# Metody numeryczne

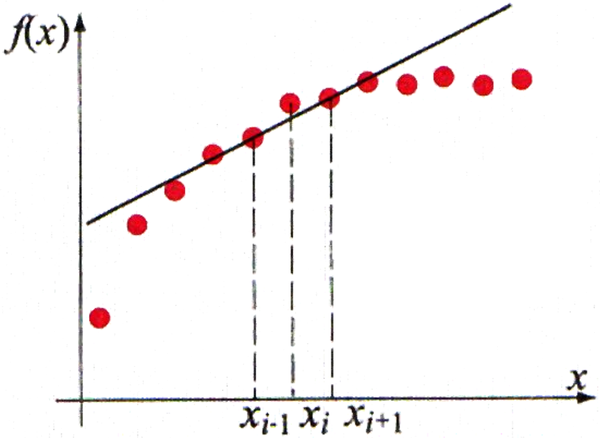
Wykład nr 6

## Różniczkowanie

dr hab. Piotr Fronczak

# Różniczkowanie numeryczne

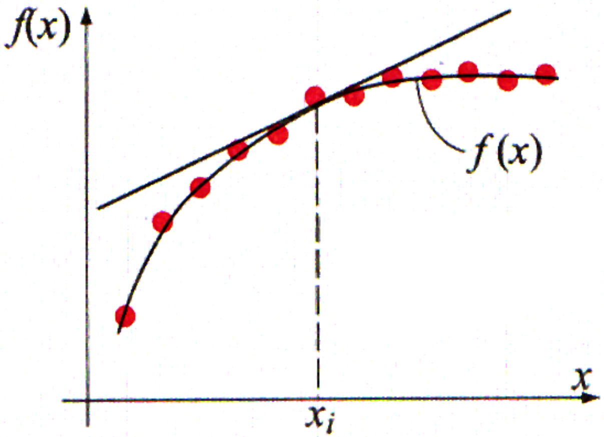
Wzory różniczkowania numerycznego znajdują zastosowanie wtedy, gdy trzeba wyznaczyć pochodne odpowiedniego rzędu funkcji *f(x)*, która określona jest tablicą lub ma skomplikowaną postać analityczną.




Dwa podstawowe sposoby różniczkowania numerycznego:

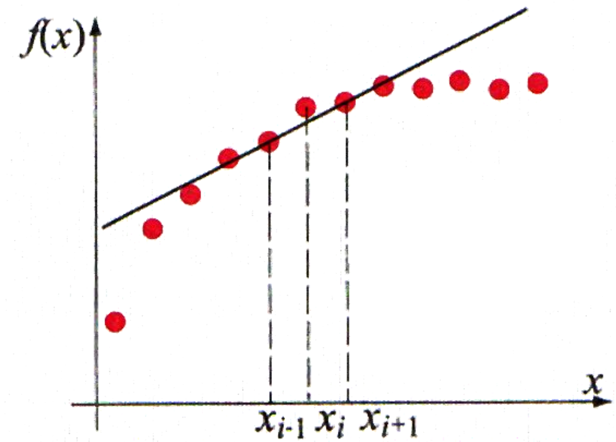
1. **Metoda różnic skończonych** – metoda polegająca na przybliżeniu pochodnej funkcji poprzez skończone różnice, w zdyskretyzowanej przestrzeni. Można ją wyprowadzić wprost z ilorazu różnicowego, bądź z rozwinięcia w szereg Taylora.

2. **Różniczkowanie funkcji aproksymującej** – aproksymujemy punkty wyrażeniem, które może być łatwo różniczkowalne, np. wielomianem, funkcją wykładniczą, itp.



