

Computació Numèrica

Tema 5.1 - Derivació Numèrica

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtica Aplicada II
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

21 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”

Índex

- 1 Introducció
- 2 Fórmules derivada primera
- 3 Fórmules derivada segona
- 4 Fórmules derivades ordre superior
- 5 Comportament de l'error
- 6 Extrapolació de Richardson
- 7 Derivades parcials

Taula de dades

L'any 2009 (a Berlín) Usain Bolt va situar el record dels 100m en 9.58s. Les dades de la carrera són les següents

r	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
t(r)	0	1.85	2.89	3.78	4.64	5.49	6.31	7.11	7.92	8.74	9.58

on la primera fila és la distància recorreguda en metres i la segona el temps emprat en segons

(font: NBC, <http://www.universalsports.com/news/article/newsid=385633.html>).

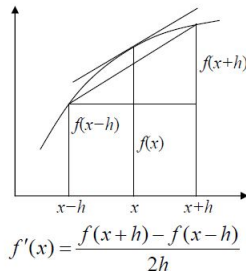
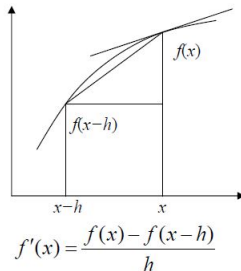
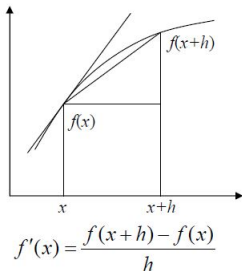
Introducció

El problema és calcular la derivada d'una funció de la que sols coneixem un nombre finit de valors. Els dos mètodes més usuals de resolució són:

- Derivar el polinomi d'interpolació construït mitjançant algun dels mètodes estudiats en el capítol previ. Les fórmules obtingudes d'aquesta manera reben el nom de fórmules de derivació interpolatòria.
- Calcular directament la derivada utilitzant per a això aproximacions de la funció mitjançant els polinomis de Taylor. Les fórmules obtingudes d'aquesta manera reben el nom de fórmules de diferències finites.

Primeres fórmules - Geomètricament

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \implies f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$



Primeres fórmules

Si sigui $f : D \subseteq \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}$ una funció real de variable real derivable dues/tres vegades amb continuïtat en un entorn de x , de la fórmula de Taylor s'obté:

$$\frac{f(x) - f(x-h)}{h} - f'(x) = \frac{h}{2}f''(\xi) \rightarrow 0 \quad \text{si } (h \rightarrow 0),$$

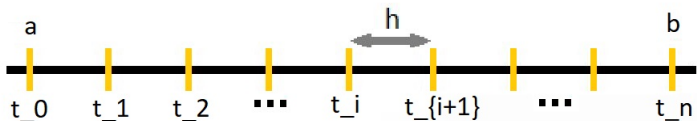
$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) = \frac{h}{2}f''(\xi) \rightarrow 0 \quad \text{si } (h \rightarrow 0),$$

$$\frac{f(x+h/2) - f(x-h/2)}{h} - f'(x) = \frac{h^2}{24}f^{(3)}(\xi) \rightarrow 0 \quad \text{si } (h \rightarrow 0).$$

Discretització

Generalment es divideix l'interval on es calcula en punts equiespaïats: donat n prenem

$$t_i = a + ih, \text{ per } i = 0, 1, 2, \dots, n, \text{ amb } h = t_i - t_{i-1} = \frac{b - a}{n}.$$



Els mètodes ens permetran trobar la derivada aproximada en $f'_i \simeq f'(t_i)$ en els punts del domini.

Fórmules derivada primera.

Donat h , siguin $t_k = t_0 + k \cdot h$, i $f_k = f(t_k)$, per $k \in \mathbb{Q}$

$$\textcircled{1} \quad f'(t_0) = \frac{f_1 - f_0}{h} + \mathcal{O}(h) \quad f'(t_0) = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} + \mathcal{O}(h)$$

$$\textcircled{2} \quad f'(t_0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\textcircled{3} \quad f'(t_0) = \frac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \quad f'(t_0) = \frac{3f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$\textcircled{4} \quad f'(t_0) = \frac{-f_2 + 8f_1 - 8f_{-1} + f_{-2}}{12h} + \mathcal{O}(h^4)$$

Fórmulas derivada segona

$$① \quad f''(t_0) = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2} + \mathcal{O}(h)$$

$$② \quad f''(t_0) = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$③ \quad f''(t_0) = \frac{-f_3 + 4f_2 - 5f_1 + 2f_0}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$④ \quad f''(t_0) = \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2} + \mathcal{O}(h^4)$$

Fórmulas derivades ordre superior

$$① \quad f'''(t_0) = \frac{f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0}{h^3} + \mathcal{O}(h)$$

$$② \quad f'''(t_0) = \frac{f_2 - 2f_1 + 2f_{-1} - f_{-2}}{8h^3} + \mathcal{O}(h^2)$$

$$③ \quad f^{(4)}(t_0) = \frac{f_2 - 4f_1 + 6f_0 - 4f_{-1} + f_{-2}}{h^4} + \mathcal{O}(h^2)$$

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 mal condicionat.

Extrapolació de Richardson

Extrapolació de Richardson

1 Si es coneix l'**ordre de l'error**, el valor exacte es pot aproximar a partir de dues aproximacions successives amb valors h i $2h$.

2 Diem $D_2(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$ i calculem

3 $f'(x) = D_2(h) + Ch^2$ i $f'(x) = D_2(2h) + C4h^2$.

4 Restem la segona equació de la primera multiplicada per 4:

5 $3f'(x) \approx 4D_2(h) - D_2(2h)$, llavors $f'(x) \approx \frac{4D_2(h) - D_2(2h)}{3}$

6 El resultat és

$$f'(x) \approx \frac{-f(x+2h) + 8f(x+h) - 8f(x-h) + f(x-2h)}{12h}$$

Taula d'extrapolació

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

$\mathcal{O}(h^2)$	$\mathcal{O}(h^4)$	$\mathcal{O}(h^6)$	$\mathcal{O}(h^8)$
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 $M = N_1(h) + K_1 h^2 + \dots$

Derivades parcials

Per una funció de dues variables que només es coneixen

$$u_{ij} = u(x_i, y_j), \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq m,$$

valors en la malla equiespada, $h = x_{i+1} - x_i$ i $k = y_{i+1} - y_i$

Les fórmules centrades per les derivades primeres són:

$$u_x(x_i, y_j) \approx \frac{1}{2h} (u_{i+1j} - u_{ij})$$

$$u_y(x_i, y_j) \approx \frac{1}{2k} (u_{ij+1} - u_{ij})$$

Le fórmules centrades per les derivades segones són:

$$u_{xx}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{h^2} (u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j})$$

$$u_{yy}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{k^2} (u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1})$$

$$u_{xy}(x_i, y_j) \approx \frac{1}{4hk} (u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1})$$

$$h = x_{i+1} - x_i, \quad 1 \leq i \leq n, \quad k = y_{j+1} - y_j, \quad 1 \leq j \leq m.$$