Różniczkowanie numeryczne

Obliczanie pochodnych (różniczkowanie) jest podstawowym elementem w metodach optymalizacji, znajdowania ekstremów, badaniu zmienności funkcji, rozwiązywaniu równań różniczkowych, algebraicznych, obliczaniu wielkości fizycznych,......

Pochodna jest miarą szybkości zmian wartości funkcji względem zmian jej argumentów

Przykłady pochodnych f. elementarnych

$x' = 1$

$(\sin x)' = \cos(x)$,

....

Różniczkowanie numeryczne

Obliczanie analityczne (ze wzorów) pochodnych jest często bardzo trudne, lub niewykonalne (nieopłacalne). Można wykorzystać programy do obliczeń symbolicznych.

$f(x)=\ln(\sin^2 3x)/\mathrm{arctg}(x/2)$ $x_0 = 5$

Czasami jednak nie znamy nawet postaci funkcji.

Konieczność zastosowania różniczkowania numerycznego liczymy pochodną funkcji w punkcie x_0 .

(wartość pochodnej w x_0) - liczba

$$f'(x_0)$$

Definicja pochodnej funkcji w punkcie x

Funkcja f(x) jest różniczkowalna w punkcie x jeśli jest ciągła w tym punkcie i istnieje skończona granica

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

Zapisując inaczej

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

gdzie Δx, h małe odchylenie od x

Dwa podstawowe sposoby różniczkowania numerycznego:

1. Metoda różnic skończonych.

   Metoda polegająca na przybliżeniu pochodnej funkcji poprzez skończone różnice, w dyskretyzowanej przestrzeni. Można ją wyprowadzić wprost z ilorazu różnicowego, bądź z rozwinięcia w szereg Taylora.

2. Różniczkowanie funkcji aproksymującej.

   Aproksymujemy punkty wyrażeniem, które może być łatwo różniczkowalne, np. wielomianem, funkcją wykładniczą, itp.

Najprostsze przybliżenie

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

Najprostsze przybliżenie – wprost z definicji: wzór dwupunktowy „w przód”

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

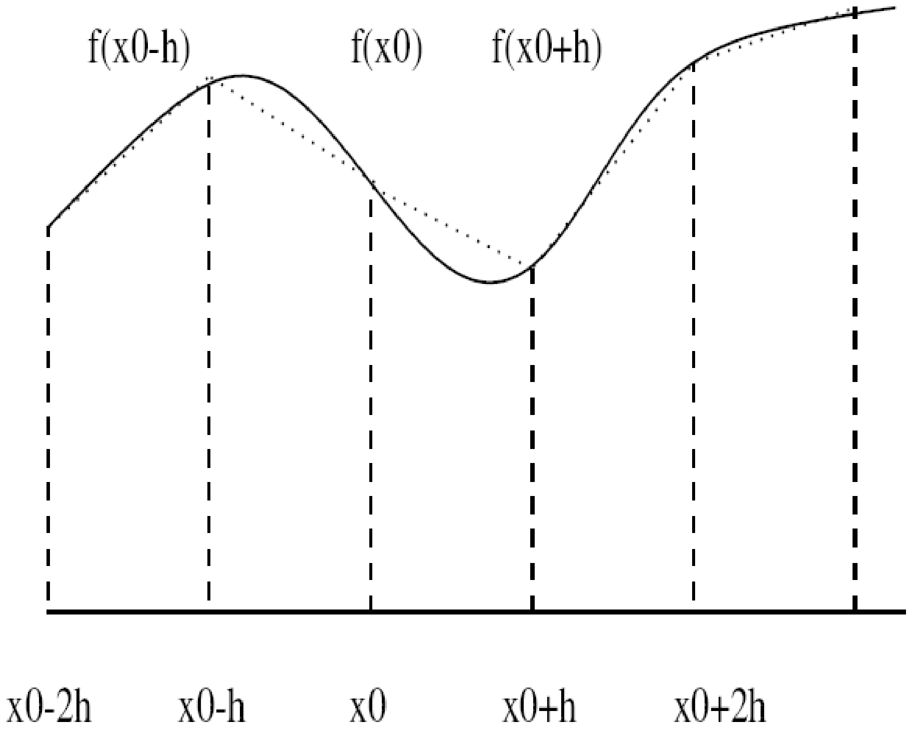
Dla małych h>0

Wzór dwupunktowy „w tył”

