Bài giảng Tính gần đúng đạo hàm

Vi phân số là tính đạo hàm của hàm số f dựa vào giá trị của hàm f .

Phép lấy vi phân số nên tránh khi có thể. Trong khi tích phân là một quá trình làm mịn và không nhạy cảm với các sai số của giá trị hàm số thì đạo hàm có xu hướng **khuyếch đại sai số và nói chung ít chính xác hơn giá trị của f.**

Sự khó khăn trong phép lấy đạo hàm gắn với định nghĩa của nó. Đạo hàm là giới hạn của thương số số gia hàm số với số gia đối số, trong đó thương số thường có sự sai khác lớn khi lấy một số lớn chia cho một số nhỏ.

Điều này dẫn tới sự không ổn định. Trong khi hiểu rõ điều này, chúng ta vẫn phải phát triển các công thức tính đạo hàm, vì ta phải sử dụng chúng trong việc giải phương trình vi phân.

Chúng ta dùng ký hiệu $f_j' = f'(x_j)$, $f_j'' = f''(x_j)$, và … chúng ta có thể nhận được công thức xấp xỉ thô cho đạo hàm bằng việc nhớ lại công thức:

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

Điều này gợi ý

(12) $$f'_{1/2} \approx \frac{\delta f_{1/2}}{h} = \frac{f_1}{}$$

Tương tự, với đạo hàm bậc 2 ta nhận được:

$$f_1'' \approx \frac{\delta^2 f_1}{h^2} = \frac{f_2 - 2}{h} \qquad (13)$$

Công thức xấp xỉ chính xác hơn chúng ta nhận được bằng cách lấy đạo hàm đa thức nội suy Lagrange phù hợp. Đạo hàm (6) và nhớ rằng mẫu số trong (6) là $2h^2$, $-h^2$, $2h^2$, chúng ta có:

$$f'(x) \approx p_2'(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2} f_0 - \frac{2x - x_0 - x_2}{h^2} f_1 + \frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2} f_2.$$

Tính với x bằng x_0, x_1 và x_2 chúng ta nhận được “công thức 3 điểm”:

$$(14) \qquad \begin{aligned} &(a) \quad f_0' \approx \frac{1}{2h}(-3f_0 + \\ &(b) \quad f_1' \approx \frac{1}{2h}(-f_0 + \\ &(c) \quad f_2' \approx \frac{1}{2h}(f_0 - 4 \end{aligned}$$

Sử dụng cùng ý tưởng đạo hàm đa thức nội suy Lagrange bậc 4 $p_4(x)$ ta nhận được công thức tương tự:

$$(15) \qquad f_2' \approx \frac{1}{12h}(f_0 - 8f_1 +$$

Một số ví dụ và các công thức khác được đưa vào tập các bài tập cũng như trong Ref. [E5] được liệt kê trong Ứng dụng. 1.

Bên cạnh đó, ta có thể xây dựng theo công thức Tay lo:

Giả sử ta có bảng kết quả đo hàm số

$y = f(x)$ tại $n+1$ điểm mốc cách đều:

$x_0 = a$, $x_i = x_0 + ih$, $h=(b - a)/n$

$x_n = b$.

x_i	x_0	x_1	…	x_k		x_n
f_i	f_0	f_1	…	f_k		f_n

Đạo hàm bậc nhất

- Tại 2 điểm biên: $f_0' \approx (f_1 - f_0)/h$
  $f_n' \approx (f_n - f_{n-1})/h$
  Sai số: $O(h)$
- Tại các điểm trong:

$f_i' \approx (f_{i+1} - f_{i-1})/2h$, i=1, 2, …, n-1
Sai số: $O(h^2)$

Cơ sở lý thuyết: Dựa vào khai triển Taylo

Đạo hàm cấp 2:

Chỉ tính với các điểm trong:

$f_i'' \approx (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1})/h^2$.

Sai số: $O(h^2)$

Cơ sở lý thuyết: Khai triển Tay lo đến bậc 3

$f(x_{j+1}) = f(x_j) + f'(x_j)h + f''(x_j)h^2/2 + f'''(x_j)h^3/6 + O(h^4)$

$f(x_{j-1}) = f(x_j) - f'(x_j)h + f''(x_j)h^2/2 - f'''(x_j)h^3/6 + O(h^4)$

$f_{j+1} + f_{j-1} = 2f_j + f_j''h^2 + O(h^4)$

$\rightarrow f_j'' \approx (f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1})/h^2$
Sai số là $O(h^2)$

Numeric differentiation is the computation of values of the derivative of a function *f* from given values of *f*. Numeric differentiation should be avoided whenever possible. Whereas *integration* is a smoothing process and is not very sensitive to small inaccuracies in function values, *differentiation* tends to make matters rough and generally gives values of that are much less accurate than those of *f*. The difficulty with differentiation is tied in with the definition of the derivative, which is the limit of the difference quotient, and, in that quotient, you usually have the difference of a large quantity divided by a small quantity. This can cause numerical instability. While being aware of this caveat, we must still develop basic differentiation formulas for use in numeric solutions of differential equations

Đạo hàm bậc nhất

Three-Point Endpoint Formula

- $$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0), \tag{4.4}$$

where ξ_0 lies between x_0 and $x_0 + 2h$.

Three-Point Midpoint Formula

- $$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0+h) - f(x_0-h)] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1), \tag{4.5}$$

where ξ_1 lies between $x_0 - h$ and $x_0 + h$.

Round-Off Error Instability

It is particularly important to pay attention to round-off error when approximating derivatives. To illustrate the situation, let us examine the three-point midpoint formula Eq. (4.5),

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}[f(x_0 + h) - f(x_0 - h)] - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1),$$

Five-Point Midpoint Formula

- $$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)] + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi), \tag{4.6}$$

where ξ lies between $x_0 - 2h$ and $x_0 + 2h$.

Five-Point Endpoint Formula

- $$f'(x_0) = \frac{1}{12h}[-25f(x_0) + 48f(x_0 + h) - 36f(x_0 + 2h) + 16f(x_0 + 3h) - 3f(x_0 + 4h)] + \frac{h^4}{5} f^{(5)}(\xi), \tag{4.7}$$

where ξ lies between x_0 and $x_0 + 4h$.

Đạo hàm bậc hai

Second Derivative Midpoint Formula

- $$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}[f(x_0 - h) - 2f(x_0) + f(x_0 + h)] - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \tag{4.9}$$

for some ξ, where $x_0 - h < \xi < x_0 + h$.