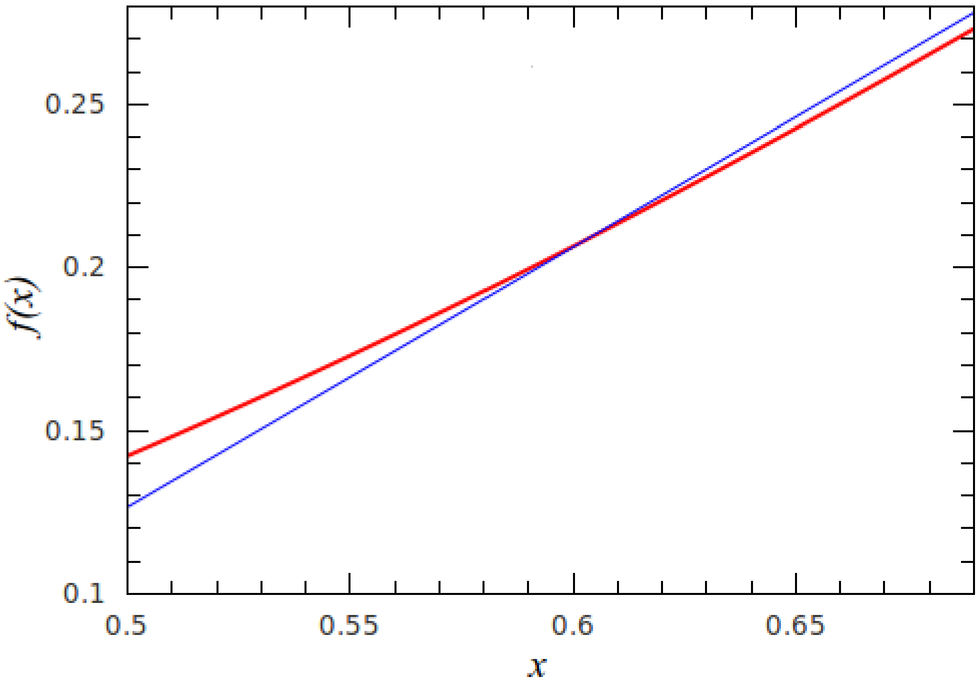

Figura 2 - Derivada à direita (zoom)

O exemplo do método de derivada centrada está representado na figura 3. Em vermelho a curva f(x) e em azul a sua derivada.

A figura 4 mostra um zoom com a curva da derivada centrada em x.

