Metody numeryczne I

Różniczkowanie

Janusz Szwabiński
szwabin@ift.uni.wroc.pl

Różniczkowanie numeryczne

1. Pierwsza pochodna funkcji
   - uwagi ogólne
   - błąd obcięcia
   - błędy zaokrąglenia
2. Druga pochodna funkcji
3. Ekstrapolacja Richardsona

Pierwsza pochodna funkcji

f	-	funkcja określona na siatce $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$
f_k	=	$f(x_k)$
f'_k	=	$f'(x_k)$
h	-	odległość między punktami węzłowymi

Pierwsza pochodna funkcji:

$$f'(x_k) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_k + \Delta x) - f(x_k)}{\Delta x}$$

⇒ najprostsze przybliżenia:

- wzór dwupunktowy “w przód”

$$f'_k \simeq \frac{f_{k+1} - f_k}{h}, \quad 0 < k < n$$

- wzór dwupunktowy “w tył”

$$f'_k \simeq \frac{f_k - f_{k-1}}{h}, \quad 0 < k < n$$

Błąd obcięcia

Rozwijamy $f(x)$ w szereg Taylora

$$\begin{aligned} f(x_k+h) &= f(x_k) + hf'(x_k) + \frac{h^2}{2!}f''(x_k) + \ldots \\ f(x_k-h) &= f(x_k) - hf'(x_k) + \frac{h^2}{2!}f''(x_k) + \ldots \end{aligned}$$

Stąd wynika

$$\begin{aligned} f'_k &= \frac{f_{k+1}-f_k}{h} + O(h) \\ f'_k &= \frac{f_k-f_{k-1}}{h} + O(h) \end{aligned}$$

⇒ zmniejsz h, aby zwiększyć dokładność

Wady:

- wolna zbieżność
- koszt obliczenia rośnie na ogół gwałtownie z malejącym h

Alternatywa:

- wzory wielopunktowe

Wzór trójpunktowy

Ponownie rozwijamy $f(x)$ w szereg Taylora

$$\begin{aligned} f_{k+1} &= f_k + hf'_k + \frac{h^2}{2!}f''_k + \ldots \\ f_{k-1} &= f_k - hf'_k + \frac{h^2}{2!}f''_k + \ldots \end{aligned}$$

Stąd

$$f_{k+1} - f_{k-1} = 2hf'_k + \frac{2h^3}{3!}f'''_k + O(h^4)$$

czyli

$$f'_k = \frac{f_{k+1}-f_{k-1}}{2h} + O(h^2)$$

Kiedy wzór trójpunktowy jest wystarczający?

Niech

$$f(x) = g\exp(ikx)$$

gdzie g i k to pewne liczby (k nie indeksuje tutaj węzłów!)

Zachodzi

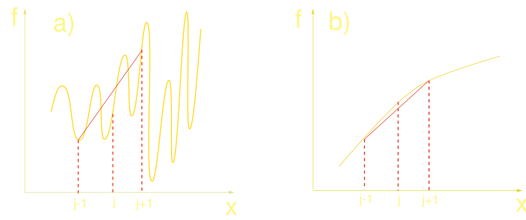
$$f'(x) = ikg\exp(ikx) = ikf(x)$$

Z drugiej strony

$$\frac{ge^{ik(x+h)} - ge^{ik(x-h)}}{2h} = \frac{g}{2h}e^{ikx}\left[e^{ikh} - e^{-ikh}\right]$$
$$= i\frac{f(x)}{h}\sin kh \simeq ikf(x) = f'(x),$$

jeżeli tylko $kh \ll 1$

$\Rightarrow$ przybliżenie jest dobre, jeżeli $f(x)$ zmienia się wolno na odcinku o długości h



Wzory wielopunktowe

Wzór pięciopunktowy:

$$f'_k = \frac{1}{12h}[-f_{k+2} + 8f_{k+1} - 8f_{k-1} + f_{k-2}] + O(h^4)$$

Wzory wyższych rzędów analogicznie

"Pułapka":

- im więcej punktów, tym trudniej wyznaczyć pochodną w punktach brzegowych x_0 i x_n

Błędy zaokrąglenia

Źródła:

- obliczanie $x + h$
- obliczanie $f(x+h) - f(x)$

Przykład Niech

$$x = 10,3; \quad h = 0,0001$$

$\Rightarrow$ ani x ani $x + h$ nie mają dokładnej reprezentacji maszynowej

$\Rightarrow$ węzły obarczone błędem względnym $\epsilon_M \simeq 2^{-M}$ (M - liczba bitów w części ułamkowej)

Stąd

$$\tilde{h} = (x+h) - x$$

jest obarczone błędem rzędu

$$\Delta\tilde{h} \sim \epsilon_M * x,$$

a zatem

$$\frac{\Delta\tilde{h}}{h} \sim 10^{-2}$$

$\Rightarrow$ stosując wzór dwupunktowy, popełnimy błąd względny rzędu co najmniej 10^{-2}

$\Rightarrow$ wybieraj h tak, aby $x+h$ i x różniły się zawsze o liczbę maszynową

