

RÓŻNICZKOWANIE NUMERYCZNE

Podstawą wielu algorytmów rozwiązywania równań różniczkowych zwyczajnych i równań różniczkowych cząstkowych jest wyrażenie wartości pochodnej lub pochodnych cząstkowych dla pewnego interesującego nas punktu przy pomocy wzorów pozwalających na uzyskanie przybliżonej wartości. Wzory te zwane ilorazami różnicowymi wykorzystują wartości funkcji podstawowej w kilku punktach wybranych z otoczenia tego punktu dla którego jest wyznaczana pochodna. Najprostsze wzory tego typu można uzyskać przy pomocy szeregu Taylora. Wzory bardziej zaawansowane można uzyskać poprzez wprowadzenie wielomianu interpolacyjnego opartego na kilku punktach, poddanego w dalszej kolejności operacji różniczkowania.

Wprowadźmy następujące oznaczenia:

$h = x_{i+1} - x_i$ krok

$y_i = f(x_i)$ wartość funkcji f w punkcie x_i

$y'_i = f'(x_i)$ wartość pochodnej funkcji f w punkcie x_i

i indeks numerujący kolejne wartości zmiennych

W oparciu o szereg Taylora można uzyskać proste wzory wykorzystujące wartości funkcji w dwóch punktach

$$y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \quad \text{-iloraz różnicowy progresywny (przedni)} \quad (2.1)$$

Wzór (2.1) można uzyskać przy użyciu rozwinięcia funkcji f w szereg Taylora w otoczeniu punktu x_i . W szeregu należy opuścić wyrazy wyższego rzędu niż 1.

$$y_{i+1} = y_i + y'_i \cdot h + y''_i \cdot \frac{h^2}{2} + \text{wyrazy wyższego rzędu} \quad \Rightarrow \quad y'_i = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

$$y'_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \quad \text{-iloraz różnicowy regresywny (wsteczny)} \quad (2.2)$$

Wzór (2.2) można uzyskać w podobny sposób jak wzór (2.1)

$$y_{i-1} = y_i + y'_i \cdot (-h) + y''_i \cdot \frac{(-h^2)}{2} + \text{wyrazy wyższego rzędu} \quad \Rightarrow \quad y'_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$$

Wprowadzając do rozważań trzy punkty i odpowiedni wielomian interpolacyjny otrzymano następujące wzory

$$y'_i = \frac{-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}}{2h} \quad \text{-iloraz różnicowy przedni} \quad (2.3)$$

$$y'_i = \frac{-y_{i-1} + y_{i+1}}{2h} \quad \text{-iloraz różnicowy centralny} \quad (2.4)$$

$$y'_i = \frac{y_{i-2} - 4y_{i-1} + 3y_i}{2h} \quad \text{-iloraz różnicowy wsteczny} \quad (2.5)$$

Wzory (2.3), (2.4), (2.5) można uzyskać wprowadzając trzy punkty (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) i przeprowadzając przez nie wielomian interpolacyjny Lagrange'a.

x_0

$x_1 = x_0 + h$

$x_2 = x_0 + 2h = x_1 + h$

Wprowadzenie z wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a.

$$L_2(x) = y_0 \underbrace{\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}}_{\substack{-h \quad -2h}} + y_1 \underbrace{\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}}_{\substack{h \quad -h}} + y_2 \underbrace{\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}}_{\substack{2h \quad h}}$$

