Metode pentru Derivarea Numerică

Valentin-Ioan VINTILĂ

Facultatea de Automatică și Calculatoare - CTI
Universitatea POLITEHNICA București

09 mai 2023 (Lab. 10)

Cuprins

Introducere

Matematic, ce înțelegem prin derivare?

Pentru o funcție $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, cu $f \in C^1$, avem:

$$\boxed{f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}}, \ \forall x \in [a, b]$$

Diferențe finite (1)

Pentru a putea găsi aproximări numerice pertinente, vom introduce conceptul **diferențelor finite**.

- **Derivate** – continue, matematice;
- **Diferențe finite** – discrete, inginerești.

Diferențe finite (2)

Fie $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ o funcție continuă. Suplimentar, considerăm constanta $h \in \mathbb{R}$, de obicei aleasă astfel încât $|h| \to 0$.

Se definesc următoarele **trei tipuri** de **diferențe finite**:

1. **Diferența finită înainte** (diferența directă):

$$\boxed{\Delta_h[f](x) = f(x+h) - f(x)}$$

2. **Diferența finită înapoi** (diferența inversă):

$$\boxed{\nabla_h[f](x) = f(x) - f(x-h)} = \Delta_h[f](x-h)$$

3. **Diferența finită centrată**:

$$\boxed{\delta_h[f](x) = f\left(x + \frac{h}{2}\right) - f\left(x - \frac{h}{2}\right)} = \Delta_{h/2}[f](x) + \nabla_{h/2}[f](x)$$

Derivata de ordin I – metoda simplă (1)

Cunoaștem deja următoarea aproximare firească:

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}}, \ \forall x \in [a, b]$$

Scrisă cu ajutorul diferențelor finite, devine:

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{\Delta_h[f](x)}{h}}, \ \forall x \in [a, b]$$

Ce facem dacă nu știm f? Interpolăm Lagrange punctele pe care le cunoaștem și aplicăm formula de mai sus!

Derivata de ordin I – metoda simplă (2)

Ne așteptăm să obținem o eroare de aproximare a derivatei:

$$\boxed{\varepsilon(x) = \frac{f''(x)}{2} h + O(h^2)}, \ \forall x \in [a, b]$$

Demonstrația la tablă...

Derivata de ordin I – metoda în 3 puncte (1)

Am plecat de la următoarea aproximare:

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}}, \ \forall x \in [a, b]$$

Dar dacă facem trecerea $h \to -h$? Obținem o nouă ecuație:

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}}, \ \forall x \in [a, b]$$

Derivata de ordin I – metoda în 3 puncte (2)

Însumăm ecuațiile și obținem:

$$2f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{h} \Rightarrow \boxed{f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}}$$

Echivalent, prin scrierea cu **diferențe finite**:

$$\boxed{f'(x) \approx \frac{\delta_{2h}[f](x)}{2h}}$$

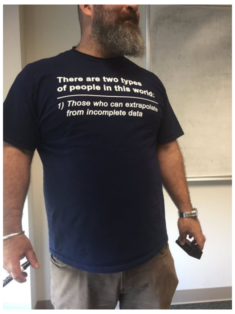
Derivata de ordin I – metoda în 3 puncte (3)

Ne așteptăm să obținem o eroare de aproximare a derivatei:

$$\boxed{\varepsilon(x) = \frac{-f^{(3)}(x)}{6} h + O(h^4)}, \ \forall x \in [a, b]$$

Demonstrația la tablă...

Extrapolarea (1)

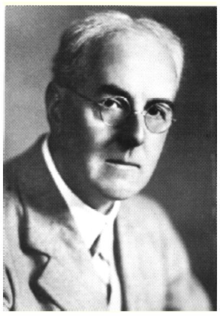


Imagine simbolică, ce înțelegem prin extrapolare?

Extrapolarea (2)

Prin extrapolare se înțelege acțiunea de a estima o informație inițial necunoscută în baza altor informații deja cunoscute.

Lewis Fry Richardson



Lewis Fry Richardson (1881–1953)

Extrapolarea Richardson (1)

Extrapolarea Richardson este o metodă de a îmbunătăți o soluție **fără** a cunoaște informații suplimentare.

Poate fi gândită drept un ***"black box"***.

Extrapolarea Richardson (2)

Avem o valoare exactă, $\Psi^* \in \mathbb{R}$, pe care vrem să o aproximăm.

Vom nota aproximația noastră cu $\Psi(h)$, unde $\Psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.

Garantat, se poate face scrierea:

$$\boxed{\begin{aligned} \Psi^* &= \Psi(h) + K_0 h^{\lambda_0} + K_1 h^{\lambda_1} + K_2 h^{\lambda_2} + \ldots \\ &= \Psi(h) + \sum_{i \geq 0} K_i h^{\lambda_i} \end{aligned}}$$

Unde considerăm constante valorile K_i și λ_i, $\forall i \in \mathbb{N}$, cu proprietatea că $h^{\lambda_i} > h^{\lambda_{i+1}}$ *(vrem să convergă seria)*.

