Derivació numèrica

Volem calcular la derivada d'una funció f en un punt x_0, però:

- Tenim l'expressió de f, però és molt complicada; o
- No tenim l'expressió de f, però sí una recepta per avaluar-la; o
- Tenim una tabulació de f, que prové, per exemple, de dades experimentals.

Llavors, podem aproximar la derivada mitjançant alguna fórmula de derivació numèrica.

Derivació numèrica cap endavant:

$$f'(x_0) \approx \delta_+ f(x_0, h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \, .$$

Derivació numèrica cap endarrere:

$$f'(x_0) \approx \delta_- f(x_0, h) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \, .$$

Derivació numèrica centrada:

$$f'(x_0) \approx \delta f(x_0, h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \, .$$

Un primer exemple

Exemple: Volem calcular la derivada de $f(x) = \sin(x^2)$ al punt $x_0 = 0.5$, i no recordem la fórmula ... :(

La podem aproximar utilitzant fórmules de derivació numèrica. Per exemple, prenent $h = 1.e{-}6$, obtenim (operant amb precisió doble):

$$\begin{aligned} f'(x_0) &\approx \delta_+ f(x_0, h) = 0.968913266924387 \\ f'(x_0) &\approx \delta_- f(x_0, h) = 0.968911576471054 \\ f'(x_0) &\approx \ \delta f(x_0, h) = 0.968912421697721 \end{aligned}$$

Nota: $f'(x_0) = 0.968912421710645$.

Un altre exemple: Usain Bolt als 100m

L'any 2009 (a Berlín) Usain Bolt va situar el record dels 100m en 9.58s. Les dades de la carrera són les següents

r	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
t(r)	0	1.85	2.89	3.78	4.64	5.49	6.31	7.11	7.92	8.74	9.58

on la primera fila és la distància recorreguda en metres i la segona el temps emprat en segons

(font: NBC, http://www.universalsports.com/news/article/newsid=385633.html).

Problema: Volem una aproximació de la velocitat i l'acceleració

$$v = \frac{dr}{dt}, \qquad a = \frac{dv}{dt} = \frac{d^2 r}{dt^2},$$

en la carrera.

Amb derivació numèrica cap endarrere

$$v(t_i) = \frac{dr}{dt}(t_i) \approx \frac{r_i - r_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, \quad 0 < i \leq 10,$$

obtindrem la taula de velocitats (en m/s) a temps t_i (o a distància r_i).

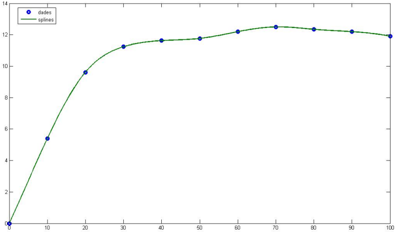
Igualment, utilitzant derivació numèrica cap endarrere sobre la taula de velocitats que acabem d'obtenir,

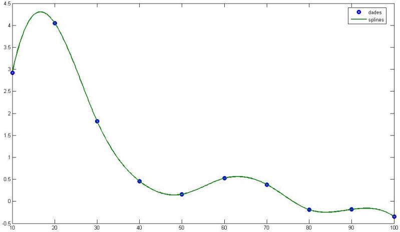
$$a(t_i) = \frac{dv}{dt}(t_i) \approx \frac{v_i - v_{i-1}}{t_i - t_{i-1}}, \quad 0 < i \leq 10,$$

obtindrem la taula d'acceleracions (en m/s^2) a temps t_i (o a distància r_i).

Un exemple: Usain Bolt als 100m (continuació)

t	0.000	1.850	2.890	3.780	4.640	5.490	6.310	7.110	7.920	8.740	9.580
x	0.000	10.000	20.000	30.000	40.000	50.000	60.000	70.000	80.000	90.000	100.000
v	0.000	5.405	9.615	11.236	11.628	11.765	12.195	12.500	12.346	12.195	11.905
a		2.922	4.048	1.821	0.456	0.161	0.525	0.381	-0.191	-0.184	-0.346





Algorisme. Per estimar la derivada d'una funció $f(x)$ en un punt x_0, utilitzant els seus valors en un conjunt de nodes $x_0, x_1, \ldots, x_m$, podem procedir de la següent manera:

1) Construïm el polinomi interpolador $p_m(x)$ de $f(x)$ en els nodes $x_0, x_1, \ldots, x_m$;
2) Calculem $p_m'(x)$;
3) Aproximem $f'(x_0) \approx p_m'(x_0)$.

Nota: L'algorisme es pot generalitzar a derivades d'ordre superior.

Exemple: Volem trobar una fórmula de derivació interpolatòria per a $f'(x_0)$ centrada, utilitzant els nodes $x_{-1} = x_0 - h$, x_0 i $x_1 = x_0 + h$.

