Numerička matematika
6. predavanje — dodatak

Saša Singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja — dodatka

- Numeričko deriviranje:
  - Aproksimacije derivacija i numeričko deriviranje.

Metoda konačnih diferencija za prostorne varijable

Aproksimacije derivacija konačnim razlikama

Gledamo funkciju jedne varijable $u = u(x)$. Za prvu i drugu derivaciju funkcije

$$\frac{du}{dx}, \qquad \frac{d^2u}{dx^2},$$

u nekoj točki x, najčešće koristimo

- aproksimacije konačnim razlikama.

Za funkciju više varijabli $u = u(x, \cdot)$, na isti način možemo dobiti aproksimacije parcijalnih derivacija

$$\frac{\partial u}{\partial x}, \qquad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$

po nekoj "prostornoj" varijabli x.

Aproksimacije derivacija konačnim razlikama

Ove aproksimacije koriste se i za

- prvu parcijalnu derivaciju po vremenu
$$\frac{\partial u}{\partial t},$$
na primjer, kod paraboličkih jednadžbi,
- a rjeđe za više derivacije po vremenu
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2},$$
recimo, kod hiperboličkih jednadžbi.

U nastavku, aproksimacije za derivacije pišemo za funkciju jedne varijable $u = u(x)$.

Aproksimacije za prvu derivaciju

Za prvu derivaciju funkcije u koristimo sljedeće aproksimacije:

- konačnom (ili podijeljenom) razlikom unaprijed
$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x)}{h},$$
- konačnom (ili podijeljenom) razlikom unazad
$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x) - u(x-h)}{h},$$
- simetričnom ili centralnom konačnom (ili podijeljenom) razlikom
$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}.$$

Lokalne greške diskretizacije

Iz Taylorovog razvoja funkcije u oko točke x, za prethodne tri formule imamo sljedeće tri lokalne greške diskretizacije:

- za razlike unaprijed

$$\delta(x) = -\frac{1}{2} h \cdot \frac{d^2 u}{dx^2}(\xi), \quad \xi \in \langle x, x+h \rangle,$$

- za razlike unazad

$$\delta(x) = +\frac{1}{2} h \cdot \frac{d^2 u}{dx^2}(\xi), \quad \xi \in \langle x-h, x \rangle,$$

- za simetrične ili centralne razlike

$$\delta(x) = -\frac{1}{6} h^2 \cdot \frac{d^3 u}{dx^3}(\xi), \quad \xi \in \langle x-h, x+h \rangle.$$

Opća aproksimacija za prvu derivaciju

Sve tri prethodne aproksimacije su posebni slučajevi tzv.

- nesimetrične ili "opće" konačne (ili podijeljene) razlike.

Ovu aproksimaciju za $u'(x)$ dobivamo tako da

- uzmemo dva nenegativna "koraka" h_1, h_2, od kojih bar jedan mora biti pozitivan,
- "povučemo" interpolacijski polinom p_1 za funkciju u s različitim čvorovima $x - h_1$ i $x + h_2$,
- $u'(x)$ aproksimiramo (konstantnom) derivacijom tog polinoma $p_1'(x)$.

Uočite da se točka x nalazi između čvorova $x - h_1$ i $x + h_2$, s tim da smije biti jednaka jednom od njih.

Opća aproksimacija za prvu derivaciju

Pripadna aproksimacija prve derivacije je

$$\frac{du}{dx}(x) \approx \frac{u(x + h_2) - u(x - h_1)}{h_1 + h_2}.$$

Iz Taylorovog razvoja za u oko točke x, dobivamo da je lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije

$$\delta(x) = -\frac{h_2 - h_1}{2} \cdot \frac{d^2u}{dx^3}(x) - \frac{1}{6}\, \frac{h_1^3 + h_2^3}{h_1 + h_2} \cdot \frac{d^3u}{dx^3}(\xi),$$

za neki $\xi \in \langle x - h_1, x + h_2 \rangle$. Označimo $h = \max\{h_1, h_2\}$.