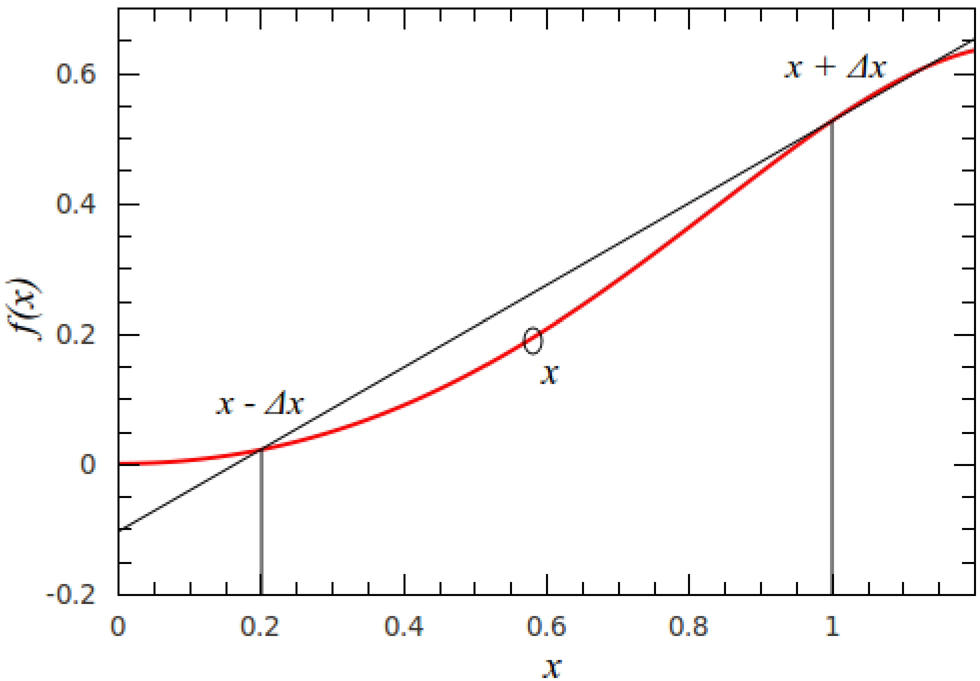

Figura 3 - Derivada centrada

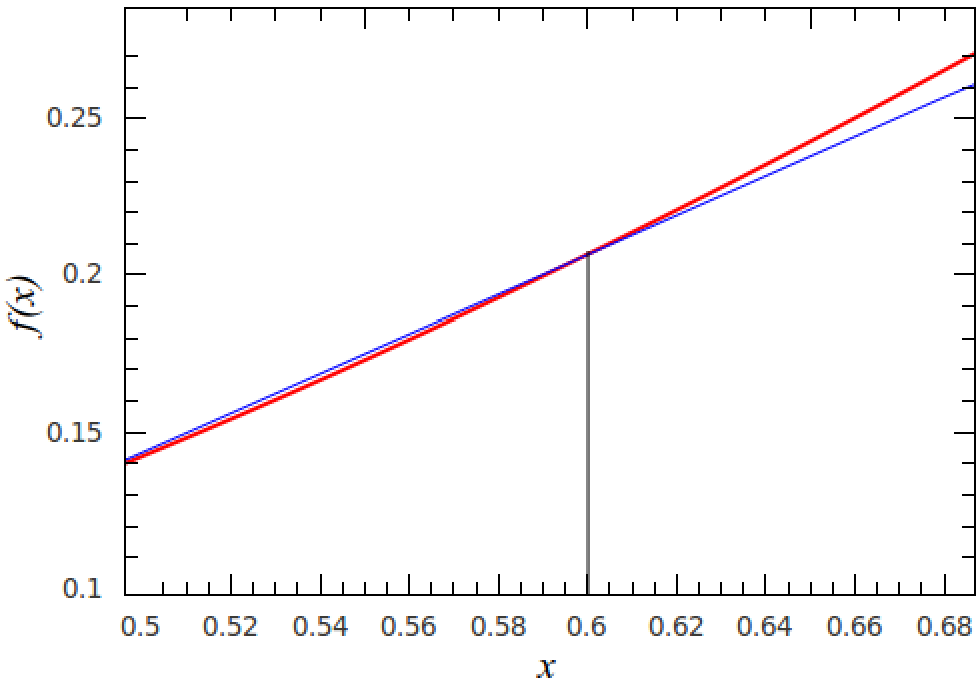

Figura 4 - Derivada centrada (zoom)

Além da ilustração dos métodos de derivação numérica, as figuras 5 e 6 mostram o gráfico do valor retornado pelo método da derivação à direita em função do incremento Δx utilizado.

Na figura 5, a derivada numérica em x=3 em função do Δx utilizado. O valor exato da derivada é f'(3) = −4.08963. Diminuindo o valor do incremento, vemos que em volta de Δx = 0.01 a derivada começa a convergir, piorando a partir de Δx = 10^{-6}. Para valores muito pequenos temos o erro de arredondamento e para valores muito alto temos o erro de truncamento.

Na figura 6 vemos ampliada a região de convergência, onde o valor de Δx = $8x10^{-5}$ parece ser o ótimo.