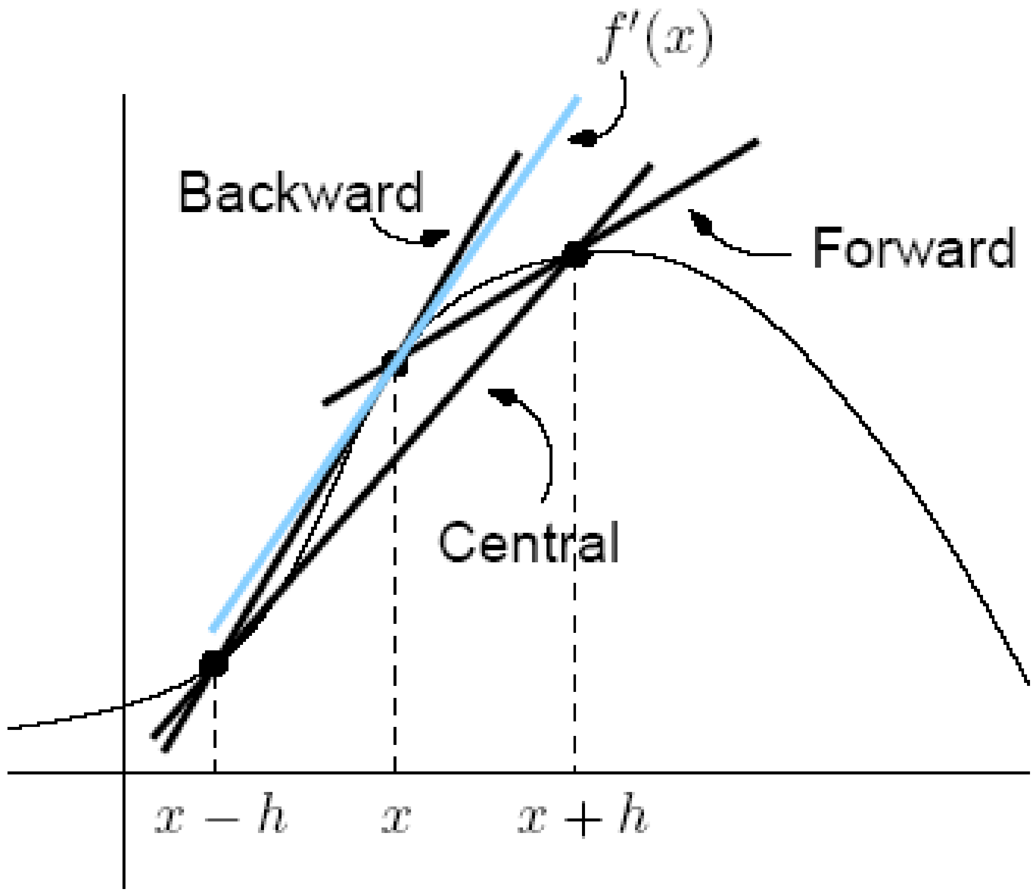
alternatywnie: wzór dwupunktowy „w tył”

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

Zakładamy oczywiście, że znamy wartość funkcji w punkcie x i x+/-h



Interpretacja graficzna pochodnej i przybliżonych metod:

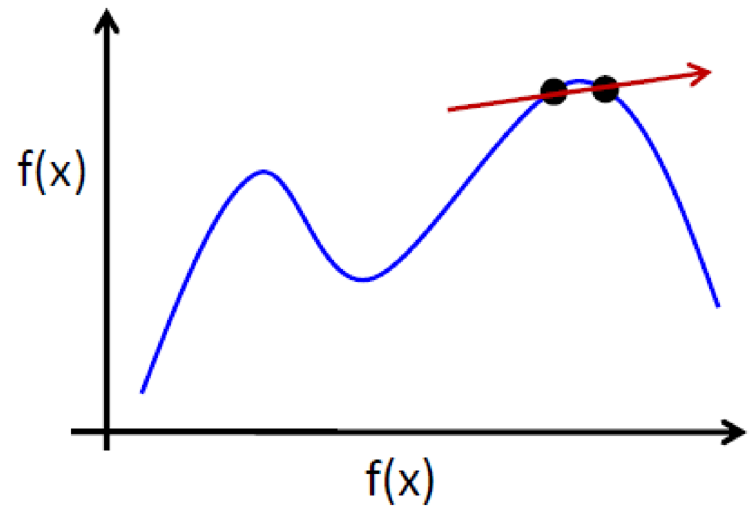


Wybór h jest kluczowy dla jakości wyniku

Różniczkowanie numeryczne

Jakie h wybrać?
Jaki błąd popełniamy przy takim przybliżeniu?

