Métodos Numéricos

DERIVAÇÃO NUMÉRICA

Prof. Erivelton Geraldo Nepomuceno

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA

UNIVERSIDADE DE JOÃO DEL-REI
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO
TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
DIRETORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

UFSJ
UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO JOÃO DEL-REI

CEFET-MG

2016

Breve Referência Histórica

As técnicas de derivação e integração numérica têm origem da interpolação. No entanto, é importante salientar alguns matemáticos que se destacaram especificamente nesta área.

As técnicas de integração, tal com são conhecidas hoje, tiveram a sua origem com Bonaventura Cavalieri (1598-1647), que cerca de 1639 descobriu geometricamente a chamada regra de Simpson (que é também a segunda fórmula de Newton-Cotes) e que consiste em aproximar o valor da integral de uma determinada função num intervalo na integral do seu PI (Polinômio Interpolador)do segundo grau.

Outros matemáticos do séc. XVII que trabalharam nesta área foram James Gregory (1659-1708) (que também conhecia a regra de Simpson), que deduziu uma nova regra de integração designada atualmente por regra de Gregory, e Isaac Newton (1643-1727).

De entre os matemáticos do séc. XVIII pela sua contribuição nesta área pode-se destacar Thomas Simpson (1710-1761), que apresentou o seu trabalho em 1743, Roger Cotes (1681-1761) e Carl Friedrich Gauss (1777-1855) que descobriu as famosas fórmulas de quadratura com o seu nome.

Introdução

- A integração e diferenciação são conceitos fundamentais usados para resolver um grande número de problemas na Engenharia e na Ciência. Enquanto muitos destes problemas possuem soluções analíticas, muitos requerem soluções numéricas para serem entendidos.

- Acontece frequentemente a necessidade de determinar valores da derivada de uma função num conjunto de pontos conhecendo o valor da função apenas, nesses pontos. Na impossibilidade de obter esses valores de forma exata, a sua aproximação pode ser feita através do valor da derivada do PI da função nos referidos pontos.

- A derivada de uma função f em um ponto pode ser descrita graficamente como a inclinação da reta que tangencia a função naquele ponto.

- Pontos da função onde a derivada é zero são chamados pontos críticos. São pontos onde a tangente é representada por uma linha horizontal e que, por isso, definem o local de máximo e de mínimo.

