Notas de Aula
Cálculo II para Economia

Professora: Yunelsy N Alvarez

FGV EPGE

10. Derivadas de segunda ordem e aproximação quadrática

Objetivos

- Compreender o significado geométrico e analítico das derivadas parciais de segunda ordem.
- Saber calcular derivadas de segunda ordem, incluindo mistas, de funções de várias variáveis.
- Reconhecer as condições de simetria (teorema de Schwarz) e sua aplicabilidade.
- Entender a construção da aproximação quadrática de uma função em torno de um ponto.
- Aplicar a aproximação quadrática para estimar valores de funções com maior precisão do que a aproximação linear.

Comecemos lembrando que, se uma função f de n variáveis tem derivadas parciais em um subconjunto $D \subset \mathbb{R}^n$, então suas derivadas parciais

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}, \quad 1 \leq i \leq n,$$

são funções definidas sobre D (ou um subconjunto dele). Faz sentido, portanto, perguntarmos se tais funções também são diferenciáveis, isto é, se existe

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)(x,y).$$

No caso afirmativo, dizemos que f tem **derivadas de segunda ordem** e usamos a notação

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_j\, \partial x_i}(x,y) \;=\; \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\partial f}{\partial x_i}\right)(x,y).$$

Exemplo 10.1.

Vamos determinar as derivadas parciais até a ordem dois da função

$$f(x,y) = x^3y^5 + 2x^4y.$$

Primeiro, observemos que essa função é uma soma de polinômios. Portanto, suas derivadas parciais também são funções polinomiais e, em particular, suas respectivas derivadas parciais existem, que são as derivadas de segunda ordem de f.

Começamos calculando as derivadas parciais de primeira ordem:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x,y) = \frac{\partial}{\partial x}(x^3y^5 + 2x^4y) = 3x^2y^5 + 8x^3y,$$

e

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x,y) = \frac{\partial}{\partial y}(x^3y^5 + 2x^4y) = 5x^3y^4 + 2x^4.$$

Agora derivamos cada uma dessas funções em relação a x e y. Isso gera quatro derivadas de segunda ordem.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial x}(x,y)\right) = \frac{\partial}{\partial x}(3x^2y^5 + 8x^3y) = 6xy^5 + 24x^2y,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x,y) = \frac{\partial}{\partial y}(3x^2y^5 + 8x^3y) = 15x^2y^4 + 8x^3$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) = \frac{\partial}{\partial x}(5x^3y^4 + 2x^4) = 15x^2y^4 + 8x^3.$$

e

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial y}(x,y)\right) = \frac{\partial}{\partial y}(5x^3y^4 + 2x^4) = 20x^3y^3.$$

Exemplo 10.2.

Calculemos as derivadas de primeira ordem e, em seguida, as derivadas de segunda ordem da função $f(x,y,z) = \operatorname{sen}(xy) + e^{xz}$.

As derivadas de primeira ordem são as seguinte:

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x,y,z) = y\cos(xy) + ze^{xz},$$

$$\frac{\partial f}{\partial y}(x,y,z) = x\cos(xy)$$

e

$$\frac{\partial f}{\partial z}(x,y,z) = xe^{xz}.$$

A partir dessas duas funções obtemos as derivadas de segunda ordem:

(i) Derivadas parciais da função $\dfrac{\partial f}{\partial x}$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial x}(y\cos(xy) + ze^{xz}) = -y^2\operatorname{sen}(xy) + z^2e^{xz},$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial y}(y\cos(xy) + ze^{xz}) = \cos(xy) - xy\,\mathrm{sen}(xy),$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial z}(y\cos(xy) + ze^{xz}) = (1 + xz)e^{xz}.$$

(ii) Derivadas parciais da função $\dfrac{\partial f}{\partial y}$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial x}\,(x\cos(xy)) = \cos(xy) - xy\,\mathrm{sen}(xy),$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial y}\,(x\cos(xy)) = -x^2\,\mathrm{sen}(xy),$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial z}\,(x\cos(xy)) = 0.$$

(iii) Derivadas parciais da função $\dfrac{\partial f}{\partial z}$:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial x}\,(xe^{xz}) = (1 + xz)e^{xz},$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial y}\,(xe^{xz}) = 0,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(x,y,z) = \frac{\partial}{\partial z}\,(xe^{xz}) = x^2 e^{xz}$$

Observem que, nesses dois exemplos, aparece uma recorrência interessante em relação às *derivadas mistas*, isto é, às segundas derivadas do tipo

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}, \quad i \neq j.$$

No primeiro exemplo, que é uma função definida sobre $\mathbb{R}^2$, tivemos

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}.$$

No segundo exemplo, definido sobre $\mathbb{R}^3$, verificamos o mesmo fenômeno, agora em mais de um par de variáveis. Por exemplo:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial z} = \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial z} = \frac{\partial^2 f}{\partial z \partial y}.$$

Ou seja, em ambos os casos as derivadas mistas coincidiram. Podemos nos perguntar então se esse fato é uma coincidência ou uma regra. O seguinte teorema fundamental responde essa pergunta.

