

Derivada Numérica

Introdução

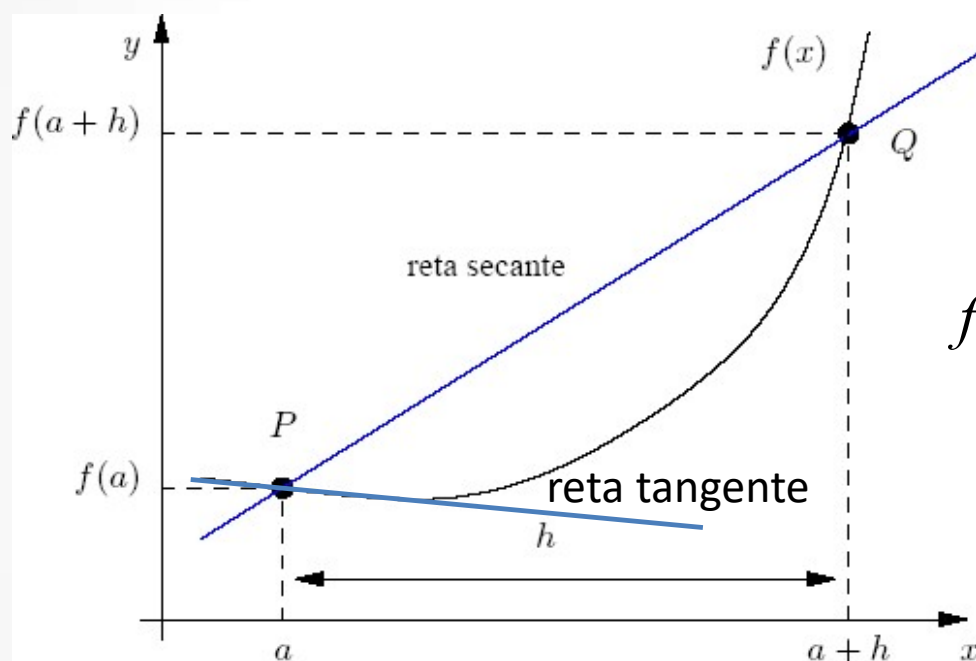
Em muitas circunstâncias, torna-se difícil obter valores de derivadas de uma função. Por exemplo:

$$f(x) = e^{\left[x + \ln(\sin(x^2 + \arctan \sqrt{1+x^3})) \right] x}$$

- Para expressões complicadas como esta, a derivada analítica também seria uma expressão complicada, enquanto que a derivada numérica pode ser calculada com facilidade, como veremos adiante.
- Além disso, frequentemente surge situações onde necessita-se determinar a derivada de uma função conhecendo-se o valor da função em alguns pontos.

Derivada numérica

- Matematicamente a derivada representa a taxa de mudança de uma variável dependente em relação a uma variável independente.



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

- Observe que quando h tende a zero, a reta secante torna-se uma reta tangente, tal qual a definição para a derivada analítica.

Aplicações

Diversas aplicações na ciência e na engenharia utilizam derivadas, principalmente através das leis de conservação. Por exemplo:

Lei

Lei de Fourier

Lei de Fick

Lei de Ohm

Lei da Viscosidade de Newton

Equação

$$q = -kA \frac{dT}{dx}$$

$$J = -D \frac{dc}{dx}$$

$$J = -\sigma \frac{dV}{dx}$$

$$\tau = \mu \frac{du}{dx}$$

Área

Condução de Calor

Difusão de Massa

Corrente Elétrica

Mecânica dos Fluidos

Fórmulas para a primeira derivada

1 – Fórmulas com dois pontos:

- Fórmula da **diferença progressiva**: $f'(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h}$
- Fórmula da **diferença regressiva**: $f'(x_k) = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{h}$
- Fórmula da **diferença central**: $f'(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}))}{2h}$

Obs: As formulas acima são facilmente obtidas a partir da Série de Taylor progressiva (+h) e regressiva (-h), respectivamente. A ultima fórmula é obtida somando-se as duas série. Verifique!!

$$f(x_{k+1}) = f(x_k) + f'(x_k)h + f''(x_k)h^2 + \dots$$

$$f(x_{k-1}) = f(x_k) + f'(x_k)(-h) + f''(x_k)(-h)^2 + \dots$$

Exemplo: diferença progressiva

Seja $f(x)=\ln(x)$. Calcular a derivada numérica utilizando a fórmula **de diferença progressiva**, para $x=1,8$ e $h=0,1$.