1) El polinomi interpolador de f en els nodes x_{-1}, x_0, x_1 és:

$$\begin{aligned} p_2(x) =& f(x_{-1}) + \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h}(x - x_{-1}) + \\ & \frac{f(x_1) - 2f(x_0) + f(x_{-1})}{2h^2}(x - x_{-1})(x - x_0) \,. \end{aligned}$$

2) Derivant $p_2(x)$, obtenim:

$$p_2'(x) = \frac{f(x_0) - f(x_{-1})}{h} + \frac{f(x_1) - 2f(x_0) + f(x_{-1})}{2h^2}(2x - (x_{-1} + x_0)) \,.$$

3) I substituint x per x_0:

$$f'(x_0) \approx p_2'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} =: \delta f(x_0, h) \,.$$

Exemple: Considerem un fluid dins un cilindre recte de radi $R = 1$m, amb un forat de radi $r = 0.1$m al fons. Mesurem l'alçada $q(t)$ a la que arriba el fluid per diferents valors del temps t, obtenint els següents resultats:

t (s)	0	5	10	15	20
q (m)	0.6350	0.5336	0.4410	0.3572	0.2822

Volem contrastar la llei de Torricelli, que dóna una relació entre la velocitat de buidament, $\dot{q}(t)$, i l'alçada, $q(t)$, en forma d'equació diferencial:

$$\dot{q}(t) = -\gamma \left(\frac{r}{R}\right)^2 \sqrt{2g\, q(t)}\,,$$

on g és l'acceleració de la gravetat i $\gamma = 0.6$ és un factor de correcció. Escriurem també $\alpha = \gamma \left(\frac{r}{R}\right)^2 \sqrt{2g}$.

Per fer això, calcularem numèricament la velocitat de buidament en els diferents instants de temps de la taula, i els compararem amb els predits per la llei de Torricelli.

t	(s)	0	5	10	15	20
$q(t)$	(m)	0.6350	0.5336	0.4410	0.3572	0.2822
$\dot{q}(t)$	(m/s)	-0.02117	-0.01940	-0.01764	-0.01588	-0.01411
$\delta_+ q$	(m/s)	-0.02028	-0.01852	-0.01676	-0.01500	-
$\delta_- q$	(m/s)	-	-0.02028	-0.01852	-0.01676	-0.01500
δq	(m/s)	-	-0.01940	-0.01764	-0.01588	-
$\dot{p}_4(t)$	(m/s)	-0.02116	-0.01940	-0.01764	-0.01588	-0.01412

A l'última fila hem considerat el polinomi interpolador $p_4(t)$ de les dades, que dóna una aproximació de $q(t)$. Així, és raonable aproximar $\dot{q}(t)$ per $\dot{p}_4(t)$. S'obté que

$$q(t) \approx p_4(t) = 0.6350 - 0.021160\ t + 0.000176\ t^2,$$

(els termes cúbics i quàrtics són zero), fet que quadra amb la llei de Torricelli (per què?).
Així, doncs,

$$\dot{q}(t) \approx \dot{p}_4(t) = -0.021160 + 0.000352\ t\ .$$

Observació: Imposant que $p_4(t_f) = 0$, podem estimar el temps t_f que tarda en buidar-se el dipòsit, obtenint $t_f \approx 57.73$ s. Resolent l'equació diferencial de la llei de Torricelli, s'obté $t_f = \frac{2\sqrt{q(0)}}{\alpha} \approx 59.97$ s.

Definició. Sigui $D^k f(x_0, h)$ una fórmula de derivació numèrica per $f^{(k)}(x_0)$, de forma que

$$f^{(k)}(x_0) = \lim_{h \to 0} D^k f(x_0, h) .$$

Direm que *la fórmula té ordre* $p > 0$, i ho escriurem $f^{(k)}(x_0) = D^k f(x_0, h) + O(h^p)$, si

$$\lim_{h \to 0} \frac{|f^{(k)}(x_0) - D^k f(x_0, h)|}{|h|^p} = C > 0.$$

Direm també que C és la *constant asimptòtica de l'error*.
Problema: Calcular l'ordre d'una fórmula de derivació numèrica.

Exemple: Volem calcular l'ordre de l'error per la fórmula

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}$$

Com $f(x) = \hat{f}_0 + \hat{f}_1\,(x-x_0) + \hat{f}_2\,(x-x_0)^2 + \cdots$, on els coeficients són les derivades normalitzades

$$\hat{f}_k = \frac{1}{k!} f^{(k)}(x_0)\ ,$$

llavors

$$\begin{aligned} f(x_0+h) =& \hat{f}_0 + \hat{f}_1 h + \hat{f}_2 h^2 + \hat{f}_3 h^3 + \cdots\ , \\ f(x_0-h) =& \hat{f}_0 - \hat{f}_1 h + \hat{f}_2 h^2 - \hat{f}_3 h^3 + \cdots\ . \end{aligned}$$

