Różniczkowanie numeryczne

Pochodna funkcji $y = f(x)$ jest definiowana następująco

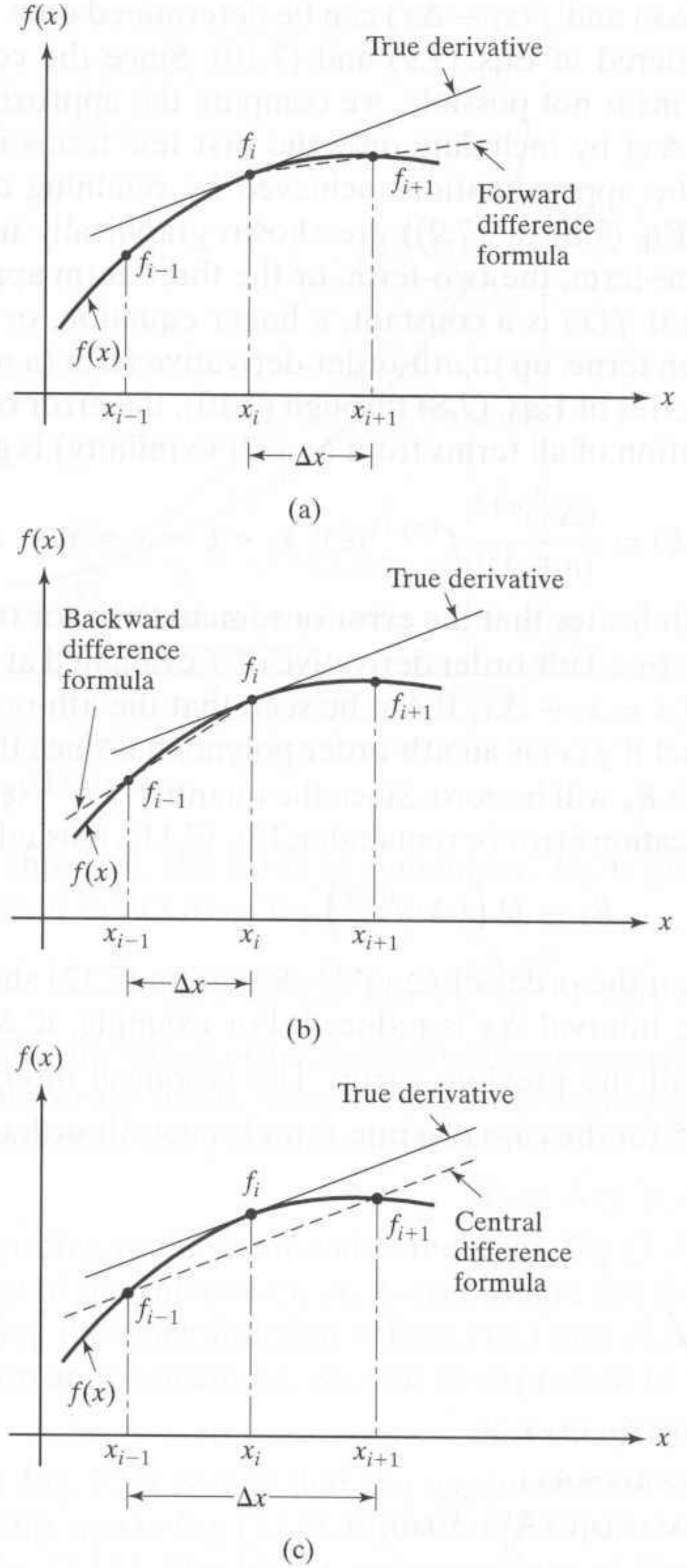
$$\frac{dy}{dx} = f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \tag{0.1}$$

Dla skończonej wartości Δx otrzymujemy ze wzoru (0.1) przybliżoną wartość pochodnej, tym dokładniejszą, im mniejsza jest wartość Δx.

Wartość pochodnej funkcji $f(x)$ w punkcie $x = x_0$ jest równa tangensowi kąta nachylenia stycznej do krzywej $f(x)$ w punkcie $(x_0,\ f(x_0))$.

Pochodna jest miarą szybkości zmiany funkcji $f(x)$ wraz ze zmianami x.