# Różniczkowanie numeryczne

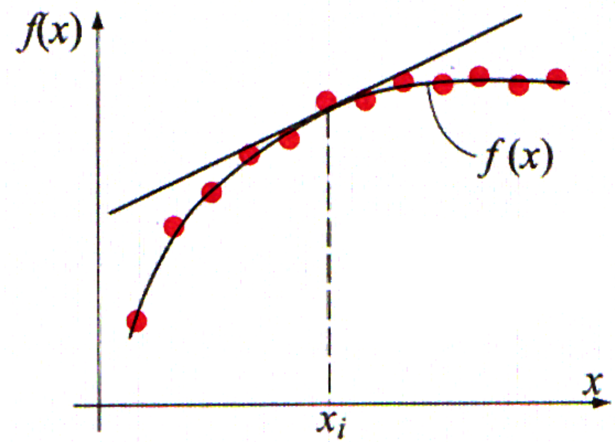
Wzory różniczkowania numerycznego znajdują zastosowanie wtedy, gdy trzeba wyznaczyć pochodne odpowiedniego rzędu funkcji *f(x)*, która określona jest tablicą lub ma skomplikowaną postać analityczną.




Dwa podstawowe sposoby różniczkowania numerycznego:

1. **Metoda różnic skończonych** – metoda polegająca na przybliżeniu pochodnej funkcji poprzez skończone różnice, w zdyskretyzowanej przestrzeni. Można ją wyprowadzić wprost z ilorazu różnicowego, bądź z rozwinięcia w szereg Taylora.

2. **Różniczkowanie funkcji aproksymującej** – aproksymujemy punkty wyrażeniem, które może być łatwo różniczkowalne, np. wielomianem, funkcją wykładniczą, itp.




W przypadku silnie zaszumionych danych różniczkowanie metodą różnic skończonych może dać fatalny efekt.

## Wyprowadzenie metody różnic skończonych ze wzoru Taylora

Rozwinięcie funkcji analitycznej *f(x)* w otoczeniu punktu x w szereg Taylora można wyrazić w postaci

$$f(x+h) = f(x) + \frac{h}{1!} f^{(1)}(x) + \frac{h^2}{2!} f^{(2)}(x) + \cdots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x)$$

Zdefiniujemy operator różniczkowania

$$Df(x) = f^{(1)}(x)$$

$$D^k f(x) = D(D^{k-1} f(x)) = f^{(k)}(x)$$

Zatem

$$f(x+h) = (1 + \frac{hD}{1!} + \frac{h^2 D^2}{2!} + \cdots) f(x) = e^{hD} f(x)$$

Zdefiniujmy operatory różnicy zwykłej $\Delta$, i wstecznej $\nabla$:

$$\Delta f(x) = f(x+h) - f(x) \qquad \nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$$

Czyli

$$f(x+h) = (1+\Delta) f(x)$$

Z porównania zależności uzyskujemy wzór na równość operatorów

$$\left(1+\Delta\right) = e^{hD}$$

$$\left(1+\Delta\right)=e^{hD}$$

Logarytmując obustronnie otrzymamy

$$hD=\ln(1+\Delta)$$

$$D=\tfrac{1}{h}\ln(1+\Delta)$$

Podnosząc obustronnie do potęgi *k*-tej, uzyskamy

$$D^k=\frac{1}{h^k}\left[\ln(1+\Delta)\right]^k$$

Ponieważ $\ln(1+\Delta)=\Delta-\tfrac{\Delta^2}{2}+\tfrac{\Delta^3}{3}-\tfrac{\Delta^4}{4}+\cdots$

$$D^k=\frac{1}{h^k}(\Delta-\frac{\Delta^2}{2}+\frac{\Delta^3}{3}-\frac{\Delta^4}{4}+\cdots)^k$$

$$D^k = \frac{1}{h^k}(\Delta - \frac{\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^3}{3} - \frac{\Delta^4}{4} + \cdots)^k$$

Możemy zatem wyprowadzić wzory na dowolne pochodne funkcji *f(x)* wyrażone za pomocą różnic zwykłych:

k = 1

$$f^{(1)}(x) = \frac{1}{h}\left[\Delta f(x) - \tfrac{1}{2}\Delta^2 f(x) + \tfrac{1}{3}\Delta^3 f(x) - \tfrac{1}{4}\Delta^4 f(x) + \cdots\right]$$

k = 2

$$f^{(2)}(x) = \frac{1}{h^2}\left[\Delta^2 f(x) - \Delta^3 f(x) + \tfrac{11}{12}\Delta^4 f(x) - \tfrac{10}{12}\Delta^5 f(x) + \cdots\right]$$

k = 3

$$f^{(3)}(x) = \frac{1}{h^3}\left[\Delta^3 f(x) - \tfrac{3}{2}\Delta^4 f(x) + \tfrac{7}{4}\Delta^5 f(x) - \tfrac{45}{24}\Delta^6 f(x) + \cdots\right]$$

