Metody numeryczne
Wykład nr 8
Różniczkowanie numeryczne

Aneta Wróblewska

UMCS, Lublin

April 22, 2024

Wstęp

Różniczkowanie numeryczne

Różniczkowanie numeryczne jest metodą obliczania przybliżonych wartości pochodnych funkcji, wykorzystując wartości tej funkcji w skończonej liczbie punktów.

Różniczkowanie numeryczne jest niezbędne w sytuacjach, gdzie rozwiązania analityczne są trudne lub niemożliwe do uzyskania, na przykład w przypadku skomplikowanych modeli fizycznych, ekonomicznych czy biologicznych, które nie są wyrażone w prostych wzorach matematycznych.

Zastosowania różniczkowania numerycznego

Inżynieria i fizyka

Różniczkowanie numeryczne jest szeroko stosowane do analizowania dynamiki systemów, np. w symulacjach mechaniki płynów, gdzie oblicza się gradienty prędkości i ciśnienia. Obliczanie prędkości i przyspieszenia na podstawie zarejestrowanej trajektorii ruchu.

Na przykładzie mechaniki płynów, różnica skończona do obliczenia pochodnej ciśnienia p w punkcie może być wyrażona jako:

$$\frac{\Delta p}{\Delta x} = \frac{p(x+h) - p(x)}{h}$$

gdzie h jest małym krokiem w przestrzeni.

Zastosowania różniczkowania numerycznego

Ekonomia i finanse

W ekonomii i finansach, różniczkowanie numeryczne pozwala na obliczanie stóp zmian, np. w modelowaniu opcji finansowych za pomocą równania Blacka-Scholesa.

Biologia i medycyna

Wykorzystywane do modelowania rozprzestrzeniania się substancji chemicznych lub leków w organizmach żywych, obliczając szybkość zmian stężenia w czasie.

Informatyka

Stosowane w algorytmach uczenia maszynowego, szczególnie w technikach optymalizacyjnych jak spadek gradientu, gdzie pochodne funkcji kosztu są niezbędne do aktualizacji wag modeli.

Metoda różniczkowania Newtona

Metoda różniczkowania Newtona, często nazywana metodą różnic skończonych Newtona, stosowana jest do numerycznego obliczania pochodnych funkcji. Metoda ta jest szczególnie przydatna, gdy nie dysponujemy analityczną formą funkcji, ale znamy jej wartości w dyskretnych punktach.

Pochodna funkcji

Dla funkcji f określonej w punktach x oraz $x+h$, gdzie h jest małym przyrostem, pochodna funkcji w punkcie x może być przybliżona jako:

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

To jest tak zwana różnica w przód (różnica zwykła).

Przykład 1

Załóżmy, że chcemy obliczyć pochodną funkcji $f(x) = x^2$ w punkcie $x = 2$ z $h = 0.01$:

$$f'(2) \approx \frac{f(2.01) - f(2)}{0.01} = \frac{4.0401 - 4}{0.01} = 4.01$$

Teoretyczna wartość pochodnej, $2x$ w $x = 2$, wynosi 4. Dlatego nasze przybliżenie jest bardzo bliskie wartości rzeczywistej.

Metoda różniczkowania Newtona jest prosta w implementacji i nie wymaga złożonych obliczeń, jednak jej dokładność zależy od wielkości kroku h oraz zachowania funkcji f. Mała wartość h może prowadzić do błędów numerycznych związanych z precyzją arytmetyki komputerowej.

Metoda różnic skończonych

Metoda różnic skończonych

Co to są różnice skończone?

Różnice skończone to metoda przybliżania pochodnych funkcji poprzez wykorzystanie wartości funkcji w skończonej liczbie punktów.

Metoda jest szeroko stosowana w numerycznym rozwiązywaniu równań różniczkowych, gdzie analityczne rozwiązanie jest trudne lub niemożliwe do uzyskania. Można ją wyprowadzić wprost z ilorazu różnicowego, bądź z rozwinięcia w szereg Taylora.

Podstawowe wzory różnic skończonych

Różnica w przód (zwykła)