W punkcie, w którym wartość pochodnej jest równa zeru występuje ekstremum funkcji (minimum lub maksimum). Styczna do krzywej w tym punkcie jest pozioma – równoległa do osi odciętych x.


f(x)
True derivative
f_i
f_{i+1}
Forward difference formula
f_{i-1}
f(x)
x
x_{i-1}
x_i
x_{i+1}
Δx
(a)
f(x)
True derivative
Backward difference formula
f_i
f_{i+1}
f_{i-1}
f(x)
x
x_{i-1}
x_i
x_{i+1}
Δx
(b)
f(x)
True derivative
f_i
Central difference formula
f_{i+1}
f_{i-1}
f(x)
x
x_{i-1}
x_i
x_{i+1}
Δx
(c)

1. Różniczkowanie numeryczne - przypadek ciągły

Dane:

$$y = \mathrm{f}(x) \tag{1.1}$$

oraz $h > 0$, gdzie $h = \Delta x = x_{i+1} - x_i$

Pochodna prawostronna f(x) w punkcie x_0

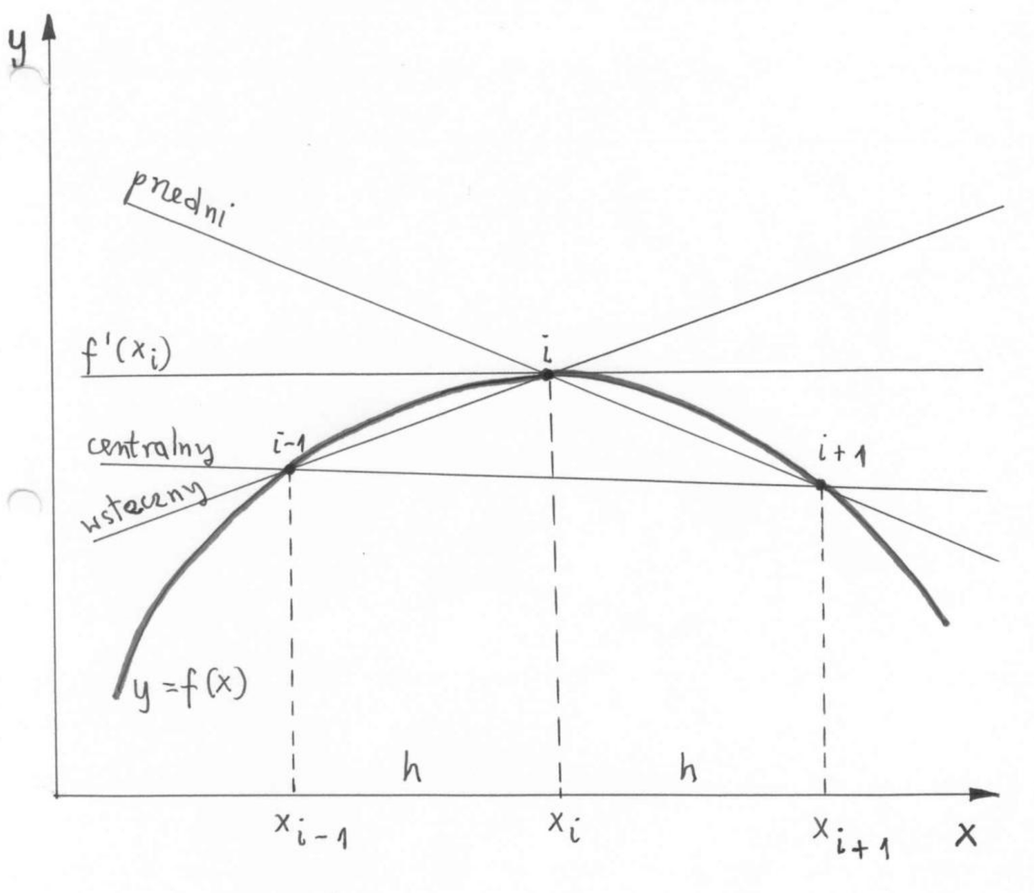
$$\mathrm{f}^{'}(x_0) \cong \frac{\mathrm{f}(x_0 + h) - \mathrm{f}(x_0)}{h} \tag{1.2}$$

Pochodna lewostronna f(x) w punkcie x_0

$$\mathrm{f}^{'}(x_0) \cong \frac{\mathrm{f}(x_0) - \mathrm{f}(x_0 - h)}{h} \tag{1.3}$$

Pochodna centralna f(x) w punkcie x_0

$$\mathrm{f}^{'}(x_0) \cong \frac{\mathrm{f}(x_0 + h) - \mathrm{f}(x_0 - h)}{2h} \tag{1.4}$$



2. Różniczkowanie numeryczne - przypadek dyskretny

Dane:

$x_0, x_1, ..., x_n$ (2.1)

oraz

$y_0 = f(x_0),\ y_1 = f(x_1), ...,\ y_n = f(x_n)$ (2.2)

gdzie

$$x_{i+1} - x_i = h \quad \text{dla} \quad i = 0, 1, \dots, n \tag{2.3}$$

Pochodna prawostronna

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h} \tag{2.4}$$

Pochodna lewostronna

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} = \frac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h} \tag{2.5}$$