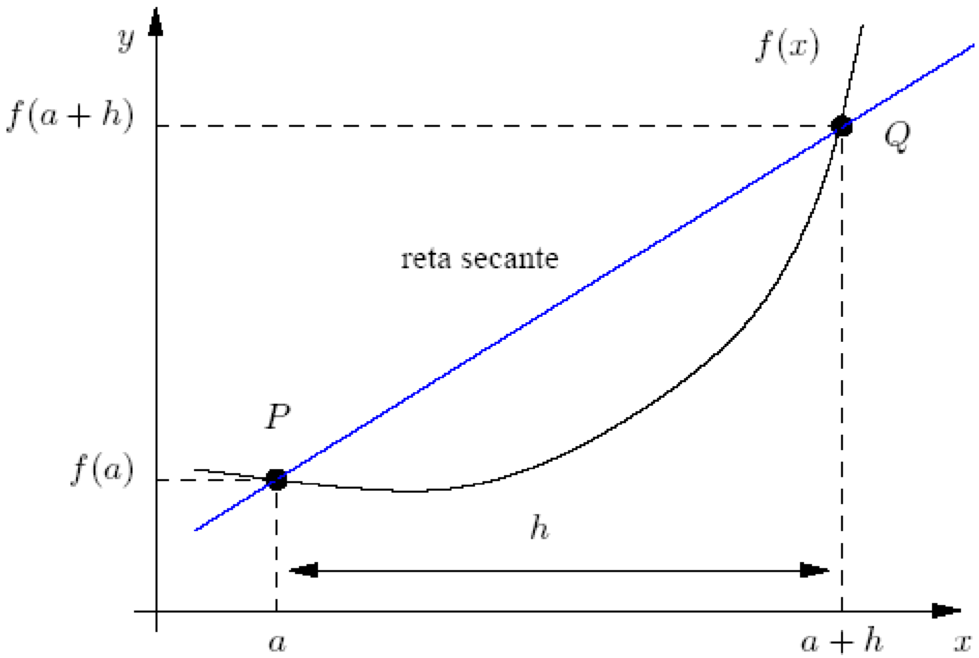
Introdução

- Pode-se perceber ao analisar uma determinada função num determinado intervalo que o sinal da derivada pode mudar, e, se esse sinal muda, significa que dentro deste intervalo existe local de máximo e local de mínimo.

- Pode-se também analisar uma função pela sua derivada segunda. De modo que, se a derivada segunda de um ponto crítico é positiva, então o valor da função naquele ponto significa um local de mínimo. Da mesma forma, se a derivada segunda de um ponto crítico é negativa, então a função possui um local de máximo.

Derivada

- Considere uma função f(x) e um dado ponto P fixo sobre esta curva. Considere um segundo ponto Q próximo de P. A reta tangente em P pode ser representada pela reta PQ na medida em que Q se aproxima de P.



Derivada

- O coeficiente da reta PQ quando Q está o mais próximo possível de P é chamado de derivada da função f no ponto P.

- O coeficiente da reta PQ, m, pode ser calculado pela formula

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

- Pela figura, pode-se perceber que quanto menor h, mais próximo Q estará de P, daí pode-se concluir que

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

Diferenciação Numérica

- A derivação numérica é utilizada para calcular a derivada em situações onde não está disponível a função, e sim apenas um conjunto de pontos pertencentes a esta ou para funções que não são deriváveis em todo o seu domínio ou de derivação não trivial.

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

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

Diferenciação Numérica

- Ex: calcular a derivada da função f(x) = ln(x) para x=1,8 com h=0,1 e 0,01 e compare com o valor real da derivada:

Valor real

$$f'(x) = \frac{1}{x} \Rightarrow f(1{,}8) = 0{,}555556$$

Para h=0,1

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

Para h=0,01

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

- E se for levado em conta os aspectos da computação aritmética?

Diferenciação Numérica

- Na medida em que h diminui, o valor da derivada numérica se aproxima do valor real. Porém, por menor que seja h, este método ainda apresentará um erro de arredondamento grande. Uma maneira de reduzir este erro é utilizar vários pontos.

- A idéia é, a partir de um conjunto de pontos, que definem um intervalo [a,b], determinar a função f que representa tais pontos, ou seja, interpolar este conjunto de pontos. Em seguida, pode-se calcular a derivada da função f e aplicá-la a qualquer ponto pertencente ao intervalo [a,b].

- Quanto maior o número de pontos melhor será o resultado. Porém, por praticidade, utiliza-se fórmulas de 3 a 5 pontos.

Aproximação da Primeira Derivada

- Seja $f \in C^{n+1}([a, b])$ conhecida num conjunto de pontos da partição uniforme

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b,$$

- Com $x_i - x_{i-1} = h$, $i = 1, \ldots, n$. Deseja-se aproximar a derivada de f num dos pontos x_k, $k \in \{0, 1, \ldots, n\}$, da partição. Usando o PI de Lagrange tem-se que, para $x \in (a, b)$:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x)$$

- Sendo l_i, $i = 0, \ldots, n$, os polinômios de Lagrange dados por:

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Aproximação da Primeira Derivada

- w a função dada por:

$$w(x) = \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)$$

- Derivando esta expressão obtém-se:

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x) + \left(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x) \right)'$$

- Pode-se ainda considerar a aproximação:

$$f'(x) \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x),$$

- Com erro dado por:

$$e(x) := \left(\frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} w(x) \right)' = \frac{\left(f^{(n+1)}(\xi) \right)'}{(n+1)!} w(x) + \frac{w'(x)}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$$

Aproximação da Primeira Derivada

- Onde:

$$w'(x) = \sum_{l=0}^{n-1} \prod_{j=0, j\neq l}^{n-1} (x - x_j)$$

- A dificuldade reside no fato de não se saber como calcular $(f^{(n+1)}(\xi))'$ e assim não ser possível estimar o erro cometido.