Solução:

$$f'(x) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} \quad \Rightarrow \quad f'(1,8) = \frac{f(1,8 + 0,1) - f(1,8)}{0,1}$$

$$f'(1,8) = \frac{\ln(1,9) - \ln(1,8)}{0,1}$$

$$f'(1,8) = 0,5406722$$

Obs: Note que o valor exato da derivada de $f(x)=\ln(x)$ é $f'(x)=1/x$. Ou seja:

$$f'(1,8)_{\text{exata}} = \frac{1}{1,8} = 0,555556$$

Exemplo: diferença regressiva

Seja $f(x)=\ln(x)$. Calcular a derivada numérica utilizando a fórmula de **diferença regressiva**, para $x=1,8$ e $h=0,1$.

Solução:

$$f'(x) = \frac{f(x_k) - f(x_{k-1})}{h} \quad \Rightarrow \quad f'(1,8) = \frac{f(1,8) - f(1,8 - 0,1)}{0,1}$$

$$f'(1,8) = \frac{\ln(1,8) - \ln(1,7)}{0,1}$$

$$f'(1,8) = 0,571587$$

Obs: Note que o valor exato da derivada de $f(x)=\ln(x)$ é $f'(x)=1/x$. Ou seja:

$$f'(1,8)_{\text{exata}} = \frac{1}{1,8} = 0,555556$$

Exemplo: diferença central

Seja $f(x)=\ln(x)$. Calcular a derivada numérica utilizando a fórmula de **diferença central**, para $x=1,8$ e $h=0,1$.

Solução:

$$f'(x) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}))}{2h} \quad \Rightarrow \quad f'(1,8) = \frac{f(1,8 + 0,1) - f(1,8 - 0,1)}{2(0,1)}$$

$$f'(1,8) = \frac{\ln(1,9) - \ln(1,7)}{0,2}$$

$$f'(1,8) = 0,55613...$$

Obs: Note que o valor exato da derivada de $f(x)=\ln(x)$ é $f'(x)=1/x$. Ou seja:

$$f'(1,8)_{\text{exata}} = \frac{1}{1,8} = 0,555556...$$

Segunda derivada

- Fórmula da diferença central, com 3 pontos:

$$f''(x) = \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2}$$

Obs: A formula acima é facilmente obtida a partir das Séries de Taylor progressiva (+h) e regressiva (-h), respectivamente. Neste caso, devemos somar as duas séries. Verifique.

$$+ \begin{cases} f(x_{k+1}) = f(x_k) + f'(x_k)h + f''(x_k)h^2 + \dots \\ f(x_{k-1}) = f(x_k) - f'(x_k)h + f''(x_k)h^2 + \dots \end{cases}$$

$$f(x_{k+1}) + f(x_{k-1}) = 2f(x_k) + 0 + 2f''(x_k)h^2 + O(h^3) \quad \Rightarrow \quad f''(x) = \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} + O(h)$$

Exemplo: diferença central

Seja $f(x)=\ln(x)$. Calcular a derivada segunda utilizando a fórmula de diferença central, para $x=1,8$ e $h=0,1$.

