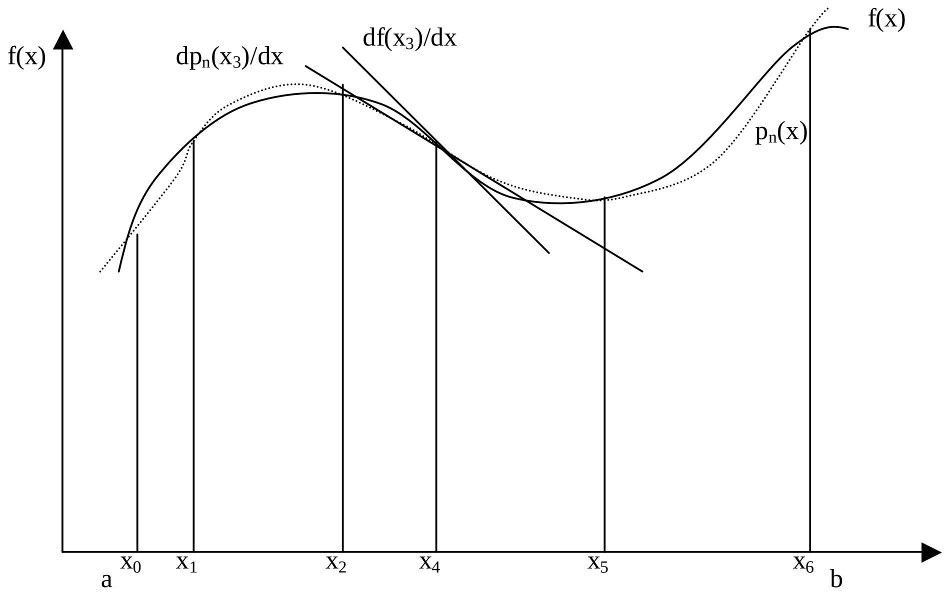
CAPÍTULO IV
DIFERENCIAÇÃO NUMÉRICA

O problema de diferenciação numérica aparentemente é semelhante ao de integração numérica, ou seja, obtendo-se um polinômio interpolador (ou outra função interpoladora) da função f(x), a aproximação das derivadas podem ser obtidas derivando-se esse polinômio. Infelizmente deve-se tomar cuidado. A diferenciação tende a magnificar as pequenas discrepâncias ou erros na função aproximada como mostrado na figura abaixo.



Pela figura, o polinômio $p_n(x)$ parece ser uma excelente função aproximadora para aproximar o valor da integral $\int_a^b p_n(x)$ por $\int_a^b f(x)dx$. No entanto, $\dfrac{dp_n(x)}{dx}$ que representa a inclinação da linha tangente à $p_n(x)$, pode ser significativamente diferente em magnitude do que $\dfrac{df(x)}{dx}$, mesmo nos pontos onde $p_n(x)$ e *f(x)* tem o mesmo valor. Derivadas de ordem superior tendem a magnificar a discrepância. Assim, a diferenciação numérica é um processo menos preciso do que a integração numérica e deve ser evitada toda vez que possível. Na verdade, engenheiros e cientistas fazem testes de diferenciação em dados de laboratório como indicação da precisão experimental.

Uma forma de reduzir o erro de diferenciação é utilizar um polinômio aproximador obtido pelo método dos mínimos quadrados. No entanto, isso é um tanto trabalhoso, e como na prática nem todas as derivadas são necessárias (geralmente somente a primeira e a segunda) derivam-se fórmulas de aproximação das primeiras derivadas, denominadas “diferenças aproximadas”. Essas diferenças aproximadas e seus respectivos erros podem ser obtidos utilizando-se a expansão de Taylor como mostrado a seguir.

Consideremos inicialmente a diferença aproximada para a primeira derivada. Sendo $f_i' = f'(x_i)$ função de $f_i = f(x_i)$ and $f_{i+1} = f(x_{i+1})$, a expansão de Taylor de f_{i+1} em torno de x_i é:

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' + \frac{h^3}{6} f_i''' + \frac{h^4}{24} f_i'''' + \ldots$$

Isolando f_i', tem-se:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{h}{2} f_i'' - \frac{h^2}{6} f_i''' - \ldots$$

que pode ser reescrita como

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + E$$

onde o primeiro termo é chamado de "diferença aproximada progressiva" e E é o erro de truncamento representado pelo seu termo dominante, ou seja:

$$E \approx -\frac{h}{2} f_i''$$

Assim o erro é aproximadamente proporcional ao valor de h e à segunda derivada. Os demais termos decrescem mais rapidamente com o valor de h, e portanto não são dominantes no valor do erro.

A "diferença aproximada regressiva" é obtida de forma similar escrevendo-se a expansão de Taylor em torno de f_{i-1}:

$$f_{i-1} = f_i - hf_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' - \frac{h^3}{6} f_i''' + \frac{h^4}{24} f_i'''' + \ldots$$

Isolando f_i', a diferença aproximada regressiva vale:

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + E$$

onde: $E \approx \frac{h}{2} f_i''$

diferença aproximada central é obtida subtraindo-se as expressões das expansões de Taylor de f_{i+1} e f_{i-1}, descritas acima respectivamente. Obtem-se:

