Κεφάλαιο 4 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ

Η αριθμητική παραγώγιση είναι ιδιαίτερα χρήσιμη, καθώς πολλά φυσικά μεγέθη αντιπροσωπεύουν τη χρονική ή χωρική παράγωγο κάποιου μετρήσιμου μεγέθους. Για παράδειγμα, σ' ένα πείραμα μπορεί να μετρήσουμε τη θέση ενός αντικειμένου σε διάφορες χρονικές στιγμές. Για να υπολογίσουμε και την ταχύτητα του αντικειμένου στις διάφορες χρονικές στιγμές, θα πρέπει να βρούμε την παράγωγο των μετρήσεων της θέσης ως προς το χρόνο, με κάποια αριθμητική μέθοδο. Άλλες εφαρμογές των μεθόδων που θα αναπτυχθούν στο παρόν Κεφάλαιο περιλαμβάνουν την ανάπτυξη αλγορίθμων για τη λύση προβλημάτων οριακών τιμών, την ανάπτυξη μεθόδων για την επίλυση διαφορικών εξισώσεων κλπ.

Γενικά, η αριθμητική παράγωγος χρησιμοποιείται όταν δεν είναι γνωστή η αναλυτική μορφή μιας συνάρτησης $y = y(x)$ και γνωρίζουμε μόνο τις τιμές της συνάρτησης σε συγκεκριμένα σημεία.

4.1 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΣΥΜΠΤΩΤΙΚΟΥ ΠΟΛΥΩΝΥΜΟΥ

Η πλέον προφανής διαδικασία είναι ο υπολογισμός του συμπτωτικού πολυωνύμου και στη συνέχεια η παραγώγισή του. Για παράδειγμα, αν χρησιμοποιήσουμε το συμπτωτικό πολυώνυμο Newton προς τα εμπρός, σε κάποιο σημείο $x = x_0 + sh$

$$y(x) = p(x) = y_0 + s\Delta y_0 + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{s(s-1)(s-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \dots \qquad \text{(Εξ. 4.1)}$$

και στη συνέχεια το παραγωγίσουμε, θα πάρουμε:

$$\frac{dy(x)}{dx} = \frac{dp(x)}{dx} = \frac{1}{h}\frac{dp(s)}{ds} = \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 + \frac{2s-1}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{3s^2-6s+2}{3!}\Delta^3 y_0 + \dots\right] \qquad \text{(Εξ. 4.2)}$$

Επομένως, αν θελήσουμε να υπολογίσουμε την παράγωγο στη θέση x_0, αρκεί να θέσουμε στην παραπάνω σχέση $s = 0$, για τη θέση x_1, αρκεί να θέσουμε στην παραπάνω σχέση $s = 1$ κ.ο.κ., άρα:

$$y_0' = \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 - \frac{1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{1}{3}\Delta^3 y_0 + \dots\right] \qquad \text{(Εξ. 4.3)}$$

και ανάλογα με τον αριθμό των όρων που θέλουμε να συμπεριλάβουμε, έχουμε τις παρακάτω σχέσεις:

$$y_0' = \frac{1}{h}(y_1 - y_0) + O(h) \qquad \text{(Εξ. 4.4a)}$$

$$y_0' = \frac{1}{h}\left(\frac{-3y_0 + 4y_1 - y_2}{2}\right) + O(h^2) \qquad \text{(Εξ. 4.4b)}$$

$$y_0' = \frac{1}{h}\left(\frac{-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3}{6}\right) + O(h^3) \qquad \text{(Εξ. 4.4c)}$$

....

Ανάλογα μπορώ να υπολογίσω και τη δεύτερη παράγωγο της συνάρτησης $y(x)$ στη θέση x_0. Είναι:

$$\frac{d^2p(x)}{dx^2} = \frac{1}{h^2}\frac{d^2p(s)}{ds^2} = \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 + (s-1)\Delta^3 y_0 + \dots\right) \qquad \text{(Εξ. 4.5)}$$

οπότε:

$$y_0'' = \frac{1}{h^2}(y_0 - 2y_1 + y_2) + O(h) \qquad \text{(Εξ. 4.5a)}$$

και

$$y_0'' = \frac{1}{h^2}(2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3) + O(h^2) \qquad \textit{(Εξ. 4.5b)}$$

κ.ο.κ.