Najprostsza implementacja:

```
temp=x+h
call nic_nie_rob(temp)
h=temp-x
```


Błędy obcięcia i zaokrąglenia

Jeśli h jest dokładne, błąd zaokrąglenia we wzorze dwupunktowym wynosi

$$\epsilon_r \sim \epsilon_f \left| \frac{f(x)}{h} \right|,$$

gdzie ϵ_f - względna dokładność $f(x)$

Dla prostych funkcji zachodzi

$$\epsilon_f \simeq \epsilon_M$$

Ponadto, błąd obcięcia jest rzędu

$$\epsilon_t \sim |hf''(x)|$$

Należy wybrać h tak, aby

$$\epsilon_r + \epsilon_t \sim \epsilon_f \left| \frac{f(x)}{h} \right| + |hf''(x)|$$

przyjęło wartość minimalną, tzn.

$$-\epsilon_f \frac{|f(x)|}{h^2} + |f''(x)| = 0 \;\; \Rightarrow h \sim \sqrt{\epsilon_f \left|\frac{f(x)}{f''(x)}\right|} \approx x_c\sqrt{\epsilon_f},$$

gdzie

$$x_c \equiv \sqrt{\left|\frac{f(x)}{f''(x)}\right|}$$ - "skala krzywizny" funkcji $f(x)$

Przy założeniu (na ogół słusznym), że f, f' i f'' mają tą samą długość charakterystyczną, otrzymujemy dla wzoru dwupunktowego

$$\frac{\epsilon_r + \epsilon_t}{|f'|} \sim \sqrt{\epsilon_f}\sqrt{\frac{ff''}{f'^2}} \sim \sqrt{\epsilon_f}$$

$\Rightarrow$ w najlepszym wypadku błąd jest rzędu $\sqrt{\epsilon_M}$

Podobnie, dla wzoru trójpunktowego powinno być

$$h \sim \left(\frac{\epsilon_f f}{f'''}\right)^{1/3} \sim (\epsilon_f)^{1/3} x_c$$

oraz

$$\frac{\epsilon_r + \epsilon_t}{|f'|} \sim (\epsilon_f)^{2/3}$$

$\Rightarrow$ błąd na ogół o rząd lub dwa mniejszy niż dla wzoru dwupunktowego

Aby zminimalizować błąd przybliżenia pochodnej, wybierz h tak, aby

- było liczbą maszynową
- było iloczynem odpowiedniej potęgi ϵ_f (lub ϵ_M) i długości charakteryzującej rozważaną funkcję

Druga pochodna

$$f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1} = h^2 f''_k + O(h^4)$$

$\Rightarrow$ wzór trójpunktowy na drugą pochodną:

$$f''_k = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{h^2} + O(h^2)$$

Biorąc kombinację rozwinięć $f_{k\pm 2}$ i $f_{k\pm 1}$, otrzymamy wzór pięciopunktowy

$$f''_k = \frac{1}{12h^2}\left[-f_{k-2} + 16f_{k-1} - 30f_k + 16f_{k+1} - f_{k+2}\right]$$

Kiedy wzór trójpunktowy jest wystarczający?

Niech

$$f(x) = g\exp(ikx) \quad \Rightarrow \quad f''(x) = (ik)^2 g e^{ikx} = -k^2 f(x)$$

Zachodzi

$$\begin{aligned}\frac{g e^{ik(x+h)} - 2g e^{ikx} + g e^{ik(x-h)}}{h^2} &= \frac{1}{h^2} f(x)\left[e^{ikh} - 2 + e^{-ikh}\right] \\ &= \frac{2}{h^2} f(x)[\cos kh - 1] \simeq -k^2 f(x)\end{aligned}$$

jeżeli $kh \ll 1$

$\Rightarrow$ dobre przybliżenie dla funkcji wolnozmiennej

Punkty brzegowe

```
SUBROUTINE THREE_POINT (N,H,FUN,F1,F2)
  IMPLICIT NONE
  INTEGER, INTENT (IN) :: N
  INTEGER :: I
  REAL, INTENT (IN) :: H
  REAL, INTENT (IN), DIMENSION (N) :: FUN
  REAL, INTENT (OUT), DIMENSION (N) :: F1,F2
  if (H .eq. 0.d0) STOP 'THREE_POINT: H=0'
  DO I = 2, N-1
    F1(I) = (FUN(I+1)-FUN(I-1))/(2.*H)
    F2(I) = (FUN(I+1)-2.0*FUN(I)+FUN(I-1))/(H*H)
  END DO
! Liniowa ekstrapolacja na brzegach
  F1(1) = 2.0*F1(2)-F1(3)
  F1(N) = 2.0*F1(N-1)-F1(N-2)
  F2(1) = 2.0*F2(2)-F2(3)
  F2(N) = 2.0*F2(N-1)-F2(N-2)
END SUBROUTINE THREE_POINT
```