Teorema 10.1 (Teorema de Clairaut (ou de Schwarz)).

Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função definida em um aberto D que contém o ponto $\mathbf{x}_0$. Se as derivadas parciais mistas existirem e forem contínuas em uma vizinhança aberta de $\mathbf{x}_0$, então

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(\mathbf{x}_0), \quad i \neq j.$$

Observe que, nos exemplos anteriores, as funções derivadas de segunda ordem são todas contínuas. De fato, a hipótese de continuidade das segundas derivadas mistas é fundamental para a validade do Teorema de Clairaut.

Resolva o seguinte exercício para compreender o que pode acontecer quando essa hipótese não é satisfeita.

Exercício 10.1 (Contraexemplo do Teorema de Clairaut).

Mostre que a função

$$f(x,y) = \begin{cases} xy\dfrac{x^2-y^2}{x^2+y^2} \text{ se } (x,y) \neq (0,0) \\ 0, \text{ se } (x,y) = (0,0). \end{cases}$$

não satisfaz o Teorema de Clairaut na origem.

10.1 Hessiano

Observe agora que, para cada uma das n derivadas parciais de primeira ordem, temos n derivadas parciais de segunda ordem associadas. Isso gera uma matriz $n \times n$ chamada de *Hessiano*, melhor definido a seguir.

Definição 10.2 (Hessiano).

Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função definida em um subconjunto D de $\mathbb{R}^n$. Suponha que todas as derivadas parciais de segunda ordem de f existam em um ponto $\mathbf{x}_0 \in D$. A *matriz Hessiana* de f em $\mathbf{x}_0$, denotada por $\operatorname{Hess} f(\mathbf{x}_0)$, é a matriz quadrada $n \times n$ definida por:

$$\operatorname{Hess} f(\mathbf{x}_0) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1^2}(\mathbf{x}_0) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2^2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n}(\mathbf{x}_0) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1}(\mathbf{x}_0) & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2}(\mathbf{x}_0) & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n^2}(\mathbf{x}_0) \end{bmatrix}.$$

Observe que, se todas as derivadas parciais mistas de segunda ordem forem contínuas em um entorno de $\mathbf{x}_0$, então a matriz Hessiana é simétrica pelo Teorema de Clairaut que garante que

$$a_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(\mathbf{x}_0) = a_{ji}, \forall i, j \in \{1, 2, \ldots, n\}.$$

Exemplo 10.3.

O Hessiano da função do Exemplo 10.1 em qualquer ponto do seu domínio é a matriz

$$\operatorname{Hess} f(x,y) = \begin{pmatrix} 6xy^5 + 24x^2y & 15x^2y^4 + 8x^3 \\ 15x^2y^4 + 8x^3 & 20x^3y^3 \end{pmatrix}.$$

Se avaliarmos essa matriz na origem obtemos a matriz nula, e no ponto $(1,1)$ temos

$$\operatorname{Hess} f(1,1) = \begin{pmatrix} 30 & 23 \\ 23 & 20 \end{pmatrix}.$$

Exemplo 10.4.

No caso da função do Exemplo 10.2 temos

$$\operatorname{Hess} f(x,y,z) = \begin{pmatrix} y^2 \operatorname{sen}(xy) + z^2 e^{xz} & \cos(xy) - xy \operatorname{sen}(xy) & (1+xz)e^{xz} \\ \cos(xy) - xy \operatorname{sen}(xy) & -x^2 \operatorname{sen}(xy) & 0 \\ (1+xz)e^{xz} & 0 & x^2 e^{xz} \end{pmatrix}.$$

Se avaliamos na origem temos

$$\operatorname{Hess} f(0,0,0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

10.2 Aproximação quadrática

Estudamos que, em toda vizinhança de um ponto, podemos aproximar os valores de uma função diferenciável por uma função linear, chamada de *aproximação linear*. Vejamos agora que também existe uma outra função, quadrática, que melhora a aproximação linear.

Teorema 10.3 (Teorema de Taylor (ordem 2)).

Seja $f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função duas vezes diferenciável em uma vizinhança aberta de um ponto $\mathbf{x}_0 = (x_1^0, x_2^0, \ldots, x_n^0)$. Então, para pontos $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ suficientemente próximos de $\mathbf{x}_0$, temos:

$$f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(\mathbf{x}_0)\,(x_i - x_i^0) + \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0)\,(x_i - x_i^0)(x_j - x_j^0) + R(\mathbf{x}), \tag{10.1}$$

onde o termo de erro $R(\mathbf{x})$ satisfaz

$$\lim_{\mathbf{x} \to \mathbf{x}_0} \frac{R(\mathbf{x})}{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|^2} = 0. \tag{10.2}$$

Observemos que o limite em (10.2) significa que, à medida que $\mathbf{x}$ se aproxima de $\mathbf{x}_0$, o termo $R(\mathbf{x})$ se torna desprezível em comparação com $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|^2$. Em outras palavras, os valores da função ficam próximos do polinômio quadrático presente no membro direito de (10.1). Como consequência, temos o seguinte resultado fundamental.