Το σφάλμα υπολογίζεται εύκολα από τον τύπο του σφάλματος του συμπτωτικού πολυωνύμου. Δηλαδή, γνωρίζουμε από την σχέση (3.1) ότι το σφάλμα του συμπτωτικού πολυωνύμου n βαθμού (που προκύπτει από $n+1$ σημεία) είναι:

$$F(x) = (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)\frac{y^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} \qquad \textit{(Εξ. 4.6)}$$

οπότε το σφάλμα της παραγώγου του συμπτωτικού πολυωνύμου για τη θέση π.χ. $x = x_0$

$$\begin{aligned} F'(x_0) &= (x_0-x_1)(x_0-x_2)\ldots(x_0-x_n)\frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \\ &= -h(-2h)\ldots(-nh)\frac{y^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} = (-1)^n h^n \frac{y^{(n+1)}(\xi)}{\mathrm{n}+1} \end{aligned} \qquad \textit{(Εξ. 4.7)}$$

οπότε το σφάλμα στη σχέση *4.4a* θα είναι $O(h)$, στην *4.4b* θα είναι $O(h^2)$ και στην *4.4c,* $O(h^3)$. Ανάλογα, το σφάλμα στη δεύτερη παράγωγο θα είναι $O(h^{(n-1)})$ *(βλ. άσκηση 4.1).* Επομένως, στη σχέση *4.5a* θα είναι $O(h)$ και στην *4.5b,* $O(h^2)$.

Αντίστοιχες σχέσεις μπορώ να δημιουργήσω και με τη χρήση του πολυωνύμου Newton προς τα πίσω, οπότε υπολογίζω την παράγωγο μιας συνάρτησης στο τέλος του διαστήματος π.χ.

$$y_0' = \frac{3y_0 - 4y_{-1} + y_{-2}}{2h} + O(h^2) \qquad \textit{(Εξ. 4.8)}$$

$$y_0'' = \frac{2y_0 - 5y_{-1} + 4y_{-2} - y_{-3}}{h^2} + O(h^2) \qquad \textit{(Εξ. 4.9)}$$

<u>ΕΦΑΡΜΟΓΗ</u>

Υπολογίστε τη δεύτερη παράγωγο μιας συνάρτησης στη θέση $x = x_1$ χρησιμοποιώντας τις τιμές y_0, y_1, y_2 και y_3.

<u>ΛΥΣΗ</u>

Θα χρησιμοποιήσουμε το συμπτωτικό πολυώνυμο Lagrange υποθέτοντας όμως ότι τα σημεία $x_0, x_1, x_2, \ldots$ είναι ισαπέχοντα. Το πολυώνυμο Lagrange είναι:

$$\begin{aligned} P(x) = &\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)}y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)}y_1 \\ &+ \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)}y_2 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)}y_3 \end{aligned}$$

οπότε παραγωγίζοντας δυο φορές και αντικαθιστώντας καταλήγω:

$$\begin{aligned} P''(x) = &\frac{2y_0}{-6h^3}[(x-x_1)+(x-x_2)+(x-x_3)] + \frac{2y_1}{2h^3}[(x-x_0)+(x-x_2)+(x-x_3)] \\ &+ \frac{2y_2}{-2h^3}[(x-x_0)+(x-x_{\cdot})+(x-x_3)] + \frac{2y_0}{6h^3}[(x-x_0)+(x-x_1)+(x-x_2)] \end{aligned}$$

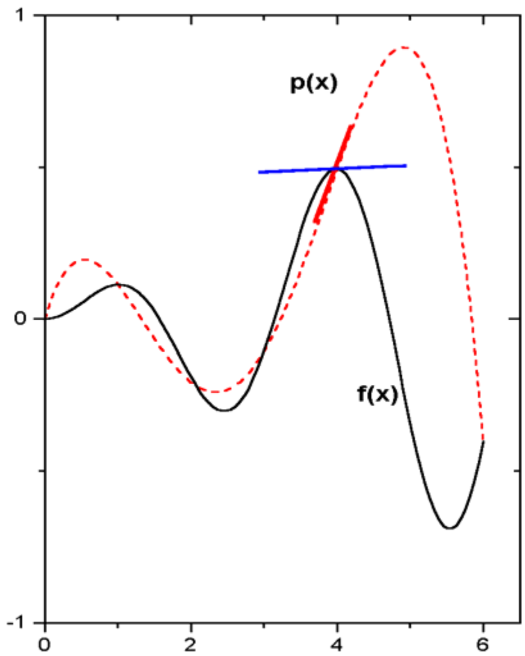
και θέτοντας $x = x_1$ *καταλήγω στη σχέση*

