

Glava 2

Numeričko diferenciranje

2.1 Numeričko diferenciranje

Neka je $P_n(x)$ interpolacioni polinom, a $R_n(x)$ greška interpolacije. Tada je

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x) \Rightarrow f^{(k)}(x) = P_n^{(k)}(x) + R_n^{(k)}(x).$$

Dakle, približna vrednost izvoda funkcije može se odrediti diferenciranjem interpolacionog polinoma, dok je greška tako dobijene vrednosti izvoda jednaka izvodu greške. Kako je:

$$R_n(x) = \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\Pi_{n+1}(x)|, \text{ tada je } R_n^{(k)}(x) = \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\Pi_{n+1}(x)|^{(k)}$$

Potražimo izvode NEWTONovih interpolacionih polinoma. Kako je $u'_x = v'_x = \frac{1}{h}$, imamo da je:

$$\begin{aligned} N'_I(x) &= \frac{1}{h} \left[\Delta f_0 + \frac{\Delta^2 f_0}{2!} (2u - 1) + \frac{\Delta^3 f_0}{3!} (3u^2 - 6u + 2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta^4 f_0}{4!} (4u^3 - 18u^2 + 22u - 6) + \dots \right] \\ N'_{II}(x) &= \frac{1}{h} \left[\Delta f_{n-1} + \frac{\Delta^2 f_{n-2}}{2!} (2u + 1) + \frac{\Delta^3 f_{n-3}}{3!} (3u^2 + 6u + 2) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\Delta^4 f_{n-4}}{4!} (4u^3 + 18u^2 + 22u + 6) + \dots \right] \end{aligned}$$

1. Odrediti tačku maksimuma funkcije, koja je zadana tabelom:

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
0.1	0.284605	0.073166	-0.047531	0.017963	-0.010382
0.2	0.357771	0.025635	-0.029568	0.007581	-0.003388
0.3	0.383406	-0.003933	-0.021987	0.004193	-0.002526
0.4	0.379473	-0.025920	-0.017794	0.002667	
0.5	0.353553	-0.043714	-0.015127		
0.6	0.309839	-0.058841			
0.7	0.250998				

Kako se od 0.2 do 0.3 vrednost funkcije uvećava, a od 0.3 do 0.4 umanjuje, tada nezavisno promenljivu u kojoj je maksimum treba tražiti u okolini tačke $x = 0.3$. Stoga, napišimo $N_I(x)$, polazeći od vrednosti $x = 0.3$ kao da je ona početak tablice.

$$N'_I(x) = \frac{1}{h} \left[-0.003933 + \frac{-0.021987}{2!}(2u-1) + \frac{0.004193}{3!}(3u^2-6u+2) \right]$$

Kako bi ovaj izvod bio 0, treba da važi da je:

$$\begin{aligned} -0.003933 + \frac{-0.021987}{2}(2u-1) + \frac{0.004193}{6}(3u^2-6u+2) &= 0 \\ 0.002096u^2 - 0.026180u + 0.008458 &= 0 \end{aligned}$$

Formiramo iterativni proces po lineranom članu:

$$\begin{aligned} u_{n+1} &= \frac{0.008458}{0.026180} + \frac{0.002096}{0.026180}u_n^2 \\ u_{n+1} &= 0.323071 + 0.080061u_n^2 \end{aligned}$$

Početna vrednost u iterativnom postupku je $u_0 = 0$. Iz poslednje jednakosti dobijamo niz iteracija:

$$\begin{aligned}
u_0 &= 0 \\
u_1 &= 0.323071 \\
u_2 &= 0.331427 \\
u_3 &= 0.331865 \\
u_4 &= 0.331888 \\
u_5 &= 0.331890 \\
u_6 &= 0.331890
\end{aligned}$$

Dobili smo $u = u_3 = 0.331890$. Sada je $u = \frac{x-x_2}{h} = \frac{x-0.3}{0.1}$, pošto je početna tačka od koje smo formirali Njutnov interpolacioni polinom 0.3. Dakle, funkcija $f(x)$ dostiže maksimalnu vrednost u tački $x = 0.1u + 0.3 = 0.1 \cdot 0.331890 + 0.3, tj.$

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{0.333189}.$$

2.2 Izvođenje formula za numeričko diferenciranje

Često se zahteva određivanje izvoda funkcije tako da se greška minimizira. To se postiže menjanjem koraka h , koji se naziva optimalan korak, ukoliko minimizira grešku. Greška numeričkog diferenciranja predstavlja zbir dve greške i to:

- 1) Greške metode (R_M)
- 2) Greške zaokruživanja (r)

Dakle, ukupna greška numeričkog diferenciranja je $R = R_M + r$. Diferenciranjem po h (korak interpolacije), nalaženjem minimuma funkcije $R(h)$ dobijamo optimalan korak. Razne formule za numeričko diferenciranje nastaju primenom TAYLORove, tačnije MACLAURINove formule.