Zakładamy, że funkcja jest liniowa pomiędzy tymi 2 punktami, im mniejsze h tym jest to lepiej spełnione



Sprawdzenie „numeryczne” błędu

$$f(x) = x^x.$$

h	$\frac{f(1+h)-f(1-h)}{2h}$	Error
0.1	1.005008325	0.005008325
0.01	1.000050001	0.000050001
0.001	1.000000500	0.000000500
0.0001	1.000000005	0.000000005

w punkcie x=1

Analiza błędów – rozwijamy f(x) w szereg Taylora w pobliżu punktu x0:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2!} f''(x_0)(x - x_0)^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)(x - x_0)^3 + R_3(x)$$

Dla $x = x_0 + h$

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2!} f''(x_0)h^2 + \frac{1}{3!} f'''(x_0)h^3 + R_3(x_0 + h)$$

Zapisując w funkcji błędu obcięcia

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

Gdzie ξ leży pomiędzy x i x+h

Przekształcając otrzymujemy:

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

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

W metodzie tej

popełniamy błąd rzędu h   ozn. *O(h)*

Niestety wzór dwupunktowy – wolno zbieżny, duży błąd kiedy *h* bardzo małe,
gdyż pojawia się błąd zaokrąglenia obliczanej wielkości

Problem z „bliskimi” liczbami (precyzja zmiennych ma tu ogromne znaczenie)

$$f(x+h)-f(x)$$

Exp.

F(x)=ln(x) w punkcie 0.7, h=10^{-8}

$$\begin{aligned} f'(0.7) &\approx \frac{f(x0+h)-f(x0)}{h} = \frac{\ln(0.7+10^{-8})-\ln(0.7)}{10^{-8}} \\ &= \frac{-0.35667492965302-(-0.35667494393873)}{10^{-8}} \end{aligned}$$

Jak poprawić dokładność tego typu metod?

Rozwińmy w szereg Taylora:

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

I odejmijmy stronami:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2h\,f'(x) + \frac{h^3}{3!}\,[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)].$$

Wzór 2 punktowy

Otrzymujemy bardzo popularny w różniczkowaniu numerycznym
wzór 2 punktowy „centralny”:

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

$$f'(x) = \underbrace{\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}}_{\text{two-sided difference}} + \underbrace{\frac{f'''(x)}{2*6} h^2 + \cdots}_{\text{error terms}}$$

Błąd takiego przybliżenia:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{1}{2}\frac{h^2}{3!}\left[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\right].$$

Jest rzędu h^2 $O(h^2)$

$$f(x) = x^x.$$

h	$\frac{f(1+h)-f(1-h)}{2h}$	Error
0.1	1.005008325	0.005008325
0.01	1.000050001	0.000050001
0.001	1.000000500	0.000000500
0.0001	1.000000005	0.000000005

Dodajmy stronami nasze rozwinięcia:

$$f'' = \frac{f_h - 2f_0 + f_{-h}}{h^2} + O(h^2).$$

Otrzymaliśmy wzór na numeryczne obliczanie drugiej pochodnej.

$f_h = f(x+h)$, $f_{-h} = f(x-h)$,

Możemy dalej poprawiać nasze wzory na przybliżone obliczanie pierwszej pochodnej przez różne kombinacje rozwinięć w szereg Taylora:

$$f'(x_n) = \frac{-3f(x_n) + 4f(x_{n+1}) - f(x_{n+2})}{2h} + O(h^2)$$

Zadanie
Wyprowadzić wzór 4 punktowy:

