Spis treści

Spis treści

Spis treści

Spis treści

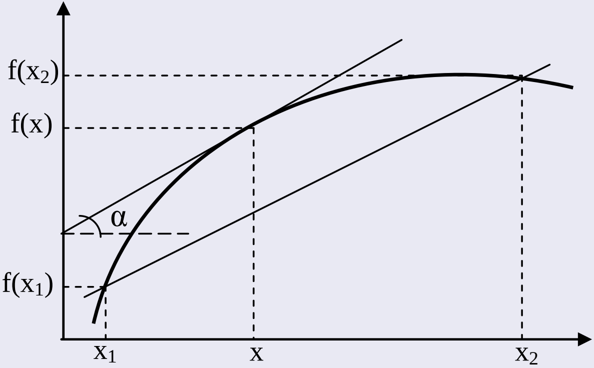
Spis treści

Literatura

1. Baron B., Piątek Ł., Metody numeryczne w C++ Builder, Helion, Gliwice, 2004
2. Fortuna Z., Macukow B., Wąsowski J., Metody numeryczne, WNT, Warszawa, 1993
3. Kosma Z., Metody numeryczne dla zastosowań inżynierskich, Politechnika Radomska, Radom, 2008
4. Povstenko J., Wprowadzenie do metod numerycznych, Akademicka Oficyna Wydawnicza Exit, Warszawa, 2005
5. Ralston A., Wstęp do analizy numerycznej, PWN, Warszawa, 1983
6. Kącki E., Małolepszy A., Romanowicz A., Metody numeryczne dla inżynierów, Wyższa Szkoła Informatyki w Łodzi, Łódź, 2005
7. Vetterling W.T., Teukolsky S.A., Press W.H., Flannery B.P., Numerical Recipes, Cambridge University Press, 2003
8. Wikipedia

Dlaczego różniczkujemy numeryczne

Definicja pochodnej



Rys. 1: Definicja pochodnej

Dlaczego różniczkujemy numeryczne

Definicja pochodnej

$$\frac{d\,f(x)}{dx} = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{1}$$

gdzie $h = x_2 - x_1$

Podstawowe wzory

$$\begin{gathered} c' = 0; \quad x' = 1; \quad (x^n)' = nx^{n-1}; \quad (1/x^n)' = -(n/x^{n+1}); \\ (\sqrt{x})' = 1/(2\sqrt{x}); \quad (e^x)' = e^x; \quad (a^x)' = a^x \ln a; \\ (\ln x)' = 1/x; \quad (\sin x)' = \cos x; \quad (\cos x)' = -\sin x; \\ (\mathrm{tg}\, x)' = 1/cos^2 x; \quad (\mathrm{ctg}\, x)' = -1/\sin^2 x \end{gathered} \tag{2}$$

Dlaczego różniczkujemy numeryczne

Dwie trudności

Potrzeba zastosowania metod numerycznych do różniczkowania pojawia się w dwu przypadkach:

1. funkcja jest określona w postaci stablicowanej;
2. analityczna postać funkcji jest bardzo skomplikowana.

Rozwiązanie: w interesującym nas przedziale $[a, b]$ zastępujemy funkcję $f(x)$ przez jej funkcję interpolacyjną $W(x)$ i stosujemy wzory na przybliżone wartości:

$$f(x) \simeq W(x); \quad f'(x) \simeq W'(x); \ldots f^{(m)}(x) \simeq W^{(m)}(x)$$

UWAGA: z faktu, że błąd interpolacji jest mały, wcale nie wynika że błąd pochodnej też jest mały! Może być wielki!

Wzór interpolacyjny Newtona

$$N_n(x) = y_0 + q\triangle y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\triangle^2 y_0 + \\ \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\triangle^3 y_0 + \ldots + \frac{q(q-1)\ldots(q-n+1)}{n!}\triangle^n y_0 \tag{3}$$

gdzie $y_0 = f(x_0)$, $q = \dfrac{x - x_0}{h}$

Pochodne w interpolacji Newtona

$$f'(x) \simeq N_n'(x) = \frac{1}{h}\left[\triangle y_0 + \frac{1}{2!}(2q-1)\triangle^2 y_0 + \right.$$
$$+ \frac{1}{3!}(3q^2 - 6q + 2)\triangle^3 y_0 + \tag{4}$$
$$\left. + \frac{1}{4!}(4q^3 - 18q^2 + 22q - 6)\triangle^4 y_0 + \ldots \right]$$

$$f''(x) \simeq N_n''(x) = \frac{1}{h^2}\left[\triangle^2 y_0 + (q-1)\triangle^3 y_0 + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{12}(6q^2 - 18q + 11q)\triangle^4 y_0 + \ldots \right] \tag{5}$$