Solução:

$$f''(x) = \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} \quad \Rightarrow \quad f''(1,8) = \frac{f(1,9) - 2f(1,8) + f(1,7)}{0,1^2}$$

$$f''(1,8) = -0.30912...$$

Obs: Note que o valor exato da segunda derivada de $f(x)=\ln(x)$ é $f''(x)=-1/x^2$. Ou seja:

$$f''(1,8)_{\text{exata}} = -\frac{1}{1,8^2} = -0.30864...$$

Outras fórmulas para a primeira derivada

<i>Derivada primeira</i>		
Método	Fórmula	Erro de truncamento
Diferença progressiva com dois pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$	$O(h)$
Diferença progressiva com três pontos	$f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{2h}$	$O(h^2)$
Diferença regressiva com dois pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1}))}{h}$	$O(h)$
Diferença regressiva com três pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-1}) + 3f(x_i))}{2h}$	$O(h^2)$
Diferença central com dois pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}$	$O(h^2)$
Diferença central com quatro pontos	$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{12h}$	$O(h^4)$

Obs: Fórmulas com erros da ordem $O(h)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao tamanho do passo.

Fórmulas com erros da ordem $O(h^2)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao quadrado do tamanho do passo.

Outras fórmulas para a primeira, segunda, terceira e quarta derivadas (derivadas regressivas)

Derivada Primeira	Erro
$f^{(1)}(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}$	$\mathcal{O}(h)$
$f^{(1)}(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h}$	$\mathcal{O}(h^2)$
Derivada Segunda	
$f^{(2)}(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^2}$	$\mathcal{O}(h)$
$f^{(2)}(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3}))}{h^2}$	$\mathcal{O}(h^2)$
Derivada Terceira	
$f^{(3)}(x_i) = \frac{f(x_i) - 3f(x_{i-1}) + 3f(x_{i-2}) - f(x_{i-3}))}{h^3}$	$\mathcal{O}(h)$
$f^{(3)}(x_i) = \frac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4}))}{2h^3}$	$\mathcal{O}(h^2)$
Derivada Quarta	
$f^{(4)}(x_i) = \frac{f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + 6f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-3}) + f(x_{i-4}))}{h^4}$	$\mathcal{O}(h)$
$f^{(4)}(x_i) = \frac{3f(x_i) - 14f(x_{i-1}) + 26f(x_{i-2}) - 24f(x_{i-3}) + 11f(x_{i-4}) - 2f(x_{i-5}))}{h^4}$	$\mathcal{O}(h^2)$

Obs: Fórmulas com erros da ordem $\mathcal{O}(h)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao tamanho do passo.

Fórmulas com erros da ordem $\mathcal{O}(h^2)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao quadrado do tamanho do passo.

Outras fórmulas para a primeira, segunda, terceira e quarta derivadas (derivadas progressivas)

Derivada Primeira

$$f^{(1)}(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$$

Erro

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(1)}(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Derivada Segunda

$$f^{(2)}(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2}$$

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(2)}(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Derivada Terceira

$$f^{(3)}(x_i) = \frac{f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+2}) + 3f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h^3}$$

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(3)}(x_i) = \frac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Derivada Quarta

$$f^{(4)}(x_i) = \frac{f(x_{i+4}) - 4f(x_{i+3}) + 6f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^4}$$

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(4)}(x_i) = \frac{-2f(x_{i+5}) + 11f(x_{i+4}) - 24f(x_{i+3}) + 26f(x_{i+2}) - 14f(x_{i+1}) + 3f(x_i)}{h^4}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Obs: Fórmulas com erros da ordem $\mathcal{O}(h)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao tamanho do passo.

Fórmulas com erros da ordem $\mathcal{O}(h^2)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao quadrado do tamanho do passo.