$$f'_{5c} = \frac{f_{-2h} - 8f_{-h} + 8f_h - f_{2h}}{12h} + O(h^4),$$

Pierwsze pochodne

Dwupunktowe różnice zwykłe	$f'(x_i)=\dfrac{f(x_{i+1})-f(x_i)}{h}$	$O(h)$
Trzypunktowe różnice zwykłe	$f'(x_i)=\dfrac{-3f(x_i)+4f(x_{i+1})-f(x_{i+2})}{2h}$	$O(h^2)$
Dwupunktowe różnice wsteczne	$f'(x_i)=\dfrac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{h}$	$O(h)$
Trzypunktowe różnice wsteczne	$f'(x_i)=\dfrac{f(x_{i-2})-4f(x_{i-1})+f(x_i)}{2h}$	$O(h^2)$
Dwupunktowe różnice centralne	$f'(x_i)=\dfrac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}$	$O(h^2)$
Czteropunktowe różnice centralne	$f'(x_i)=\dfrac{f(x_{i-2})-8f(x_{i-1})+8f(x_{i+1})-f(x_{i+2})}{12h}$	$O(h^4)$

Drugie pochodne

Trzypunktowe różnice zwykłe	$f''(x_i)=\dfrac{f(x_i)-2f(x_{i+1})+f(x_{i+2})}{h^2}$	$O(h)$
Trzypunktowe różnice wsteczne	$f''(x_i)=\dfrac{f(x_{i-2})-2f(x_{i-1})+f(x_i)}{h^2}$	$O(h)$
Trzypunktowe różnice centralne	$f''(x_i)=\dfrac{f(x_{i-1})-2f(x_i)+f(x_{i+1})}{h^2}$	$O(h^2)$
Pięciopunktowe różnice centralne	$f''(x_i)=\dfrac{-f(x_{i-2})+16f(x_{i-1})-30f(x_i)+16f(x_{i+1})-f(x_{i+2})}{12h^2}$	$O(h^4)$

Różniczkowanie numeryczne

Różniczkowanie – może być bardzo niestabilne numerycznie

Konieczność wyboru odpowiedniej metody,

odpowiedniego h (wydawałoby się, że im mniejsze tym lepsze)

ale zależność od postaci funkcji,

dokładności obliczeń, precyzji zmiennych i maszynowej, itp.

Błędy obcięcia (zaokrągleń) maja ogromny wpływ na całkowity
błąd różniczkowania numerycznego

Różniczkowanie numeryczne

In Table 3.1 we present the results of a *numerical evaluation* for various step sizes for the second derivative of $\exp(x)$ using the approximation $f_0'' = \frac{f_h - 2f_0 + f_{-h}}{h^2}$. The results are compared with the exact ones for various x values. Note well that as the step is decreased we get closer to the

x	$h = 0.1$	$h = 0.01$	$h = 0.001$	$h = 0.0001$	$h = 0.0000001$	Exact
0.0	1.000834	1.000008	1.000000	1.000000	1.010303	1.000000
1.0	2.720548	2.718304	2.718282	2.718282	2.753353	2.718282
2.0	7.395216	7.389118	7.389057	7.389056	7.283063	7.389056
3.0	20.102280	20.085704	20.085539	20.085537	20.250467	20.085537
4.0	54.643664	54.598605	54.598155	54.598151	54.711789	54.598150
5.0	148.536878	148.414396	148.413172	148.413161	150.635056	148.413159

Table 3.1: Result for numerically calculated second derivatives of $\exp(x)$. A comparison is made with the exact value. The step size is also listed.

exact value. However, if it is further decreased, we run into problems of loss of precision. This

Błąd w różniczkowaniu numerycznym

Rozważmy funkcję $f(x) = e^x$

Policzmy pochodną w punkcie $x=0$ korzystając z dwupunktowych różnic centralnych.

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2) \qquad gdzie\ x_{i+1} = h \ \ oraz \ \ x_{i-1} = -h$$

$$f'(0) = \frac{e^h - e^{-h}}{2h} + O(h^2)$$

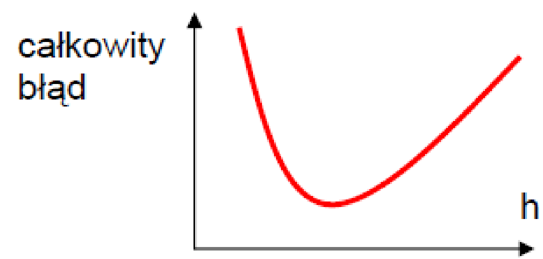
Podczas obliczeń komputer wprowadza błąd zaokrąglenia