- Ako je h_1 bitno različit od h_2, imamo $\delta(x) = O(h)$.
- Naprotiv, ako je $h_1 = h_2 = h$, onda je $\delta(x) = O(h^2)$.

Opća aproksimacija za prvu derivaciju

Standardne aproksimacije dobivamo izborima:

- $h_1 = 0$, $h_2 = h$ — razlika unaprijed,
- $h_1 = h$, $h_2 = 0$ — razlika unazad,
- $h_1 = h_2 = h$ — simetrična ili centralna razlika.

Ovu opću aproksimaciju prve derivacije možemo gledati i kao

- "težinsku" sredinu razlike unaprijed i unatrag u točki x,

$$\frac{u(x+h_2)-u(x-h_1)}{h_1+h_2} = \frac{h_2}{h_1+h_2}\left(\frac{u(x+h_2)-u(x)}{h_2}\right) + \frac{h_1}{h_1+h_2}\left(\frac{u(x)-u(x-h_1)}{h_1}\right).$$

Točnost centralne razlike za prvu derivaciju

Primijetimo još da je simetrična razlika ($h_1 = h_2 = h$)

- aritmetička sredina razlike unaprijed i razlike unazad,

$$\frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} = \frac{1}{2}\left(\frac{u(x+h) - u(x)}{h} + \frac{u(x) - u(x-h)}{h}\right),$$

pa se lokalne greške diskretizacije “skrate” (suprotnog su predznaka) i dobivamo

- jedan red točnosti više.

U nastavku — još jedna interpretacija za povećanu točnost.

Točnost centralne razlike za prvu derivaciju

Aproksimaciju za $u'(x)$ možemo dobiti i tako da

- uzmemo dva pozitivna "koraka" h_1, h_2 — sad oba moraju biti pozitivna,
- "povučemo" kvadratni interpolacijski polinom p_2 za funkciju u, s tri različita čvora $x - h_1$, x i $x + h_2$,
- a zatim $u'(x)$ aproksimiramo derivacijom tog polinoma $p_2'(x)$ u "srednjoj" točki x.

Za ekvidistantni izbor čvorova $(h_1 = h_2 = h)$ izlazi upravo

- simetrična ili centralna razlika.

"Dizanje" stupnja interpolacijskog polinoma odmah diže točnost aproksimacije za funkciju i za derivacije!

Aproksimacija za drugu derivaciju

Taj isti kvadratni interpolacijski polinom p_2, s čvorovima $x - h_1$, x i $x + h_2$, možemo iskoristiti i

- za aproksimaciju druge derivacije, tako da
- $u''(x)$ aproksimiramo (konstantnom) drugom derivacijom tog polinoma $p_2''(x)$.

Dobivamo sljedeću aproksimaciju — "centralnom" razlikom drugog reda

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x) \approx \frac{2u(x - h_1)}{h_1(h_1 + h_2)} - \frac{2u(x)}{h_1h_2} + \frac{2u(x + h_2)}{(h_1 + h_2)h_2}.$$

"Centralna" znači da p_2 deriviramo u "srednjem" čvoru x.

Ova razlika je "simetrična" samo za $h_1 = h_2 = h$.

Lokalna greška diskretizacije

Iz Taylorovog razvoja za u oko točke x, dobivamo da je lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije

$$\delta(x) = \frac{h_2 - h_1}{3} \cdot \frac{d^3u}{dx^3}(x) - \frac{1}{12}\,\frac{h_1^3 + h_2^3}{h_1 + h_2} \cdot \frac{d^4u}{dx^4}(\xi),$$

za neki $\xi \in \langle x - h_1, x + h_2 \rangle$.

Označimo, kao ranije, $h = \max\{h_1, h_2\}$.

- Ako je h_1 bitno različit od h_2, imamo $\delta(x) = O(h)$.
- Međutim, za $h_1 = h_2 = h$, dobivamo da je $\delta(x) = O(h^2)$.