$$P''(x_1) = \frac{y_0 - 2y_1 + y_2}{h^2} \qquad \textit{(Εξ. 4.10)}$$

Ο όρος y_3*, αν και είχε χρησιμοποιηθεί, απουσιάζει από την τελική σχέση, παρ' όλα αυτά η ακρίβεια της μεθόδου είναι* $O(h^2)$*, όπως προβλέπεται από τη χρήση συμπτωτικού πολυωνύμου για τέσσερα σημεία. Στη συνέχεια, θα δούμε ότι η παραπάνω σχέση μπορεί να δημιουργηθεί και με τη χρήση της τεχνικής των κεντρικών διαφορών.*

<u>ΑΚΡΙΒΕΙΑ</u>

Θα πρέπει να επισημανθεί ότι γενικά το συμπτωτικό πολυώνυμο μπορεί να προσεγγίζει με ικανοποιητική ακρίβεια μια συνάρτηση και συμπίπτει με αυτήν σε ορισμένα σημεία, δεν συμβαίνει όμως συνήθως το ίδιο και με την παράγωγό του. Οπως φαίνεται από το Σχήμα 4.1 είναι προφανές το σφάλμα στον υπολογισμό της $y'(x)$ με τη χρήση του $P'(x)$.



4.2 ΤΥΠΟΙ ΚΕΝΤΡΙΚΩΝ ΔΙΑΦΟΡΩΝ

Μια κατηγορία σχέσεων για τον υπολογισμό αριθμητικών παραγώγων είναι αυτή των κεντρικών διαφορών. Εδώ, η παράγωγος στη θέση x_0 υπολογίζεται ως συνάρτηση των σημείων εκατέρωθεν της θέσης συμμετρικά. Τέτοιες σχέσεις είναι οι παρακάτω:

$$y_0' = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h} + O(h^2) \qquad \textit{(Εξ. 4.11a)}$$

$$y_0' = \frac{-y_2 + 8y_1 - 8y_{-1} + y_{-2}}{12h} + O(h^4) \qquad \textit{(Εξ. 4.11b)}$$

$$y_0'' = \frac{y_1 - 2y_0 + y_{-1}}{h^2} + O\left(h^2\right) \qquad \textit{(Εξ. 4.12a)}$$

$$y_0'' = \frac{-y_2 + 16y_1 - 30y_0 + 16y_{-1} - y_{-2}}{12h^2} + O\left(h^4\right) \qquad \textit{(Εξ. 4.12b)}$$

$$y_0''' = \frac{y_2 - 2y_1 + 2y_{-1} - y_{-2}}{2h^3} + O\left(h^2\right) \qquad \textit{(Εξ. 4.13)}$$

$$y_0^{(4)} = \frac{y_2 - 4y_1 + 6y_0 - 4y_{-1} + y_{-2}}{h^4} + O\left(h^2\right) \qquad \textit{(Εξ. 4.14)}$$

Στη συνέχεια θα δούμε πώς αποδεικνύονται μερικές από τις παραπάνω σχέσεις. Αν πάρω τα αναπτύγματα Taylor δεξιά και αριστερά του σημείου x_0, τότε θα έχω

$$y\left(x_0 + h\right) = y_1 = y_0 + hy_0' + \frac{h^2}{2}y_0'' + \frac{h^3}{6}y_0''' + \frac{h^4}{24}y_0^{(4)} + \cdots \qquad \textit{(Εξ. 4.15)}$$

$$y\left(x_0 - h\right) = y_{-1} = y_0 - hy_0' + \frac{h^2}{2}y_0'' - \frac{h^3}{6}y_0''' + \frac{h^4}{24}y_0^{(4)} + \cdots \qquad \textit{(Εξ. 4.16)}$$