$$\begin{aligned}
L'_2(x) &= y_0 \frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2} + y_1 \frac{2x - x_0 - x_2}{-h^2} + y_2 \frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2} \\
L'_2(x) &= \frac{y_0}{2h^2} (2x - x_1 - x_2) + \frac{y_1}{-h^2} (2x - x_0 - x_2) + \frac{y_2}{2h^2} (2x - x_0 - x_1) \\
L'_2(x) &= \frac{y_0}{2h^2} (2x - (x_0 + h) - (x_0 + 2h)) - \frac{y_1}{h^2} (2x - x_0 - (x_0 + 2h)) + \frac{y_2}{2h^2} (2x - x_0 - (x_0 + h)) \\
L'_2(x) &= \frac{y_0}{2h^2} (2x - x_0 - h - x_0 - 2h) - \frac{y_1}{h^2} (2x - x_0 - x_0 - 2h) + \frac{y_2}{2h^2} (2x - x_0 - x_0 - h) \\
L'_2(x) &= \frac{y_0}{2h^2} (2x - 2x_0 - 3h) - \frac{y_1}{h^2} (2x - 2x_0 - 2h) + \frac{y_2}{2h^2} (2x - 2x_0 - h) \\
L'_2(x_0) &= \frac{y_0}{2h^2} (2x_0 - 2x_0 - 3h) - \frac{y_1}{h^2} (2x_0 - 2x_0 - 2h) + \frac{y_2}{2h^2} (2x_0 - 2x_0 - h) \\
L'_2(x_0) &= \frac{y_0}{2h^2} (-3h) - \frac{y_1}{h^2} (-2h) + \frac{y_2}{2h^2} (-h) = \frac{-3hy_0 + 4hy_1 - hy_2}{2h^2} \\
L'_2(x_0) &= \frac{-3y_0 + 4y_1 - y_2}{2h} \quad \text{progresywny iloraz różnicowy} \\
L'_2(x_1) &= \frac{y_0}{2h^2} (2x_1 - 2x_0 - 3h) - \frac{y_1}{h^2} (2x_1 - 2x_0 - 2h) + \frac{y_2}{2h^2} (2x_1 - 2x_0 - h) \\
L'_2(x_1) &= \frac{y_0}{2h^2} (2(x_0 + h) - 2x_0 - 3h) - \frac{2y_1}{2h^2} (2(x_0 + h) - 2x_0 - 2h) + \frac{y_2}{2h^2} (2(x_0 + h) - 2x_0 - h) \\
L'_2(x_1) &= \frac{y_0}{2h^2} (-h) - \frac{2y_1}{2h^2} (0) + \frac{y_2}{2h} (h) = \frac{-hy_0 + hy_2}{2h^2} \\
L'_2(x_1) &= \frac{-y_0 + y_2}{2h} \quad \text{centralny iloraz różnicowy} \\
L'_2(x_2) &= \frac{y_0}{2h^2} (2x_2 - 2x_0 - 3h) - \frac{y_1}{h^2} (2x_2 - 2x_0 - 2h) + \frac{y_2}{2h^2} (2x_2 - 2x_0 - h) \\
L'_2(x_2) &= \frac{y_0}{2h^2} (h) - \frac{2y_1}{2h^2} (2h) + \frac{y_2}{2h} (3h) = \frac{hy_0 - 4y_1h + 3hy_2}{2h^2} \\
L'_2(x_2) &= \frac{y_0 - 4y_1 + 3y_2}{2h} \quad \text{wsteczny iloraz różnicowy}
\end{aligned}$$

Wyznaczając drugą pochodną wielomianu Lagrange'a można uzyskać wzory na przybliżoną wartość drugiej pochodnej .

$$y''_j = \frac{y_i - 2y_{i+1} + y_{i+2}}{h^2} \quad \text{iloraz różnicowy przedni} \quad (2.6)$$

$$y''_j = \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} \quad \text{iloraz różnicowy centralny} \quad (2.7)$$

$$y''_j = \frac{y_{i-2} - 2y_{i-1} + y_i}{h^2} \quad \text{iloraz różnicowy wsteczny} \quad (2.8)$$

Zatem:

$$L'_2(x) = y_0 \frac{2x - x_1 - x_2}{2h^2} + y_1 \frac{2x - x_0 - x_2}{-h^2} + y_2 \frac{2x - x_0 - x_1}{2h^2}$$

$$L_2''(x) = y_0 \frac{2}{2h^2} + y_1 \frac{2}{-h^2} + y_2 \frac{2}{2h^2} = \frac{y_0 - 2y_1 + y_2}{h^2}$$

$$L_2''(x_0) = L_2''(x_1) = L_2''(x_2)$$

Wprowadzając do rozważań 5 punktów (x_0, y_0) , (x_1, y_1) , (x_2, y_2) , (x_3, y_3) , (x_4, y_4) i badając wielomian interpolacyjny stopnia 4 przechodzący przez te punkty można otrzymać następujące wzory :

$$y_i' = \frac{y_{i-2} - 8y_{i-1} + 8y_{i+1} - y_{i+2}}{12h} \quad (2.9)$$

$$y_i'' = \frac{-y_{i-2} + 16y_{i-1} - 30y_i + 16y_{i+1} - y_{i+2}}{12h^2} \quad (2.10)$$

$$y_i''' = \frac{-y_{i-2} + 2y_{i-1} - 2y_{i+1} + y_{i+2}}{2h^3} \quad (2.11)$$

$$y_i^{(4)} = \frac{y_{i-2} - 4y_{i-1} + 6y_i - 4y_{i+1} + y_{i+2}}{h^4} \quad (2.12)$$

Wzory różniczkowania numerycznego są bardzo użyteczne w rozważaniach teoretycznych dotyczących opracowania efektywnych procedur rozwiązania równań różniczkowych zwyczajnych i cząstkowych. Do obliczania pochodnych funkcji, których postać jest znana i posiada prostą budowę, należy stosować wzory analityczne.