Numerieke Analyse

Prof. Dr. Guido Vanden Berghe

Chapter 7

Numeriek berekenen van afgeleiden

Doelstelling

De topics behandeld in dit hoofdstuk zullen vooral van belang zijn voor de paragrafen over randwaarde problemen (zie hoofdstuk 9). We zullen verschillende technieken bespreken om eerste en hogere orde afgeleiden van een functie, geëvalueerd in een welbepaald punt, te benaderen door een lineaire combinatie van functiewaarden in dit punt en zijn dichtste naburen.

7.1 Eerste–orde afgeleiden

Om het onderwerp over numerieke afleiding te introduceren vertrekken we van een functie $f \in C^2[a, b]$ en een willekeurig punt x_0 in $[a, b]$. Beschouw daarenboven een toename h met $h \neq 0$ klein genoeg om zeker te zijn dat $x_0 + h \in [a, b]$. Beschouwen we dan de Taylorreeksontwikkeling van $f(x)$ rondom het punt x_0 van de vorm ;

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + \frac{h}{1\,!} f'(x_0) + \frac{h^2}{2\,!} f''(\xi) \ , \qquad x_0 < \xi < x_0 + h$$

waaruit

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi) \ . \tag{7.1}$$

Voor kleine waarden van h kan het differentiequotiënt $[f(x_0 + h) - f(x_0)]/h$ gebruikt worden als benadering voor $f'(x_0)$ en met als bovengrens voor de fout $(h/2)M$, waarbij M zelf een bovengrens is voor $|f''(x)|$ in $[a, b]$. Deze formule is in de literatuur bekend als de voorwaartste differentieformule als $h > 0$ en als de achterwaartse differentieformule als $h < 0$.

Om de afleidingsprocedure meer in het algemeen te beschouwen, introduceren we $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$, zijnde $(n + 1)$ verschillende punten in het interval I en $f \in C^{n+1}(I)$.

Dan weten we dat $f(x)$ door een Lagrange interpolatievorm (5.6) kan benaderd worden, i.e.

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(x) + \frac{(x - x_0)\dots(x - x_n)}{(n+1)\,!} f^{(n+1)}(\xi(x))\,.$$

Afleiden van deze betrekking levert

$$\begin{aligned} f'(x) &= \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j'(x) + \frac{d}{dx}\left[\frac{(x - x_0)\dots(x - x_n)}{(n+1)\,!}\right] f^{(n+1)}(\xi(x)) \\ &\quad + \frac{(x - x_0)\dots(x - x_n)}{(n+1)\,!}\ \frac{d}{dx}\left[f^{(n+1)}(\xi(x))\right]\,. \end{aligned} \tag{7.2}$$

Deze formule kan in principe gebruikt worden voor de benadering van $f'(x)$ voor elke $x \in I$ maar de foutterm

$$\begin{aligned} t_n(x) &= \frac{d}{dx}\left[\frac{(x - x_0)\dots(x - x_n)}{(n+1)\,!}\right] f^{(n+1)}(\xi) \\ &\quad + \frac{(x - x_0)\dots(x - x_n)}{(n+1)\,!}\ \frac{d}{dx}\left[f^{(n+1)}(\xi)\right] \end{aligned} \tag{7.3}$$

is moeilijk te analyzeren omdat weinig bekend is omtrent $\dfrac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi)$. De relatie (7.2) kan nochtans goed aangewend worden in het geval x een interpolatieknooppunt is, als we aannemen dat de grootheid $\dfrac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi)$ bestaat. In dit geval herleidt de foutterm zich tot

$$\begin{aligned} t_n(x_k) &= \left.\left\{\frac{d}{dx}\left[\frac{(x - x_0)\dots(x - x_n)}{(n+1)\,!}\right] f^{(n+1)}(\xi)\right\}\right|_{x=x_k} \\ &= \frac{(x_k - x_0)\dots(x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1})\dots(x_k - x_n)}{(n+1)\,!} f^{(n+1)}(\xi)\,, \end{aligned}$$

zodat (7.2) voor $x = x_k$ te schrijven is als

$$f'(x_k) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j'(x_k) + t_n(x_k)\,. \tag{7.4}$$

Zulk een vergelijking wordt een $(n+1)$–puntsformule genoemd voor de benadering van $f'(x_k)$ omdat een lineaire combinatie van $(n+1)$ functiewaarden $f(x_j)$ $(j = 0, 1, \dots, n)$ gebruikt wordt.