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

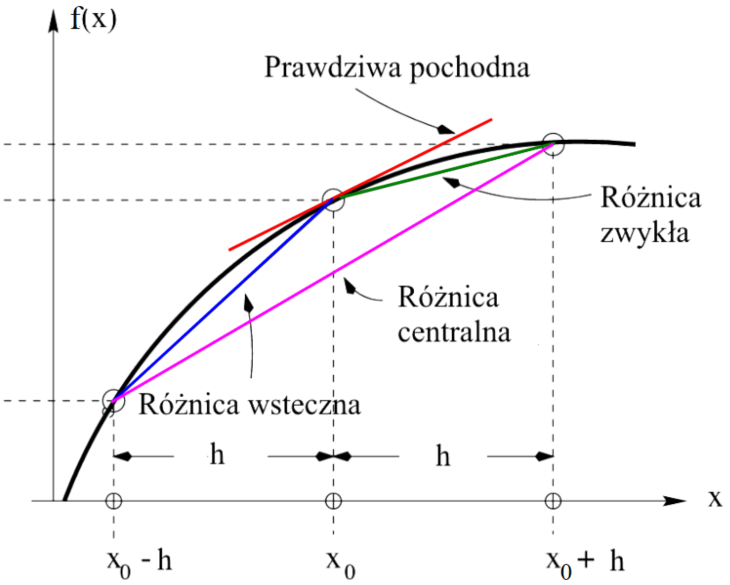
Różnica wsteczna

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

Różnica centralna

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

Różnice skończone - porównanie



Różnice centralne - przykład

Przykład 2

Załóżmy, że mamy funkcję $f(x) = x^2$ i chcemy obliczyć $f'(2)$ przy $h = 0.1$ za pomocą różnicy centralnej:

$$f'(2) \approx \frac{(2.1)^2 - (1.9)^2}{0.2} = \frac{4.41 - 3.61}{0.2} = 4.0$$

Teoretyczna wartość pochodnej $f'(x) = 2x$ w $x = 2$ wynosi 4, więc wynik jest dokładny.

Wyprowadzenie metody różnic skończonych ze wzoru Taylora

- Rozwinięcie funkcji analitycznej $f(x)$ w otoczeniu punktu x w szereg Taylora można wyrazić w postaci:

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

- Definiujemy operator różniczkowania $D^k f(x) = f^{(k)}(x)$
- Zatem:

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

- Definiujemy operatory różnicy zwykłej Δ i wstecznej ∇:

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

$$\nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$$

Równość operatorów i logarytmowanie

- Z porównania zależności uzyskujemy wzór na równość operatorów:

$$e^{hD} = \Delta + 1$$

$$1 - \nabla = e^{-hD}$$

- Logarytmując obustronnie otrzymujemy:

$$\ln(1+\Delta) = hD \quad \longrightarrow \quad D = \frac{1}{h}\ln(1+\Delta)$$

$$\ln(1-\nabla) = -hD \quad \longrightarrow \quad D = -\frac{1}{h}\ln(1-\nabla)$$

Wzory na pochodne dla różnicy zwykłej

- Podnosząc (w pierwszej kolejności) równanie dla różnicy zwykłej obustronnie do potęgi k-tej, uzyskujemy:

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

- Możemy zatem wyprowadzić wzory na dowolne pochodne funkcji $f(x)$ wyrażone za pomocą różnic zwykłych i wstecznych.

Wyprowadzenie wzoru dla różnicy zwykłej

Rozwijając funkcję logarytmiczną w szereg wokół 1 (zwykle Δ to mała wielkość): $\ln(1+\Delta) = \Delta - \frac{\Delta^2}{2} + \frac{\Delta^3}{3} - \frac{\Delta^4}{4} + \ldots$, uzyskujemy następujące powiązanie operatora różniczkowania D z operatorem różnicy zwykłej ("w przód") Δ:

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

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

$$k=1 \quad f^{(1)}(x)=\frac{1}{h}(\Delta f(x)-\frac{1}{2}\Delta^2 f(x)+\frac{1}{3}\Delta^3 f(x)-\frac{1}{4}\Delta^4 f(x)+\ldots)$$

$$k=2 \quad f^{(2)}(x)=\frac{1}{h^2}(\Delta^2 f(x)-\Delta^3 f(x)+\frac{11}{12}\Delta^4 f(x)-\frac{10}{12}\Delta^5 f(x)+\ldots)$$

$$k=3 \quad f^{(3)}(x)=\frac{1}{h^3}(\Delta^3 f(x)-\frac{3}{2}\Delta^4 f(x)+\frac{7}{4}\Delta^5 f(x)-\frac{45}{24}\Delta^6 f(x)+\ldots$$

Wzory na pochodne funkcji

Pokażemy (dowód na tablicy), że pochodną pierwszego rzędu (i analogicznie drugiego rzędu) można wyrazić w różnoraki sposób korzystając z większej lub mniejszej ilości wyrazów w powyższym rozwinięciu.

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

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

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

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

Wzory na pochodne dla różnicy wstecznej

- Podnosząc następnie obustronnie równanie dla różnicy wstecznej do potęgi k-tej, uzyskujemy:

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

- Dalej postępujemy analogicznie jak w przypadku różnic zwykłych.