Sprawdź, że

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

$$f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{2h}$$

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

$$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i+1}) + 4f(x_{i+2}) - 3f(x_{i+3})}{h^2}$$

Zróbmy to samo za pomocą różnic wstecznych. Zauważmy, że

$$(1-\nabla)(1+\Delta)\, f(x) = (1-\nabla)\, f(x+h) = f(x+h) - \nabla f(x+h)$$
$$= f(x+h) - \left[ f(x+h) - f(x) \right] = f(x)$$

Zatem

$$\left(1+\Delta\right) = \left(1-\nabla\right)^{-1}$$

Wstawiając powyższy wzór do wzoru $D^k = \frac{1}{h^k}\left[\ln(1+\Delta)\right]^k$ otrzymujemy

$$D^k = \frac{1}{h^k}\left[\ln(1-\nabla)^{-1}\right]^k = \frac{1}{h^k}\left[-\ln(1-\nabla)\right]^k$$

Ponieważ $$\ln(1-\nabla) = -\left(\nabla + \frac{\nabla^2}{2} + \frac{\nabla^3}{3} + \frac{\nabla^4}{4} + \cdots\right)$$

$$D^k = \frac{1}{h^k}\left(\nabla + \frac{\nabla^2}{2} + \frac{\nabla^3}{3} + \frac{\nabla^4}{4} + \cdots\right)^k$$

$$D^k = \frac{1}{h^k}\left(\nabla + \frac{\nabla^2}{2} + \frac{\nabla^3}{3} + \frac{\nabla^4}{4} + \cdots\right)^k$$

Możemy zatem wyprowadzić wzory na dowolne pochodne funkcji *f(x)* wyrażone za pomocą różnic wstecznych:

k = 1

$$f^{(1)}(x) = \frac{1}{h}\left[\nabla f(x) + \tfrac{1}{2}\nabla^2 f(x) + \tfrac{1}{3}\nabla^3 f(x) + \cdots\right]$$