$$e^h \to e^h + R_1 \qquad\qquad e^{-h} \to e^{-h} + R_2$$

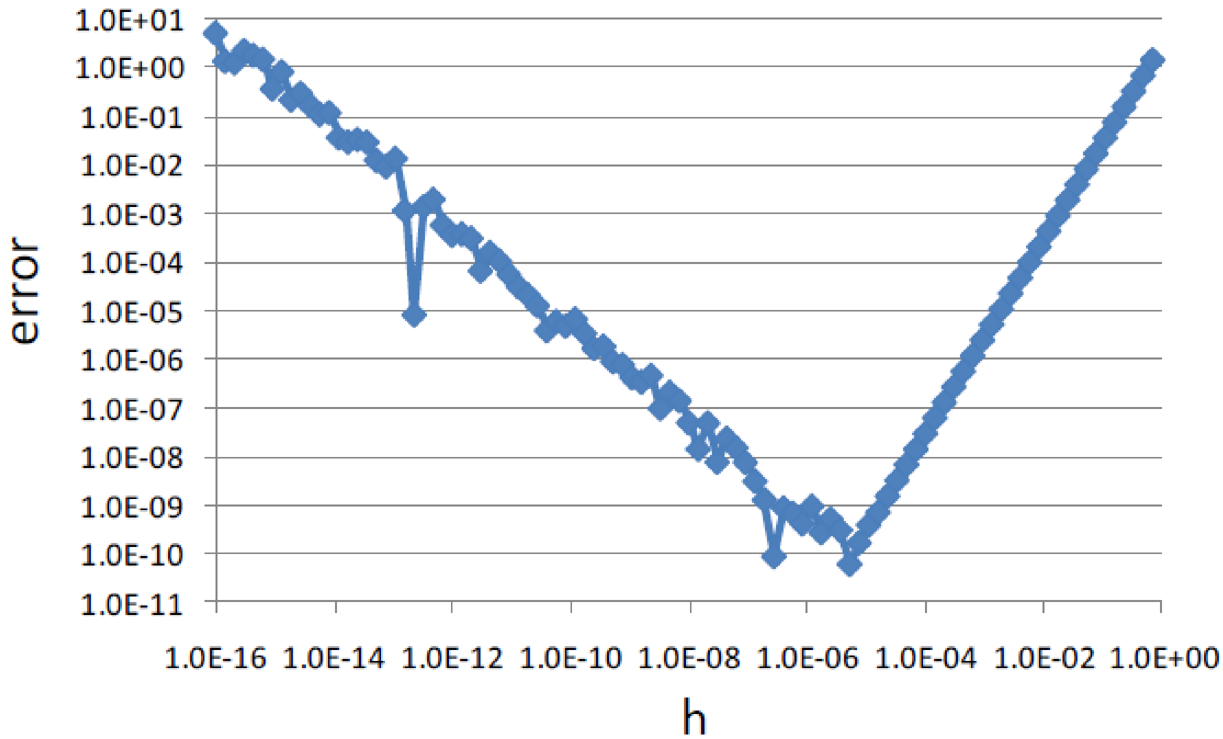
Wartości dokładne

$$f'(0) = \frac{e^h + R_1 - e^{-h} - R_2}{2h} + O(h^2) = \frac{e^h - e^{-h}}{2h} + \underbrace{\frac{R_1 - R_2}{2h}}_{\text{Błąd zaokrąglenia}} + \underbrace{O(h^2)}_{\text{Błąd obcięcia}}$$

Gdy zmniejszamy h, błąd obcięcia maleje,
ale błąd zaokrąglenia rośnie.