Pochodne w interpolacji Newtona

Wzory (4) i (5) upraszczają się dla punktów węzłowych, gdyż wtedy $q = 0$ i

$$f'(x_0) \simeq N_n'(x_0) = \frac{1}{h}\left[\triangle y_0 - \frac{1}{2}\triangle^2 y_0 + \frac{1}{3}\triangle^3 y_0 - \frac{1}{4}\triangle^4 y_0 + \dots\right] \tag{6}$$

$$f''(x_0) \simeq N_n''(x_0) = \frac{1}{h^2}\left[\triangle^2 y_0 - \triangle^3 y_0 + \frac{11}{12}\triangle^4 y_0 - \frac{5}{6}\triangle^5 y_0 \dots\right] \tag{7}$$

Pochodne w interpolacji Newtona

Przykład

Policzyć dla funkcji $f(x)$, określoną przez poniższą tabelę, pierwszą i drugą pochodną w punkcie $x = 1.0$.

x_i	y_i	$\triangle y_i$	$\triangle^2 y_i$	$\triangle^3 y_i$	$\triangle^4 y_i$
1.0	1.1752				
		0.1605			
1.1	1.3357		**0.0133**		
		0.1738		**0.0018**	
1.2	1.5095		0.0151		**0.0001**
		0.1889		0.0019	
1.3	1.6984		0.0170		
		0.2059			
1.4	1.9043				

Pochodne w interpolacji Newtona

Przykład c.d.

Podstawiamy do wzorów (6) i (7) określone wartości z tabeli:

$$f'(1.0) \simeq N_n'(1.0) = \frac{1}{0.1}\left[0.1605 - \frac{1}{2}0.0133 + \frac{1}{3}0.0018 - \frac{1}{4}0.0001\right] = \\ = 0.1543$$

$$f''(1.0) \simeq N_n''(1.0) = \frac{1}{(0.1)^2}\left[0.0133 - 0.0018 + \frac{11}{12}0.0001\right] \\ = 1.1592$$

Dane w tablicy to wartości dla funkcji $y = \sinh x$ ($y' = \cosh x$ i $y'' = \sinh x$), a dokładne wartości, to $y'(1.0) = 1.5431$ i $y''(1.0) = 1.1752$.

Interpolacja Lagrange'a

Dowolne rozmieszczenie węzłów

Wielomian interpolacyjny Lagrange'a

$$f(x) \simeq L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k \frac{1}{\omega'_{n+1}(x_k)} \frac{\omega_{n+1}(x)}{x - x_k} \qquad (8)$$

gdzie $\omega_{n+1} = (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)$, a
$\omega'_{n+1} = (x_k - x_0)(x_k - x_1)\dots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\dots(x - x_n)$

Interpolacja Lagrange'a

Dowolne rozmieszczenie węzłów

Mamy zatem

$$f'(x) \simeq L_n'(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k \frac{1}{\omega_{n+1}'(x_k)} \frac{d}{dx}\left(\frac{\omega_{n+1}(x)}{x - x_k}\right) \tag{9}$$

$$f^{(m)}(x) \simeq L_n^{(m)}(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k \frac{1}{\omega_{n+1}'(x_k)} \frac{d^m}{dx^m}\left(\frac{\omega_{n+1}(x)}{x - x_k}\right) \tag{10}$$

Czasami jest wygodniej korzystać ze wzorów w terminach wartości funkcji w węzłach, a jeszcze lepiej, gdy węzły rozmieszczone w jednakowych odstępach.

Interpolacja Lagrange'a

Jednakowe rozmieszczenie węzłów

Wartości pierwszych i drugich pochodnych dla $n = 2$ (trzy punkty)

$$y'(x_0) \simeq \frac{1}{2h}[-3y_0 + 4y_1 - y_2],$$

$$y'(x_1) \simeq \frac{1}{2h}[-y_0 + y_2],$$

$$y'(x_2) \simeq \frac{1}{2h}[y_0 - 4y_1 + 3y_2];$$

$$y''(x_0) \simeq \frac{1}{h^2}[y_0 - 2y_1 + y_2],$$

$$y''(x_1) \simeq \frac{1}{h^2}[y_0 - 2y_1 + y_2],$$

$$y''(x_2) \simeq \frac{1}{h^2}[y_0 - 2y_1 + y_2].$$

Interpolacja Lagrange'a

Jednakowe rozmieszczenie węzłów

Wartości pierwszych i drugich pochodnych dla $n = 3$ (cztery punkty)

