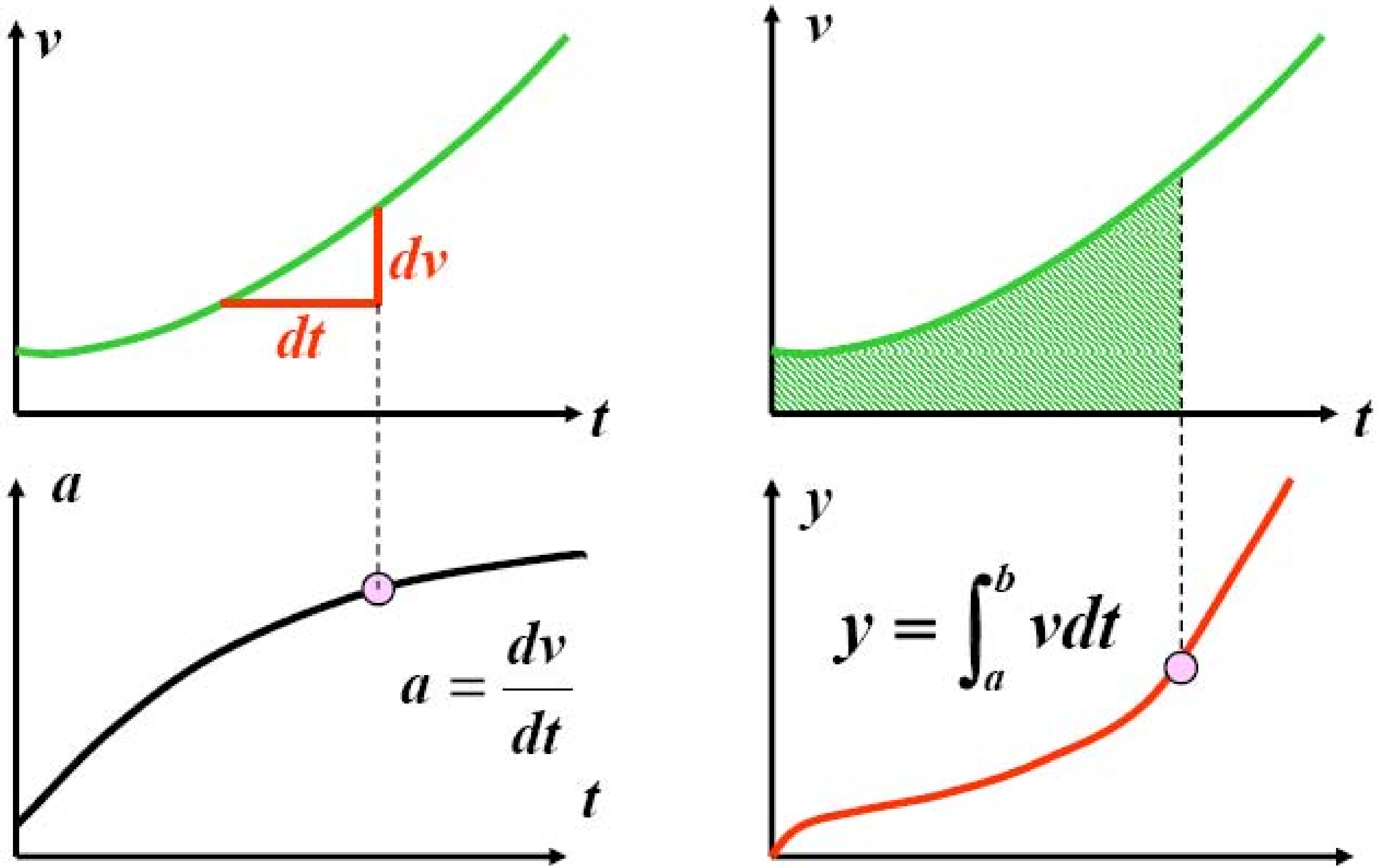
Αριθμητική Ανάλυση

Αργύρης Δελής

Διάλεξη 13η

Σχολή Μηχανικών Παραγωγής & Διοίκησης
Πολυτεχνείο Κρήτης

ΚΕΦ. 5: ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ ΚΑΙ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ



<u>ΜΕΡΟΣ Α</u>: ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ (ΔΙΑΦΟΡΙΣΗ)

- Πολλές φορές η παράγωγος, καθώς και παράγωγοι ανώτερης τάξης, μίας συνάρτησης f είναι δύσκολο να υπολογιστούν, λόγω της πολυπλοκότητάς της.

<u>ΜΕΡΟΣ Α</u>: ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ (ΔΙΑΦΟΡΙΣΗ)

- Πολλές φορές η παράγωγος, καθώς και παράγωγοι ανώτερης τάξης, μίας συνάρτησης f είναι δύσκολο να υπολογιστούν, λόγω της πολυπλοκότητάς της.

- Άλλες φορές γνωρίζουμε **διακριτές** τιμές μίας συνάρτησης ή έχουμε δεδομένα (x_i, y_i) και θέλουμε να υπολογίσουμε την παράγωγο (μεταβολή) σε κάποιο από τα x_i ή και σε σημεία $x \neq x_i$.

ΜΕΡΟΣ Α: ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ (ΔΙΑΦΟΡΙΣΗ)

- Πολλές φορές η παράγωγος, καθώς και παράγωγοι ανώτερης τάξης, μίας συνάρτησης f είναι δύσκολο να υπολογιστούν, λόγω της πολυπλοκότητάς της.

- Άλλες φορές γνωρίζουμε **διακριτές** τιμές μίας συνάρτησης ή έχουμε δεδομένα (x_i, y_i) και θέλουμε να υπολογίσουμε την παράγωγο (μεταβολή) σε κάποιο από τα x_i ή και σε σημεία $x \neq x_i$.