k = 2

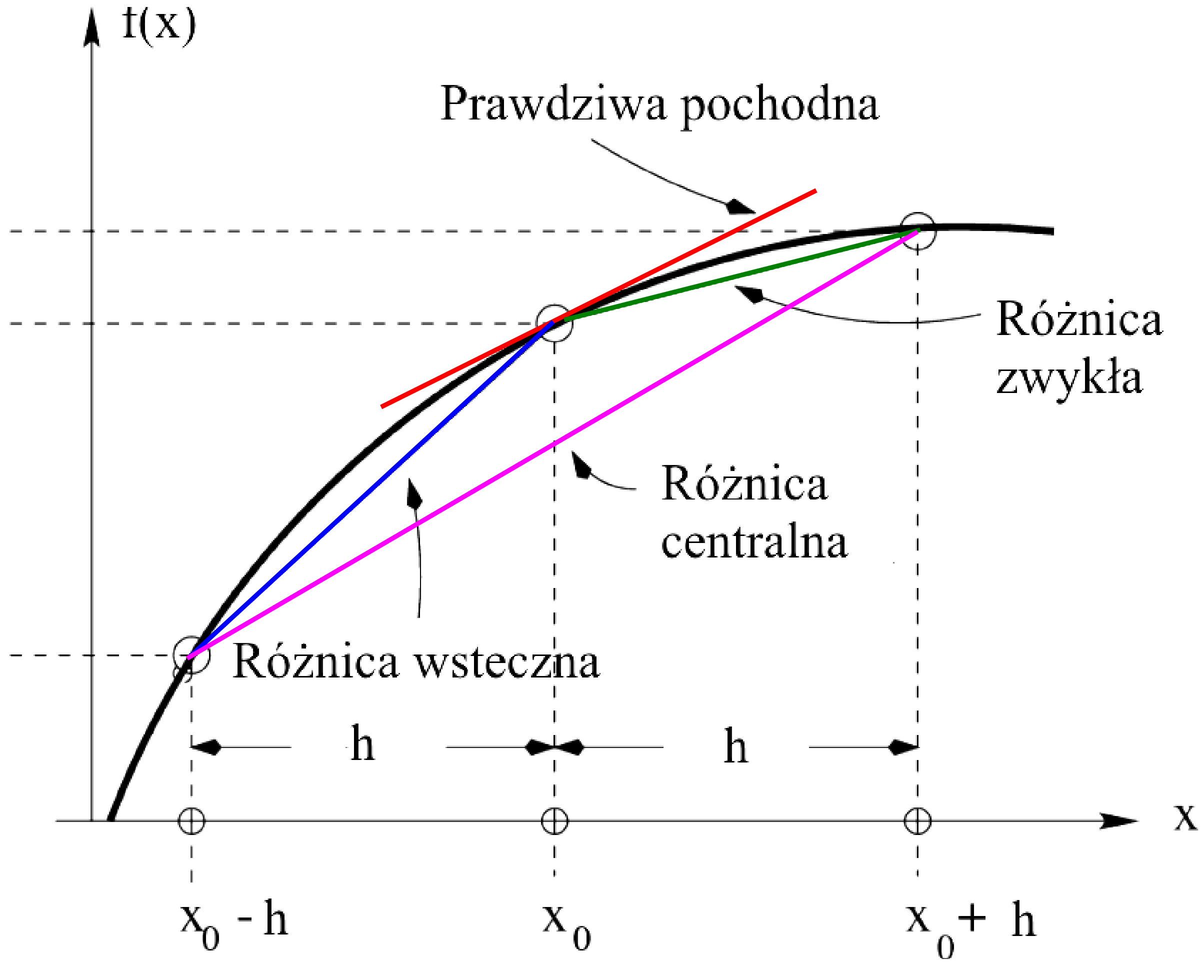
$$f^{(2)}(x) = \frac{1}{h^2}\left[\nabla^2 f(x) + \nabla^3 f(x) + \tfrac{11}{12}\nabla^4 f(x) + \cdots\right]$$

k = 3

$$f^{(3)}(x) = \frac{1}{h^3}\left[\nabla^3 f(x) + \tfrac{3}{2}\nabla^4 f(x) + \tfrac{7}{4}\nabla^5 f(x) + \tfrac{34}{24}\nabla^6 f(x)\cdots\right]$$

## Różnice centralne

Wyprowadzone wcześniej wzory różniczkowania numerycznego funkcji *f(x)* w punkcie $x = x_0$ mają tę wadę, że wykorzystuje się w nich jedynie wartości funkcji *f(x)* dla argumentów leżących z jednej strony $x_0$. Wady tej nie posiadają wzory wykorzystujące wartości funkcji *f(x)* po prawej i po lewej stronie punktu $x = x_0$. Są to wzory symetryczne, oparte na różnicach centralnych.



$$f\left(x+\frac{h}{2}\right)=\left(1+\frac{h}{2}\frac{D}{1!}+\left(\frac{h}{2}\right)^2\frac{D^2}{2!}+\cdots\right)f(x)=e^{\frac{h}{2}D}f(x)$$

$$f\left(x-\frac{h}{2}\right)=\left(1-\frac{h}{2}\frac{D}{1!}+\left(\frac{h}{2}\right)^2\frac{D^2}{2!}+\cdots\right)f(x)=e^{-\frac{h}{2}D}f(x)$$

Zdefiniujmy operator różnicy centralnej

$$\delta f(x)=f(x+\tfrac{h}{2})-f(x-\tfrac{h}{2})$$

Zatem

$$\delta f(x) = \left[ e^{\frac{h}{2}D} - e^{-\frac{h}{2}D} \right] f(x)$$

$$\delta = e^{\frac{h}{2}D} - e^{-\frac{h}{2}D} = 2\sinh\left(\tfrac{h}{2}D\right)$$

$$\operatorname{arcsinh}(\tfrac{\delta}{2}) = \frac{h}{2}D$$

$$D = \frac{2}{h}\operatorname{arcsinh}(\tfrac{\delta}{2})$$

Rozwijając w szereg Taylora:

