Wszystkie udostępniane materiały, skrypty, notatniki są wyłącznie przeznaczone do użytku prywatnego w celu łatwiejszego opanowania wiedzy.

Nie wolno ich rozprzestrzeniać, ani umieszczać w Internecie.

Przypomnienie

Twierdzenie Taylora dla funkcji jednej zmiennej.
Jeżeli $y = f(x)$ jest funkcją ciągłą w przedziale $[a, a+h]$ i ma w tym przedziale ciągłe pochodne do rzędu $n-1$ włącznie, przy czym wewnątrz tego przedziału istnieje pochodna rzędu n, to zachodzi:

$$f(a+h) = f(a) + \frac{h}{1!}f'(a) + \frac{h^2}{2!}f''(a) + \cdots$$
$$+ \frac{h^{n-1}}{(n-1)!}f^{(n-1)}(a) + \frac{h^n}{n!}f^n(a+\theta h)$$

gdzie $0 < \theta < 1$. Wielkość h może przyjmować wartości dodatnie jak i ujemne.

Różniczkowanie numeryczne

Różniczkowanie numeryczne stosujemy gdy: dla danej funkcji $y = f(x)$ chcemy wyliczyć jej pochodne w punkcie $x = x_k$.

Dana funkcja $f(x)$ jest rozumiana w ten sposób, iż mamy algorytm/formułę umożliwiają wyliczenie wartości funkcji lub zbiór punktów $(x_i, y_i), i = 0,1, \dots, n$.

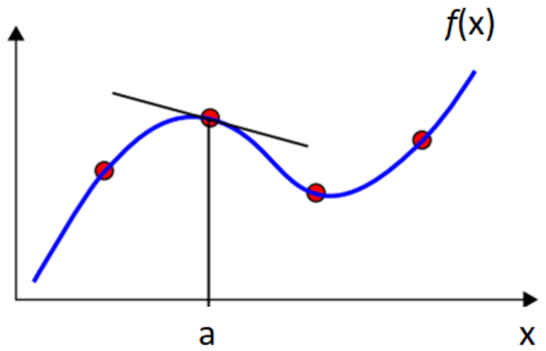
Numeryczne różniczkowanie jest powiązane z interpolacją (o tym na wykładzie dotyczącym interpolacji).

Różniczkowanie numeryczne nie jest procesem szczególnie dokładnym. Jest to związane z błędami zaokrąglania oraz błędami interpolacji. Z tego powodu pochodna funkcji nigdy nie może być obliczona z taką samą dokładnością jak sama funkcja.

Różniczkowanie numeryczne

Interpretacja geometryczna

nachylenie stycznej do funkcji w punkcie a



Wyznaczanie wielkości definiowanych różniczką

- czułość przyrządu, nachylenie charakterystyki przetwarzania, wrażliwość układu
- prędkość i przyspieszenie wyznaczane na podstawie sygnału położenia
- nachylenie (gradient) w metodach poszukiwania minimum funkcji

Różniczkowanie numeryczne

Wyprowadzenie metody różnic skończonych dla pochodnych funkcji $f(x)$ bazuje na rozwinięciu szeregu Taylora dla $f(x)$ w przód i w tył:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) - \cdots$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) + \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f(x-2h) = f(x) - 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) - \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{(4)}(x) - \cdots$$

Różniczkowanie numeryczne

Możemy również zapisać sumy i różnice rozwinięć:

SUMY TYLKO PARZYSTE POCHODNE

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

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

RÓŻNICE TYLKO NIEPARZYSTE POCHODNE

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

$$f(x+2h)-f(x-2h)=4hf'(x)+\frac{8h^3}{3}f'''(x)+\cdots$$

RN – różnice centralne

Wyznaczmy $f'(x)$ z równania:

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

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

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

Błąd odcięcia w notacji dużego O

Przybliżenie pierwszej pochodnej
RÓŻNICĄ CENTRALNĄ

RN – różnice centralne

Analogicznie wyznaczymy $f''(x)$ z równania:

