Trabalho apresentado no XXXVII CNMAC, S.J. dos Campos - SP, 2017.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Comparativo entre os Métodos de Derivação Numérica h-Derivada e q-Derivada

Caroline Galvão Toscano[1]
Discente do Curso de Engenharia Civil, UFERSA, Mossoró, RN
Matheus da Silva Menezes[2]
Ivan Mezzomo[3]
Centro de Ciências Exatas e Naturais, UFERSA, Mossoró, RN

1 Introdução

Em alguns casos, o cálculo da derivada de uma função não é uma tarefa trivial. Quando estamos interessados apenas no valor numérico da operação, podemos utilizar técnicas de derivação numérica para alcançar este resultado. Além disso, existem outras teorias que envolvem o cálculo de derivadas, além das aproximações tradicionalmente vistas nos cursos de cálculo. Objetivamos, então, tomando como base conceitos do *q-cálculo* e *h-cálculo*, que equivalem a duas áreas do Cálculo Quântico [3], apresentar um experimento numérico buscando inferir situações onde é preferível utilizar cada uma das técnicas supracitadas.

Segundo [2], podendo definir q-Derivada e h-Derivada por:

Definição 1: *Sejam $q, h \in \mathbb{R}$ tais que $q \neq 1$ e $h \neq 0$. Seja $f : A \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ uma função arbitrária. A expressão $d_q f(x) = f(qx) - f(x)$ é chamada de* ***q-diferencial de*** *f e denotada por $d_q f$. A expressão $d_h f(x) = f(x+h) - f(x)$ é chamada de* ***h-diferencial de*** *f e denotada por $d_h f$*, onde a igualdade é verdadeira se f for diferenciável.

Utilizando diferenças finitas e uma aproximação através do polinômio interpolador de Lagrange para a derivada vista nos cursos tradicionais de cálculo (*h-derivada*), supondo que $x_k \in (a,b)$, onde $f \in C^2[a,b]$ e que $x_{k+1} = x_k + h$ para algum $h \neq 0$ que seja suficientemente pequeno para garantir que $x_{k+1} \in [a,b]$ [1]. obtemos:

$$f'_h(x_k) = \frac{f(x_k+h) - f(x_k)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi). \tag{1}$$

Dizemos então que a equação (1) representa a aproximação da derivada por *diferenças progessivas* para valores de $h > 0$ e *diferenças regressivas* para valores de $h < 0$.

Partindo dos mesmos preceitos definidos anteriormente para *h-derivada* e que $x_{k+1} = qx_k$ para algum $q \neq 1$ que seja proximo a 1 para garantir que $x_{k+1} \in [a,b]$, obtemos, para a *q-derivada*:

[1]caroltoscano.cn@hotmail.com
[2]matheus@ufersa.edu.br
[3]imezzomo@ufersa.edu.br

$$f'_q(x_k) = \frac{f(qx_k) - f(x_k)}{(q-1)x_k} - \frac{(q-1)x_k}{2} f''(\xi) \quad (2)$$

Para valores de $q > 1$, a equação (2) é chamada de *q-diferença progressiva* e, quando $q < 1$, ela é chamada de *q-diferença regressiva.*

2 Experimentos e Discussões

Problema: Quando tomamos os limites, $h \to 0$ e $q \to 1$ temos uma equivalência entre *h-derivada* e *q-derivada*, contudo, a convergência numérica é a mesma? Para verificar a hipótese, analisamos as equações, $f_1 = \ln(x)$ e $f_2(x) = x^3 + 3x^2 - 3x$ estimando derivadas, com aproximação de 5 casas decimais para os valores de h e q em pontos distintos.

Para a qualidade das soluções, iremos analisar o erro absoluto cometido (E_{abs}), dado pela diferença entre o resultado exato da derivada calculado analiticamente e o resultado aproximado da derivada obtido através dos métodos e o parâmetro erro limitante E_{lim} para *h-derivada* e *q-derivada* obtido através das expressões $E_{h-lim} = \frac{|hf''(\xi)|}{2}$ e $E_{q-lim} = \frac{|(q-1)x_k f''(\xi)|}{2}$, respectivamente. Os resultados são apresentados a seguir:

Tabela 1: Simulações realizadas com *h-derivadas* e *q-derivadas*

Função	Ponto	h-derivada	E_{h-abs}	E_{h-lim}	q-derivada	E_{q-abs}	E_{q-lim}
f_1	100	1,00000E-02	5,04864E-10	5,00000E-10	9,99995E-03	5,00004E-08	5,00000E-08
f_1	0,02	4,99875E+01	1,24958E-02	1,25000E-02	4,99998E+01	2,49998E-04	2,50000E-04
f_2	1	6,00006	6,00002E-05	6,00000E-05	6,00006	6,00001E-05	6,00000E-05
f_2	0,42	4,92426E-02	4,26001E-05	4,26000E-05	4,92179E-02	1,78920E-05	1,78920E-05

O erro limitante (E_{lim}) é bastante próximo do erro absoluto (E_{abs}), então, observe que é esperado que a q-derivada apresente um menor erro para $-1 < x_k < 1$ com $x_k \neq 0$, já a h-derivada apresenta um menor erro para $x_k < -1$ e $x_k > 1$.

Portanto, observamos três situações comparativas: a primeira é que quanto mais próximo de zero for o ponto calculado melhor será o desempenho da *q-derivada*, pois menor será o seu limitante de erro; a segunda é que quanto maior for o valor do ponto analisado em módulo melhor será o resultado da *h-derivada*, pois menor será o seu limitante de erro. E por fim, a terceira, quando os pontos analisados são 1 ou -1 os métodos apresentam o mesmo limitante de erro e, consequentemente, valores muito próximos de erro absoluto e, neste caso,o desempenho dos métodos é equivalente.

Referências

[1] R. L. Burden, and D. J. Faires. *Análise Numérica.* Cengage, São Paulo, 2008.

[2] P. Cheung, and V. Kac. *Quantum Calculus.* Universitext, New York, 2002.

[3] A. C. Soterroni, O método do q-gradiente para otimização global, Tese de Doutorado em Computação Aplicada, INPE, (2012).