Substituint:

$$\frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} = \hat{f}_1 + \hat{f}_3 h^2 + \cdots = f'(x_0) + O(h^2)\ .$$

Problema numèric: Quan h tendeix a 0 l'error de truncament decreix, però l'error d'arrodoniment (degut a cancelacions) creix.
Exemple: Considerem les fórmules de derivació:

$$\text{A:}\ \ f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h},\ \ \text{B:}\ \ f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h}.$$

Les fites dels errors absoluts respectius e_A i e_B són

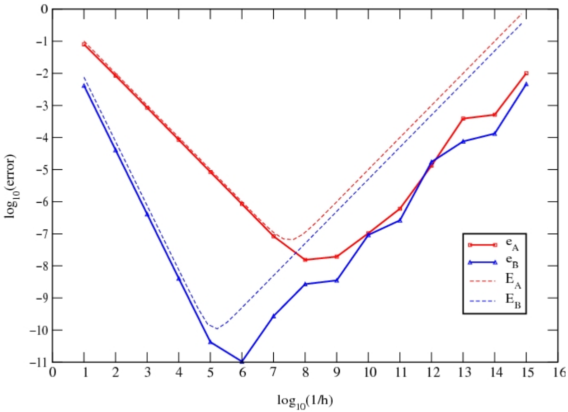
$$E_A(h) = \frac{h}{2}M_2 + \frac{2\varepsilon}{h}, \quad E_B(h) = \frac{h^2}{6}M_3 + \frac{\varepsilon}{h}, \text{ on}$$

- $\varepsilon =$ fita error absolut de l'avaluació de f;
- $M_2 =$ fita per $|f''(x)|$ i $M_3 =$ fita per $|f'''(x)|$.

Podem calcular una estimació de la h òptima:

$$\text{A:}\ \ h_A = \left(\frac{4\varepsilon}{M_2}\right)^{1/2}, \quad \text{B:}\ \ h_B = \left(\frac{3\varepsilon}{M_3}\right)^{1/3}.$$

Experiment. Considerem $f(x) = \sin x^2$ i $x_0 = 0.5$, i les fórmules de derivació A i B per diferents h's.



- Dades: $\varepsilon = 5.e{-}16$, $M_2 = 2$ i $M_3 = 4.5$ (cotes “generoses”);
- Passos òptims: $h_A = 3.2e{-}08$ i $h_B = 6.9e{-}06$.

Extrapolació de Richardson

El càlcul numèric de derivades es redueix a estimar un límit de la forma

$$F_0 = \lim_{h \to 0} F(h)$$

per una certa funció $F(h)$.

En el cas de la derivació numèrica tenim problemes numèrics en fer h petit doncs tenim cancelació de termes.

En el cas de la integracio numèrica, el nombre d'operacions augmenta considerablement, fent créixer els errors d'arrodoniment.

Com podem millorar les estimacions, sense fer h massa petit?

Exemple: Per la funció $f(x) = \sin(x^2)$ al punt $x_0 = 0.5$, calculem $f'(x_0) = 9.689124217106447e{-}01$, utilitzant la fórmula de derivació numèrica cap endavant

$$D(h) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

amb els tres pasos $h = 1.e{-}3$, $h/2 = 0.5e{-}3$ i $h/4 = 0.25e{-}3$:

- $D(1.e{-}3) = 9.697572226650484e{-}01$;
- $D(0.5e{-}3) = 9.693349246344281e{-}01$;
- $D(0.25e{-}3) = 9.691236987561548e{-}01$.

Obtenim unes **3** xifres significatives correctes.

Sabem que l'expansió de l'error és del tipus

$$D(h) = f'(x_0) + c_1 h + c_2 h^2 + \dots$$

de forma que

$$D(\frac{h}{2}) = f'(x_0) + c_1 \frac{h}{2} + c_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \dots$$

Eliminant els termes de h^1, obtenim

$$D_1(h) = 2D(\frac{h}{2}) - D(h) = f'(x_0) + c_2^1 h^2 + c_3^1 h^3 + \dots$$

Aplicant la fórmula $D_1(h)$ obtenim:

- $D_1(1.e{-}3) = 9.689126266038077e{-}01$;
- $D_1(0.5e{-}3) = 9.689124728778815e{-}01$.

Ara tenim unes **6** xifres significatives correctes!

Repetint l'argument, ara amb $D_1(h)$, eliminen els termes de h^2 en la fórmula de l'error, de forma que

$$D_2(h) = \frac{4D_1(\frac{h}{2}) - D_1(h)}{3} = f'(x_0) + c_3^2 h^3 + c_4^2 h^4 + \dots$$

Així, podem tornar a refinar els resultats, obtenint:

- $D_2(1.e{-}3) = 9.689124216359061e{-}01$,

que té **9** xifres significatives correctes!!