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

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

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

Błąd odcięcia w notacji dużego O

Przybliżenie drugiej pochodnej
RÓŻNICĄ CENTRALNĄ

RN – różnice centralne

Różnice centralne dla wyższych pochodnych można wyznaczyć analogicznie na podstawie rozwinięć:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) - \cdots$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) + \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots$$

$$f(x-2h) = f(x) - 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) - \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{(4)}(x) - \cdots$$

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + \frac{h^4}{1}$$

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

$$f(x+2h) + f(x-2h) = 2f(x) + 4h^2 f''(x) +$$

$$f(x+2h) - f(x-2h) = 4hf'(x) + \frac{8h^3}{3}f'''(x$$

	$f(x-2h)$	$f(x-h)$	$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$
$2hf'(x)$		-1	0	1	
$h^2f''(x)$		1	-2	1	
$2h^3f'''(x)$	-1	2	0	-2	1
$h^4f^{(4)}(x)$	1	-4	6	-4	1

RN – różnice niecentralne

Różnice centralne nie zawsze są użyteczne.

Załóżmy, że mamy zbiór próbek $x_0, x_1, \dots, x_n$. Metoda różnic centralnych wykorzystuje próbkę poprzednią i następną. W konsekwencji nie będziemy w stanie wyznaczyć pochodnej dla x_0 i x_n

$\Downarrow$

Rozwiązanie: różnice niecentralne -> w przód i w tył (różnica progresywna, wsteczna). Możemy je uzyskać analogicznie jak r.c.

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots$$

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

RN – różnice niecentralne, pierwsze

RÓŻNICA WSTECZNA	RÓŻNICA PROGRESYWNA
$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h)$$	$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

RZĄD *h*

Różnica Wsteczna, pierwsza, *O(h)*						**Różnica Progresywna, pierwsza, *O(h)***				
$f(x-4\mathrm{h})$	$f(x-3h)$	$f(x-2h)$	$f(x-h)$	$f(x)$		$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$	$f(x+3h)$	$f(x+4h)$
			-1	1	$hf'(x)$	-1	1			
		1	-2	1	$h^2f''(x)$	1	-2	1		
	-1	3	-3	1	$h^3f'''(x)$	-1	3	-3	1	
1	-4	6	-4	1	$h^4f^{(4)}(x)$	1	-4	6	-4	1

Wada wszystkich wzorów na różnice pierwsze:
niska dokładność (błąd rzędu *O*(*h*))

RN – różnice niecentralne, drugie

Żeby uzyskać różnice niecentralne z błędem *O(h²)* musimy zachować więcej składników rozwinięcia szeregu Taylora.

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + \cdots$$

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

Wyeliminujmy $f''(x)$ mnożąc pierwsze równanie przez 4 i odejmując stronami:

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

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

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

RÓŻNICA PROGRESYWNA, DRUGA

RN – różnice niecentralne, drugie

Różnice niecentralne z błędem *O(h²)* dla wyższych pochodnych

Różnica Wsteczna, druga *O(h²)*							**Różnica Progresywna, druga *O(h²)***					
$f(x-5\mathrm{h})$	$f(x-4\mathrm{h})$	$f(x-3h)$	$f(x-2h)$	$f(x-h)$	$f(x)$		$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$	$f(x+3h)$	$f(x+4h)$	$f(x-5\mathrm{h})$
			1	**-4**	**3**	$2hf'(x)$	**-3**	**4**	**-1**			
		-1	**4**	**-5**	**2**	$h^2f''(x)$	**2**	**-5**	**4**	**-1**		
	3	**-14**	**24**	**-18**	**5**	$2h^3f'''($	**-5**	**18**	**-24**	**14**	**-3**	
-2	**11**	**-24**	**26**	**-14**	**3**	$h^4f^{(4)}(x$	**3**	**-14**	**26**	**-24**	**11**	**-2**