<u>1 – Fórmulas com dois pontos:</u>

- Tem-se que, para $x \in [x_k, x_{k+1}]$:

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{h}$$

$$\boxed{f'(x) \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x),}$$

$$\boxed{l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}}$$

Aproximação da Primeira Derivada

- Obtem-se assim duas fórmulas de diferenças finitas de primeira ordem para aproximar a primeira derivada. A

$$f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k+1})}{h}$$

- é usual chamar fórmula de diferenças progressivas (ou forward ou forwind) e a

$$f'(x_k) = \frac{f(x_{k-1}) - f(x_k)}{h}$$

- costuma chamar-se fórmula de diferenças regressivas (ou upward ou upwind).

Aproximação da Primeira Derivada

2 – Fórmulas com três pontos:

- Para obter fórmulas mais precisas para aproximar a primeira derivada de uma função, pode-se pensar em aumentar o número de pontos da interpolação. Assim para três pontos:

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

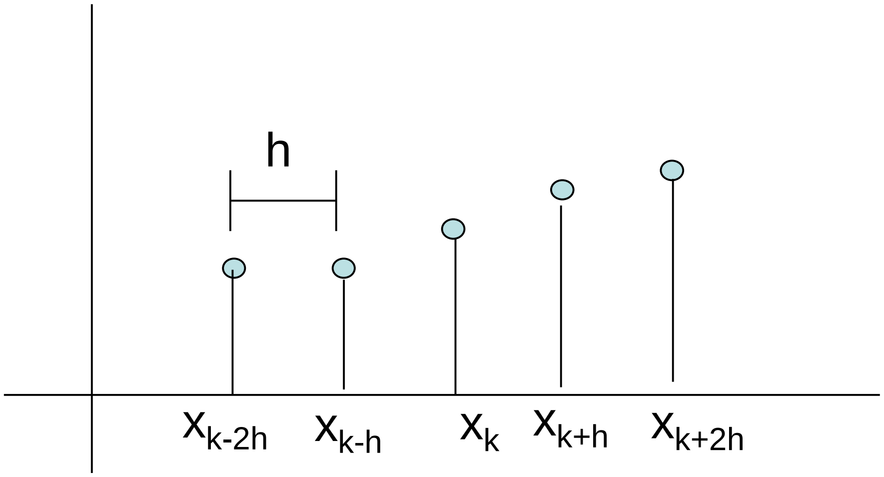
$$f'(x) \cong \frac{f(x_0)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}(2x-x_1-x_2) + \frac{f(x_1)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}(2x-x_0-x_2) + \frac{f(x_2)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}(2x-x_0-x_1)$$

$$\boxed{f'(x) \approx \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_i'(x),}$$

$$\boxed{l_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}}$$

Aproximação da Primeira Derivada

- Sendo os pontos $x_0, x_1, \ldots, x_n$ separados por uma distância h, e se querendo determinar a derivada da função em um determinado ponto x_k, existem 3 possibilidades:



1. Pode-se escolher x_{k-2h}, x_{k-h} e x_k – diferenças finitas retroativas
2. Pode-se escolher x_{k-h}, x_k e x_{k+h} – diferenças finitas centrais
3. Pode-se escolher x_k, x_{k+h} e x_{k+2h} – diferenças finitas progressivas

Aproximação da Primeira Derivada

- Substituindo os valores para os pontos na derivada da equação de interpolação de Langrage obtem-se as seguintes fórmulas:

- diferenças finitas retroativas

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

- diferenças finitas centrais

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

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

- diferenças finitas progressivas

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

Aproximação da Primeira Derivada

Exemplo: Considere os seguintes valores da função $f(x) = xe^x$:

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

Aproxime o valor de $f'(2.0) = 22.167168$ usando as fórmulas de diferenças finitas dadas e compare os erros cometidos.

a. Fórmula retroativa de segunda ordem com $h = 0.1$.

$$f'(2.0) \approx \frac{1}{0.2}[-3f(2.0) + 4f(2.1) - f(2.2)] = 22.032310$$

O erro cometido é aproximadamente 1.35×10^{-1}.