Outras fórmulas para a primeira, segunda, terceira e quarta derivadas (derivadas centradas)

Derivada Primeira

$$f^{(1)}(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}$$

Erro

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(1)}(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{12h}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Derivada Segunda

$$f^{(2)}(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_i) + f(x_{i-2}))}{h^2}$$

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(2)}(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{12h^2}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Derivada Terceira

$$f^{(3)}(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2}))}{2h^3}$$

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(3)}(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3}))}{8h^3}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Derivada Quarta

$$f^{(4)}(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 4f(x_{i+1}) + 6f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{h^4}$$

$$\mathcal{O}(h)$$

$$f^{(4)}(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 12f(x_{i+2}) - 39f(x_{i+1}) + 56f(x_i) - 39f(x_{i-1}) + 12f(x_{i-2}) - f(x_{i-3}))}{6h^4}$$

$$\mathcal{O}(h^2)$$

Obs: Fórmulas com erros da ordem $\mathcal{O}(h)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao tamanho do passo.

Fórmulas com erros da ordem $\mathcal{O}(h^2)$ indicam que o erro cometido é proporcional ao quadrado do tamanho do passo.

Programa em matlab / octave para a primeira derivada

```
function [dydxc2,dydyp3,dydxr3,dydxc4] = derivada1 (f,xv,h)
%entradas: f - fun??o que iremos derivar
%           xv - ponto (ou vetor de pontos) onde iremos calcular dydx
%           h - espa?amento dos pontos x (incremento)
%Saídas: dydxc2 = derivada por diferenca central (oh^2)
%         dydyp3= derivada por diferenca progressiva com 3 ptos (oh^2)
%         dydxr3= derivada por diferenca regressiva com 3 ptos (oh^2)
%         dydxc4 = derivada por diferenca central c/ 4 pts (oh^4)

for i=1:length(xv)
xi=xv(i);
x=xi-h:h:xi+2*h;
y=feval (f,x);
dydxc2 (i)=(y (3)-y (1)) / (2*h);
%-----
x=xi:h:xi+2*h;
y=feval (f,x);
dydyp3 (i)=(-3*y (1)+4*y (2)-y (3)) / (2*h);
%-----
x=xi-2*h:h:xi;
y=feval (f,x);
dydxr3 (i)=(3*y (3)-4*y (2)+y (1)) / (2*h);
%-----
x=xi-2*h:h:xi+2*h;
y=feval (f,x);
dydxc4 (i)=(y (1)-8*y (2)+8*y (4)-y (5)) / (12*h);
endfor
endfunction
```

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}))}{2h}$$

$$f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{2h}$$

$$\frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2}))}{2h}$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2}))}{12h}$$

roteiro

`x=5:.1:7;` ← Intervalo de x, onde queremos calcular a derivada

`h=0.05;` ← incremento

`[dydxc2, dydxc3, dydxc4] = derivada1 ('fx', x, h);` ← chamada da função para derivar numericamente

`df_exata=@d_exata(x);` ← chamada da função para a derivada exata

```
subplot(2,2,1)
plot(x, dydxc2, 'r', x, df_exata, 'k')
xlabel('x')
ylabel('dydxc2')
legend('d. num. dydxc2', 'd. exata')
```

```
subplot(2,2,2)
plot(x, dydxc3, 'r', x, df_exata, 'k')
xlabel('x')
ylabel('dydxc3')
legend('d. num. dydxc3.', 'd. exata')
```

```
subplot(2,2,3)
plot(x, dydxc4, 'r', x, df_exata, 'k')
xlabel('x')
ylabel('dydxc4')
legend('d. num. dydxc4.', 'd. exata')
```

```
subplot(2,2,4)
plot(x, dydxc4, 'r', x, df_exata, 'k')
xlabel('x')
ylabel('dydxc4')
legend('d. num. dydxc4.', 'd. exata')
```

Graficos

Funções necessárias

```
function y=fx(x)
  

y=exp(x+log(sin(x.^2+atan(1+x.^3).^0.5))).*x;
endfunction
```

Arquivo que
contem a
função a ser
derivada

```
function y=d_exata(x)
y= e.^x .* sin(x.^2 + sqrt(atan(1 + x.^3))) + ...
    e.^x .* x .* sin(x.^2 + sqrt(atan(1 + x.^3))) + ...
    e.^x .* x .* ((3*x.^2)./(2* ((1 + x.^3).^2 + 1) .* ...
    sqrt(atan(1 + x.^3))) + 2*x) .* cos(x.^2 + sqrt(atan(1 + x.^3))) ;
endfunction
```

Arquivo que contém a derivada exata (analítica) da
função em questão.