Extrapolarea Richardson (3)

Cunoaștem $\Psi^* = \Psi(h) + K_0 h^{\lambda_0} + K_1 h^{\lambda_1} + K_2 h^{\lambda_2} + \ldots$; echivalent, putem *renunța* la termenii de după $K_0 h^{\lambda_0}$:

$$\boxed{\Psi^* = \Psi(h) + K_0 h^{\lambda_0} + O(h^{\lambda_1})}$$

Dar dacă facem trecerea $h \to \frac{h}{t}$, unde t e o constantă?

$$\Psi^* = \Psi\left(\frac{h}{t}\right) + K_0 \left(\frac{h}{t}\right)^{\lambda_0} + O(h^{\lambda_1})$$

Rearanjăm puțin termenii:

$$\boxed{t^{\lambda_0} \Psi^* = t^{\lambda_0} \Psi\left(\frac{h}{t}\right) + K_0 h^{\lambda_0} + t^{\lambda_0} O(h^{\lambda_1})}$$

Extrapolarea Richardson (4)

Scădem ecuațiile:

$$t^{\lambda_0}\Psi^* - \Psi^* = t^{\lambda_0}\Psi\left(\frac{h}{t}\right) - \Psi(h) + O(h^{\lambda_1})$$

Echivalent, după rearanjare, obținem:

$$\boxed{\Psi^* = \frac{t^{\lambda_0}\Psi\left(\frac{h}{t}\right) - \Psi(h)}{t^{\lambda_0} - 1}} + O(h^{\lambda_1})$$

Avem deci o aproximare mai bună!

Extrapolarea Richardson (5)

Am trecut de la $O(h^{\lambda_0})$ la $O(h^{\lambda_1})$, ceea ce este impresionant pentru că am plecat de la ipoteza că $h^{\lambda_0} > h^{\lambda_1}$!

Ne-a interesat cine e Ψ^*? NU, de aceea putem considera metoda un *"black box"* foarte elegant!

Extrapolarea Richardson (6)

Având în vedere ultima formulă întâlnită, putem simplifica și mai mult calculele și intuiția prin următoarea **formulă de recurență**:

$$\boxed{\Psi_i(h) = \frac{t^{\lambda_{i-1}}\Psi_{i-1}\left(\frac{h}{t}\right) - \Psi_{i-1}(h)}{t^{\lambda_{i-1}} - 1}}, \ \forall i \in \mathbb{N}^*$$

În acest context, aproximările vor fi de ordinul:

$$\Psi^* = \Psi_i(h) + O(h^{\lambda_{i+1}})$$

Extrapolarea Richardson + derivarea numerică (1)

Amintim următoarea formulă ce a apărut în demonstrația derivării numerice folosind metoda celor trei puncte:

$$\boxed{f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f^{(3)}(x)}{3!}h^2 - \frac{f^{(5)}(x)}{5!}h^4 - \dots}, \ \forall x \in \mathbb{R}$$

Identificăm următoarele:

- $\Psi^* = f'(x)$;
- $\Psi_0(h) = \dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$;
- **Surplusul** $-\dfrac{f^{(3)}(x)}{3!}h^2 + O(h^4)$.

Extrapolarea Richardson + derivarea numerică (2)

Putem aplica direct recurența considerând $t = \lambda_0 = 2$, dar preferăm să facem calculele mai natural.

Facem înlocuirea $h \to \dfrac{h}{2}$ și obținem:

$$\Psi^* = \Psi_0\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{f^{(3)}(x_0)}{3!}\left(\frac{h}{2}\right)^2 - O(h^4)$$

Echivalent, ne pregătim de scădere rearanjând:

$$4\Psi^* = 4\Psi_0\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{f^{(3)}(x_0)}{3!}h^2 - 4O(h^4)$$

Extrapolarea Richardson + derivarea numerică (3)

Scădem și simplificăm:

$$\boxed{3\Psi^* = 4\Psi_0\left(\frac{h}{2}\right) - \Psi_0(h) - 3O(h^4)}$$

Dacă înlocuim Ψ^* și Ψ_0 cu formulele lor, obținem:

$$\boxed{f'(x) = \frac{8f\left(x + \frac{h}{2}\right) + f(x-h) - f(x+h) - 8f\left(x - \frac{h}{2}\right)}{6h} + O(h^4)}$$

Sau, cu diferențe finite: $f'(x) \approx \dfrac{8\delta_h[f](x) - \delta_{2h}[f](x)}{6h}$

Derivata de ordin II

Se poate demonstra ușor următoarea formulă de aproximare a derivatei de ordin II:

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

Demonstrația la tablă...

Diferențe finite de ordin superior

Fie $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ o funcție de clasă C^{n-1}. Suplimentar, considerăm constanta $h \in \mathbb{R}$, de obicei aleasă astfel încât $|h| \to 0$.

Se definesc următoarele **trei tipuri** de **diferențe finite** de ordin n:

1. **Diferența finită înainte**:
$$\Delta_h^n[f](x) = \Delta_h\left[\Delta_h^{n-1}[f]\right](x) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^{n-k} \cdot C_n^k \cdot f(x + kh)$$
2. **Diferența finită înapoi**:
$$\nabla_h^n[f](x) = \nabla_h\left[\nabla_h^{n-1}[f]\right](x) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^{k} \cdot C_n^k \cdot f(x - kh)$$
3. **Diferența finită centrată**:
$$\delta_h^n[f](x) = \delta_h\left[\delta_h^{n-1}[f]\right](x) = \sum_{k=0}^{n}(-1)^{k} \cdot C_n^k \cdot f\left(x + \left(\frac{n}{2} - k\right)h\right)$$

Derivata de ordin n

Pentru a calcula o derivată de orice ordin, se pot utiliza formulele:

$$\frac{d^n f}{dx^n}(x) = \begin{cases} \frac{\Delta_h^n[f](x)}{h^n} + O(h) \\ \frac{\nabla_h^n[f](x)}{h^n} + O(h) \\ \frac{\delta_h^n[f](x)}{h^n} + O(h^2) \end{cases}, \forall x \in [a, b]$$

Bibliografie

Toate resursele bibliografice de care aveți nevoie se găsesc în descrierea cu care a venit atașată această prezentare.

Sfârșit

Mulțumesc frumos pentru atenție!

Vă rog frumos să **completați formularul de feedback**!