$$
\begin{aligned}
y'(x_0) &\simeq \frac{1}{6h}[-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3],\\
y'(x_1) &\simeq \frac{1}{6h}[-2y_0 - 3y_1 + 6y_2 - y_3],\\
y'(x_2) &\simeq \frac{1}{6h}[y_0 - 6y_1 + 3y_2 + 2y_3],\\
y'(x_3) &\simeq \frac{1}{6h}[-2y_0 + 9y_1 - 18y_2 + 11y_3];\\
y''(x_0) &\simeq \frac{1}{h^2}[2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3],\\
y''(x_1) &\simeq \frac{1}{h^2}[y_0 - 2y_1 + y_2],\\
y''(x_2) &\simeq \frac{1}{h^2}[y_1 - 2y_2 + y_3],\\
y''(x_3) &\simeq \frac{1}{h^2}[-y_0 + 4y_1 - 5y_2 + 2y_3].
\end{aligned}
$$

Interpolacja Lagrange'a

Przykład

Dla funkcji określonej poniższą tabelą policz pierwszą i drugą pochodną w węzłach.

x_i	y_i
0.5	0.4794
0.6	0.5646
0.7	0.6442
0.8	0.7174

Interpolacja Lagrange'a

Przykład c.d.

Wartości pierwszych pochodnych dla $n = 3$ (cztery punkty)

$$y'(0.5) \simeq \frac{1}{6 \cdot 0.1}\Big[-11 \cdot 0.4794 + 18 \cdot 0.5646 - 9 \cdot 0.6442 + 2 \cdot 0.7174 \Big] = 0.8773,$$

$$y'(0.6) \simeq \frac{1}{6 \cdot 0.1}\Big[-2 \cdot 0.4794 - 3 \cdot 0.5646 + 6 \cdot 0.6442 - 0.7174 \Big] = 0.8253,$$

$$y'(0.7) \simeq \frac{1}{6 \cdot 0.1}\Big[0.4794 - 6 \cdot 0.5646 + 3 \cdot 0.6442 + 2 \cdot 0.7174 \Big] = 0.7653,$$

$$y'(0.8) \simeq \frac{1}{6 \cdot 0.1}\Big[-2 \cdot 0.4794 + 9 \cdot 0.5646 - 18 \cdot 0.6442 + 11 \cdot 0.7174 \Big] = 0.6973;$$

Interpolacja Lagrange'a

Przykład c.d.

Wartości drugich pochodnych dla $n = 3$ (cztery punkty)

$$y''(0.5) \simeq \frac{1}{(0.1)^2}\Big[\, 2\cdot 0.4794 - 5\cdot 0.5646 + \\ +4\cdot 0.6442 - 0.7174 \Big] = -0.48,$$

$$y''(0.6) \simeq \frac{1}{(0.1)^2}\Big[\, 0.4794 - 2\cdot 0.5646 + 0.6442 \Big] = -0.56,$$

$$y''(0.7) \simeq \frac{1}{(0.1)^2}\Big[\, 0.5646 - 2\cdot 0.6442 + 0.7174 \Big] = -0.64,$$

$$y''(0.8) \simeq \frac{1}{(0.1)^2}\Big[-0.4794 + 4\cdot 0.5646 - \\ -5\cdot 0.6442 + 2\cdot 0.7174 \Big] = -0.72.$$

Interpolacja Lagrange'a

Przykład c.d.

W tabeli podano wyniki dla funkcji $y = \sin x$. Dokładne wartości pierwszej pochodnej ($y' = \cos x$) wynoszą

$$
\begin{array}{ll}
y'(0.5) = 0.8776 & y'(0.6) = 0.8253 \\
y'(0.7) = 0.7648 & y'(0.8) = 0.6967
\end{array}
$$

Drugie pochodne powinny być takie, jak w tabeli, ale z dokładnością do znaku (dlaczego?).

Metoda bezpośrednia

Chcemy zróżniczkować numerycznie funkcję daną wzorem

$$y = g\, e^{ikx} \tag{11}$$

gdzie g – amplituda, k – liczba falowa, i – pierwiastek z liczby -1. Wstawiamy (11) do ilorazu różnicowego (12)

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2) \tag{12}$$

i otrzymujemy

$$\begin{aligned} y'_j &= \frac{g}{2h}\left[e^{ik(x_j+h)} - e^{ik(x_j-h)}\right] \\ &= \frac{g e^{ikx_j}}{h}\left[e^{ikh} - e^{-ikh}\right] = \frac{i\, y_j}{h}\, \sin kh \end{aligned} \tag{13}$$

Metoda bezpośrednia

Rozwijamy funkcję $\sin kh$ w szereg i dostajemy

$$y_j' = iky_j \left[1 - \frac{k^2 h^2}{6} + O(k^4 h^4) \right] \tag{14}$$

Porównujemy (13) i (14) i mamy

$$y' = ikge^{ikx} = iky$$

co pozwala nam stwierdzić, że wzór różnicowy (12) jest dobrą aproksymacja pierwszej pochodnej w sytuacji, gdy

1. liczba falowa k jest mała;
2. długość fali $\lambda = 2\pi/k$ jest duża.