Het lijkt op het eerste gezicht beter meer punten te gebruiken omdat dit zou leiden tot een grotere nauwkeurigheid omwille van het feit dat t_n zou afnemen; maar van het praktische uit gezien, moet de functie f dan ook geëvalueerd worden in meer punten en zelfs als dit gemakkelijk kan gebeuren, zal door de hierbij optredende afrondingsfouten, het gebruik van een groot aantal knooppunten niet bevorderlijk zijn. Om bovenstaande opmerking te illustreren, zullen we hieronder enkele bruikbare drie–puntsformules afleiden en aspecten van hun afrondingsfouten beschouwen.

Vermits

$$l_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \quad \text{is} \quad l_0'(x) = \frac{2x-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}$$

Op analoge wijze is

$$\begin{aligned} l_1'(x) &= \frac{2x-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \qquad \text{en} \\ l_2'(x) &= \frac{2x-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\,. \end{aligned}$$

Aldus is

$$\begin{aligned} f'(x_j) = f(x_0)&\left[\frac{2x_j-x_1-x_2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\right] + f(x_1)\left[\frac{2x_j-x_0-x_2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)}\right] \\ &+f(x_2)\left[\frac{2x_j-x_0-x_1}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}\right] + \frac{1}{6}f^{(3)}(\xi_j)\prod_{\substack{i=0\\ i\neq j}}^{2}(x_j-x_i) \end{aligned} \tag{7.5}$$

voor elke $j = 0, 1, 2$ waarbij de notatie ξ_j aanduidt dat dit punt afhangt van x_j. De drie formules in (7.5) worden zeer bruikbaar als de knooppunten equidistant gelegen zijn, i.e.

$$x_1 = x_0 + h \qquad \text{en} \qquad x_2 = x_0 + 2h \qquad \text{voor een } h \neq 0\,.$$

Relatie (7.5) met $x_j = x_0$, $x_1 = x_0 + h$ en $x_2 = x_0 + 2h$ levert

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\Big[-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2}f(x_2)\Big] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0)\,.$$

Op analoge wijze volgt uit (7.5) voor $x_j = x_1$ en $x_j = x_2$

$$\begin{aligned} f'(x_1) &= \frac{1}{h}\left[-\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_2)\right] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1) \qquad \text{en} \\ f'(x_2) &= \frac{1}{h}\Big[\frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2}f(x_2)\Big] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)\,. \end{aligned}$$

Als we nu elk van deze vergelijkingen uitdrukken in termen van x_0 bekomen we respectievelijk

$$f'(x_0) = \frac{1}{h}\Big[-\frac{3}{2}f(x_0) + 2f(x_0+h) - \frac{1}{2}f(x_0+2h)\Big] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0) \tag{7.6}$$

$$f'(x_0+h) = \frac{1}{h}\Big[-\frac{1}{2}f(x_0) + \frac{1}{2}f(x_0+2h)\Big] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1) \tag{7.7}$$

$$f'(x_0+2h) = \frac{1}{h}\Big[\frac{1}{2}f(x_0) - 2f(x_0+h) + \frac{3}{2}f(x_0+2h)\Big] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)\,. \tag{7.8}$$

Vervangen we nu x_0 door $(x_0 - h)$ in (7.7) en x_0 door $(x_0 - 2h)$ in (7.8) dan bekomen we drie formules om $f'(x_0)$ te benaderen, i.e.

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) &= \frac{1}{2h}\Big[-3f(x_0) + 4f(x_0+h) - f(x_0+2h)\Big] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_0) && (7.9)\\
f'(x_0) &= \frac{1}{2h}\Big[-f(x_0-h) + f(x_0+h)\Big] - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1) && (7.10)\\
f'(x_0) &= \frac{1}{2h}\Big[f(x_0-2h) - 4f(x_0-h) + 3f(x_0)\Big] + \frac{h^2}{3}f^{(3)}(\xi_2)\,. && (7.11)
\end{aligned}
$$