RN - przykład

Pochodna funkcji

Przykład:
`W2_1_FDM.ipynb`

RN – metody różnic, błędy

- We wszystkich wyrażeniach w metodzie różnic, suma współczynników wynosi zero.
- Uwaga na błędy zaokrągleń. Jeżeli *h* jest bardzo małe (teoretycznie dobrze), to wartości $f(x), f(x \pm h), f(x \pm 2h)$, ... będą w przybliżeniu równe. Ryzyko utraty cyfr znaczących.
- Sytuację może polepszyć stosowanie podwójnej precyzji oraz wyrażeń z błędem $O(h^2)$.

RN – przykład

Dla danych pomiarowych:

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4
$f(x)$	0.0000	0.0819	0.1341	0.1646	0.1797

wyznacz $f'(x), f''(x)$ dla $x = 0$ i $x = 2$ z błędem $O(h^2)$.

Dla $x = 0$ stosujemy różnicę progresywną:

$$f'(0) = \frac{-3f(0) + 4f(0.1) - f(0.2)}{2(0.1)} = \frac{-3(0) + 4(0.0819) - 0.1341}{0.2} = 0.967$$

$$f''(0) = \frac{2f(0) - 5f(0.1) + 4f(0.2) - f(0.3)}{(0.1)^2}$$

$$= \frac{2(0) - 5(0.0819) + 4(0.1341) - 0.1646}{(0.1)^2} = -3.77$$

Dla $x = 2$ $centralną$:

$$f'(0.2) = \frac{-f(0.1) + f(0.3)}{2(0.1)} = \frac{-0.0819 + 0.1646}{0.2} = 0.4135$$

$$f''(0.2) = \frac{f(0.1) - 2f(0.2) + f(0.3)}{(0.1)^2} = \frac{0.0819 - 2(0.1341) + 0.1646}{(0.1)^2} = -2.17$$

Ekstrapolacja Richardsona

- Załóżmy, że mamy przybliżony sposób obliczenia pewnej wielkości *G*.
- Dodatkowo załóżmy, że wynik zależy od parametru *h*.
- Możemy tą sytuację opisać wzorem $G = g(h) + E(h)$ BŁĄD

  WARTOŚĆ PRYBLIŻONA
- Ekstrapolacja Richardsona może usunąć błąd jeżeli jest on postaci: $E(h) = ch^p$

  c, *p* - stałe
- Wyznaczamy $g(h)$ dla jakiegoś h np. $h = h_1$ oraz $h = h_2$
- Otrzymujemy $G = g(h_1) + ch_1^p$ oraz $G = g(h_2) + ch_2^p$
- Eliminując *c* otrzymujemy: $G = \dfrac{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p g(h_2) - g(h_1)}{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p - 1}$

Ekstrapolacja Richardsona

- Wyrażenie na Ekstrapolację Richardsona: $G = \frac{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p g(h_2) - g(h_1)}{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^p - 1}$

- W praktyce często przyjmuje się $h_2 = \frac{h_1}{2}$

- $G = \frac{2^p g\left(\frac{h_1}{2}\right) - g(h_1)}{2^p - 1}$

Wróćmy do przykładu -> Dla danych pomiarowych:

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4
$f(x)$	0.0000	0.0819	0.1341	0.1646	0.1797

wyznacz $f'(x), f''(x)$ dla $x = 0\ i\ x = 2$ z błędem $O(h^2)$.