Wniosek: metody różnicowe można stosować dla zjawisk długofalowych, a aproksymacja tym lepsza im więcej punktów dyskretyzacji.

Metoda bezpośrednia

Zadanie domowe

Sprawdź, czy i w jakich sytuacjach operator różnicowy drugiego rzędu jest dobrą aproksymacją drugiej pochodnej funkcji

$$y = g\, e^{ikx}$$

Pochodne cząstkowe

Definicje

Rozważmy funkcję dwu zmiennych $z = f(x, y)$.

Dane są jej dyskretne wartości $f(x_i, y_i)$ określone dla

$$x_i = x_0 + i\,h_1\,, \quad y_j = y_0 + j\,h_2$$

dla i = 0, 1, 2,. . . , n, j = 0, 1, 2, . . . , m

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe prawostronne

Pierwsze pochodne cząstkowe można aproksymować wyrażeniami:

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} &= \frac{f(x+h_1,y)-f(x,y)}{h_1}\\ \frac{\partial f(x,y)}{\partial y} &= \frac{f(x+h_2,y)-f(x,y)}{h_2}\end{aligned} \tag{15}$$

dla wystarczająco małych h_1 i h_2 .

Dla dowolnego punktu (x_i, y_j) można je wyrazić następująco:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{f_{i+1,j}-f_{ij}}{h_1}, \qquad \left(\frac{\partial f}{\partial y}\right)_{ij} = \frac{f_{i,j+1}-f_{ij}}{h_2} \tag{16}$$

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe centralne

Lepsze dokładności otrzymuje się dla przybliżeń centralnych. Rozwińmy funkcję $f(x, y)$ w dwuwymiarowy szereg Fouriera

$$
\begin{aligned}
&f(x+\triangle x, y+\triangle y) = \\
=&f(x, y) + \frac{\partial f}{\partial x}\triangle x + \frac{\partial f}{\partial y}\triangle y + \\
=&\frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}\triangle x^2 + 2\frac{\partial^2 f}{\partial x\,\partial y}\triangle x\triangle y + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\triangle y^2\right) + \ldots
\end{aligned} \tag{17}
$$

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe centralne

Dla $x = x_i$, $\triangle x = h_1$, $y = y_i$, $\triangle y = 0$, szereg (17) można zapisać jako

$$f(x_i + h_1, y_j) = f_{i+1,j} = f_{i,j} + \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{ij} h_1 + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{ij} h_1^2 + \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{ij} h_1^3 + \dots \tag{18}$$

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe centralne

Podobnie dla $x = x_i$, $\triangle x = -h_1$, $y = y_i$, $\triangle y = 0$, szereg (17) można zapisać jako

$$f(x_i - h_1, y_j) = f_{i-1,j} = f_{i,j} - \left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{ij} h_1 + \frac{1}{2!}\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{ij} h_1^2 - \frac{1}{3!}\left(\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}\right)_{ij} h_1^3 + \dots \tag{19}$$

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe centralne

Odejmując stronami (18) i (19), a następnie dodając te równania stronami, otrzymujemy wzory do obliczania pierwszej i drugiej pochodnej cząstkowej względem zmiennej x

$$\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)_{ij} \approx \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\, h_1} - O(h_1^2) \approx \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2\, h_1}$$

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right)_{ij} \approx \frac{f_{i+1,j} - 2f_{ij} + f_{i-1,j}}{h_1^2} - O(h_1^2) \approx \frac{f_{i+1,j} - 2f_{ij} + f_{i-1,j}}{h_1^2}$$

Podobne wzory otrzymujemy dla zmiennej y. Proszę je wyprowadzić samodzielnie!

Pochodne cząstkowe

Pochodne cząstkowe centralne

Funkcja dwu zmiennych może mieć $2^2 = 4$ różne pochodne drugiego rzędu, w tym pochodne mieszane

$$\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}\right)_{ij} = \left(\frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}\right)_{ij} = \frac{f_{i+1,j+1} - f_{i+1,j-1} - f_{i-1,j+1} + f_{i-1,j-1}}{4\, h_1\, h_2} \tag{20}$$

Pytanie: Kiedy

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

i jaką nazwę nosi twierdzenie które o tym mówi?

Koniec? :-(

Koniec wykładu 9