Aproximação da Primeira Derivada

b. Fórmula progressiva segunda ordem com h = 0.1.

$$f'(2.0) \approx \frac{1}{0.2}[f(1.8) - 4f(1.9) + 3f(2.0)] = 22.054525$$

O erro cometido é aproximadamente 1.13×10^{-1}.

b. Fórmula centrada de segunda ordem com h = 0.1.

$$f'(2.0) \approx \frac{1}{0.2}[f(2.1) - f(1.9)] = 22.228790$$

O erro cometido é aproximadamente -6.16×10^{-2}.

Note-se que o erro cometido quando se usa a fórmula de diferenças centradas é aproximadamente metade do erro cometido com as outras fórmulas.

Aproximação da Segunda Derivada

- Seja $f \in C^{n+1}([a, b])$ conhecida num conjunto de pontos da partição, com $x_i - x_{i-1} = h$, $i = 1, \ldots, n$. Deseja-se aproximar a segunda derivada de f num dos pontos x_k, $k \in \{0, 1, \ldots, n\}$, da partição.

- É possível, tal como para a primeira derivada, usar o PI na dedução das fórmulas para a segunda derivada. A obtenção de estimativas para o erro é, no entanto, mais complicada. Um processo alternativo para a dedução das fórmulas de derivação (e respectivo erro) faz uso da série de Taylor da função.

- Desenvolvendo f em serie de Taylor em torno do ponto x_k tem-se:

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + f'(x_k)h + \frac{h^2}{2}f''(x_k) + \frac{h^3}{6}f'''(x_k) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_1), \qquad \xi_1 \in (x_k, x_{k+1});$$

$$f(x_{k-1}) = f(x_k) - f'(x_k)h + \frac{h^2}{2}f''(x_k) - \frac{h^3}{6}f'''(x_k) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_2), \qquad \xi_2 \in (x_{k-1}, x_k).$$

Aproximação da Segunda Derivada

- A adicionando estas duas expressões obtem-se:

$$f''(x_k) = \frac{1}{h^2}[f(x_{k-1} - 2f(x_k) + f(x_{k+1})] - \frac{h^2}{24}(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)).$$

Esta fórmula é conhecida como fórmula de diferenças centradas de segunda ordem para aproximar a segunda derivada.

Aproximação de Derivadas de Ordem Superior

O estudo efetuado pode ser generalizado para obter fórmulas de diferenças finitas para aproximar derivadas de ordem superior. Essas fórmulas podem ser obtidas recorrendo à série de Taylor.

$$f'''(x_k) = \frac{1}{2h^3}\left[-f(x_{k-2}) + 2f(x_{k-1}) - 2f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})\right] - \frac{h^2}{4} f^{(5)}(\xi_1);$$

$$f^{(4)}(x_k) = \frac{1}{h^4}\left[f(x_{k-2}) - 4f(x_{k-1}) + 6f(x_k) - 4f(x_{k+1}) + f(x_{k+2})\right] - \frac{h^2}{6} f^{(6)}(\xi_2)$$

Um algoritmo para obter formulas de diferenças finitas de qualquer ordem para aproximar qualquer derivada de uma função podem ser vistas em:

Fornberg (1988), Generation of nite dierence formulas on arbitrarily spaced grids, Math. Comp., 51, 699-706.

Referencias Bibliográficas

1. Aderito Lus Martins Araujo, Analise Numérica Engenharias Mecânica e de Materiais F.C.T.U.C. 2002