2. Neka je funkcija $f(x) \in C^2[a, b]$ dva puta neprekidno diferencijabilna, čije su poznate vrednosti u ekvidistantnim čvorovima $a = x_0 < x_1 < \dots < x_j < \dots < x_n = b$. Dokazati da je:

$$f'(x_k) = \frac{\Delta f_k}{h} - \frac{f''(\xi)}{2}h, \quad \text{za neko } \xi \in (x_k, x); \quad x < x_{k+1}$$

Dokaz: Kako je

$$f(x_{k+1}) = f(x_k + h) = f(x_k) + \frac{f'(x_k)}{1!}(x_{k+1} - x_k) + \frac{f''(\xi)}{2!}(x_{k+1} - x_k)^2$$

odnosno

$$f'(x_k) = \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h} - \frac{f''(\xi)}{2!}h$$

dobijamo da je

$$f'(x_k) = \frac{\Delta f_k}{h} - \frac{f''(\xi)}{2!}h.$$

{Objašnjenje: TAYLORova formula:

$$F_{X_k}(h) = F_{X_k}(0) + \frac{F'_{X_k}(0)}{1!}h + \frac{F''_{X_k}(0)}{2!}h^2 + \dots$$

Funkcija $F_{X_k}(h)$ je razvijena u okolini $h = 0$, a X_k u indeksu je fiksiran parametar.}

Postavlja se pitanje „Da li je moguće izračunati vrednost izvoda u tačkama koje nisu čvorovi?“

3. Neka je funkcija $f(x) \in C^3[a, b]$ dva puta neprekidno diferencijabilna, čije su poznate vrednosti u ekvidistantnim čvorovima $a = x_0 < x_1 < \dots < x_j < \dots < x_n = b$. Dokazati da je

$$f' \left(x_k + \frac{h}{2} \right) = \frac{\Delta f_k}{h} - \frac{f''(\xi)}{24}h^2;$$

Dokaz: Označimo sa $\underline{x} = x_k + \frac{h}{2}$. Tada je

$$x_k = \underline{x} - \frac{h}{2}, \text{ a } x_{k+1} = \underline{x} + \frac{h}{2}$$

Na osnovu TAYLORove formule imamo da je:

$$\begin{aligned} f(x_k) &= f\left(\underline{x} - \frac{h}{2}\right) = f(\underline{x}) - \frac{h}{2} \frac{f'(\underline{x})}{1!} + \frac{h^2}{2^2} \frac{f''(\underline{x})}{2!} - \frac{h^3}{2^3} \frac{f'''(\xi)}{3!} \\ f(x_{k+1}) &= f\left(\underline{x} + \frac{h}{2}\right) = f(\underline{x}) + \frac{h}{2} \frac{f'(\underline{x})}{1!} + \frac{h^2}{2^2} \frac{f''(\underline{x})}{2!} - \frac{h^3}{2^3} \frac{f'''(\xi)}{3!} \end{aligned}$$

Oduzimanjem prve formule od druge dobijamo da je

$$f(x_{k+1}) - f(x_k) = hf'(\underline{x}) + \frac{h^3}{24} f'''(\xi),$$

odnosno

$$f'(\underline{x}) = \frac{\Delta f_k}{h} - \frac{h^2}{24} f'''(\xi)$$

Napomena: Uočimo da su približne vrednosti izvoda, u tačkama u x_0 i $x_0 + h/2$ iz prethodna dva zadatka iste i iznose $\Delta f_k/h$, ali se greške razlikuju.

Domaći zadatak: Za $f(x) \in C^3[a, b]$ izvesti formulu za diferenciranje $f'(x_k + h/n)$ gde je $n \in \mathbf{N}$ bilo koji prirodan broj, $n > 1$.

