CURS #12

CONȚINUTUL CURSULUI #12:

VI. Derivarea numerică.

VI.1. Diferențe finite progresive, regresive și centrale pentru $f'(x)$.

Fie $f \in C^2([a,b])$. Din Teorema lui Taylor rezultă, pentru $h > 0$:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + f''(\xi)\frac{h^2}{2}, \ \xi \in (x, x+h) \Rightarrow$$

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

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{1}$$

Relația (1) se numește **formula de apoximare prin diferențe finite progresive** pentru $f'(x)$.

Are loc estimarea erorii de trunchiere:

$$|e_t| = \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right| = \frac{h}{2}|f''(\xi)| \le \frac{h}{2}M = O(h)$$

unde $M = \max_{t\in[x,x+h]} |f''(t)|$. Precizăm că orice funție continuă pe un interval închis este și mărginită.

Din Teorema lui Taylor rezultă, pentru $h > 0$:

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + f''(\xi)\frac{h^2}{2}, \xi \in (x-h, x) \Rightarrow$$

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

Obținem astfel **formula de aproximare prin diferențe finite regresive** pentru $f'(x)$:

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

cu eroarea de trunchiere, e_t:

$$|e_t| = \left| f'(x) - \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \right| = \frac{h}{2}|f''(\xi)| \le \frac{h}{2}M = O(h)$$

unde $M = \max_{t\in[x-h,x]} |f''(t)|$.

Fie $f \in C^3[a,b]$. Din Teorema lui Taylor rezultă, pentru $h > 0$:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2} + f^{(3)}(\xi_1)\frac{h^3}{6},$$
$$\xi_1 \in (x, x+h)$$
$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2} - f^{(3)}(\xi_2)\frac{h^3}{6},$$
$$\xi_2 \in (x-h, x)$$

Scăzând a doua relație din prima și rearanjând termenii, obținem:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \left[f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2)\right]\frac{h^2}{12},$$
$$\xi_1 \in (x, x+h), \quad \xi_2 \in (x-h, x)$$

Obținem astfel **formula de aproximare prin diferențe finite centrale** pentru $f'(x)$:

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

cu erorea de trunchiere, e_t:

$$\begin{aligned} |e_t| &= \left| f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \right| = \frac{h^2}{12} |f^{(3)}(\xi_1) + f^{(3)}(\xi_2)| \\ &\le \frac{h^2}{12} \left(|f^{(3)}(\xi_1)| + |f^{(3)}(\xi_2)| \right) \le \frac{h^2}{12} M = O(h^2) \end{aligned}$$

unde $M = \max_{t \in [x, x+h]} |f'''(t)| + \max_{t \in [x-h, x]} |f'''(t)|$.

VI.2. Diferențe finite centrale pentru $f''(x)$.

Fie $f \in C^4[a, b]$. Din Teorema lui Taylor rezultă, pentru $h > 0$:

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2} + f^{(3)}(x)\frac{h^3}{6} + f^{(4)}(\xi_1)\frac{h^4}{24}, \\ &\quad \xi_1 \in (x, x+h) \\ f(x-h) &= f(x) - f'(x)h + f''(x)\frac{h^2}{2} - f^{(3)}(x)\frac{h^3}{6} + f^{(4)}(\xi_2)\frac{h^4}{24}, \\ &\quad \xi_2 \in (x-h, x) \end{aligned}$$

Adunând relațiile de mai sus și rearanjând termenii, obținem:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \left[f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2) \right] \frac{h^2}{24},$$
$$\xi_1 \in (x, x+h), \quad \xi_2 \in (x-h, x)$$

Formula de aproximare prin diferențe finite centrale pentru $f''(x)$ este:

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

cu **eroarea de trunchiere**, e_t:

$$|e_t| = \left| f''(x) - \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \right| \le \frac{h^2}{24} M = O(h^2)$$

unde $M = \max_{t \in [x, x+h]} |f^4(t)| + \max_{t \in [x-h, x]} |f^4(t)|$.