$$D = \frac{2}{h}\left[ \frac{\delta}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{3}\left(\frac{\delta}{2}\right)^3 + \frac{1\cdot 3}{2\cdot 4}\frac{1}{5}\left(\frac{\delta}{2}\right)^5 - \frac{1\cdot 3\cdot 5}{2\cdot 4\cdot 6}\frac{1}{7}\left(\frac{\delta}{2}\right)^7 + \ldots \right]$$

$$D \approx \frac{2}{h}\left[\frac{\delta}{2}\right] = \frac{\delta}{h}$$

$$Df(x) = \frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h}$$

$$D^2 f(x) = D\left[\frac{f(x+\frac{h}{2}) - f(x-\frac{h}{2})}{h}\right] = \frac{1}{h}\left(Df(x+\tfrac{h}{2}) - Df(x-\tfrac{h}{2})\right)$$

$$= \frac{1}{h}\left(\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{\left(f(x) - f(x-h)\right)}{h}\right) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

$$hD = 2\operatorname{arcsinh}\frac{\delta}{2} = \delta - \frac{\delta^3}{24} + \frac{3\delta^5}{640} - \frac{5\delta^7}{7168} + \frac{35\delta^9}{294{,}912} - \frac{63\delta^{11}}{2{,}883{,}584} + \cdots$$

$$(hD)^2 = \delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \frac{\delta^6}{90} - \frac{\delta^8}{560} + \frac{\delta^{10}}{3150} - \frac{\delta^{12}}{16{,}632} + \cdots$$

$$\delta f(x) = f(x + \tfrac{1}{2}h) - f(x - \tfrac{1}{2}h)$$

$$\mu f(x) = \tfrac{1}{2}\big(f(x + \tfrac{1}{2}h) + f(x - \tfrac{1}{2}h)\big)$$

operator uśredniania

$$\mu^2 = 1 + \frac{1}{4}\delta^2 \qquad \mu = \sqrt{1 + \delta^2/4}$$

$$1 = \mu\left(1 + \frac{1}{4}\delta^2\right)^{-1/2} = \mu\left(1 - \frac{\delta^2}{8} + \frac{3\delta^4}{128} - \frac{5\delta^6}{1{,}024} + \frac{35\delta^8}{32{,}768} + \cdots\right)$$

$$hD = \left(1 - \frac{\delta^2}{6} + \frac{\delta^4}{30} - \frac{\delta^6}{140} + \frac{\delta^8}{630} - \cdots\right)\mu\delta$$

# Oszacowanie błędów

$$f(x+h) = f(x) + \sum_k \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x)$$

W szczególności:

$$f(x+h) = f(x) + hf^{(1)}(x) + O(h^2) + O(h^3) \qquad (1)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf^{(1)}(x) + O(h^2) - O(h^3) \qquad (2)$$

$$O(h^3) << O(h^2)$$

$$z \;\; równ.\ (1) \rightarrow f^{(1)}(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h) + O(h^2)$$

$$z \; równ.\ (2) \rightarrow f^{(1)}(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h) - O(h^2)$$

$$z \; równ.\ (1)-(2) \rightarrow f(x+h) - f(x-h) = 2hf^{(1)}(x) + O(h^3)$$

$$f^{(1)}(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

# Podsumowanie

## Pierwsze pochodne

Dwupunktowe różnice zwykłe $f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}$ $O(h)$

Trzypunktowe różnice zwykłe $f'(x_i) = \frac{-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{2h}$ $O(h^2)$

Dwupunktowe różnice wsteczne $f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}$ $O(h)$

Trzypunktowe różnice wsteczne $f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 4f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2h}$ $O(h^2)$

Dwupunktowe różnice centralne $f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}$ $O(h^2)$

Czteropunktowe różnice centralne $f'(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 8f(x_{i-1}) + 8f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{12h}$ $O(h^4)$

## Drugie pochodne

Trzypunktowe różnice zwykłe $f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})}{h^2}$ $O(h)$

Trzypunktowe różnice wsteczne $f''(x_i) = \frac{f(x_{i-2}) - 2f(x_{i-1}) + f(x_i)}{h^2}$ $O(h)$

Trzypunktowe różnice centralne $f''(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2}$ $O(h^2)$