Als we dan nog vaststellen dat (7.11) kan bekomen worden uit (7.9) door h eenvoudig te vervangen door $(-h)$, zijn er uiteindelijk slechts twee formules namelijk (7.9) waarbij ξ_0 ligt tussen x_0 en x_0+2h en (7.10) waarbij ξ_1 ligt tussen (x_0-h) en (x_0+h). Merk op dat de fout in (7.10) benaderend de helft van de fout in (7.9) is. Dit is begrijpelijk vermits in (7.10) gegevens aan beide zijden van x_0 worden in acht genomen en in (7.9) slechts gegevens aan één kant van x_0. De benadering in (7.9) is bruikbaar bij de uiteinden van het interval I. Merk tevens op dat in (7.10), f slechts in twee punten moet bepaald worden terwijl in (7.9) drie punten meespelen.

De methodes voorgesteld in (7.9) en (7.10) zijn bekend als drie–puntsformules. Er zijn ook methodes, bekend als vijf–puntsformules, die de functie evaluatie in meerdere punten vereisen maar waarbij de foutterm van de orde $\mathcal{O}(h^4)$ is. Om een typische formule van dit type af te leiden, ontwikkelen we de functie f in een vierde–graads Taylorveelterm en evalueren we deze veelterm bij $x_0 - 2h$, $x_0 - h$, $x_0 + h$ en $x_0 + 2h$, i.e.

$$
\begin{aligned}
f(x_0+h) &= f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(x_0)h^4\\
&\quad + \frac{1}{120}f^{(5)}(\xi_1)h^5 && (7.12)\\
f(x_0-h) &= f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{24}f^{(4)}(x_0)h^4\\
&\quad - \frac{1}{120}f^{(5)}(\xi_{-1})h^5 && (7.13)
\end{aligned}
$$

waarbij $x_0 - h < \xi_{-1} < x_0 < \xi_1 < x_0 + h$,

$$
\begin{aligned}
f(x_0+2h) &= f(x_0) + 2f'(x_0)h + 2f''(x_0)h^2 + \frac{4}{3}f'''(x_0)h^3 + \frac{2}{3}f^{(4)}(x_0)h^4\\
&\quad + \frac{4}{15}f^{(5)}(\xi_2)h^5 && (7.14)
\end{aligned}
$$

en

$$
\begin{aligned}
f(x_0-2h) &= f(x_0) - 2f'(x_0)h + 2f''(x_0)h^2 - \frac{4}{3}f'''(x_0)h^3 + \frac{2}{3}f^{(4)}(x_0)h^4\\
&\quad - \frac{4}{15}f^{(5)}(\xi_{-2})h^5 && (7.15)
\end{aligned}
$$

waarbij $x_0 - 2h < \xi_{-2} < x_0 < \xi_2 < x_0 + 2h$. Vergelijking (7.13) aftrekken van (7.12) en (7.15) van (7.14) geeft

$$\begin{aligned} f(x_0+h) - f(x_0-h) &= 2f'(x_0)h + \frac{1}{3}f'''(x_0)h^3 \\ &\quad + \frac{1}{120}\Big[f^{(5)}(\xi_1) + f^{(5)}(\xi_{-1})\Big]h^5 \end{aligned} \tag{7.16}$$

en

$$\begin{aligned} f(x_0+2h) - f(x_0-2h) &= 4f'(x_0)h + \frac{8}{3}f'''(x_0)h^3 \\ &\quad + \frac{4}{15}\Big[f^{(5)}(\xi_2) + f^{(5)}(\xi_{-2})\Big]h^5 \,. \end{aligned} \tag{7.17}$$

Als $f^{(5)}$ continu is in het interval $[x_0 - 2h\,,\, x_0 + 2h]$ dan kan op de stelling van de tussenliggende waarden beroep gedaan worden om ons te verzekeren dat $\xi_{-1} < \hat{\xi}_1 < \xi_1$ en $\xi_{-2} < \hat{\xi}_2 < \xi_2$ bestaan met de eigenschap dat

$$\begin{aligned} f^{(5)}(\xi_1) + f^{(5)}(\xi_{-1}) &= 2f^{(5)}(\hat{\xi}_1) \qquad \text{en} \\ f^{(5)}(\xi_2) + f^{(5)}(\xi_{-2}) &= 2f^{(5)}(\hat{\xi}_2) \end{aligned}$$