VI.3. Metoda de extrapolare Richardson.

Dacă avem dată o formulă de aproximare a derivatei $f'(x)$ de forma $f'(x) = \phi_1(x, h) + O(h)$, atunci în baza funcției ϕ_1 se poate construi recurent un șir de funcții $(\phi_n)_{n>1}$ care aproximează derivata $f'(x)$ cu ordinul de aproximare $O(h^n)$.

Pentru simplificare vom evita scrierea variabilei x ca argument al funcției ϕ_n. Avem astfel:

$$\begin{aligned} f'(x) &= \phi_1(h) + a_1 h + a_2 h^2 + a_3 h^3 + \dots \\ &= \phi_1(h) + O(h) \end{aligned} \tag{3}$$

Cum (3) are loc pentru orice valoare $h > 0$, scriem formula de aproximare (3) pentru $h/2$:

$$f'(x) = \phi_1\left(\frac{h}{2}\right) + a_1\left(\frac{h}{2}\right) + a_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + a_3\left(\frac{h}{2}\right)^3 + \dots \tag{4}$$

Efectuăm următoarea combinație: $2^1 \cdot$ (4) $-1 \cdot$ (3). Rezultă:

$$(2^1-1)f'(x) = \left[2^1\phi_1\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_1(h)\right] + a_2\left(\frac{1}{2}-1\right)h^2 + a_3\left(\frac{1}{2^2}-1\right)h^3 + \ldots$$

$$f'(x) = \phi_2(h) + b_2h^2 + b_3h^3 + b_4h^4 + \ldots = \phi_2(h) + O(h^2) \tag{5}$$

unde

$$\begin{aligned}\phi_2(h) &:= \frac{1}{2^1-1}\left[2^1\phi_1\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_1(h)\right] \\ &= \phi_1\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^1-1}\left[\phi_1\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_1(h)\right]\end{aligned} \tag{6}$$

Cum relația (5) are loc pentru orice $h > 0$, scriem formula de aproximare (5) pentru $h/2$:

$$f'(x) = \phi_2\left(\frac{h}{2}\right) + b_2\left(\frac{h}{2}\right)^2 + b_3\left(\frac{h}{2}\right)^3 + b_4\left(\frac{h}{2}\right)^4 + \ldots \tag{7}$$

Efectuăm următoarea combinație: $2^2\cdot$ (7) $-1\cdot$ (5). Rezultă:

$$f'(x) = \phi_3(h) + c_3h^3 + c_4h^4 + c_5h^5 + \ldots = \phi_3(h) + O(h^3) \tag{8}$$

unde

$$\begin{aligned}\phi_3(h) &:= \frac{1}{2^2-1}\left[2^2\phi_2\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_2(h)\right] \\ &= \phi_2\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^2-1}\left[\phi_2\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_2(h)\right]\end{aligned} \tag{9}$$

Prin inducție după $n \geq 2$ se poate demonstra formula de aproximare pentru $f'(x)$:

$$f'(x) = \phi_n(h) + d_nh^n + d_{n+1}h^{n+1} + d_{n+2}h^{n+2} + \ldots = \phi_n(h) + O(h^n) \tag{10}$$

unde

$$\begin{aligned}\phi_n(h) &:= \frac{1}{2^{n-1}-1}\left[2^{n-1}\phi_{n-1}\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_{n-1}(h)\right] \\ &= \phi_{n-1}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2^{n-1}-1}\left[\phi_{n-1}\left(\frac{h}{2}\right) - \phi_{n-1}(h)\right]\end{aligned} \tag{11}$$

