

# Derivada Numérica

## Introdução

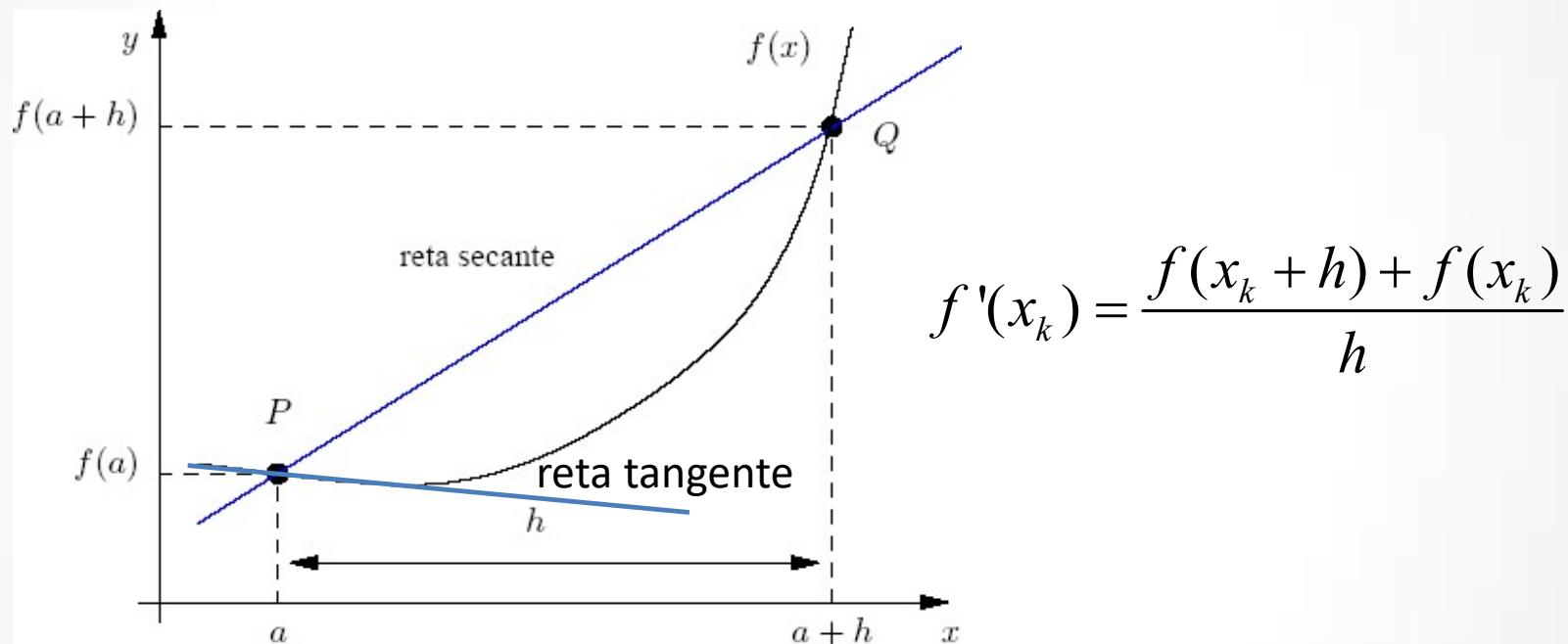
Em muitas circunstâncias, torna-se difícil obter valores de derivadas de uma função. Por exemplo:

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

- 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.



- 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 séries. 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:

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

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

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

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

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

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

## 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:

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

## 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:**

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

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

$$f'(1,8) = 0,55613\dots$$

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

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

## 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.

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

---

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



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

## 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:**

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

$$f''(1,8) = -0.30912\dots$$

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

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

## Outras fórmulas para a primeira derivada

Derivada primeira		
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

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

Erro

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

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

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

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

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

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

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

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

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,dydp3,dydxr3,dydxc4] = derivadal (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)
%         dydp3= 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); ← 
$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}$$

    %-----
    x=xi:h:xi+2*h;
    y=feval(f,x);
    dydp3 (i)=(-3*y(1)+4*y(2)-y(3)) / (2*h); ← 
$$f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{2h}$$

    %-----
    x=xi-2*h:h:xi;
    y=feval(f,x);
    dydxr3 (i)=(3*y(3)-4*y(2)+y(1)) / (2*h); ← 
$$\frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h}$$

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

endfor
endfunction
```

## roteiro

```
x=5:.1:7; ↪ Intervalo de x, onde queremos calcular a derivada  
h=0.05; ↪ incremento  
  
[dydxc2, dydxp3, dydxr3, dydxc4] = derivada1 ('fx', x, h); ↪ chamada da funcao  
df_exata=@d_exata(x); ↪ chamada da funcao  
                           ↪ 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,dydxp3,'r',x,df_exata,'k')  
xlabel('x')  
ylabel('dydxp3')  
legend('d. num. dydxp3','d. exata')  
  
subplot(2,2,3)  
plot(x,dydxr3,'r',x,df_exata,'k')  
xlabel('x')  
ylabel('dydxr3')  
legend('d. num. dydxr3','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 contém 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)  $y = \sin(x)$  ,  $x \in [0, 2\pi]$  ,  $h = 0.5$

b)  $y = \sin(x)$  ,  $x \in [0, 2\pi]$  ,  $h = 0.1$

**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?**

a)  $y = e^{\left[x + \ln(\sin(x^2 + \arctan \sqrt{1+x^3}))\right]x}$ ,  $x \in [0, 2]$ ,  $h = 0.5$

b)  $y = e^{\left[x + \ln(\sin(x^2 + \arctan \sqrt{1+x^3}))\right]x}$ ,  $x \in [0, 2]$ ,  $h = 0.1$

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/>

**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/>