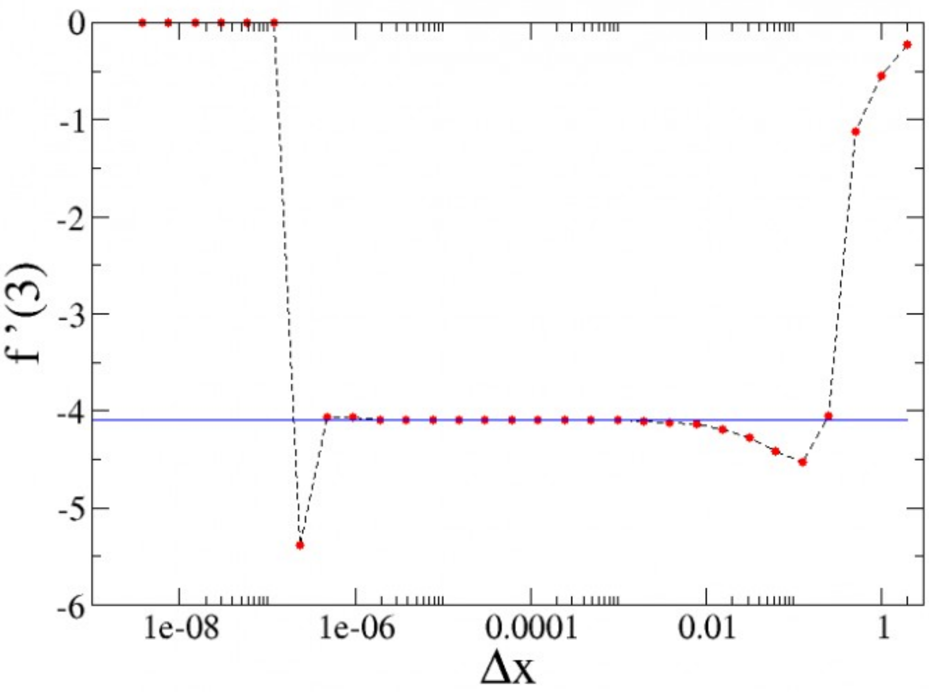

Figura 5 - Erros de truncamento e precisão

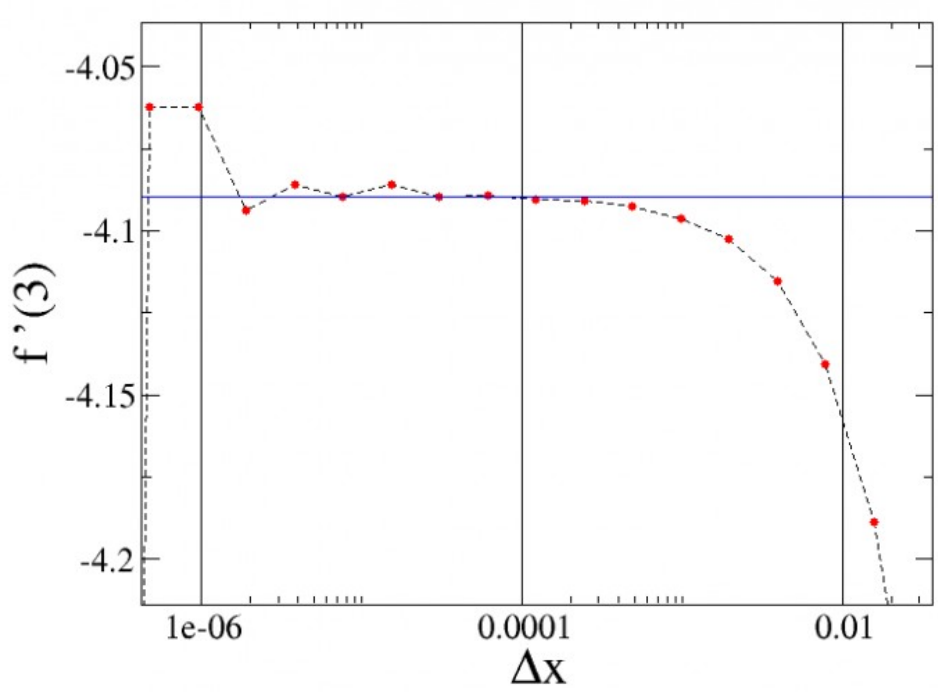

Figura 6 - Erros de truncamento e precisão (zoom)

NOTA: os programa FORTRAN usado para o calculo da derivada esta em Real (ou Real*4, ou seja ponto flutuante em representação de 32 bits). Como seria em dupla precisão (Real*8)?