Vom adopta următoarea notație

$$Q_{ij} = \phi_j\left(\frac{h}{2^{i-j}}\right) \tag{12}$$

Cu această convenție, conform metodei inductive

$$\begin{aligned}Q_{ij} &= \phi_j\left(\frac{h}{2^{i-j}}\right) = \phi_{j-1}\left(\frac{h}{2^{i-j+1}}\right) \\ &+ \frac{1}{2^{j-1}-1}\left(\phi_{j-1}\left(\frac{h}{2^{i-j+1}}\right) - \phi_{j-1}\left(\frac{h}{2^{i-j}}\right)\right) \\ &= \phi_{j-1}\left(\frac{h}{2^{i-(j-1)}}\right) \\ &+ \frac{1}{2^{j-1}-1}\left(\phi_{j-1}\left(\frac{h}{2^{i-(j-1)}}\right) - \phi_{j-1}\left(\frac{h}{2^{i-1-(j-1)}}\right)\right)\end{aligned}$$

$$Q_{ij} = Q_{i,j-1} + \frac{1}{2^{j-1}-1}(Q_{i,j-1} - Q_{i-1,j-1}) \tag{13}$$

Vom da în continuare următorul tabel:

$h/2^n$	$O(h)$	$O(h^2)$	$O(h^3)$	$O(h^4)$	$O(h^5)$
h	$\boxed{\phi_1(h)}$ $\searrow$				
$h/2$	$\phi_1(h/2)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\boxed{\phi_2(h)}$ $\searrow$			
$h/2^2$	$\phi_1(h/2^2)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\phi_2(h/2)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\boxed{\phi_3(h)}$ $\searrow$		
$h/2^3$	$\phi_1(h/2^3)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\phi_2(h/2^2)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\phi_3(h/2)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\boxed{\phi_4(h)}$ $\searrow$	
$h/2^4$	$\phi_1(h/2^4)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\phi_2(h/2^3)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\phi_3(h/2^2)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\phi_4(h)$ $\longrightarrow$ $\searrow$	$\boxed{\phi_5(h)}$ $\searrow$
...	...	...	...	...	...

Conform acestui tabel elementele de pe diagonala principală aproximează derivata $f'(x)$ cu ordinul de aproximare egal cu numărul coloanei.

$h/2^n$	$O(h)$	$O(h^2)$	$O(h^3)$	$O(h^4)$	$O(h^5)$
h	$\boxed{\phi_1(h) = Q_{11}}$				
$h/2$	$\phi_1(h/2) = Q_{21}$	$\boxed{\phi_2(h) = Q_{22}}$			
$h/2^2$	$\phi_1(h/2^2) = Q_{31}$	$\phi_2(h/2) = Q_{32}$	$\boxed{\phi_3(h) = Q_{33}}$		
$h/2^3$	$\phi_1(h/2^3) = Q_{41}$	$\phi_2(h/2^2) = Q_{42}$	$\phi_3(h/2) = Q_{43}$	$\boxed{\phi_4(h) = Q_{44}}$	
$h/2^4$	$\phi_1(h/2^4) = Q_{51}$	$\phi_2(h/2^3) = Q_{52}$	$\phi_3(h/2^2) = Q_{53}$	$\phi_4(h/2) = Q_{54}$	$\boxed{\phi_5(h) = Q_{55}}$
...	...	...	...	...	...

ALGORITM (Formula de extrapolare Richardson)

Date de intrare: f; x; h; n.
Date de ieșire: df.

STEP 1: Se defineşte funcţia $\phi = \phi(x, h)$;
  for $i = 1 : n$ do
    $Q_{i1} = \phi(x, h/2^{i-1})$;
  endfor
STEP 2: for $i = 2 : n$ do
    for $j = 2 : i$ do
      Determină Q_{ij} conform (13);
    endfor
  endfor
STEP 3: $df = Q_{nn}$

Observaje: Algoritmul Richardson poate fi aplicat și pentru aproximarea derivatei de ordinul doi. Fiind dată o formulă de aproximare de ordinul doi pentru $f''(x)$ cu ordinul de aproximare $O(h^2)$, în calculul matricei Q se va suprima ultima coloană. Astfel, pentru evaluarea derivatei de ordinul 2 cu ordinul de aproximare $O(h^n)$ se va returna valoarea componentei $Q_{n-1,n-1}$.