Przykłady

$f(x) = \sin x$, wzór trójpunktowy, 101 punktów węzłowych:

x	f'	$E(f')$	f''	$E(f'')$
0	1,000206	0,000206	0,000000	0,000000
$\frac{\pi}{10}$	0,951017	-0,000039	-0,309087	-0,000070
$\frac{\pi}{5}$	0,808985	-0,000032	-0,587736	0,000049
$\frac{3\pi}{10}$	0,587762	-0,000023	-0,809013	0,000004
$\frac{2\pi}{5}$	0,309003	-0,000014	-0,951055	0,000001
$\frac{\pi}{2}$	0,000006	0,000006	-1,000335	-0,000335

$\frac{d \sin x}{dx}\Big|_{x=1}$ $(= 0.540302)$ w funkcji h

h	dwupunktowy (przód)		dwupunktowy (tył)		trójpunktowy	
	f'	$\lvert E(f')\rvert$	f'	$\lvert E(f')\rvert$	f'	$\lvert E(f')\rvert$
0,5	0,312048	0,228254	0,724091	0,183789	0,518069	0,022233
0,1	0,497364	0,042938	0,581440	0,041138	0,539402	0,000900
0,05	0,519046	0,021257	0,561109	0,020806	0,540077	0,000225
0,01	0,536090	0,004212	0,544500	0,004198	0,540295	0,000007
0,005	0,538206	0,002096	0,542402	0,002100	0,540304	0,000002
0,001	0,539958	0,000344	0,540674	0,000371	0,540316	0,000014
0,0005	0,540257	0,000046	0,540376	0,000073	0,540316	0,000014
0,0001	0,540614	0,000312	0,540018	0,000284	0,540316	0,000014
0,00005	0,540018	0,000284	0,540018	0,000284	0,540018	0,000284
0,00001	0,542402	0,002100	0,536442	0,003861	0,539422	0,000880

Ekstrapolacja Richardsona

Rozważmy jeszcze raz

$$\begin{aligned} f(x+h) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x)}{k!} h^k \\ f(x-h) &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{f^{(k)}(x)}{k!} h^k \end{aligned}$$

Obliczając różnicę $f(x+h) - f(x-h)$ otrzymamy wzór trójpunktowy na pierwszą pochodną

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k h^{2k}$$

Niech

$$D_0(h) \equiv \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Obliczmy $D_0(h)$ dla dwóch różnych wartości h:

$$\begin{aligned} D_0(h) &= f'(x) + \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k h^{2k} \\ D_0(qh) &= f'(x) + \sum_{k=1}^{\infty} q^{2k} \alpha_k h^{2k} \end{aligned}$$

Rozważmy różnicę

$$\begin{aligned} q^2 D_0(h) - D_0(qh) &= (q^2-1) f'(x) + \sum_{k=2}^{\infty} \tilde{\alpha}_k h^{2k} \\ \tilde{\alpha}_k &= q^2 \alpha_k \left[1 - q^{2(k-1)}\right] \end{aligned}$$

Stąd

$$\begin{aligned} D_1(h) &\equiv \frac{q^2 D_0(h) - D_0(qh)}{q^2 - 1} \\ &= f'(x) + \frac{1}{q^2-1} \sum_{k=2}^{\infty} \tilde{\alpha}_k h^{2k} \end{aligned}$$

$\Rightarrow$ otrzymaliśmy przybliżenie rzędu $O(h^4)$ dla pochodnej

Ogólnie, dysponując przybliżeniami pewnego rzędu, obliczamy przybliżenie wyższego rzędu ze wzoru

$$D_k(h) = \frac{q^{2k} D_{k-1}(h) - D_{k-1}(qh)}{q^{2k} - 1}$$

$\Rightarrow$ najprostszy sposób konstrukcji wyników o pomijalnym błędzie obcięcia

$$\begin{array}{lllll}
D_0(h) & & & & \\
D_0(\frac{h}{2}) & D_1(\frac{h}{2}) & & & \\
D_0(\frac{h}{4}) & D_1(\frac{h}{4}) & D_2(\frac{h}{4}) & & \\
D_0(\frac{h}{8}) & D_1(\frac{h}{8}) & D_2(\frac{h}{8}) & D_3(\frac{h}{8}) & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}$$

- pierwsza kolumna - wyniki obliczeń ze wzoru trójpunktowego
- elementy tabeli obliczamy wiersz po wierszu do osiągnięcia żądanej dokładności

Przykład

$$\left.\frac{d\sin x}{dx}\right|_{x=1} (= 0.540302)$$

	Wzór trójpunktowy		Ekstrapolacja Richardsona	
	f'	$\lvert E(f')\rvert$	f'	$\lvert E(f')\rvert$
$h = 0,1$	0,539402	0,000900	0,549402	0,000900
$\frac{h}{2}$	0,540077	0,000225	0,540302	0,000000
$\frac{h}{4}$	0,540245	0,000058	0,540301	0,000001
$\frac{h}{8}$	0,540290	0,000012	0,540305	0,000003
$\frac{h}{16}$	0,540295	0,000008	0,540296	0,000006
$\frac{h}{32}$	0,540314	0,000011	0,540321	0,000019