4. Neka se vrednosti funkcije f mogu izraziti sa tačnošću ε i neka je $\max |f^{(n)}(x)| = M_n$. Odrediti optimalan korak za numeričko diferenciranje po formuli:

$$\begin{aligned} \text{a) } f'(x_k) &\approx \frac{\Delta f_k}{h}; & \text{b) } f'\left(x_k + \frac{h}{2}\right) &\approx \frac{\Delta f_k}{h}; \\ \text{c) } f''(x_k) &\approx \frac{\Delta^2 f_{k-1}}{h^2} = \frac{f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1}))}{h^2} \end{aligned}$$

Rešenje:

a) Zbog zadatka 1, imamo da je $R_M = |-f''(\xi)h/2| \leq M_2 h/2$, a greška zaokrugljivanja vrednosti izraza je $r = 2\varepsilon/h$, odakle sledi da je ukupna greška $R = M_2 h/2 + 2\varepsilon/h$. Diferenciranjem po h dobijamo da je:

$$R'(h) = \frac{M_2}{2} - \frac{2\varepsilon}{h^2} = 0 \Rightarrow h^2 = \frac{4\varepsilon}{M_2}$$

b) Slično, $R = \frac{h^2 M_3}{24} + \frac{2\varepsilon}{h} \Rightarrow R'(h) = \frac{h M_3}{12} - \frac{2\varepsilon}{h^2} = 0 \Rightarrow h^3 = \frac{24\varepsilon}{M_3}$

c) Posmatrajmo desnu stranu predložene formule:

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^2} [f(x_{k+1}) - 2f(x_k) + f(x_{k-1})] &= \frac{1}{h} [f(x_k + h) - 2f(x_k) + f(x_k - h)] \\ &= \frac{1}{h^2} \left[f(x_k) + h \frac{f'(x_k)}{1!} + h^2 \frac{f''(x_k)}{2!} + h^3 \frac{f'''(x_k)}{3!} + h^4 \frac{f^{iv}(\xi)}{4!} + \right. \\ &\quad \left. - 2f(x_k) + f(x_k) - h \frac{f'(x_k)}{1!} + h^2 \frac{f''(x_k)}{2!} + h^3 \frac{f'''(x_k)}{3!} + h^4 \frac{f^{iv}(\xi)}{4!} \right] = \\ &= f''(x_k) + \frac{h^2}{12} f^{iv}(\xi), \end{aligned}$$

čime je dokazana predložena formula sa greškom $R_M = \frac{h^2}{12} M_4$, a greškom računa $r = \frac{4\varepsilon}{h^2}$, te je:

$$R = \frac{h^2}{12} M_4 + \frac{4\varepsilon}{h^2} \Rightarrow R'(h) = \frac{h M_4}{6} - \frac{8\varepsilon}{h^3} = 0 \Rightarrow h^4 = \frac{48\varepsilon}{M_4}$$

Domaći zadatak:

1) Izvesti formule za nalaženje sledećih izvoda

$$\{f'''(x_k), f^{iv}(x_k); \quad f''(x_k + h/n), f'''(x_k + h/n), f^{iv}(x_k + h/n)\}$$

i odrediti optimalan korak takvog diferenciranja.

2) Neka se vrednosti funkcije mogu odrediti sa tačnošću ε i neka je $M_n = \max |f^{(n)}(x)|$, $x \in [a, b]$. Naći optimalan korak za numeričko diferenciranje po formuli (čvorovi su ekvidistantni).

$$f'(x_k) = \frac{1}{2h} [-3f(x_k) + 4f(x_{k+1}) - f(x_{k+2})]$$

Rešenje:

$$2) R = h^2 M_3 + \frac{4\varepsilon}{h};$$

$$R'(h) = 2h M_3 - \frac{4\varepsilon}{h^2} = 0 \Rightarrow h^3 = \frac{2\varepsilon}{M_3}.$$

Postavlja se pitanje da li je u opštem slučaju moguće izvesti „najbolju” formulu za određivanje izvoda u obliku:

$$f'(x) = \frac{1}{h}(a_1 f(x + b_1 h) + a_2 f(x + b_2 h))$$

Rešenje: Pretpostavimo da je ovaj problem normalizovan, tj. da je $|b_2 - b_1| = 1$. Primenimo TAYLORovu formulu tako da ostatak bude oblika $O(h^r)$, pri čemu je r što je moguće veće. U tom slučaju imamo da je ostatak najmanji moguć.

$$f'(x) = \frac{1}{h} \left[a_1 \left(f(x) + \frac{f'(x)}{1!}(b_1 h)^1 + \frac{f''(x)}{2!}(b_1 h)^2 + \frac{f'''(x)}{3!}(b_1 h)^3 + O(h^3) \right) + a_2 \left(f(x) + \frac{f'(x)}{1!}(b_2 h)^1 + \frac{f''(x)}{2!}(b_2 h)^2 + \frac{f'''(x)}{3!}(b_2 h)^3 + O(h^3) \right) \right]$$

