Diferenciação Numérica

Notas de aula

Prof. Yuri Dumaresq Sobral

Departamento de Matemática
Universidade de Brasília

2025

- Suponha que conheçamos apenas alguns pontos de uma dada função $f : IR \to IR$, por exemplo:

t_1	t_2	t_3	$\cdots$	t_i	$\cdots$	t_n
$f(t_1)$	$f(t_2)$	$f(t_3)$	$\cdots$	$f(t_i)$	$\cdots$	$f(t_n)$

  e suponha que queiramos determinar $f'(t_i)$.
- Do Cálculo 1, aprendemos várias regras para calcular derivadas, mas todas elas precisam do conhecimento explícito da função! Porém...
- Sabemos calcular derivadas a partir da definição formal de derivada:

$$f'(t) = \lim_{h \to 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{h}$$

- Então, podemos pensar em obter uma aproximação com h finito para a derivada da função $f(t)$ em $t = t_i$ a partir do quociente de Newton:

$$f'(t_i) \approx \frac{f(t_i+h) - f(t_i)}{h}$$

- Se tomarmos $t_{i+1} = t_i + h$, podemos escrever, então:

$$f'(t_i) \approx \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{h} = \frac{f(t_{i+1}) - f(t_i)}{t_{i+1} - t_i}$$

- Exemplo:

t	0.7	0.8	0.9	1.0
$f(t)$	3.43	5.12	7.29	10.0

$$f'(0.7) \approx \frac{f(0.8) - f(0.7)}{0.8 - 0.7} = \frac{5.12 - 3.43}{0.1} = \frac{1.69}{0.1} = 16.9$$

$$f'(0.9) \approx \frac{f(1.0) - f(0.9)}{1.0 - 0.9} = \frac{10.0 - 7.29}{0.1} = \frac{2.71}{0.1} = 27.1$$

Note que $f(t) = 10t^3$ e, portanto, $f'(t) = 30t^2$. Assim, deveríamos ter:

$$f'(0.7) = 14.7 \ (\textit{erro } 15\%) \qquad f'(0.9) = 24.3 \ (\textit{erro } 12\%)$$

Obtivemos uma aproximação bem modesta para a derivada!

- Obviamente, quanto menor for o h do conjunto de pontos, melhor será a aproximação para a derivada. Por exemplo:

t	0.89	0.9	0.91
$f(t)$	7.04969	7.29	7.53571

$$f'(0.9) \approx \frac{f(0.91) - f(0.9)}{0.91 - 0.9} = \frac{7.53571 - 7.29}{0.01} = \frac{0.24571}{0.01} = 24.571$$

Este valor já é consideravelmente mais próximo do valor esperado (erro $\approx 1\%$) !

- Estes exemplos foram obtidos tomando-se $h > 0$. Podemos, também, tomar valores de $h < 0$. Tomando $t_{i-1} = t_i + h$:

$$f'(t_i) \approx \frac{f(t_i + h) - f(t_i)}{h} = \frac{f(t_{i-1}) - f(t_i)}{t_{i-1} - t_i} = \frac{f(t_i) - f(t_{i-1})}{t_i - t_{i-1}}$$

- E a estimativa para $f'(0.9)$ obtida por esta expressão seria:

$$f'(0.9) \approx \frac{f(0.9) - f(0.89)}{0.9 - 0.89} = \frac{7.29 - 7.04969}{0.01} = \frac{0.24031}{0.01} = 24.031$$

- O valor de h é claramente decisivo para determinar a qualidade da aproximação da derivada. Mas qual é sua real influência? Será que conseguimos determinar o erro destas aproximações em termos de h?
- Para isto, precisamos usar a Série de Taylor!

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

com $\xi(x) \in [x, x+h]$.

- O erro de Lagrange mostra qual é a dependência do erro cometido em termos de h.

