# Computació Numèrica

# Tema 5.1 - Derivació Numèrica (II)

M. Àngela Grau Gotés

Departament de Matemàtiques
Universitat Politècnica de Catalunya · BarcelonaTech.

27 d'abril de 2020

# Drets d'autor

"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

# Introducció

La derivaciò 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 $f'(x)$

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

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

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

# Fórmula enrera $f'(x)$

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

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

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

# Fórmula centrada $f'(x)$

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

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

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

# Fórmula centrada $f''(x)$

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

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

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

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{f^{(4)}(x)}{12}h^2 + \cdots$$

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

# 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

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

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 $h \to 0$ 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

# 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 $h \to 0$ 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 $\mathcal{O}(h^2)$

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

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

Taula: Extrapolació de Richardson de $F(h) = N_1 + N_2 h^2 + N_3 h^6 \ldots$