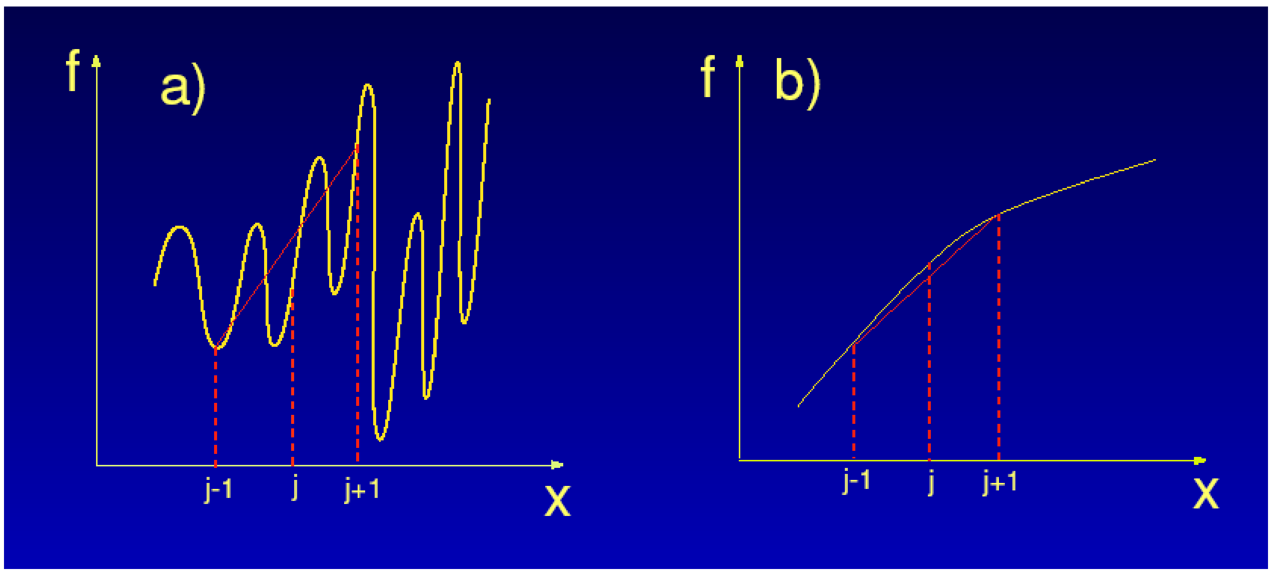
- consider errors in f'(1) for $f(x) = 3x^3 + 2x^2 + x$ with two-sided derivatives



- at low h, round-off errors dominate
- at high h, truncation errors dominate
- optimum value at: $h_{\min} \approx \varepsilon^{1/3} = 10^{-6}$

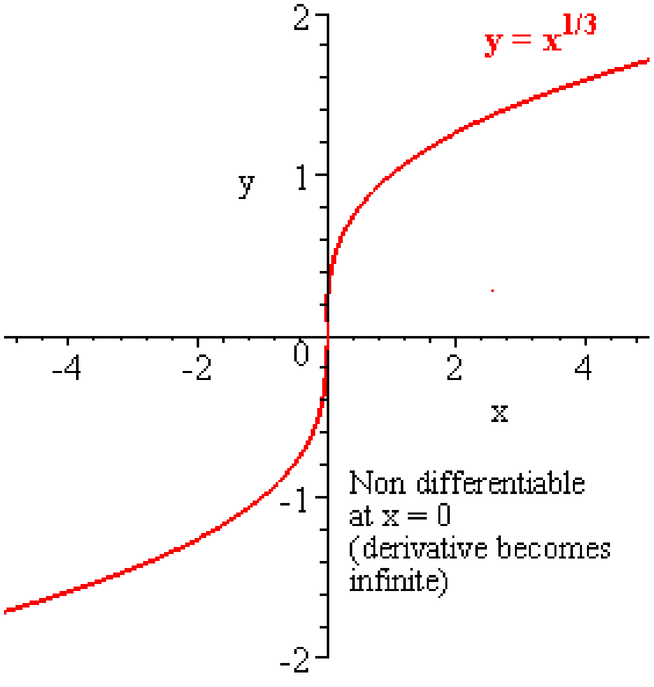
Duża podatność na błędy zaokrągleń *(x+h), f(x+h)-f(x).*

