Różniczkowanie numeryczne

Janusz Szwabiński

30 października 2002

Różniczkowanie numeryczne

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

Pierwsza pochodna funkcji (1)

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:

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

Pierwsza pochodna funkcji (2)

$\Rightarrow$ najprostsze przybliżenia:

- wzór dwupunktowy "w przód"

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

- wzór dwupunktowy "w tył"

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

Pierwsza pochodna funkcji (3)

Źródła niedokładności:

- błędy obcięcia
- błędy zaokrąglenia

Błąd obcięcia (1)

Rozwijamy $f(x)$ w szereg Taylora

$$f(x_k + h) = f(x_k) + hf'(x_k) + \frac{h^2}{2!} f''(x_k) + \ldots$$

Stąd wynika

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

Podobnie,

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

prowadzi do

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

Błąd obcięcia (2)

$\Rightarrow$ zmniejsz h, aby zwiększyć dokładność

Wady:

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

Alternatywa:

- wzory wielopunktowe

Wzór trójpunktowy

Rozważmy ponownie rozwinięcia funkcji $f(x)$ 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? (1)

Niech

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

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

Zachodzi

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

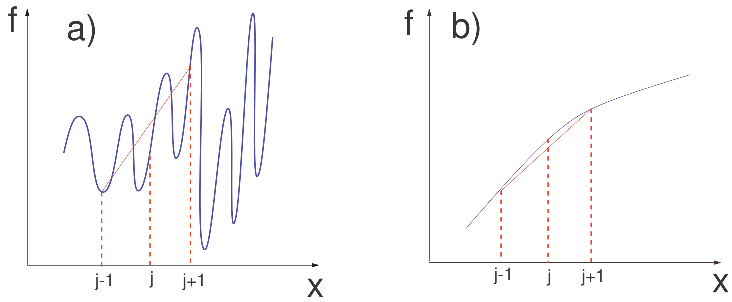
Z drugiej strony

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

jeżeli tylko $kh \ll 1$

Kiedy wzór trójpunktowy jest wystarczający? (2)

$\Rightarrow$ 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 (1)

Źródła:

- obliczanie $x + h$
- obliczanie $f(x+h) - f(x)$ (grozi znoszenie się składników)

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

$$\epsilon_M \simeq 2^{-M}, \; M \text{ - liczba bitów w części ułamkowej}$$

Błędy zaokrąglenia (2)

Przykład (ciąg dalszy)
Stąd

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

jest obarczona 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}

Błędy zaokrąglenia (3)

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

Najprostsza implementacja:

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

Błędy obcięcia i zaokrąglenia (1)

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

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

Błędy obcięcia i zaokrąglenia (2)

Należy wybrać h tak, aby

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

przyjęło wartość minimalną, tzn.

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

gdzie

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

Błędy obcięcia i zaokrąglenia (3)

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 $\sqrt{\epsilon_M}$

Błędy obcięcia i zaokrąglenia (4)

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

Błędy obcięcia i zaokrąglenia (5)

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

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

⇒ wzór trójpunktowy na drugą pochodną:

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

Biorąc kombinację rozwinięć $f_{k\pm2}$ i $f_{k\pm1}$, 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

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

Mamy

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

oraz

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

jeżeli $kh \ll 1$

⇒ dobre przybliżenie dla funkcji wolnozmiennej

Punkty brzegowe (1)

Metoda:

- interpolacja (ekstrapolacja)

Przykład

```
SUBROUTINE THREE_POINT (N,H,FUN,F1,F2)
  IMPLICIT NONE
  INTEGER, INTENT (IN) :: N !liczba wezlow
  INTEGER :: I
  REAL, INTENT (IN) :: H  !odleglosc miedzy wezlami
  REAL, INTENT (IN), DIMENSION (N) :: FUN  !funkcja
  REAL, INTENT (OUT), DIMENSION (N) :: F1,F2 !jej pochodne

  if (H .eq. 0.d0) STOP 'THREE_POINT: H=0'
```

Punkty brzegowe (2)

Przykład (ciąg dalszy)

```
! Oblicz pochodne ze wzoru trojpunktowego
  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 (1)

$f(x) = \sin x$, 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

Przykłady (2)

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

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

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

Ekstrapolacja Richardsona (2)

Niech

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

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

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

Ekstrapolacja Richardsona (3)

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

---

Ekstrapolacja Richardsona (4)

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

---

Ekstrapolacja Richardsona (5)

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

- 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