- Vamos considerar a seguinte expansão da Série de Taylor de $f(x+h)$:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(\xi(x))}{2!}h^2,$$

para $\xi(x) \in [x, x+h]$. Então, podemos reorganizar os termos para escrever:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(\xi(x))}{2!}h.$$

- Como o termo $-f''(\xi(x))/2!$ é uma constante (cujo valor não conhecemos!), podemos simplesmente escrever:

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

- Portanto, o erro que cometido nesta aproximação depende linearmente com o valor de h.

- Note que uma expressão similar pode ser obtida tomando-se a Série de Taylor de $f(x-h)$:

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

- Dizemos que estas duas expressões:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \rightarrow \text{DIFERENÇA ATRASADA}$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \rightarrow \text{DIFERENÇA AVANÇADA}$$

  são aproximações de primeira ordem para a primeira derivada de $f(x)$.
- Será que é possível melhorar esta aproximação? SIM! Combinando as Séries de Taylor de $f(x+h)$ e $f(x-h)$!

- Tomando as seguintes expansões:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_1(x))}{3!}h^3$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 - \frac{f'''(\xi_2(x))}{3!}h^3$$

com $\xi_1 \in [x, x+h]$ e $\xi_2 \in [x-h, x]$. Subtraindo a primeira da segunda, obtemos:

$$f(x+h) - f(x-h) = 0 + 2f'(x)h + 0 + \mathcal{O}(h^3),$$

de onde podemos determinar

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

- Esta expressão, chamada de DIFERENÇA CENTRADA para $f'(x)$, é uma aproximação de segunda ordem para a primeira derivada de $f(x)$.

- Retornando ao primeiro exemplo:

t	0.7	0.8	0.9	1.0
$f(t)$	3.43	5.12	7.29	10.0

$$f'(0.9) = \frac{f(1.0) - f(0.8)}{2 \cdot 0.1} = \frac{10.0 - 5.12}{0.2} = \frac{4.88}{0.2} = 24.4$$

Uma aproximação consideravelmente melhor que a obtida pelas diferenças (avançada e atrasada) de primeira ordem.

- Será que podemos obter uma aproximação para a segunda derivada de $f(x)$? SIM! Combinando (de novo!) as Séries de Taylor de $f(x+h)$ e $f(x-h)$! Desta vez, somando-as! Tomando:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \frac{f''''(\xi_1(x))}{4!}h^4$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \frac{f''''(\xi_2(x))}{4!}h^4$$

- Fazendo a soma, percebe-se que os termos associados à primeira e à terceira derivadas se cancelam:

$$f(x+h)+f(x-h)=2f(x)+0+2\frac{f''(x)}{2!}h^2+0+\mathcal{O}(h^4),$$

e, portanto, obtém-se:

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

- Esta expressão é também uma DIFERENÇA CENTRADA de segunda ordem para a segunda derivada de $f(x)$.
- Voltando ao primeiro exemplo:

t	0.7	0.8	0.9	1.0
$f(t)$	3.43	5.12	7.29	10.0

$$f''(0.8)=\frac{f(0.9)-2f(0.8)+f(0.7)}{0.1^2}=\frac{7.29-10.24+3.43}{0.01}=\frac{0.48}{0.01}=48.$$

Desta vez (por coincidência?), obtivemos o valor exato de $f''(0.8)=48$! (Tente explicar a coincidência.)

- As aproximações para as derivadas de uma função que obtivemos até agora são chamadas de diferenças finitas. São baseadas em aproximações finitas do limite que define a derivada.
- Várias aproximações de diferenças finitas podem ser construídas, de acordo com a necessidade. Por exemplo, as expressões centradas que obtivemos para $f'(t)$ e $f''(t)$ não podem ser usadas no primeiro nem no último ponto da tabela! Precisamos de expressões específicas para cada caso.
- A priori, é possível encontrar todas as expressões desejadas combinando precisamente séries de Taylor.
- Por exemplo, vamos construir uma aproximação $\mathcal{O}(h^2)$ para $f'(t)$ em $t = 0.1$ do nosso exemplo. Considere as seguintes séries de Taylor:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + h^2 \frac{f''(x)}{2!} + h^3 \frac{f'''(x)}{3!} + h^4 \frac{f''''(\xi_1(x))}{4!}$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + 4h^2 \frac{f''(x)}{2!} + 8h^3 \frac{f'''(x)}{3!} + 16h^4 \frac{f''''(\xi_2(x))}{4!}$$