<u>Exercícios:</u> Derivada Numérica

Este programa calcula f'(x=6) variando h com várias décadas.

Olhe no gnuplot em escala logaritma no eixo x o arquivo gerado por este programa ("derivada_adireita.dat");

No trabalho 8b você deve alterar o programa para entender os erros quando h é grande e pequeno:

1) Adaptar o código acima para calcular a derivada centrada conforme acabamos de ver. Faça um gráfico em eps (usando gnuplot) onde você comparar a derivada usando o método à direita e centrada. Coloque as duas curvas na mesma figura e também o valor analítico.

Haverá uma diferença para valores de h "grandes". Porque ocorre esta diferença?

2) Agora use apenas o método da derivada centrada e altere as variáveis associadas à derivada de float para double. Faça uma figura em eps com as duas curvas da f'(6) usando os dois tipos de variáveis. Coloque junto ao gráfico o valor analítico.

Há uma diferença para valores de h "pequenos". Por quê?

O programa abaixo calcula a derivada da função f(x) = sen(x) * x3 no ponto "x" desejado usando o método de derivada à direita:

```
#include<stdio.h>

#include<math.h>

float funcaoF(float xx) ;

main() {

    float derivadaF, x ;

    float h, i ;

    FILE *file ;

    file = fopen("derivada_adireita.dat", "w" );

    x = 6 ;

    for(i = -10 ; i <= 1; i+=0.2 ) {

        h = pow(10, i) ;

        derivadaF = ( funcaoF(x+h) - funcaoF(x) )/ h ;

        fprintf(file, "%1.1E %f \n", h, derivadaF ) ;

    }

    fclose( file );

}

float funcaoF(float xx)  {

return ( sin(xx) * pow(xx, 3) );

}
```

Medida do erro associado a cada método de derivada numérica

É possível mostrar analiticamente que os erros associados ao cálculo numérico da derivada são crescem de forma diferente dependendo do método usado. Para o método à direita, o erro cresce linearmente com o tamanho do intervalo h e para o método da derivada centrada, ele cresce quadraticamente com h. Por isto escrevemos que:

Erro direita ~ h

Erro central ~ h^2

No trabalho 9b vamos medir computacionalmente o erro numérico ao derivar a função f(x) = sin(x) * x^3

1) Faça um programa que calcule os erros numéricos associados a cada método de derivação para calcular f'(9). Para isto, construa uma função em C para calcular a função f(x) e outra que retorne a f'(x) analítica.

2) para h variando entre 10^{-10} e 1, faça:

- calule f'_central (ou seja: derivada numérica usando o método da derivada central
- calcule f'_direita (usando método da derivada à direita)
- calcule Erro_central, erro associado ao método da derivada central (usando a expressão (1) mostrada acima)
- calcule Erro_direita, erro associado ao método da derivada central (usando a expressão (1) acima)
- imprima numarquivo: h, Erro_central, Erro_direta

3)Desenhe, no gnuplot, o Erro vs h para os dois métodos

Use escala logaritmica em x e y e observe os comportamentos das curvas

Interprete!

Derivada numérica e proximidade de pontos de divergência de uma função

1) Calcule a derivada da função $g(x) = 1/(x^3-1)$. Note que esta função diverge para $x=1$. Você deve usar derivada centrada para calcular $g'(x)$ dos seguintes valores de x: -2, 0.5, 2 e 5

Para **cada** um destes pontos, faça "h" variar bastante (entre 10^{-10} e 10^{-1} por exemplo) e compare os resultados num gráfico feito em gnuplot.

Dica : Você pode usar exatamente o mesmo programa da aula passada, alterando a função f(x) para a g(x) proposta neste trabalho.

2) Entregue um gráfico com as curvas g'(x) em todos os pontos pedidos com seus respectivos valores analíticos comparativos dentro de um documento em pdf gerado usando LaTeX. O documento deve conter a figura pedida e a resposta à questão abaixo:

Note que o intervalo para o qual a derivada numérica converge para o seu valor analítico depende da proximidade do valor de x ao ponto de divergência da função g(x). Por quê?