Ponieważ $\ln(1-\nabla) = -(\nabla + \frac{\nabla^2}{2} + \frac{\nabla^3}{3} + \frac{\nabla^4}{4} + \ldots)$,

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

Wzory na pochodne funkcji dla różnicy wstecznej

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

$$k = 1 \quad f^{(1)}(x) = \frac{1}{h}(\nabla f(x) + \frac{1}{2}\nabla^2 f(x) + \frac{1}{3}\nabla^3 f(x) + \ldots)$$

$$k = 2 \quad f^{(2)}(x) = \frac{1}{h^2}(\nabla^2 f(x) + \nabla^3 f(x) + \frac{11}{12}\nabla^4 f(x) + \ldots)$$

$$k = 3 \quad f^{(3)}(x) = \frac{1}{h^3}(\nabla^3 f(x) + \frac{3}{2}\nabla^4 f(x) + \frac{34}{24}\nabla^5 f(x) + \ldots)$$

Różnice centralne

- Wzory różniczkowania numerycznego funkcji $f(x)$ w punkcie $x = x_0$ dla różnicy zwykłej i wstecznej wykorzystują jedynie wartości funkcji $f(x)$ dla argumentów leżących tylko z jednej strony x_0
- Wady tej nie posiadają wzory wykorzystujące wartości funkcji $f(x)$ po prawej i po lewej stronie punktu x_0. Są to wzory symetryczne, oparte na różnicach centralnych

Definicja operatora różnicy centralnej

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

Zatem,

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

Rozwinięcie w szereg Taylora

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \frac{f'''(x)}{6}h^3 + O(h^4)$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 - \frac{f'''(x)}{6}h^3 + O(h^4)$$

Podstawiając te wzory do definicji $\delta f(x)$ i $\delta^2 f(x)$, otrzymujemy:

$$\delta f(x) = f'(x) + O(h^2)$$

$$\delta^2 f(x) = f''(x) + O(h^2)$$

Wzory na pochodne - podsumowanie

Dwupunktowe różnice zwykłe:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \qquad O(h)$$

Trzypunktowe różnice zwykłe:

$$f'(x) \approx \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h}, \qquad O(h^2)$$

Dwupunktowe różnice wsteczne:

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \qquad O(h)$$

Trzypunktowe różnice wsteczne:

$$f'(x) \approx \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h}, \qquad O(h^2)$$

Wzory na pochodne - podsumowanie cd

Dwupunktowe różnice centralne:

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

Czteropunktowe różnice centralne:

$$f'(x) \approx \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h}, \qquad O(h^4)$$

Błędy metody różnic skończonych

Błąd przybliżenia

Błąd metody różnic skończonych zależy od wartości h oraz od wyższych pochodnych funkcji f. Ogólnie, błąd dla różnicy centralnej jest rzędu $O(h^2)$, co oznacza, że mniejsze h daje dokładniejsze wyniki, ale zwiększa ryzyko błędu numerycznego.

Rozważmy funkcję $f(x) = e^x$.
Policzymy pochodną w punkcie $x = 0$ korzystając z dwupunktowych różnic centralnych:

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

gdzie $i = 0, h \neq 0$.

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

gdzie $i = 0, h \neq 0$.
Podczas obliczeń komputer wprowadza błąd zaokrąglenia:

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

Wartości dokładne:

$$f'(0) = \frac{e^h + R_1 - e^{-h} - R_2}{2h} + O(h^2) = \frac{e^h - e^{-h}}{2h} + \frac{R_1 - R_2}{2h} + O(h^2)$$

Gdy zmniejszamy h, błąd obcięcia $(O(h^2))$ maleje, ale błąd zaokrąglenia $(\frac{R_1 - R_2}{2h})$ rośnie.

Różniczkowanie funkcji aproksymującej

Aproksymacja funkcji

Często funkcja f nie jest znana dokładnie, ale mamy jej przybliżone wartości w punktach. W takim przypadku używamy różnic skończonych do aproksymowania pochodnej na podstawie tych przybliżonych wartości.

Różniczkowanie za pomocą wielomianów Lagrange'a

Metoda interpolacyjna

Różnice skończone można połączyć z interpolacją wielomianową Lagrange'a, co pozwala na obliczanie pochodnych w punktach między znanymi wartościami funkcji.

$$f'(x) \approx \frac{\sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k'(x)}{\sum_{k=0}^{n} l_k(x)}$$

gdzie $l_k(x)$ to wielomiany interpolacyjne Lagrange'a.