Corolário 10.4 (Aproximação quadrática de uma função).

Se definirmos a função quadrática

$$Q(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial f}{\partial x_i}(\mathbf{x}_0)\,(x_i - x_i^0) + \sum_{i,j=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_0)\,(x_i - x_i^0)(x_j - x_j^0), \tag{10.3}$$

então temos que $f(\mathbf{x}) \approx Q(\mathbf{x})$ em uma vizinhança suficientemente pequena de $\mathbf{x}_0$.

Exemplo 10.5.

Considere a função $f(x,y) = \ln\left(x+y^2\right)$ nas proximidades do ponto $(x_0,y_0) = (1,1)$. Temos:

$$\begin{aligned}
&f(1,1) = \ln 2\\
&\frac{\partial f}{\partial x}(x,y) = \frac{1}{x+y^2} \implies \frac{\partial f}{\partial x}(1,1) = \frac{1}{2}\\
&\frac{\partial f}{\partial y}(x,y) = \frac{2y}{x+y^2} \implies \frac{\partial f}{\partial y}(1,1) = 1.
\end{aligned}$$

Assim, a aproximação linear é dada por:

$$f(x,y) \approx \ln 2 + \frac{1}{2}(x-1) + 1\cdot(y-1)$$

As derivadas de segunda ordem são:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x,y) &= -\frac{1}{(x+y^2)^2} \implies \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(1,1) = -\frac{1}{4}\\
\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(x,y) &= \frac{2(x-y^2)}{(x+y^2)^2} \implies \frac{\partial^2 f}{\partial y^2}(1,1) = 0\\
\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(x,y) &= -\frac{2y}{(x+y^2)^2} \implies \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(1,1) = -\frac{1}{2}.
\end{aligned}$$

A aproximação quadrática é:

$$\begin{aligned}
f(x,y) &\approx \ln 2 + \frac{1}{2}(x-1) + (y-1)\\
&\quad + \frac{1}{2}\left[-\frac{1}{4}(x-1)^2 + 2\cdot\left(-\frac{1}{2}\right)(x-1)(y-1)\right]\\
&= \ln 2 + \frac{x-1}{2} + (y-1) - \frac{(x-1)^2}{8} - \frac{(x-1)(y-1)}{2}.
\end{aligned}$$

Observe que a aproximação quadrática de uma função em um ponto fornece uma boa estimativa para os valores da função nas proximidades desse ponto, mas tende a se tornar menos precisa à medida que nos afastamos dele.

10.3 Derivadas de ordem superior

Da mesma forma que as derivadas de segunda ordem, podemos definir as derivadas de ordem superior, desde que as derivadas de ordem inferior existam nos pontos considerados.

Definição 10.5 (Derivadas parciais de ordem superior).

Sejam $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ uma função e $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$. Suponha que todas as derivadas parciais de ordem k existam em um ponto $\mathbf{x}_0$. Então, definimos as derivadas parciais de ordem $k+1$ como as derivadas parciais das derivadas de ordem k, se existirem.

Exercícios Suplementares

Todos os exercícios a seguir são baseados na lista anterior, sobre a Nota de Aproximação Linear. O objetivo agora é aproveitar os cálculos já realizados naquela lista para compreender como a aproximação linear se relaciona e contrasta com a aproximação quadrática.

Exercício 10.2.

Considere a função $f(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2}$.

(a) Determine a aproximação quadrática de f no ponto $(3, 4)$.

(b) Use essa aproximação para estimar $f(3{,}01, 4{,}02)$.

(c) Compare com o valor da aproximação linear e discuta a qualidade da aproximação.

Exercício 10.3.

Seja $f(x, y) = e^{xy} + \ln(x + y)$.

(a) Calcule a aproximação quadrática de f em torno do ponto $(1, 1)$.

(b) Estime $f(1{,}01, 0{,}98)$ usando a aproximação quadrática.

(c) Compare com o valor da aproximação linear e discuta a qualidade da aproximação.

Exercício 10.4.

A função $f(x, y) = x^2y + \cos(y)$ representa um modelo simplificado de custo de produção.

(a) Determine a aproximação quadrática de f no ponto $(1, \pi)$.

(b) Use a aproximação quadrática para estimar $f(1{,}05, \pi + 0{,}01)$.

(c) Compare com o valor da aproximação linear e discuta a qualidade da aproximação.

Exercício 10.5.

Considere a função $f(x, y, z) = xyz$.

(a) Calcule a aproximação quadrática de f no ponto $(1, 2, 3)$.

(b) Use a aproximação quadrática para estimar $f(1{,}01, 1{,}98, 3{,}02)$.

(c) Compare com o valor da aproximação linear e discuta a qualidade da aproximação.