- Η κατασκευή αριθμητικών τύπων παραγώγισης κυρίως στηρίζεται σε **χρήση αναπτυγμάτων Taylor** και η ακρίβεια των παραγώμενων τύπων εξαρτάται κυρίως από το πλήθος των όρων των αναπτυγμάτων που χρησιμοποιούνται καθώς και από τη μορφή της συνάρτησης.

ΜΕΡΟΣ Α: ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΠΑΡΑΓΩΓΙΣΗ (ΔΙΑΦΟΡΙΣΗ)

- Πολλές φορές η παράγωγος, καθώς και παράγωγοι ανώτερης τάξης, μίας συνάρτησης f είναι δύσκολο να υπολογιστούν, λόγω της πολυπλοκότητάς της.

- Άλλες φορές γνωρίζουμε **διακριτές** τιμές μίας συνάρτησης ή έχουμε δεδομένα (x_i, y_i) και θέλουμε να υπολογίσουμε την παράγωγο (μεταβολή) σε κάποιο από τα x_i ή και σε σημεία $x \neq x_i$.

- Η κατασκευή αριθμητικών τύπων παραγώγισης κυρίως στηρίζεται σε **χρήση αναπτυγμάτων Taylor** και η ακρίβεια των παραγώμενων τύπων εξαρτάται κυρίως από το πλήθος των όρων των αναπτυγμάτων που χρησιμοποιούνται καθώς και από τη μορφή της συνάρτησης.

- Ένας άλλος τρόπος υπολογισμού παραγώγων είναι με **χρήση παρεμβολής** (πολυωνυμικής, spline κ.τ.λ.)

Υπολογισμός Παραγώγων μέσω αναπτυγμάτων Taylor

Γνωρίζουμε ότι για συνάρτηση $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ η παράγωγος σ΄ενα σημείο x

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

Υπολογισμός Παραγώγων μέσω αναπτυγμάτων Taylor

Γνωρίζουμε ότι για συνάρτηση $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ η παράγωγος σ΄ενα σημείο x

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

Η πιο απλή προσέγγιση της παραγώγου μπορεί να δωθεί τότε ως

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad \text{(τέμνουσα)}$$

Υπολογισμός Παραγώγων μέσω αναπτυγμάτων Taylor

Γνωρίζουμε ότι για συνάρτηση $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ η παράγωγος σ΄ενα σημείο x

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

Η πιο απλή προσέγγιση της παραγώγου μπορεί να δωθεί τότε ως

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad \text{(τέμνουσα)}$$

Έστω τώρα το ανάπτυγμα Taylor για την $f(x) \in C^n[a,b]$ γύρω από το x

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \cdots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(\xi_1) \quad (1)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \cdots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(\xi_2) \quad (2)$$

Υπολογισμός Παραγώγων μέσω αναπτυγμάτων Taylor

Γνωρίζουμε ότι για συνάρτηση $f : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ η παράγωγος σ΄ενα σημείο x

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

Η πιο απλή προσέγγιση της παραγώγου μπορεί να δωθεί τότε ως

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \quad \text{(τέμνουσα)}$$

Έστω τώρα το ανάπτυγμα Taylor για την $f(x) \in C^n[a,b]$ γύρω από το x

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \cdots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(\xi_1) \quad (1)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \cdots + \frac{h^n}{n!}f^{(n)}(\xi_2) \quad (2)$$

Κρατώντας τους δύο πρώτους όρους

$$(1) \Rightarrow f'(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{h}{2!}f''(\xi_1) \quad \text{(προς τα εμπρός διαφορά)} \quad (3)$$

$$(2) \Rightarrow f'(x) = \frac{f(x)-f(x-h)}{h} + \frac{h}{2!}f''(\xi_2) \quad \text{(προς τα πίσω διαφορά)} \quad (4)$$

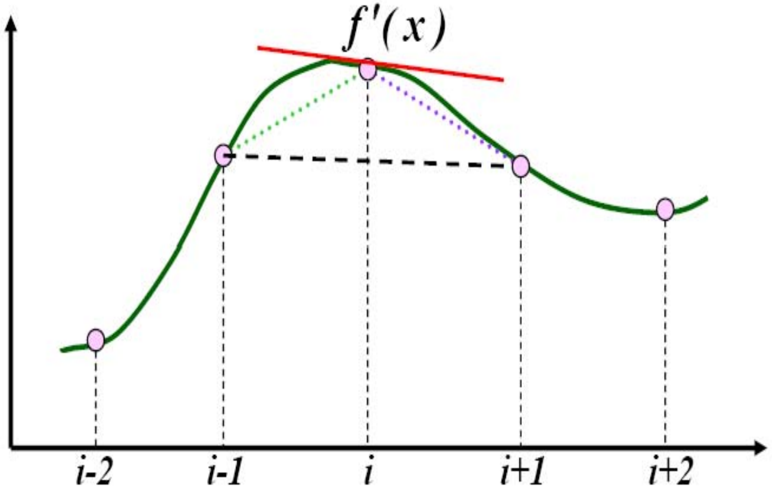
Αφαιρώντας τώρα την (2) από την $(1) \Rightarrow$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] \quad \text{(κεντρική διαφορά)} \tag{5}$$

Αφαιρώντας τώρα την (2) από την (1) $\Rightarrow$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] \quad \text{(κεντρική διαφορά)} \tag{5}$$