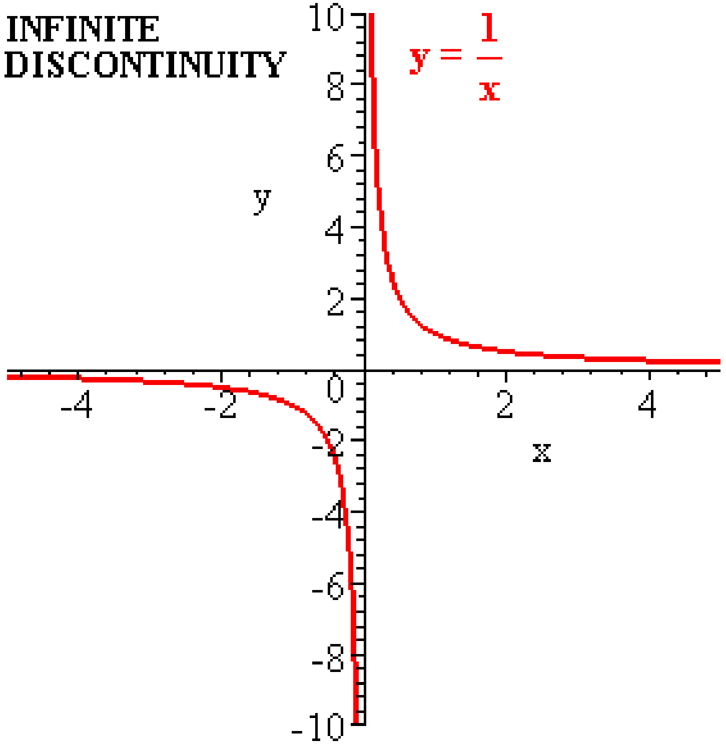
Wzory przybliżone (2-3 punktowe) pracują dobrze,
jeśli funkcja zmienia się wolno na odcinku h

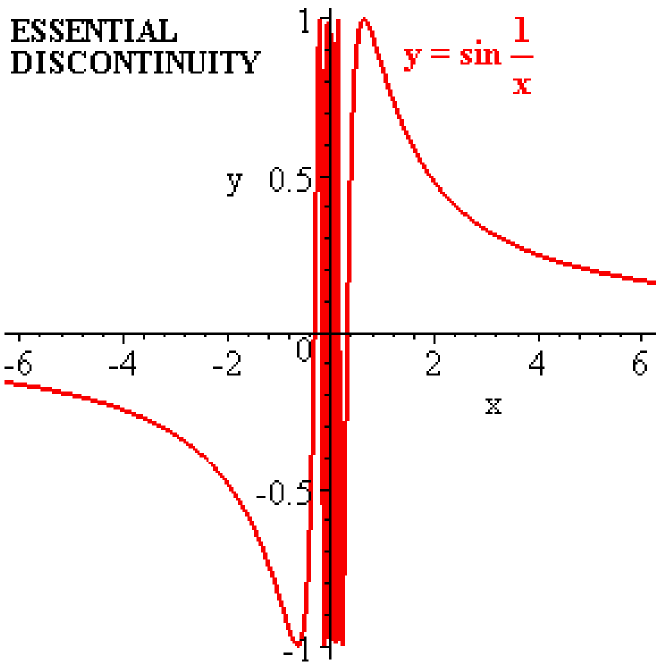


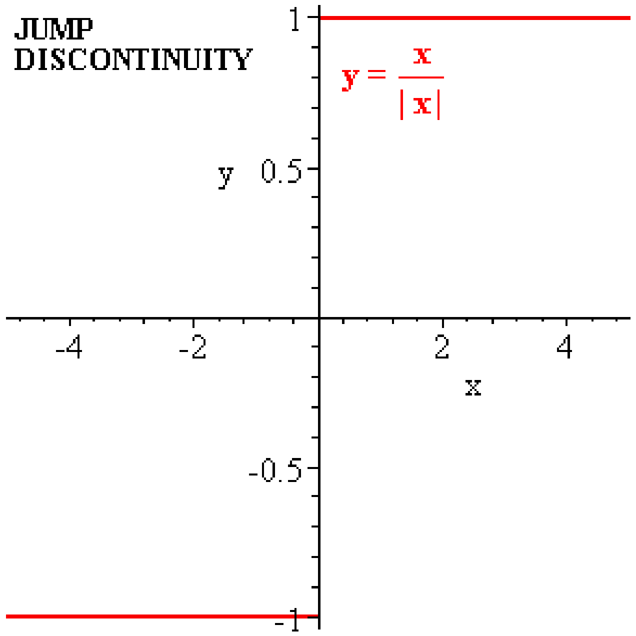
Niebezpieczeństwo w przypadkach funkcji nieróżniczkowalnych!

Różniczkowanie numeryczne






ESSENTIAL
DISCONTINUITY
$y = \sin \frac{1}{x}$
y
x
1
0.5
0
-0.5
-1
-6
-4
-2
2
4
6


JUMP
DISCONTINUITY
$y = \frac{x}{|x|}$
y
x
1
0.5
-0.5
-1
-4
-2
2
4