Comentários Finais

1. No programa derivada1.m, escolhemos 4 formulas de derivada numérica. As 3 primeiras tem erro da ordem $O(h^2)$ e a última tem erro da ordem $O(h^4)$.
2. Se $h=0.1$. Então $O(h^2)$ é da ordem $0.1^2 \sim 0.01$, e $O(h^4)$ é da ordem $0.1^4 \sim 0.0001$.
3. Deve ficar claro que, em geral, quando utilizamos derivada numérica não conhecemos a derivada analítica.
4. No roteiro apresentado anteriormente, utilizamos a derivada analítica em conjunto com a derivada numérica apenas com o objetivo de demonstrar a capacidade das fórmulas numéricas de alcançar com precisão suficiente o valor da derivada exata (analítica).

Exercício 1- Utilize o programa *derivada1.m* para calcular a primeira derivada da função abaixo, no intervalo indicado, com o incremento dado. Anexe o gráfico gerado pelo programa e analise qual das fórmulas é mais precisa (diferença central com dois pontos, diferença progressiva com 3 pontos, diferença regressiva com 3 pontos ou diferença central com 4 pontos). O que acontece quando reduzimos o tamanho do passo h ?

a) $y = \text{sen}(x)$, $x \in [0, 2\pi]$, $h = 0.5$

b) $y = \text{sen}(x)$, $x \in [0, 2\pi]$, $h = 0.1$

Exercício 2- Utilize o programa *derivada1.m* para calcular a primeira derivada da função abaixo, no intervalo indicado, com o incremento dado. Anexe o gráfico gerado pelo programa e analise qual das fórmulas é mais precisa (diferença central com dois pontos, diferença progressiva com 3 pontos, diferença regressiva com 3 pontos ou diferença central com 4 pontos). O que acontece quando reduzimos o tamanho do passo h?

$$\begin{aligned} \text{a) } y &= e^{\left[x + \ln(\sin(x^2 + \arctan \sqrt{1+x^3})) \right] x}, \quad x \in [0, 2], \quad h = 0.5 \\ \text{b) } y &= e^{\left[x + \ln(\sin(x^2 + \arctan \sqrt{1+x^3})) \right] x}, \quad x \in [0, 2], \quad h = 0.1 \end{aligned}$$

Obs: você pode utilizar o site a plataforma Wolfram alpha para derivar analiticamente a função deste exercício. Insira a derivada fornecida pelo site na função *d_exata.m*

<https://www.wolframalpha.com/examples/mathematics/calculus-and-analysis/derivatives/>

Exercício 3- Utilize o programa *derivada1.m* para calcular a primeira derivada da função abaixo, no intervalo indicado, com o incremento dado. Anexe o gráfico gerado pelo programa e analise qual das fórmulas é mais precisa (diferença central com dois pontos, diferença progressiva com 3 pontos, diferença regressiva com 3 pontos ou diferença central com 4 pontos). O que acontece quando reduzimos o tamanho do passo h ?

a) $y = e^{\left[x + \ln(\sin(x^2 + \arctan \sqrt{1+x^3})) \right] x}$, $x \in [2, 8]$, $h = 0.5$

b) $y = e^{\left[x + \ln(\sin(x^2 + \arctan \sqrt{1+x^3})) \right] x}$, $x \in [2, 8]$, $h = 0.1$

Obs: você pode utilizar o site a plataforma Wolfram alpha para derivar analiticamente a função deste exercício. Insira a derivada fornecida pelo site na função *d_exata.m*

<https://www.wolframalpha.com/examples/mathematics/calculus-and-analysis/derivatives/>