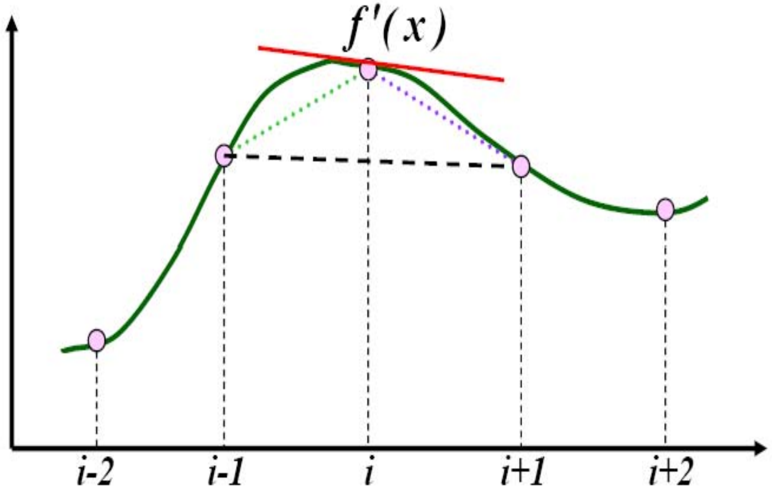
Έστω η συνάρτηση $f(x) \in [a,b]$ σε σημεία $x_i = a + ih$, $i = 0, \ldots, n$



Αφαιρώντας τώρα την (2) από την $(1) \Rightarrow$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] \quad \text{(κεντρική διαφορά)} \tag{5}$$

Έστω η συνάρτηση $f(x) \in [a, b]$ σε σημεία $x_i = a + ih, i = 0, \ldots, n$



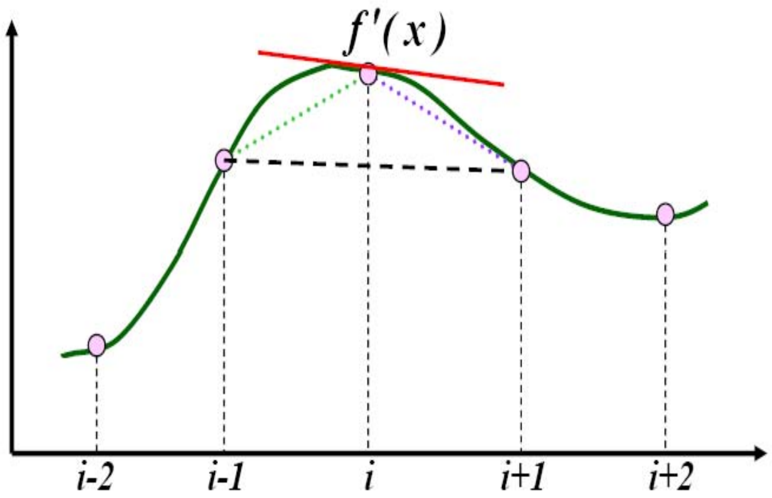
$$\begin{aligned}
f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h) \\
f'(x_i) &= \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h) \\
f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2)
\end{aligned}$$

- Οι όροι $O(\cdot)$ είναι η ποσότητα σφάλματος της κάθε προσέγγισης λόγω αποκοπής των όρων στα αναπτύγματα Taylor.

Αφαιρώντας τώρα την (2) από την $(1) \Rightarrow$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] \quad \text{(κεντρική διαφορά)} \tag{5}$$

Έστω η συνάρτηση $f(x) \in [a, b]$ σε σημεία $x_i = a + ih, i = 0, \ldots, n$



$$\begin{aligned} f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h) \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h) \\ f'(x_i) &= \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2) \end{aligned}$$

- Οι όροι $O(\cdot)$ είναι η ποσότητα σφάλματος της κάθε προσέγγισης λόγω αποκοπής των όρων στα αναπτύγματα Taylor.

- Μιά ποσότητα ψ, που εξαρτάται από το h, είναι **τάξης** k, αν και μόνο αν καθώς το $h \to 0$ $\exists\, C \in \mathbf{R} : |\psi(h)| \leq Ch^k$, διαβάζεται O του h^k και γράφουμε $\psi(h) = O(h^k)$.

Προσθέτωντας τις (1) και (2) υπολογίζουμε μια προσέγγιση της $f''(x)$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{24}[f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)] \qquad (6)$$

$\Longrightarrow$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + O(h^2) \qquad (7)$$

(Κεντρική διαφορά 3 σημείων).

Προσθέτωντας τις (1) και (2) υπολογίζουμε μια προσέγγιση της $f''(x)$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{24}[f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)] \qquad (6)$$

$\Longrightarrow$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + O(h^2) \qquad (7)$$

(Κεντρική διαφορά 3 σημείων).

Αντικαθιστώντας την (7) στο ανάπτυγμα Taylor γύρω από το x_i

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

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

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

Άσκηση Χρησιμοποιήστε εμπρός, πίσω και κεντρικές διαφορές για να εκτιμήσετε την πρώτη και δεύτερη παράγωγο στο $x = 0.5$ της $f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$, με βήμα $h = 0.5$ και βήμα $h = 0.25$ και συγκρίνεται με την πραγματική τιμή για κάθε περίπτωση.

Άσκηση Χρησιμοποιήστε εμπρός, πίσω και κεντρικές διαφορές για να εκτιμήσετε την πρώτη και δεύτερη παράγωγο στο $x = 0.5$ της $f(x) = -0.1x^4 - 0.15x^3 - 0.5x^2 - 0.25x + 1.2$, με βήμα $h = 0.5$ και βήμα $h = 0.25$ και συγκρίνεται με την πραγματική τιμή για κάθε περίπτωση.