Pięciopunktowe różnice centralne $f''(x_i) = \frac{-f(x_{i-2}) + 16f(x_{i-1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})}{12h^2}$ $O(h^4)$

# Różniczkowanie za pomocą wielomianów Lagrange'a

Zapiszmy wielomian przechodzący przez trzy punkty $(x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1}), (x_{i+2}, y_{i+2})$

$$f(x) = \frac{(x - x_{i+1})(x - x_{i+2})}{(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i+2})} y_i + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+2})}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})} y_{i+1} + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})} y_{i+2}$$

Różniczkując

$$f'(x) = \frac{2x - x_{i+1} - x_{i+2}}{(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i+2})} y_i + \frac{2x - x_i - x_{i+2}}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})} y_{i+1} + \frac{2x - x_i - x_{i+1}}{(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})} y_{i+2}$$

Podstawmy $x = x_{i+1}$

$$f'(x_{i+1}) = \frac{x_{i+1} - x_{i+2}}{(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i+2})} y_i + \frac{2x_{i+1} - x_i - x_{i+2}}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})} y_{i+1} + \frac{x_{i+1} - x_i}{(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})} y_{i+2}$$

$$f'(x_{i+1}) = \frac{x_{i+1} - x_{i+2}}{(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i+2})} y_i + \frac{2x_{i+1} - x_i - x_{i+2}}{(x_{i+1} - x_i)(x_{i+1} - x_{i+2})} y_{i+1} + \frac{x_{i+1} - x_i}{(x_{i+2} - x_i)(x_{i+2} - x_{i+1})} y_{i+2}$$

**Uwagi:**

1. Gdy punkty są równomiernie rozłożone, czyli $x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i = h$

$$f'(x_{i+1}) = \frac{-h}{(-h)(-2h)} y_i + \frac{h-h}{(h)(-h)} y_{i+1} + \frac{h}{(2h)(h)} y_{i+2}$$

$$f'(x_{i+1}) = \frac{-1}{2h} y_i + \frac{1}{2h} y_{i+2} = \frac{y_{i+2} - y_i}{2h}$$

Wzór dla różnic centralnych

2. Zaleta nr 1: punkty nie muszą być równomiernie rozłożone

3. Zaleta nr 2: możemy policzyć pochodną w dowolnym punkcie między $x_i$ a $x_{i+2}$.

# Błąd w różniczkowaniu numerycznym

Rozważmy funkcję $f(x) = e^x$

Policzmy pochodną w punkcie $x=0$ korzystając z dwupunktowych różnic centralnych.

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2) \qquad gdzie\ x_{i+1} = h\ \ oraz\ \ x_{i-1} = -h$$

$$f'(0) = \frac{e^h - e^{-h}}{2h} + O(h^2)$$

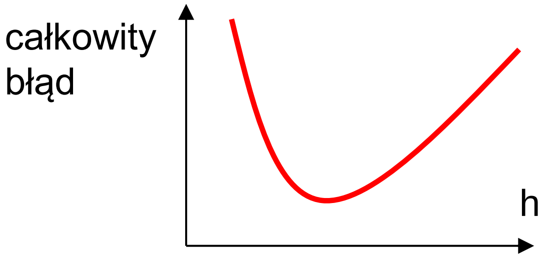
Podczas obliczeń komputer wprowadza błąd zaokrąglenia