- Note que se tomarmos $f(x+2h) - 4f(x+h)$, conseguimos cancelar o termo em h^2:

$$f(x+2h) - 4f(x+h) = -3f(x) - 2hf'(x) + 0 + \mathcal{O}(h^3) \Leftrightarrow$$

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h) + 4f(x+h) - 3f(x)}{2h} + \mathcal{O}(h^2).$$

- Note que esta expressão usa apenas pontos à direita do ponto onde se deseja avaliar a derivada. Esta é chamada de uma diferença assimétrica.
- Voltando ao exemplo:

$$f'(0.7) = \frac{-f(0.9) + 4f(0.8) - 3f(0.7)}{2h} = \frac{-7.29 + 20,48 - 10.29}{0.2} = \frac{2.9}{0.2} = 14.5$$

- É muito difícil tentar acertar as combinações de séries de Taylor que funcionarão para uma determinada situação. Precisamos de um jeito mais fácil (ou, pelo menos, mais sistemático!) para determinar as diferenças finitas!

- A solução? POLINÔMIOS INTERPOLADORES! Já sabemos que podemos representar funções a partir de polinômios interpoladores.
- Considere que tenhamos um conjunto de $n+1$ pontos. Então

$$f(t) = \sum_{k=1}^{n+1} f(t_k)\mathcal{L}_k(t) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(t))}{(n+1)!} \prod_{k=1}^{n+1}(t - t_i),$$

com $\xi(t) \in [t_1, t_k]$, e $\mathcal{L}_k(t)$ os polinômios de Lagrange.
- Então, podemos pensar em calcular a derivada desta expressão:

$$f'(t) = \sum_{k=1}^{n+1} f(t_k)\mathcal{L}'_k(t) + \frac{d}{dt}\left(\frac{f^{(n+1)}(\xi(t))}{(n+1)!}\right) \cdot \prod_{k=1}^{n+1}(t - t_k) +$$

$$+\frac{f^{(n+1)}(\xi(t))}{(n+1)!} \cdot \frac{d}{dt}\left(\prod_{k=1}^{n+1}(t - t_k)\right)$$

- Note que, agora, temos dois termos de erro. O primeiro, porém, será identicamente nulo se avaliarmos a derivada em um dos pontos t_k, pois um dos fatores do produto será nulo. Portanto, avaliando a derivada no segundo termo:

$$f'(t_i) = \sum_{k=1}^{n+1} f(t_k)\mathcal{L}'_k(t_i) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(t_i))}{(n+1)!} \cdot \prod_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{n+1} (t_i - t_k)$$

  para $i = 1, \ldots, n+1$.

- Como no produtório do termo de erro há n fatores $(t_i - t_k)$, ao ser avaliado em t_i, e tomando $n+1$ pontos igualmente espaçados $(t_{i+1} = t_i + h)$, teremos um termo propocional a h^n. Portanto, construímos a seguinte expressão de n-ésima ordem para $f'(t_i)$:

$$\boxed{f'(t_i) = \sum_{k=1}^{n+1} f(t_k)\mathcal{L}'_k(t_i) + \mathcal{O}(h^n).}$$

- Vamos considerar um conjunto de três pontos: $t_1,\ t_2,\ t_3$. Então:

$$\mathcal{L}_1(t) = \frac{(t-t_2)(t-t_3)}{(t_1-t_2)(t_1-t_3)} \qquad \mathcal{L}_1'(t) = \frac{2t-t_2-t_3}{(t_1-t_2)(t_1-t_3)}$$

$$\mathcal{L}_2(t) = \frac{(t-t_1)(t-t_3)}{(t_2-t_1)(t_2-t_3)} \qquad \mathcal{L}_2'(t) = \frac{2t-t_1-t_3}{(t_2-t_1)(t_2-t_3)}$$

$$\mathcal{L}_3(t) = \frac{(t-t_1)(t-t_2)}{(t_3-t_1)(t_3-t_2)} \qquad \mathcal{L}_3'(t) = \frac{2t-t_1-t_2}{(t_3-t_1)(t_3-t_2)}$$