Λύση Για $h = 0.5$ υπολογίζουμε τα

$$\begin{aligned} x_{i-1} &= 0 \qquad f(x_{i-1}) = 1.2 \\ x_i &= 0.5 \qquad f(x_i) = 0.925 \\ x_{i+1} &= 1.0 \qquad f(x_{i+1}) = 0.2 \end{aligned}$$

Τότε

(Ε.Δ) $f'(0.5) \approx \dfrac{0.2 - 0.925}{0.5} = -1.45$, (Π.Δ) $f'(0.5) \approx \dfrac{0.925 - 1.2}{0.5} = -0.55$

(Κ.Δ) $f'(0.5) \approx \dfrac{0.2 - 1.2}{2 \cdot 0.5} = -1.0$

Τύποι προσέγγισης παραγώγων με προς τα **εμπρός** διαφορές

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} + O(h) \tag{8}$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 4f(x_{i+1}) - 3f(x_i)}{2h} + O(h^2) \tag{9}$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + f(x_i)}{h^2} + O(h) \tag{10}$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 4f(x_{i+2}) - 5f(x_{i+1}) + 2f(x_i)}{h^2} + O(h^2) \tag{11}$$

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+3}) - 3f(x_{i+2}) + 3f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h^3} + O(h) \tag{12}$$

$$f'''(x_i) = \frac{-3f(x_{i+4}) + 14f(x_{i+3}) - 24f(x_{i+2}) + 18f(x_{i+1}) - 5f(x_i)}{2h^3} + O(h^2) \tag{13}$$

Τύποι προσέγγισης παραγώγων με προς τα **πίσω** διαφορές

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} + O(h) \tag{14}$$

$$f'(x_i) = \frac{3f(x_i) - 4f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{2h} + O(h^2) \tag{15}$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i) - 2f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{h^2} + O(h) \tag{16}$$

$$f''(x_i) = \frac{2f(x_i) - 5f(x_{i-1}) + 4f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^2} + O(h^2) \tag{17}$$

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_i) - 3f(x_{i-1}) + 3f(x_{i-2}) - f(x_{i-3})}{h^3} + O(h) \tag{18}$$

$$f'''(x_i) = \frac{5f(x_i) - 18f(x_{i-1}) + 24f(x_{i-2}) - 14f(x_{i-3}) + 3f(x_{i-4})}{2h^3} + O(h^2) \tag{19}$$

Τύποι προσέγγισης παραγώγων με **κεντρικές** διαφορές

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2) \tag{20}$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h} + O(h^4) \tag{21}$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + O(h^2) \tag{22}$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{12h^2} + O(h^4) \tag{23}$$

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{2h^3} + O(h^2) \tag{24}$$

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3})}{8h^3} + O(h^4)$$

Τύποι προσέγγισης παραγώγων με **κεντρικές** διαφορές

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} + O(h^2) \tag{20}$$

$$f'(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 8f(x_{i+1}) - 8f(x_{i-1}) + f(x_{i-2})}{12h} + O(h^4) \tag{21}$$

$$f''(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{h^2} + O(h^2) \tag{22}$$

$$f''(x_i) = \frac{-f(x_{i+2}) + 16f(x_{i+1}) - 30f(x_i) + 16f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{12h^2} + O(h^4) \tag{23}$$

$$f'''(x_i) = \frac{f(x_{i+2}) - 2f(x_{i+1}) + 2f(x_{i-1}) - f(x_{i-2})}{2h^3} + O(h^2) \tag{24}$$

$$f'''(x_i) = \frac{-f(x_{i+3}) + 8f(x_{i+2}) - 13f(x_{i+1}) + 13f(x_{i-1}) - 8f(x_{i-2}) + f(x_{i-3})}{8h^3} + O(h^4)$$

Άσκηση Αποδείξτε τους τύπους (9), (15), (16), (17), (21) και (22) και εφαρμόστε τους στην προηγούμενη άσκηση για βήμα $h = 0.25$.

Παραγώγιση μέσω πολυωνυμικής παρεμβολής

Υπενθυμίζεται ότι αν $f \in C^{n+1}[a,b]$ και $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ανά δύο διαφορετικά μεταξύ τους σημεία. Έαν $p_n \in \mathbf{P}_n$ το πολυώνυμο παρεμβολής στα $\{x_i\}_{i=0}^n$ τότε ισχύουν $\forall x \in [a,b]$

$$f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \prod_{i=0}^{n} (x - x_i), \quad \text{για } \xi \in (a,b), \tag{25}$$

όπου

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i(x) \quad \text{(μορφή Langrange)} \tag{26}$$

Παραγώγιση μέσω πολυωνυμικής παρεμβολής

Υπενθυμίζεται ότι αν $f \in C^{n+1}[a,b]$ και $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ανά δύο διαφορετικά μεταξύ τους σημεία. Έαν $p_n \in \mathbf{P}_n$ το πολυώνυμο παρεμβολής στα $\{x_i\}_{i=0}^n$ τότε ισχύουν $\forall x \in [a,b]$

$$f(x) - p_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \prod_{i=0}^{n} (x - x_i), \quad \text{για } \xi \in (a,b), \tag{25}$$

όπου

$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i(x) \quad \text{(μορφή Langrange)} \tag{26}$$

Συνεπώς παραγωγίζοντας την (25)

$$\begin{aligned} f'(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i'(x) \quad &+ \quad \frac{d}{dx}\Big[\frac{\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)}{(n+1)!}\Big] f^{(n+1)}(\xi) + \\ &+ \quad \frac{\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)}{(n+1)!} \frac{d}{dx}[f^{(n+1)}(\xi)] \end{aligned} \tag{27}$$