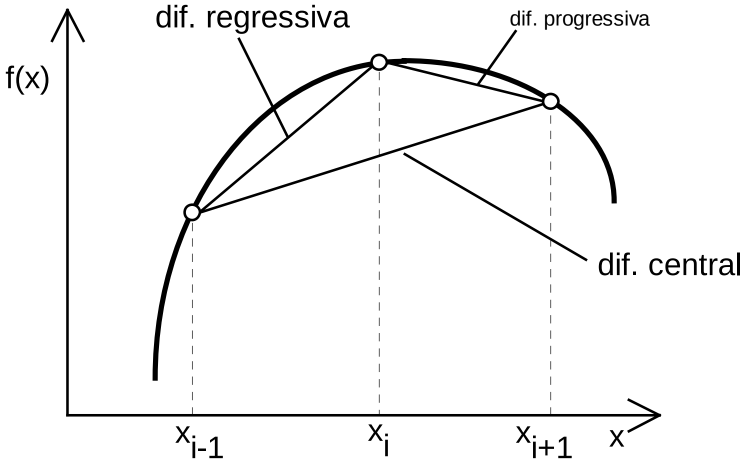
$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2hf_i' + \frac{1}{3} h^3 f_i''' + \ldots$$

Note que f_i'' foi automaticamente eliminado. Isolando-se f_i', tem-se:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + E$$

onde: $E \approx -\frac{h^2}{6} f_i'''$

Portanto o erro depende de h^2 !! Dessa forma, a fórmula de diferença aproximada central é mais precisa do que as diferenças aproximada regressivas e progressivas na aproximação da primeira derivada.



No entanto, se mais pontos estão disponíveis fórmulas mais precisas podem ser deduzidas para a primeira derivada. Assim, considerando-se três pontos (um a mais do que o mínimo necessário para se obter uma aproximação de f_i') podemos obter as expressões de expansão de Taylor de f_i, f_{i+1} e f_{i+2}:

$$f_{i+1} = f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2} f_i'' + \frac{h^3}{6} f_i''' + \frac{h^4}{24} f_i'''' + \ldots$$

$$f_{i+2} = f_i + 2hf_i' + \frac{4h^2}{2} f_i'' + \frac{8h^3}{6} f_i''' + \frac{16h^4}{24} f_i'''' + \ldots$$

Multiplicando a primeira equação por 4, subtraindo da segunda equação, e isolando f_i', tem-se:

$$f_i' = \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2h} + E$$

onde: $E \approx -\frac{h^2}{3} f_i'''$

Essa aproximação é chamada “diferença aproximada progressiva de três pontos”, e possue um erro da mesma ordem que a diferença aproximada central. Similarmente a “diferença aproximada regressiva de três pontos” pode ser derivada usando f_i, f_{i-1}, e f_{i-2}:

$$f_i' = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} + E$$

onde: $E \approx \frac{h^2}{3} f_i'''$

Diferenças aproximadas para a segunda derivada podem ser obtidas da mesma forma. Assim pode se obter f_i'' em função de f_{i+1}, f_i e f_{i-1}. Somando as expansões de Taylor de f_{i+1} e f_{i-1} tem-se:

$$f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1} = h^2 f_i'' + \frac{h^4}{12} f_i'''' + \ldots$$

e portanto a diferença aproximada central de f_i'' é igual à:

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + E$$

onde: $E \approx -\frac{h^2}{12} f_i''''$

Outra diferença aproximada pode ser derivada em termos de f_i, f_{i-1} e f_{i-2}. Subtraindo 2 vezes a expansão de Taylor de f_{i-1} da expansão de f_{i-2} e isolando f_i'' resulta na diferença aproximada regressiva:

$$f_i'' = \frac{f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i}{h^2} + E$$

onde: $E \approx h f_i'''$

A ordem de grandeza desse erro é maior do que o erro da diferença aproximada central, mostrando que a diferença aproximada central representa com maior precisão a segunda derivada, como já observado na aproximação da primeira derivada. Conclue-se que a interpolação é sempre melhor no centro do intervalo de pontos.

Diferenças aproximadas para derivadas de ordem maior do que dois podem ser obtidas de forma semelhante, no entanto é extremamente trabalhoso. Em geral, existem algoritmos de computador que calculam automaticamente diferenças aproximadas de derivadas de alta ordem.

No caso de derivadas parciais, segue-se o mesmo raciocínio. Considerando a função bidimensional *f(x,y)*, a diferença aproximada da derivada parcial com relação à *x* por exemplo, pode ser derivada fixando *y* igual a constante y_0 e considerando $f(x, y_0)$ como uma função unidimensional. Assim, as diferenças aproximadas regressiva, central e progressiva são iguais a:

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - f(x_0, y_0)}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f(x_0 + \Delta x, y_0) - f(x_0 - \Delta x, y_0)}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial x} \approx \frac{f(x_0, y_0) - f(x_0 - \Delta x, y_0)}{\Delta x}$$

As diferenças aproximadas centrais das segundas derivadas de *f(x,y)* em (x_0, y_0) são dadas por:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \approx \frac{f(x_0+\Delta x, y_0) - 2f(x_0, y_0) + f(x_0-\Delta x, y_0)}{\Delta x^2}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \approx \frac{f(x_0, y_0+\Delta y) - 2f(x_0, y_0) + f(x_0, y_0-\Delta y)}{\Delta y^2}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \approx \frac{f(x_0+\Delta x, y_0+\Delta y) - f(x_0-\Delta x, y_0+\Delta y) - f(x_0+\Delta x, y_0-\Delta y) + f(x_0-\Delta x, y_0-\Delta y)}{4\Delta x \Delta y}$$