Dakle, ova aproksimacija za drugu derivaciju daje lokalnu grešku istog reda kao i ranija diskretizacija za prvu derivaciju (tj. ove diskretizacije su “lokalno” kompatibilne).

Centralna simetrična razlika za drugu derivaciju

U simetričnom slučaju $h_1 = h_2 = h$, aproksimacija za drugu derivacija ima (poznati) oblik

$$\frac{d^2u}{dx^2}(x) \approx \frac{1}{h^2}\Big(u(x-h) - 2u(x) + u(x+h)\Big).$$

Lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije je

$$\delta(x) = -\frac{1}{12}h^2 \cdot \frac{d^4u}{dx^4}(\xi),$$

za neki $\xi \in \langle x-h, x+h\rangle$.

Zaključak: Kad god možemo, treba koristiti simetrične (centralne) aproksimacije za derivacije!

“Druga” derivacija u jednadžbi difuzije

U jednadžbi difuzije, trebamo aproksimacije za derivacije “drugog” reda u obliku

$$\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right),$$

s tim da “koeficijent” $D = D(x)$ može biti

- eksplicitno poznat kao funkcija od x, tj. $D = D(x)$,
- eksplicitno poznat kao funkcija rješenja u, pa onda implicitno ovisi o x, tj. $D = D(u(x))$.

U oba slučaja, derivacije diskretiziramo na isti način, a pišemo samo za $D = D(x)$.

Radi jednostavnosti, gledamo samo simetrični slučaj $h_1 = h_2 = h$, tj. uzimamo da su točke ekvidistantne.

Lošija aproksimacija — unaprijed, unazad

Ako za unutarnju derivaciju koristimo razliku unaprijed, a za vanjsku derivaciju razliku unazad u točki x, onda dobivamo sljedeću aproksimaciju

$$
\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right) &\approx \frac{1}{h}\,\frac{d}{dx}\Big(D(x)\big(u(x+h)-u(x)\big)\Big) \\
&\approx \frac{1}{h^2}\Big(D(x)\big(u(x+h)-u(x)\big) \\
&\qquad\qquad - D(x-h)\big(u(x)-u(x-h)\big)\Big) \\
&\approx \frac{1}{h^2}\Big(D(x)u(x+h)-\big(D(x)+D(x-h)\big)u(x) \\
&\qquad\qquad + D(x-h)u(x-h)\Big).
\end{aligned}
$$

Lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije je $\delta(x) = O(h)$.

Bolja aproksimacija — centralnim razlikama

Korištenjem centralnih razlika dobivamo bolju aproksimaciju. Za unutarnju derivaciju koristimo centralnu razliku u točki $x + h/2$, a za vanjsku koristimo razliku unazad u toj točki.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right) &\approx \frac{1}{h}\,\frac{d}{dx}\left(D\left(x+\frac{h}{2}\right)\big(u(x+h)-u(x)\big)\right) \\
&\approx \frac{1}{h^2}\left[D\left(x+\frac{h}{2}\right)\big(u(x+h)-u(x)\big)\right. \\
&\qquad \left. - D\left(x-\frac{h}{2}\right)\big(u(x)-u(x-h)\big)\right].
\end{aligned}$$

Simetriju dobivamo zato što je centralna razlika $=$ aritmetička sredina razlika unaprijed i unazad — naprijed, nazad za $h/2$.

Bolja aproksimacija — centralnim razlikama

Nakon sređivanja, dobivamo sljedeću aproksimaciju

$$\frac{d}{dx}\left(D(x)\frac{d}{dx}u\right) \approx \frac{1}{h^2}\biggl[D\Bigl(x+\frac{h}{2}\Bigr)u(x+h) - \left(D\Bigl(x+\frac{h}{2}\Bigr) + D\Bigl(x-\frac{h}{2}\Bigr)\right)u(x) + D\Bigl(x-\frac{h}{2}\Bigr)u(x-h)\biggr].$$

Lokalna greška diskretizacije ove aproksimacije je $\delta(x) = O(h^2)$.