Pochodna centralna

$$f'(x_i) \cong \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{2h} \tag{2.6}$$

3. Różniczkowanie numeryczne - rozwinięcie funkcji w szereg Taylora

Funkcję $y(x)$ rozwijamy w otoczeniu punktu x_i

$$y_{i+1} = y_i + h\,y_i' + \frac{h^2}{2!}\,y_i'' + \frac{h^3}{3!}\,y_i''' + \cdots \tag{3.1}$$

$$y_{i-1} = y_i - h\,y_i' + \frac{h^2}{2!}\,y_i'' - \frac{h^3}{3!}\,y_i''' + \cdots \tag{3.2}$$

Po podzieleniu wzorów (3.1) i (3.2) przez h otrzymujemy

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - \frac{h}{2!}\,y_i'' - \frac{h^2}{3!}\,y_i''' + \cdots \tag{3.3}$$

$$y_i' = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + \frac{h}{2!}\,y_i'' - \frac{h^2}{3!}\,y_i''' + \cdots \tag{3.4}$$

Po zsumowaniu równań (3.3) i (3.4) i podzieleniu wyniku stronami przez 2 dostajemy

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{3!}\,y_i''' + \cdots \tag{3.5}$$

Gdy uwzględnimy tylko pierwsze wyrazy prawych stron równań (3.3) - (3.5) otrzymujemy kolejno

- iloraz różnicowy przedni (przybliżenie pochodnej prawostronnej)

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \qquad\qquad e = o(h) \tag{3.6}$$

- iloraz różnicowy wsteczny (przybliżenie pochodnej lewostronnej)

$$y_i' = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \qquad e = o(h) \tag{3.7}$$

- iloraz różnicowy centralny (przybliżenie pochodnej centralnej)

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \qquad e = o(h^2) \tag{3.8}$$

Ilorazy różnicowe przedni i wsteczny mają dokładność pierwszego rzędu, natomiast iloraz różnicowy centralny ma dokładność drugiego rzędu.

4. Ilorazy różnicowe dla pochodnych wyższych rzędów

Iloraz różnicowy przedni

$$y_i'' = \frac{y_{i+1}' - y_i'}{h} = \frac{\dfrac{y_{i+2} - y_{i+1}}{h} - \dfrac{y_{i+1} - y_i}{h}}{h} = \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i}{h^2} \tag{4.1}$$

Iloraz różnicowy wsteczny

$$y_i'' = \frac{y_i' - y_{i-1}'}{h} = \frac{\dfrac{y_i - y_{i-1}}{h} - \dfrac{y_{i-1} - y_{i-2}}{h}}{h} = \frac{y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}}{h^2} \tag{4.2}$$

Iloraz różnicowy centralny

$$y_i'' = \frac{y_{i+1/2}' - y_{i-1/2}'}{h} = \frac{\dfrac{y_{i+1} - y_i}{h} - \dfrac{y_i - y_{i-1}}{h}}{h} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \tag{4.3}$$

5. Różniczkowanie numeryczne – zastosowanie interpolacji

Dane:

$$x_0, x_1, ..., x_n \tag{5.1}$$

oraz

$$y_0 = \mathrm{f}(x_0), y_1 = \mathrm{f}(x_1), ..., y_n = \mathrm{f}(x_n) \tag{5.2}$$

Postać funkcji $y = \mathrm{f}(x)$ jest lub nie jest znana. Zakładamy, że funkcja ta ma pochodne aż do rzędu $n + 1$ w przedziale (a, b) zawierającym punkty $x_0, x_1, ..., x_n$.

Należy obliczyć pochodne funkcji różnych rzędów w przedziale $x_{\min} < x < x_{\max}$, gdzie $x_{\min} = \min x_i$ oraz $x_{\max} = \max x_i$.

Zadanie to można rozwiązać w sposób przybliżony poprzez znalezienie wielomianu interpolacyjnego F(x) i założenie, że

$$\mathrm{f}^{(k)}(x) \cong \mathrm{F}^{(k)}(x) \tag{5.3}$$

Błąd bezwzględny tej metody można oszacować tylko dla węzłów interpolacji wykorzystując poniższe twierdzenie.

<u>TWIERDZENIE 1</u>

Jeżeli w przedziale (a, b)

$$\left|\mathrm{f}^{(n+1)}(x)\right| \leq M$$

gdzie M jest stałą, to

$$\left|\mathrm{f}^{(k)}(x_i) - \mathrm{F}^{(k)}(x_i)\right| \leq \frac{M}{(n+1)!}\left|\frac{\mathrm{d}^k}{\mathrm{d}x^k}\left[(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)\right]\right|_{(x=x_i)} \tag{5.4}$$