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4
$f(x)$	0.0000	0.0819	0.1341	0.1646	0.1797

Ekstrapolacja Richardsona

- Dla tych samych danych wyznaczmy $f'(x)$ dla $x = 0$ tak dokładnie jak możemy.
- Wyznaczamy dwie różnice progresywne z błędem rzędu *O(h^2), h=0.2 oraz h=0.1*

	Różnica Progresywna, druga *O(h^2)*					
	$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$	$f(x+3h)$	$f(x+4h)$	$f(x-5\mathrm{h})$
$2hf'(x)$	**-3**	**4**	**-1**			
$h^2f''(x)$	**2**	**-5**	**4**	**-1**		
$2h^3f'''(x)$	**-5**	**18**	**-24**	**14**	**-3**	
$h^4f^{(4)}(x)$	**3**	**-14**	**26**	**-24**	**11**	**-2**

$$g(0.2) = \frac{-3f(0) + 4f(0.2) - f(0.4)}{2(0.2)} = \frac{3(0) + 4(0.1341) - 0.1797}{0.4} = 0.8918$$

$$g(0.1) = \frac{-3f(0) + 4f(0.1) - f(0.2)}{2(0.1)} = \frac{-3(0) + 4(0.0819) - 0.1341}{0.2} = 0.9675$$

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4
$f(x)$	0.0000	0.0819	0.1341	0.1646	0.1797

Ekstrapolacja Richardsona

$$g(0.2) = \frac{-3f(0) + 4f(0.2) - f(0.4)}{2(0.2)} = \frac{3(0) + 4(0.1341) - 0.1797}{0.4} = 0.8918$$

$$g(0.1) = \frac{-3f(0) + 4f(0.1) - f(0.2)}{2(0.1)} = \frac{-3(0) + 4(0.0819) - 0.1341}{0.2} = 0.9675$$

- W obu formułach błąd jest rzędu $O(\mathrm{h}^2)$ $E(h) = c_1 h^2 + c_2 h^4 + \cdots$
- Używając Ekstrapolacji Richardsona możemy usunąć dominujący składnik błędu $G = \frac{2^p g\left(\frac{h_1}{2}\right) - g(h_1)}{2^p - 1}$

$$f'(0) \approx G = \frac{2^2 g(0.1) - g(0.2)}{2^2 - 1} = \frac{4(0.9675) - 0.8918}{3} = 0.9927$$

$O(\mathrm{h}^4)$

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe wyznaczamy analogicznie jak w przypadku funkcji jednej zmiennej. Przykładowo, dla $f(x, y)$ równomiernie próbkowanej, pierwsza pochodna cząstkowa może być przedstawiona z wykorzystaniem różnicy centralnej:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x - \Delta x, y)}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial f}{\partial y} = \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y - \Delta y)}{2\Delta y}$$

Wszystkie pozostałe, omówione metody można wykorzystać w analogiczny sposób.

Pochodne cząstkowe mieszane

Dla wyższych rzędów możemy potrzebować wyznaczyć pochodne mieszane. Przykładowo, dla $f(x, y)$ równomiernie próbkowanej, pochodna mieszana będzie postaci:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)$$

Żeby ją policzyć, najpierw policzymy w kierunku x, a następnie w kierunku y:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\frac{\partial f}{\partial y}(x + \Delta x, y) - \frac{\partial f}{\partial y}(x - \Delta x, y)}{2\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\frac{f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x + \Delta x, y - \Delta y)}{2\Delta y} - \frac{f(x - \Delta x, y + \Delta y) - f(x - \Delta x, y - \Delta y)}{2\Delta y}}{2\Delta x}$$

Pochodne cząstkowe mieszane

Finalnie po uproszczeniu

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\dfrac{f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x + \Delta x, y - \Delta y)}{2\Delta y} - \dfrac{f(x - \Delta x, y + \Delta y) - f(x - \Delta x, y - \Delta y)}{2\Delta y}}{2\Delta x}$$

otrzymujemy:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x + \Delta x, y - \Delta y) - f(x - \Delta x, y + \Delta y) + f(x - \Delta x, y - \Delta y)}{4\Delta x \Delta y}$$

Przykład:
`W2_2_Gradient.ipynb`

RN

- Przy okazji innych wykładów będą poruszane kwestie związane z różniczkowaniem:
  - Wykład dotyczący interpolacji:
    - różniczkowanie z wykorzystaniem interpolacji
    - wyznaczanie pochodnych nierównomiernie próbkowanych