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

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

Różniczkujemy po x, a następnie podstawiamy $x = x_{i+1}$:

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

Uwagi

1. Gdy punkty są równomiernie rozłożone, czyli $x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i = h$, korzystając z różnicy centralnej otrzymujemy:
$$f'(x_{i+1}) = \frac{y_{i+2} - y_i}{2h}$$
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}

Ekstrapolacja Richardsona

Ekstrapolacja Richardsona

Weźmy szereg Taylora:

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

Odejmijmy stronami dwa powyższe równania i wyznaczmy pierwszą pochodną:

$$f'(x) = \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)] - \left[\frac{1}{3!}h^2 f^{(3)}(x) + \frac{1}{5!}h^4 f^{(5)}(x) + \dots\right]$$

$$L = D(h) + a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \dots \quad (h \neq 0) \qquad (1)$$

gdzie:
L - pierwsza pochodna
$D(h)$ - przybliżenie pochodnej
$a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \dots$ - błąd przybliżenia

Ekstrapolacja Richardsona

W równaniu (1) zamieńmy h na $h/2$ i pomnóżmy stronami przez 4:

$$4L = 4D(h/2) + a_2 h^2 + \frac{a_4 h^4}{4} + \frac{a_6 h^6}{16} + \dots \qquad (2)$$

Odejmijmy równanie (1) od (2) i podzielmy przez 3:

$$L = \frac{4}{3} D(h/2) - \frac{1}{3} D(h) - \frac{a_4 h^4}{4} - \frac{a_6 h^6}{16} - \dots \qquad (3)$$

przejście od (1) do (3) jest pierwszym krokiem ekstrapolacji Richardsona

Kombinacja $D(h)$ i $D(h/2)$ jest przybliżeniem L, którego błąd jest rzędu $O(h^4)$ w porównaniu z $O(h^2)$ dla wzoru (1).
Rozumowanie nie zależy od interpretacji L i $D(h)$ może być zastosowane do innych zagadnień.

Przykład 3

Zastosuj pierwszy krok ekstrapolacji Richardsona do znalezienia pochodnej funkcji $f(x) = 2^x$ w punkcie 3 znając dokładne wartości funkcji w punktach: $1, 2, 3, 4, 5$ oraz $h = 2$.

(Rozwiązanie na tablicy)

Ekstrapolacja Richardsona

Teraz rozumujemy podobnie jak przy przejściu z równania (1) do (3).

Oznaczmy $D^{(1)}(h) := \frac{4}{3}D\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3}D(h)$.

Po zastosowaniu wzoru (3) otrzymamy:

$$L = D^{(1)}(h) + b_4 h^4 + b_6 h^6 + \cdots \quad (4)$$

i ogólnie:

$$D^{(k)}(h) := \frac{4^k D^{(k-1)}(\frac{h}{2}) - D^{(k-1)}(h)}{4^k - 1}$$

Ekstrapolacja Richardsona - schemat

Schemat M kroków ekstrapolacji Richardsona:

- Wybieramy h, np. $h = 1$.
- Obliczamy $D(n, 0) := D(h/2^n)$ $(0 \leqslant n \leqslant M)$.
- Dla $k = 1, 2, \ldots, M$ i $n = k, k + 1, \ldots, M$ stosujemy wzór rekurencyjny:

$$D(n,k) := D(n,k-1) + \frac{D(n,k-1) - D(n-1,k-1)}{4k-1}$$
$$= \frac{4D(n,k-1) - D(n-1,k-1)}{4k-1} \qquad (6)$$

Ekstrapolacja Richardsona

Ekstrapolacja Richardsona daje następującą trójkątną tablicę przybliżeń L:

$$\begin{array}{ccccc}
D(0,0) & & & & \\
D(1,0) & D(1,1) & & & \\
D(2,0) & D(2,1) & D(2,2) & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
D(M,0) & D(M,1) & D(M,2) & \cdots & D(M,M)
\end{array}$$

Tablicę, przy założeniu, że funkcja D jest dana, można skonstruować przy użyciu algorytmu:

input h, M
for $n = 0$ **to** M **do**
    $D(n,0) \leftarrow D(h/2^n)$
end do
for $k = 1$ **to** M **do**
    for $n = k$ **to** M **do**
        $D(n,k) \leftarrow D(n,k-1) + \left[\frac{D(n,k-1)-D(n-1,k-1)}{4k-1}\right]$
        output $D(n,k)$
    end do
end do

Przykład 4

$$f(x) = \operatorname{arc\,tg} x, \quad x = \sqrt{2}, \quad f'(x) = (x^2 - 1)^{-1} \quad \Rightarrow \quad f'(\sqrt{2}) = \frac{1}{3}$$

n	D(n, 0)	D(n, 1)	D(n, 2)	D(n, 3)	D(n, 4)
0	0.3926991				
1	0.3487710	0.3341283			
2	0.3371938	0.3333348	0.3332819		
3	0.3342981	0.3333329	0.3333328	0.3333336	
4	0.3335748	0.3333336	0.3333337	0.3333337	0.3333337