Iz poslednjeg dobijamo da je

$$f'(x) = \frac{a_1 + a_2}{h} f(x) + (a_1 b_1 + a_2 b_2) f'(x) + \frac{h}{2} (a_1 b_1^2 + a_2 b_2^2) f''(x) + \frac{h^2}{3!} (a_1 b_1^3 + a_2 b_2^3) f'''(x) + \left[\frac{f^{iv}(\xi_1)}{4!} (b_1 h)^4 + \frac{f^{iv}(\xi_2)}{4!} (b_2 h)^4 \right]$$

Da bi leva strana bila „jednaka” desnoj zahtevamo da je

$$a_1 = -a_2, b_1 - b_2 = 1, b_1 = -b_2, 2a_1 b_1 = 1$$

$$\text{tj. } a_1 = -a_2 = 1, b_1 = -b_2 = 1/2$$

Dakle, najbolja od „dvotačkastih” formula za izračunavanje izvoda je

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left(f \left(x + \frac{h}{2} \right) - f \left(x - \frac{h}{2} \right) \right), \text{ a greška } R_M = \frac{h^4}{2^3 \cdot 4!} M_4$$

Napomena: J. M. ASH i R. L. JONES su pokazali da je u klasi „trotačkastih” formula, polazeći od:

$$f'(x) = \frac{1}{h}(a_1 f(x + b_1 h) + a_2 f(x + b_2 h) + a_3 f(x + b_3 h)),$$

uz uslov normalizacije $\min\{|b_1 - b_2|, |b_2 - b_3|, |b_1 - b_3|\} = 1$, najbolja ona za koju je

$$\begin{aligned} a_1 &= 32/120 & b_1 &= 3 \\ a_2 &= -27/120 & b_2 &= -2 \\ a_3 &= -5/120 & b_3 &= 6 \end{aligned}$$

(Ispitni zadatak): Funkcija $x \mapsto f(x)$ tabelirana je sa korakom $h > 0$, u ekvidistantnim čvorovima x_0, x_1, x_2, x_3, x_4 . Dokazati aproksimacije ($f_k \approx f(x_k)$):

a) $f'(x_0) = \frac{1}{12h}(-25f_0 + 48f_1 - 36f_2 + 16f_3 - 3f_4)$

b) $f'(x_1) = \frac{1}{12h}(-3f_0 - 10f_1 + 18f_2 - 6f_3 + f_4)$

c) $f'(x_2) = \frac{1}{12h}(f_0 - 8f_1 + 8f_3 - f_4)$

Rešenje: Iskoristimo I NEWTONov interpolacioni polinom:

x	f	Δf	$\Delta^2 f$	$\Delta^3 f$	$\Delta^4 f$
x_0	f_0	$f_1 - f_0$	$f_2 - 2f_1 + f_0$	$f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0$	$f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0$
x_1	f_1	$f_2 - f_1$	$f_3 - 2f_2 + f_1$	$f_4 - 3f_3 + 3f_2 - f_1$	
x_2	f_2	$f_3 - f_2$	$f_4 - 2f_3 + f_2$		
x_3	f_3	$f_4 - f_3$			
x_4	f_4				

$$u = (x - x_0)/h$$

$$\begin{aligned} N_I(x) &= f_0 + (f_1 - f_0)u + \frac{1}{2}(f_2 - 2f_1 + f_0)(u^2 - u) \\ &\quad + \frac{1}{6}(f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0)(u^3 - 3u^2 + 2u) \\ &\quad + \frac{1}{24}(f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0)(u^4 - 6u^3 + 11u^2 - 6u) \end{aligned}$$

odnosno:

$$\begin{aligned} N'_I(x) &= \frac{1}{h} \left[(f_1 - f_0) + \frac{1}{2}(f_2 - 2f_1 + f_0)(2u - 1) \right. \\ &\quad + \frac{1}{6}(f_3 - 3f_2 + 3f_1 - f_0)(3u^2 - 6u + 2) \\ &\quad \left. + \frac{1}{24}(f_4 - 4f_3 + 6f_2 - 4f_1 + f_0)(4u^3 - 18u^2 + 22u - 6) \right] \end{aligned}$$

Zamenom:

$x = x_0 \Rightarrow u = 0 \dots$ dobijamo prvu formulu (a)

$x = x_1 \Rightarrow u = 1 \dots$ dobijamo prvu formulu (b)

$x = x_2 \Rightarrow u = 2 \dots$ dobijamo prvu formulu (c)

Domaći zadatak: Formiranjem drugog interpolacionog NEWTONovog polinoma odrediti iz datih podataka $f'(x_3)$ i $f'(x_4)$.