$$y\left(x_0 + 2h\right) = y_2 = y_0 + 2hy_0' + 2h^2 y_0'' + \frac{4}{3}h^3 y_0''' + \frac{2h^4}{3}y_0^{(4)} + \cdots \qquad \textit{(Εξ. 4.17)}$$

$$y\left(x_0 - 2h\right) = y_{-2} = y_0 - 2hy_0' + 2h^2 y_0'' - \frac{4}{3}h^3 y_0''' + \frac{2h^4}{3}y_0^{(4)} + \cdots \qquad \textit{(Εξ. 4.18)}$$

Οπότε αφαιρώντας την *4.16* από την *4.15* λαμβάνω τη σχέση *4.11a*, ενώ προσθέτοντας έχω τη σχέση *4.12a,* την οποία είχαμε αποδείξει νωρίτερα με τη χρήση του συμπτωτικού πολυωνύμου Lagrange, σχέση *4.10.*

Ενεργώντας ανάλογα και πολλαπλασιάζοντας την *4.15* και την *4.16* με 8 και δημιουργώντας στη συνέχεια τη σχέση

$$y_{-2} - y_2 + 8\left(y_1 - y_{-1}\right)$$

δημιουργώ τη σχέση *(4.11b)* . Με ανάλογο τρόπο δημιουργώ και τις υπόλοιπες σχέσεις.

<u>ΠΑΡΑΔΕΙΓΜΑ</u>

Μια συνάρτηση $f\left(x\right)$ παίρνει τις εξής τιμές:

x	*0.90*	*1.00*	*1.11*
$f\left(x\right)$	*2.4596*	*2.7183*	*3.0344*

Να βρεθεί η $f'\left(1\right)$. (Η συνάρτηση είναι η $f\left(x\right) = e^x$.

<u>Λύση</u>

Παρατηρούμε ότι τα τρία σημεία δεν ισαπέχουν, οπότε θα πρέπει να δημιουργήσουμε μια σχέση με βάση την προηγούμενη θεωρία. Θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν δυο διαφορετικές μέθοδοι. Η προφανής επιλογή είναι να υπολογίσουμε με τον τύπο του Lagrange το δευτεροβάθμιο συμπτωτικό πολυώνυμο και, στη συνέχεια, να το παραγωγίσουμε. Η άλλη επιλογή είναι να χρησιμοποιήσουμε μια παραλλαγή της μεθόδου των κεντρικών διαφορών, όπως θα δείξουμε και στη συνέχεια.

Είναι $y(x_0 + h) = y(1 + 0.11)$ *και* $y(x_0 - h_1) = y(1 - 0.1)$. *Γενικά, θα ισχύει:*

$$y_1 = y(x_0 + h) = y_0 + hy_0' + \frac{h^2}{2} y_0'' + \frac{h^3}{6} y_0''' + \cdots$$

$$y_{-1} = y(x_0 - h_1) = y_0 - h_1 y_0' + \frac{h_1^{\,2}}{2} y_0'' - \frac{h_1^{\,3}}{6} y_0''' + \cdots$$

οπότε

$$y_0' = \frac{\frac{1}{h^2} y_1 - \frac{1}{h^2} y_{-1}}{\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h}} - \left(\frac{1}{h} - \frac{1}{h_1}\right) y_0$$

Θέτοντας τις κατάλληλες τιμές ($h = 0.11$ *και* $h_1 = 0.1$*), βρίσκουμε* $y_0' = 2.7233$ *, η ακριβής τιμή είναι 2.7183.*

ΑΣΚΗΣΕΙΣ

1. Να βρεθεί ο τύπος του σφάλματος για τη δεύτερη παράγωγο του συμπτωτικού πολυωνύμου.
2. Αποδείξτε τις σχέσεις (4.12b), (4.13) και (4.14)
3. Με τη χρήση ΗΥ υπολογίστε την $f'(x_0)$ και $f''(x_0)$, για $f(x) = \tan^{-1}(x)$ και $x_0 = \sqrt{2}$. Χρησιμοποιήστε τις σχέσεις (4.11a) και (4.10) με βήμα $h = 0.1$