$$e^h \rightarrow e^h + R_1 \qquad\qquad e^{-h} \rightarrow e^{-h} + R_2$$

Wartości dokładne

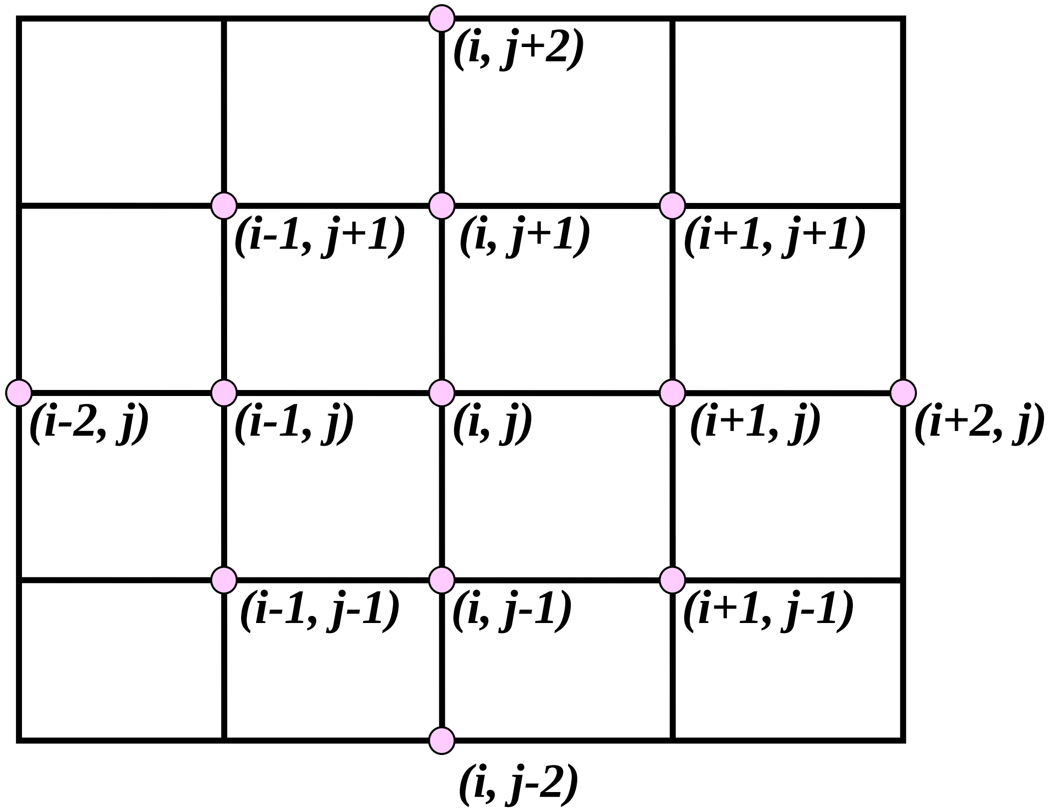
$$f'(0) = \frac{e^h + R_1 - e^{-h} - R_2}{2h} + O(h^2) = \frac{e^h - e^{-h}}{2h} + \underbrace{\frac{R_1 - R_2}{2h}}_{\text{Błąd zaokrąglenia}} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{Błąd obcięcia}}$$

Gdy zmniejszamy h, błąd obcięcia maleje,
ale błąd zaokrąglenia rośnie.



