

Computació Numèrica

Tema 5.1 - Derivació Numèrica (II)

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtiques
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

28 d'abril de 2020

“Donat el caràcter i la finalitat exclusivament docent i eminentment il·lustrativa de les explicacions a classe d'aquesta presentació, l'autor s'acull a l'article 32 de la Llei de propietat intel·lectual vigent respecte de l'ús parcial d'obres alienes com ara imatges, gràfics o altre material contingudes en les diferents diapositives”



© 2020 by M. Àngela Grau Gotés.

Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-SinDerivadas 4.0 Internacional.

- 1 Introducció
- 2 Comportament de l'error
- 3 Extrapolació de Richardson

Introducció

La derivació numèrica avalua la derivada d'una funció en un punt a partir de valors numèrics d'aquesta funció, sense necessitat per tant de conèixer l'expressió analítica d'aquesta derivada. És molt sensible a petites pertorbacions en les dades o la precisió d'aquestes.

Fórmula endavant $f'(x)$

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

Si aïllem de la igualtat $f'(x)$ s'obté la **fórmula endavant** més un reste de primer ordre $\mathcal{O}(h)$

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

Fórmula enrera $f'(x)$

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

Si aïllem de la igualtat $f'(x)$ s'obté la **fórmula enrera** més un reste de primer ordre $\mathcal{O}(h)$

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

Fórmula centrada $f'(x)$

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

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

Si restem les dues igualtats i aïllem $f'(x)$ s'obté la **fórmula centrada** més un reste de segon ordre $\mathcal{O}(h^2)$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \dots \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

Fórmula centrada $f''(x)$

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

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

Si sumem les dues igualtats i aïllem $f''(x)$ s'obté la **fórmula centrada** més un reste de segon ordre $\mathcal{O}(h^2)$

$$\begin{aligned} f''(x) &= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{f^{(4)}(x)}{12}h^2 + \dots \\ &\approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \end{aligned}$$

Comportament de l'error

Comportament de l'error

L'aparició en moltes fórmules de diferències de quantitats molt properes, amb la corresponent cancel·lació de termes, fa que pensar que pendre passos de derivació h molt petits no millorarà les aproximacions numèriques.

Cal fer atenció als errors d'arrodoniment que apareixen.

Observació

$$\left| f'(t_0) - \frac{\tilde{f}(t_0 + h) - \tilde{f}(t_0)}{h} \right| \leq \frac{2\epsilon}{h} + \frac{h}{2}K, \quad |f''| < K.$$

El pas òptim és el que minimitza l'error total $\left(\Rightarrow h = \left(\frac{4\epsilon}{K} \right)^{1/2} \right)$.

Exemple

Càlcul de la derivada de $\ln(x)$ en $x = 2$

```
f=@(x)log(x);  
k=0:14;  
h=1/10.^k;  
for k=1:15  
    fp(k)=(f(2+h(k))-f(2))/h(k);  
end  
er = abs(fp-0.5);  
taula=[h; fp; er]'
```

La derivació numèrica és un problema molt sensible a petites pertorbacions en les dades o la precisió d'aquestes.

Extrapolació de Richardson

Extrapolació de Richardson

Ordre $\mathcal{O}(h^p)$

Si per p i r , $r > p$ es té una fórmula del tipus

$$F(h) = a_0 + a_1 h^p + \mathcal{O}(h^r)$$

quan $h \rightarrow 0$ el valor a_0 es pot aproximar a partir de dues aproximacions calculades per h i h/q , $q > 0$.

$$F(h) = a_0 + a_1 h^p + \mathcal{O}(h^r)$$

$$F(h/q) = a_0 + a_1 (h/q)^p + \mathcal{O}(h^r)$$

Sistema d'equacions amb dues incògnites, a_0 i a_1 . Multiquem la segona equació per q^p i restem les dues equacions,

$$a_0 = F(h/q) + \frac{F(h/q) - F(h)}{q^p - 1} + \mathcal{O}(h^r)$$

Fórmula per calcular a_0 d'ordre $\mathcal{O}(h^r)$, amb $r > p$. S'ha augmentat l'ordre sense

Taula d'extrapolació

Ordre $\mathcal{O}(h)$

$$N_{j+1}(h) = N_j \left(\frac{h}{q} \right) + \frac{N_j \left(\frac{h}{q} \right) - N_j(h)}{q^j - 1}, \quad j \geq 1.$$

| $\mathcal{O}(h)$ | $\mathcal{O}(h^2)$ | $\mathcal{O}(h^3)$ | $\mathcal{O}(h^4)$ |
|------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 1: $N_1(h)$ | | | |
| 2: $N_1(h/q)$ | 3: $N_2(h)$ | | |
| 4: $N_1(h/q^2)$ | 5: $N_2(h/q)$ | 6: $N_3(h)$ | |
| 7: $N_1(h/q^3)$ | 8: $N_2(h/q^2)$ | 9: $N_3(h/q)$ | 10: $N_4(h)$ |

Taula: Extrapolació de Richardson de $F(h) = N_1 + N_2h + N_3h^2 + \dots$

Extrapolació de Richardson

Ordre $\mathcal{O}(h^2)$

Si per p i r , $r > p$ es té una fórmula del tipus

$$F(h) = a_0 + a_1 h^2 + \mathcal{O}(h^4)$$

quan $h \rightarrow 0$ el valor a_0 es pot aproximar a partir de dues aproximacions calculades per h i h/q , $q > 0$.

$$F(h) = a_0 + a_1 h^2 + a_2 h^4 + \mathcal{O}(h^6)$$

$$F(h/2) = a_0 + a_1 h^2/4 + a_2 h^4/16 + \mathcal{O}(h^6).$$

Multiquem la segona equació per 4 i restem les dues equacions, s'bté

$$a_0 = F(h/2) + \frac{F(h/2) - F(h)}{3} + \mathcal{O}(h^4)$$

Fórmula per calcular a_0 d'ordre $\mathcal{O}(h^r)$, mb $r > p$

Taula d'extrapolació

Ordre $\mathcal{O}(h^2)$

$$N_{j+1}(h) = N_j\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{N_j\left(\frac{h}{2}\right) - N_j(h)}{4^j - 1}, \quad j \geq 1.$$

| $\mathcal{O}(h^2)$ | $\mathcal{O}(h^4)$ | $\mathcal{O}(h^6)$ | $\mathcal{O}(h^8)$ |
|----------------------|----------------------|----------------------|---------------------|
| 1: $N_1(h)$ | | | |
| 2: $N_1(h/2)$ | 3: $N_2(h)$ | | |
| 4: $N_1(h/4)$ | 5: $N_2(h/2)$ | 6: $N_3(h)$ | |
| 7: $N_1(h/8)$ | 8: $N_2(h/4)$ | 9: $N_3(h/2)$ | 10: $N_4(h)$ |

Taula: Extrapolació de Richardson de $F(h) = N_1 + N_2h^2 + N_3h^4 \dots$