Άν το x πάρει μία τιμή από τις $x_0, x_1, \dots, x_n$ ο τρίτος όρος του αθροίσματος στην (27) μηδενίζεται και συνεπώς

$$\boxed{f'(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i'(x_i) + \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} (x_i - x_j) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \qquad (28)}$$

Άν το x πάρει μία τιμή από τις $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ο τρίτος όρος του αθροίσματος στην (27) μηδενίζεται και συνεπώς

$$f'(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i'(x_i) + \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} (x_i - x_j) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \tag{28}$$

- Αν τα σημεία x_i είναι **ισαπέχοντα** τότε από την σχέση (28) παράγουμε τους αντίστοιχους τύπους προσέγγισης της πρώτης παραγώγου όπως και με τη χρήση αναπτυγμάτων Taylor, επιλέγοντας φυσικά τα κατάλληλα σημεία που πρέπει να χρησιμοποιηθούν. (Άσκηση)

Άν το x πάρει μία τιμή από τις $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ο τρίτος όρος του αθροίσματος στην (27) μηδενίζεται και συνεπώς

$$\boxed{f'(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i'(x_i) + \prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{n} (x_i - x_j) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \qquad (28)}$$

- Αν τα σημεία x_i είναι **ισαπέχοντα** τότε από την σχέση (28) παράγουμε τους αντίστοιχους τύπους προσέγγισης της πρώτης παραγώγου όπως και με τη χρήση αναπτυγμάτων Taylor, επιλέγοντας φυσικά τα κατάλληλα σημεία που πρέπει να χρησιμοποιηθούν. (Άσκηση)

- Η παραγώγιση με παρεμβολή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη όταν τα σημεία (η τα δεδομένα) δεν είναι ισαπέχοντα.

Άν το x πάρει μία τιμή από τις $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ο τρίτος όρος του αθροίσματος στην (27) μηδενίζεται και συνεπώς

$$f'(x_i) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i'(x_i) + \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{n} (x_i - x_j) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \qquad (28)$$

- Αν τα σημεία x_i είναι **ισαπέχοντα** τότε από την σχέση (28) παράγουμε τους αντίστοιχους τύπους προσέγγισης της πρώτης παραγώγου όπως και με τη χρήση αναπτυγμάτων Taylor, επιλέγοντας φυσικά τα κατάλληλα σημεία που πρέπει να χρησιμοποιηθούν. (Άσκηση)

- Η παραγώγιση με παρεμβολή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη όταν τα σημεία (η τα δεδομένα) δεν είναι ισαπέχοντα.

- Υπενθυμίζεται ότι η για παραγώγιση με παρεμβολή κυβικών splines έχουμε και αντίστοιχες εκτιμήσεις σφάλματος μέχρι παραγώγους **τρίτης** τάξης.

Παράδειγμα Η ροή θερμότητας στο μέτωπο αέρα/επιφάνεια του εδάφους όπως δίνεται από το νόμο Fourier είναι

$$q\Big|_{z=0} = -k\rho C\frac{dT}{dz}\Big|_{z=0}$$

όπου

$$\begin{aligned}
q &= \text{ροή θερμότητας}, > 0 \text{ από τον αέρα στο έδαφος, σε } W/m^2, \\
k &= \text{συντελεστής θερμικής διάχυσης στο έδαφος} \approx 3.5 \cdot 10^{-7} m^2/s \\
\rho &= \text{πυκνότητα εδάφους} \approx 1800 Kgr/m^3 \\
C &= \text{ειδική θερμότητα εδάφους} \approx 840 J/(Kgr \cdot^{o} \mathcal{C})
\end{aligned}$$

Παράδειγμα Η ροή θερμότητας στο μέτωπο αέρα/επιφάνεια του εδάφους όπως δίνεται από το νόμο Fourier είναι

$$q\Big|_{z=0} = -k\rho C \frac{dT}{dz}\Big|_{z=0}$$

όπου

$$\begin{aligned} q &= \text{ροή θερμότητας}, > 0 \text{ από τον αέρα στο έδαφος, σε } W/m^2, \\ k &= \text{συντελεστής θερμικής διάχυσης στο έδαφος} \approx 3.5 \cdot 10^{-7} m^2/s \\ \rho &= \text{πυκνότητα εδάφους} \approx 1800 Kgr/m^3 \\ C &= \text{ειδική θερμότητα εδάφους} \approx 840 J/(Kgr \cdot^o \mathcal{C}) \end{aligned}$$

Χρησιμοποιήστε αριθμητική διαφόριση για τον υπολογισμό της αλλαγής θερμοκρασίας (dT/dz) στο μέτωπο ($z = 0$) αέρα/έδαφος και υπολογίστε το q στην επιφάνεια του εδάφους έχοντας τα πειραματικά δεδομένα

$z_i(cm)$	0	1.25	3.75
$T_i(^o\mathcal{C})$	13.5	12	10

Από τον τύπο (28) και χωρίς τον όρο του σφάλματος, χρειάζεται να υπολογιστούν τα πολυώνυμα $L_0(z), L_1(z), L_2(z)$ καθώς και τα $L_0'(z), L_1'(z), L_2'(z)$ έτσι ώστε

$$\left.\frac{dT}{dz}\right|_{z=0} = T'(0) = \sum_{i=0}^{n} T_i L_i'(z_i)$$

Από τον τύπο (28) και χωρίς τον όρο του σφάλματος, χρειάζεται να υπολογιστούν τα πολυώνυμα $L_0(z), L_1(z), L_2(z)$ καθώς και τα $L_0'(z), L_1'(z), L_2'(z)$ έτσι ώστε

$$\left.\frac{dT}{dz}\right|_{z=0} = T'(0) = \sum_{i=0}^{n} T_i L_i'(z_i)$$

Έχουμε

$$L_0'(z) = \frac{2z - z_1 - z_2}{(z_0 - z_1)(z_0 - z_2)} \quad L_1'(z) = \frac{2z - z_0 - z_2}{(z_1 - z_0)(z_1 - z_2)}, \quad L_2'(z) = \frac{2z - z_0 - z_1}{(z_2 - z_0)(z_2 - z_1)}$$