- Assim, a expressão para a primeira derivada de $f(t)$ é dada por:

$$f'(t_i) = f(t_1)\frac{2t_i-t_2-t_3}{(t_1-t_2)(t_1-t_3)} + f(t_2)\frac{2t_i-t_1-t_3}{(t_2-t_1)(t_2-t_3)} +$$

$$+f(t_3)\frac{2t_i-t_1-t_2}{(t_3-t_1)(t_3-t_2)} + \mathcal{O}(h^2)$$

- Vamos considerar t_1, $t_2 = t_1 + h$ e $t_3 = t_1 + 2h$. Então:

$$f'(t_1) = f(t_1)\frac{2t_1 - t_2 - t_3}{(t_1 - t_2)(t_1 - t_3)} + f(t_2)\frac{2t_1 - t_1 - t_3}{(t_2 - t_1)(t_2 - t_3)} +$$

$$+f(t_3)\frac{2t_1 - t_1 - t_2}{(t_3 - t_1)(t_3 - t_2)} + \mathcal{O}(h^2) =$$

$$= f(t_1)\frac{t_1 - t_2 + t_1 - t_3}{(t_1 - t_2)(t_1 - t_3)} + f(t_2)\frac{t_1 - t_3}{(t_2 - t_1)(t_2 - t_3)}$$

$$\cdots + f(t_3)\frac{t_1 - t_2}{(t_3 - t_1)(t_3 - t_2)} + \mathcal{O}(h^2) =$$

$$= f(t_1)\frac{-h - 2h}{(-h)(-2h)} + f(t_2)\frac{-2h}{(h)(-h)} + f(t_3)\frac{-h}{(2h)(h)} + \mathcal{O}(h^2) \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow f'(t_1) = -\frac{3}{2h}f(t_1) + \frac{2}{h}f(t_2) - \frac{1}{2h}f(t_3) + \mathcal{O}(h^2)$$

que é a mesma diferença assimétrica que encontramos anteriormente.

- Podemos construir, também, expressões para $f'(t_2)$ e $f'(t_3)$ a partir da expressão geral de $f'(t_i)$. Exercício!
- Se quisermos encontrar diferenças finitas com termos de erro de maior ordem (ou seja, mais precisas), precisaremos usar mais pontos.
- Para calcular diferenças finitas para derivadas superiores ($f''(t)$, $f'''(t)$, etc), seguimos exatamente o mesmo procedimento, derivando mais vezes o polinômio interpolador de $f(t)$.
- No caso geral, a derivada p-ésima da função $f(t)$ pode ser calculada como:

$$f^{(p)}(t) = \sum_{k=1}^{n+1} f(t_k)\mathcal{L}_k^{(p)}(t) + \frac{d^p}{dt^p}\left[\frac{f^{(n+1)}(\xi(t))}{(n+1)!} \cdot \prod_{k=1}^{n+1}(t-t_k)\right].$$

Cuidado: mais pontos podem ser necessários, pois polinômios têm um número finito de derivadas que não são identicamente nulas!

- A análise do termo do erro se complica um pouco para as derivadas superiores. Porém é possível mostrar que a cada derivação, o termo do erro perde uma potência de h (isto é, a qualidade da aproximação piora). É preciso usar cada vez mais pontos para calcular a aproximação.

- Comentários finais:

    - Por causa da precisão finita dos computadores, deve existir um equilíbrio entre aumentar o número de pontos da aproximação e diminuir o valor de h. Nem sempre aproximações com muitos pontos obtidas para h muito pequenos serão as melhores.

    - Não precisamos que os pontos sejam igualmente espaçados. As diferenças finitas que determinamos nesta aula podem ser facilmente adaptadas para conjuntos de pontos não-igualmente espaçados, isto é, $t_{i+1} - t_i = h_i$, para $i = 1, n$.