# Pochodne cząstkowe

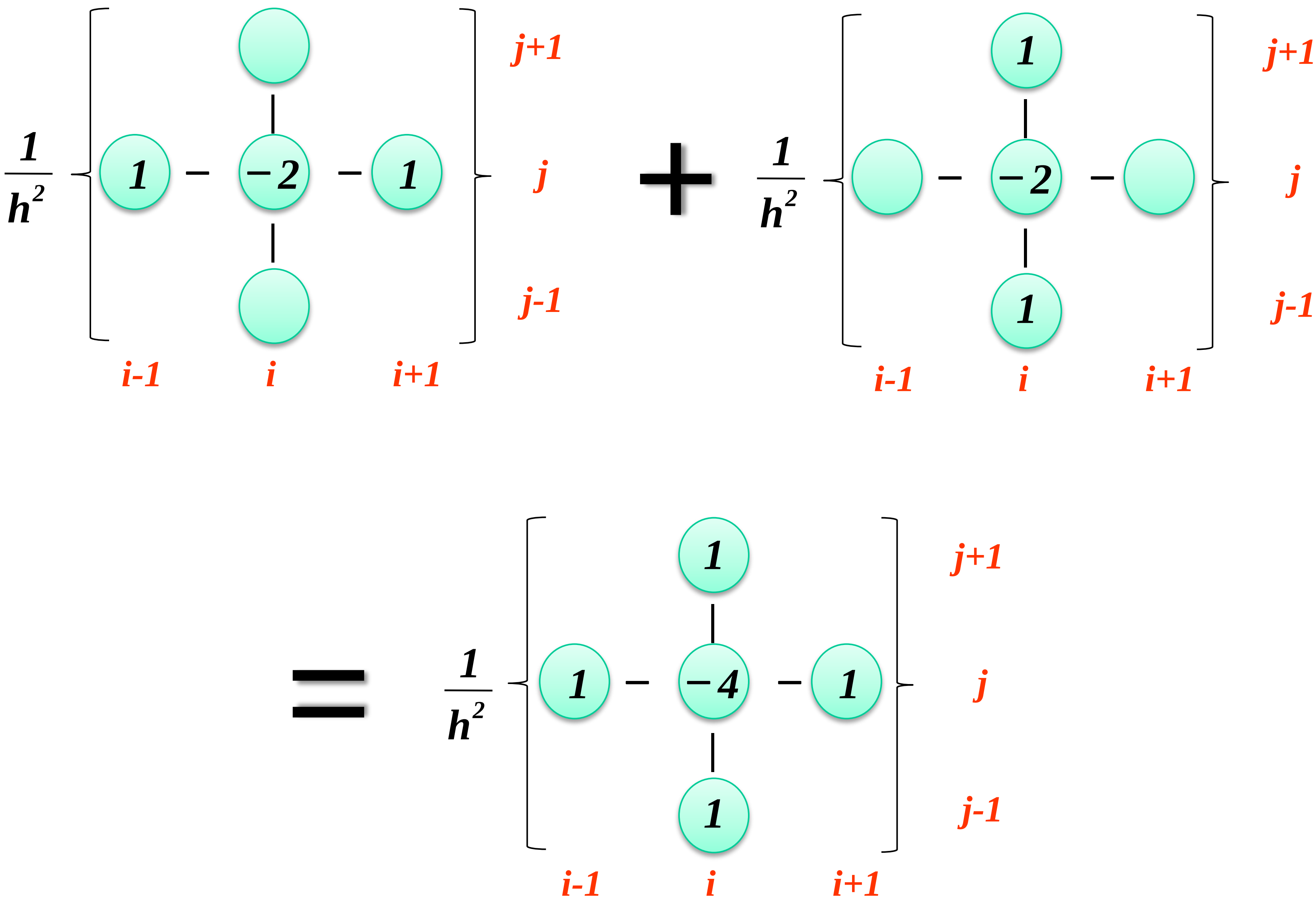
Proste rozszerzenie metod dla pochodnych zupełnych (jednowymiarowych)




$$f_x = \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{2h}\begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$f_{xx} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}\begin{bmatrix} 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

## Operator Laplace'a $\nabla^2 f = f_{xx} + f_{yy}$



# Pochodne mieszane

$$\frac{\partial f}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial y}\left( \frac{1}{2h} \begin{array}{c|c} \begin{bmatrix} 0 & - & 0 & - & 0 \\ | & & | & & | \\ -1 & - & 0 & - & 1 \\ | & & | & & | \\ 0 & - & 0 & - & 0 \end{bmatrix} & \begin{matrix} j+1 \\ \\ j \\ \\ j-1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} i-1 & & i & & i+1 \end{matrix} & \end{array} \right) =$$

$$= \frac{1}{4h^2} \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} -1 & - & 0 & - & 1 \\ | & & | & & | \\ 0 & - & 0 & - & 0 \\ | & & | & & | \\ 1 & - & 0 & - & -1 \end{bmatrix} & \begin{matrix} j+1 \\ \\ j \\ \\ j-1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} i-1 & & i & & i+1 \end{matrix} & \end{array}$$

## Bilaplasjan (operator bi-harmoniczny)

$$\nabla^4 f = \frac{\partial^4 f}{\partial x^4} + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 f}{\partial y^4} \approx$$

$$\frac{1}{h^4}\begin{array}{cc} \left\{\begin{array}{ccccc} & & 1 & & \\ & 2 & -8 & 2 & \\ 1 & -8 & 20 & -8 & 1 \\ & 2 & -8 & 2 & \\ & & 1 & & \end{array}\right\} & \begin{array}{c} j+2\\ j+1\\ j\\ j-1\\ j-2\end{array} \\ \begin{array}{ccccc} i-2 & i-1 & i & i+1 & i+2\end{array} & \end{array}$$