Από τον τύπο (28) και χωρίς τον όρο του σφάλματος, χρειάζεται να υπολογιστούν τα πολυώνυμα $L_0(z), L_1(z), L_2(z)$ καθώς και τα $L_0'(z), L_1'(z), L_2'(z)$ έτσι ώστε

$$\left.\frac{dT}{dz}\right|_{z=0} = T'(0) = \sum_{i=0}^{n} T_i L_i'(z_i)$$

Έχουμε

$$L_0'(z) = \frac{2z - z_1 - z_2}{(z_0 - z_1)(z_0 - z_2)} \quad L_1'(z) = \frac{2z - z_0 - z_2}{(z_1 - z_0)(z_1 - z_2)}, \quad L_2'(z) = \frac{2z - z_0 - z_1}{(z_2 - z_0)(z_2 - z_1)}$$

Αντικαθιστώντας

$$T'(0) = 13.5\frac{2(0) - 1.25 - 3.75}{(0 - 1.25)(0 - 3.75)} + 12\frac{2(0) - 0 - 3.75}{(1.25 - 0)(1.25 - 3.75)} + 10\frac{2(0) - 0 - 1.25}{(3.75 - 0)(3.75 - 1.25)}$$

$$\Rightarrow T'(0) = -1.333333^o\mathcal{C}/cm = -133.3333^o\mathcal{C}/m$$

Από τον τύπο (28) και χωρίς τον όρο του σφάλματος, χρειάζεται να υπολογιστούν τα πολυώνυμα $L_0(z), L_1(z), L_2(z)$ καθώς και τα $L'_0(z), L'_1(z), L'_2(z)$ έτσι ώστε

$$\left.\frac{dT}{dz}\right|_{z=0} = T'(0) = \sum_{i=0}^{n} T_i L'_i(z_i)$$

Έχουμε

$$L'_0(z) = \frac{2z - z_1 - z_2}{(z_0 - z_1)(z_0 - z_2)} \quad L'_1(z) = \frac{2z - z_0 - z_2}{(z_1 - z_0)(z_1 - z_2)}, \quad L'_2(z) = \frac{2z - z_0 - z_1}{(z_2 - z_0)(z_2 - z_1)}$$

Αντικαθιστώντας

$$T'(0) = 13.5\frac{2(0) - 1.25 - 3.75}{(0 - 1.25)(0 - 3.75)} + 12\frac{2(0) - 0 - 3.75}{(1.25 - 0)(1.25 - 3.75)} + 10\frac{2(0) - 0 - 1.25}{(3.75 - 0)(3.75 - 1.25)}$$

$$\Rightarrow T'(0) = -1.333333^o\mathcal{C}/cm = -133.3333^o\mathcal{C}/m$$

Άρα $\left.q\right|_{z=0} = 70.56W/m^2$. ($1W = 1J/s$)

Αριθμητική παραγώγιση με τη μέθοδο απροσδιόριστων συντελεστών

Εστω ότι δίνονται διακριτές τιμές $(x_i, f(x_i))$ και έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε έναν τύπο αριθμητικής παραγώγισης της μορφής

$$w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + \cdots + w_n f(x_n) \approx f'(x_k),$$

θέλουμε τότε να υπολογίσουμε τα $w_0, w_1, \ldots, w_n$ (τα λεγόμενα **βάρη**), ώστε να είναι όσο το **δυνατόν πιό ακριβής.**

Αριθμητική παραγώγιση με τη μέθοδο απροσδιόριστων συντελεστών

Εστω ότι δίνονται διακριτές τιμές $(x_i, f(x_i))$ και έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε έναν τύπο αριθμητικής παραγώγισης της μορφής

$$w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + \cdots + w_n f(x_n) \approx f'(x_k),$$

θέλουμε τότε να υπολογίσουμε τα $w_0, w_1, \ldots, w_n$ (τα λεγόμενα **βάρη**), ώστε να είναι όσο το **δυνατόν πιό ακριβής.**

Για να το πετύχουμε αυτό ζητάμε ο τύπος να παραγωγίζει ακριβώς πολυώνυμα έως και $n-$βαθμού.

Αριθμητική παραγώγιση με τη μέθοδο απροσδιόριστων συντελεστών

Εστω ότι δίνονται διακριτές τιμές $(x_i, f(x_i))$ και έστω ότι θέλουμε να κατασκευάσουμε έναν τύπο αριθμητικής παραγώγισης της μορφής

$$w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + \cdots + w_n f(x_n) \approx f'(x_k),$$

θέλουμε τότε να υπολογίσουμε τα $w_0, w_1, \ldots, w_n$ (τα λεγόμενα **βάρη**), ώστε να είναι όσο το **δυνατόν πιό ακριβής.**

Για να το πετύχουμε αυτό ζητάμε ο τύπος να παραγωγίζει ακριβώς πολυώνυμα έως και $n-$βαθμού.

Δηλαδή, αν η $f(x) \equiv p_n(x)$, τότε σε κάποιο σημείο $x_k,\ k \in 0, 1, 2, \ldots, n$

$$p_n'(x_k) = w_0 p_n(x_0) + w_1 p_n(x_1) + \cdots + w_n p_n(x_n)$$

Χρησιμοποιώντας τη βάση του $\mathbf{P}_n$, $\phi_i(x) = x^i, i = 0, \ldots, n$ έχουμε θέτωντας διαδοχικά $p_n(x) = x^i$ για $i = 0, \ldots, n$

$$
\begin{aligned}
\phi_0'(x_k) &= w_0\phi_0(x_0) + w_1\phi_0(x_1) + \cdots + w_n\phi_0(x_n) \\
\phi_1'(x_k) &= w_0\phi_1(x_0) + w_1\phi_1(x_1) + \cdots + w_n\phi_1(x_n) \\
\phi_2'(x_k) &= w_0\phi_2(x_0) + w_1\phi_2(x_1) + \cdots + w_n\phi_2(x_n) \\
\vdots & \qquad\qquad \vdots \\
\phi_n'(x_k) &= w_0\phi_n(x_0) + w_1\phi_n(x_1) + \cdots + w_n\phi_n(x_n)
\end{aligned}
$$

και λύνουμε το γραμμικό $(n+1) \times (n+1)$ σύστημα ως προς τα βάρη $w_0, w_1, \ldots, w_n$.

$$
\begin{aligned}
\phi_0'(x_k) &= w_0\phi_0(x_0) + w_1\phi_0(x_1) + \cdots + w_n\phi_0(x_n) \\
\phi_1'(x_k) &= w_0\phi_1(x_0) + w_1\phi_1(x_1) + \cdots + w_n\phi_1(x_n) \\
\phi_2'(x_k) &= w_0\phi_2(x_0) + w_1\phi_2(x_1) + \cdots + w_n\phi_2(x_n) \\
&\vdots \\
\phi_n'(x_k) &= w_0\phi_n(x_0) + w_1\phi_n(x_1) + \cdots + w_n\phi_n(x_n)
\end{aligned}
$$

και λύνουμε το γραμμικό $(n+1) \times (n+1)$ σύστημα ως προς τα βάρη $w_0, w_1, \ldots, w_n$.

Παράδειγμα Να υπολογιστούν τα βάρη w_{-1}, w_1 έτσι ώστε ο προσεγγιστικος τύπος της αριθμητικής παραγώγισης $w_{-1}f(x_{-1}) + w_1 f(x_1)$ να είναι όσο το δυνατόν πιό ακριβής, για την προσέγγιση του $f'(x_0)$, στα σημεία $x_i = x_0 + ih, i = -1, 0, 1.$

$$
\begin{aligned}
\phi_0'(x_k) &= w_0\phi_0(x_0) + w_1\phi_0(x_1) + \cdots + w_n\phi_0(x_n) \\
\phi_1'(x_k) &= w_0\phi_1(x_0) + w_1\phi_1(x_1) + \cdots + w_n\phi_1(x_n) \\
\phi_2'(x_k) &= w_0\phi_2(x_0) + w_1\phi_2(x_1) + \cdots + w_n\phi_2(x_n) \\
&\vdots \\
\phi_n'(x_k) &= w_0\phi_n(x_0) + w_1\phi_n(x_1) + \cdots + w_n\phi_n(x_n)
\end{aligned}
$$

και λύνουμε το γραμμικό $(n+1)\times(n+1)$ σύστημα ως προς τα βάρη $w_0, w_1, \ldots, w_n$.

Παράδειγμα Να υπολογιστούν τα βάρη w_{-1}, w_1 έτσι ώστε ο προσεγγιστικος τύπος της αριθμητικής παραγώγισης $w_{-1}f(x_{-1}) + w_1 f(x_1)$ να είναι όσο το δυνατόν πιό ακριβής, για την προσέγγιση του $f'(x_0)$, στα σημεία $x_i = x_0 + ih, i = -1, 0, 1.$

Λύση Για $f(x) = p(x) = 1$ και $f(x) = p(x) = x$ έχουμε

$$\begin{aligned} 1' &= 0 = w_{-1} \cdot 1 + w_1 \cdot 1 \\ x' &= 1 = w_{-1} \cdot x_{-1} + w_1 \cdot x_1 = w_{-1} \cdot (x_0 - h) + w_1 \cdot (x_0 + h) \end{aligned}$$

$\Rightarrow$

$$\begin{aligned} w_{-1} + w_1 &= 0 \\ (-w_{-1} + w_1)h &= 1 \end{aligned}$$

$\Rightarrow \quad w_1 = -w\_1 = \dfrac{1}{2h}$. Συνεπώς

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h} \quad \text{(κεντρική διαφορά)}$$

$$
\begin{aligned}
1' &= 0 = w_{-1} \cdot 1 + w_1 \cdot 1 \\
x' &= 1 = w_{-1} \cdot x_{-1} + w_1 \cdot x_1 = w_{-1} \cdot (x_0 - h) + w_1 \cdot (x_0 + h)
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$

$$
\begin{aligned}
w_{-1} + w_1 &= 0 \\
(-w_{-1} + w_1)h &= 1
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow \quad w_1 = -w\_1 = \frac{1}{2h}$. Συνεπώς

$$
f'(x_0) \approx \frac{f(x_1) - f(x_{-1})}{2h} \quad \text{(κεντρική διαφορά)}
$$

Άσκηση Να προσδιοριστούν τα w_0, w_1, w_2 ώστε ο προσεγγιστικός τύπος της αριθμητικής παραγώγισης $\Big(w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)\Big)/h$ να είναι όσο το δυνατόν πιό ακριβής, για την προσέγγιση του $f'(x_0)$, με $x_i = x_0 + ih, i = 0, 1, 2.$

Η μέθοδος παρεκβολής (extrapolation) Richardson

Η τεχνική αυτή εφαρμόζεται για να δώσει αποτελέματα υψηλής ακρίβειας χρησιμοποιώντας τύπους χαμηλής τάξης σφάλματος.

Η ιδέα: Έστω μία ποσότητα D που προσεγγίζεται από έναν υπολογιστικό τύπο $q(h)$ μέ σφάλμα $O(h)$ ως

$$D = q(h) + c_1 h + c_2 h^2 + c_3 h^3 + \cdots\,, \quad h > 0, \quad c_i \text{ κατάλληλες σταθερές} \tag{29}$$

Αν αντικαταστήσουμε το h με $\frac{h}{2}$ στην (29) έχουμε

$$D = q(\frac{h}{2}) + c_1 \frac{h}{2} + c_2 \frac{h^2}{4} + c_3 \frac{h^3}{8} + \cdots \tag{30}$$

Διπλασιάζουμε την (30) και αφαιρούμε την (29) (απαλείφουμε το c_1)

$$D = \left[q(\frac{h}{2}) + \left(q(\frac{h}{2}) - q(h)\right)\right] + c_2\left(\frac{h^2}{2} - h^2\right) + c_3\left(\frac{h^3}{4} - h^3\right) + \cdots \tag{31}$$

Η νέα αυτή προσέγγιση του D έχει σφάλμα $O(h^2)$

Θέτωντας

$$
\begin{aligned}
q_1(h) &= q(h) \quad \text{και} \\
q_2(h) &= \left[q_1(\frac{h}{2}) + \left(q_1(\frac{h}{2}) - q_1(h)\right)\right] \quad \text{τότε} \\
D &= q_2(h) - c_2\frac{h^2}{2} - c_3\frac{3h^3}{4} - \cdots
\end{aligned}
\tag{32}
$$

Αν αντικαταστήσουμε το h με $\frac{h}{2}$ στη (32) και τετραπλασιάσουμε, τότε αφαιρώντας την (31) (απαλείφουμε το c_2) έχουμε

$$D = \left[q_2(\frac{h}{2}) + \frac{q_2(\frac{h}{2}) - q_2(h)}{3}\right] + c_3\frac{7h^3}{32} + \cdots$$

Η νέα αυτή προσέγγιση του D έχει σφάλμα $O(h^3)$ και θέτουμε

$$q_3(h) = \left[q_2(\frac{h}{2}) + \frac{q_2(\frac{h}{2}) - q_2(h)}{3}\right]$$

Συνεχίζοντας τη διαδικασία κατασκευάζουμε για $k = 2, 3, , \ldots, m$ τον προσεγγιστικό τύπο με σφάλμα $O(h^k)$

$$\boxed{q_k(h) = \frac{2^{k-1} q_{k-1}(\frac{h}{2}) - q_{k-1}(h)}{2^{k-1} - 1}}$$

Συνεχίζοντας τη διαδικασία κατασκευάζουμε για $k = 2, 3, , \ldots, m$ τον προσεγγιστικό τύπο με σφάλμα $O(h^k)$

$$\boxed{q_k(h) = \frac{2^{k-1} q_{k-1}(\frac{h}{2}) - q_{k-1}(h)}{2^{k-1} - 1}}$$

Άν ο αρχικός προσεγγιστικός τύπος έχει στους όρους σφάλματος **άρτιες δυνάμεις του** h, τότε θα έχουμε σφάλμα προσέγγισης $O(h^{2k})$ και

$$\boxed{q_k(h) = \frac{4^{k-1} q_{k-1}(\frac{h}{2}) - q_{k-1}(h)}{4^{k-1} - 1}}$$

Άσκηση Να βρεθεί η προσεγγιστική τιμή της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης $f(x) = x \ln x$ στο σημείο $x_0 = 2$ με $h = 0.1$ με ακρίβεια $O(h^4)$ και χρήση της τεχνικής Richardson.

Άσκηση Να βρεθεί η προσεγγιστική τιμή της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης $f(x) = x \ln x$ στο σημείο $x_0 = 2$ με $h = 0.1$ με ακρίβεια $O(h^4)$ και χρήση της τεχνικής Richardson.

Λύση Ξεκινώντας από το τύπο κεντρικών διαφορών (με **άρτια τάξη** σφάλματος)

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} + O(h^2)$$

θέτουμε

$$q_1(h) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} \quad \Rightarrow$$

$$q_1(0.1) = \frac{1}{0.2}\Big[(2.1)\cdot\ln(2.1) - (1.9)\cdot\ln(1.9) = 1.692728$$

και

$$q_1(h/2) = \frac{1}{h}\Big[f(x_0+h/2) - f(x_0-h/2)\Big] \Rightarrow$$

$$q_1(0.05) = \frac{1}{0.1}\Big[(2.05)\cdot\ln(2.05) - (1.95)\cdot\ln(1.95)\Big] = 1.693043$$

Για $k = 2$ έχουμε

$$q_2(h) = \frac{4q_1(\frac{h}{2}) - q_1(h)}{4-1} \quad \Rightarrow$$

$$q_2(0.1) = \frac{4q_1(0.05) - q_1(0.1)}{3} = 1.693148$$

Για $k = 2$ έχουμε

$$q_2(h) = \frac{4q_1(\frac{h}{2}) - q_1(h)}{4-1} \quad \Rightarrow$$

$$q_2(0.1) = \frac{4q_1(0.05) - q_1(0.1)}{3} = 1.693148$$

Η ακριβής τιμή της παραγώγου είναι

$$f'(2) = \ln(2) + 1 = 1.693147$$

Έχουμε δηλ. σωστά 5 δεκαδικά ψηφία ενώ στις $q_1(0.1)$ και $q_1(0.05)$ μόνο 2 και 3, αντίστοιχα!