Aldus kunnen (7.16) en (7.17) als volgt herschreven worden

$$f(x_0+h) - f(x_0-h) = 2f'(x_0)h + \frac{1}{3}f'''(x_0)h^3 + \frac{1}{60}f^{(5)}(\hat{\xi}_1)h^5 \tag{7.18}$$

$$f(x_0+2h) - f(x_0-2h) = 4f'(x_0)h + \frac{8}{3}f'''(x_0)h^3 + \frac{8}{15}f^{(5)}(\hat{\xi}_2)h^5 \,. \tag{7.19}$$

De term $f'''(x_0)$ kan uit die beide vergelijkingen geëlimineerd worden, i.e.

$$\begin{aligned} &8f(x_0+h) - 8f(x_0-h) - f(x_0+2h) + f(x_0-2h) \\ &\qquad = 12hf'(x_0) + \frac{2}{15}\Big[f^{(5)}(\hat{\xi}_1) - 4f^{(5)}(\hat{\xi}_2)\Big]h^5 \end{aligned}$$

of

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{12h}\Big[f(x_0-2h) - 8f(x_0-h) + 8f(x_0+h) - f(x_0+2h)\Big] \\ &\quad + \frac{h^4}{90}\Big[4f^{(5)}(\hat{\xi}_2) - f^{(5)}(\hat{\xi}_1)\Big] \,. \end{aligned} \tag{7.20}$$

De foutterm afgeleid op deze wijze is nogal ingewikkeld maar kan gemakkelijk herleid worden tot $(h^4/30)f^{(5)}(\xi)$ voor $x_0 - 2h < \xi < x_0 + 2h$.

Dergelijke formule volgt uiteraard ook uit (7.4) waar we de verdelingspunten $x_0 - 2h$, $x_0 - h$, x_0, $x_0 + h$ en $x_0 + 2h$ in acht nemen. Een andere vijf–puntsformule die opnieuw bruikbaar is bij de uiteinden van het interval I luidt

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{1}{12h}\Big[-25f(x_0) + 48f(x_0+h) - 36f(x_0+2h) \\ &\qquad +16f(x_0+3h) - 3f(x_0+4h)\Big] + \frac{h^4}{5}f^{(5)}(\xi) \end{aligned} \tag{7.21}$$

waarbij ξ ligt tussen x_0 en $x_0 + 4h$.

Een bijzonder belangrijk onderwerp in de studie van numerieke afleiding is het effect van de afrondingsfouten. Laat ons opnieuw de formule

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

meer in detail onderzoeken. Veronderstel dat bij de bepaling van $f(x_0+h)$ en $f(x_0-h)$ afrondingsfouten $e(x_0+h)$ en $e(x_0-h)$ optreden; d.i. onze berekende waarden $\tilde{f}(x_0+h)$ en $\tilde{f}(x_0-h)$ zijn gecorreleerd aan de echte waarden $f(x_0+h)$ en $f(x_0-h)$ door de formules

$$\begin{aligned} f(x_0+h) &= \tilde{f}(x_0+h) + e(x_0+h) \\ f(x_0-h) &= \tilde{f}(x_0-h) + e(x_0-h)\ . \end{aligned}$$

In dit geval is de echte fout

$$f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0-h)}{2h} = \frac{e(x_0+h) - e(x_0-h)}{2h} - \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi_1)$$

en ze bezit dus een deel afkomstig van afronding en een deel afkomstig van afkapping van de beschouwde Taylorreeks. Als er aangenomen wordt dat de afrondingsfouten $e(x_0 \pm h)$ naar boven begrensd zijn door $\epsilon > 0$ en dat de derde afgeleide van f begrensd is door $M > 0$, dan is

$$\left| f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0-h)}{2h} \right| \le \frac{\epsilon}{h} + \frac{h^2}{6}M\ .$$

Als h klein is impliceert dit dat de fout ten gevolge van afronding, ϵ/h groot kan zijn. In praktijk is het dus niet voordelig h te klein te laten worden omdat de afrondingsfouten dan significant worden.

7.2 Hogere–orde afgeleiden en extrapolatie

De methoden uit paragraaf 7.1 kunnen uitgebreid worden om benaderingen te vinden voor hogere–orde afgeleiden van een functie door enkel getabelleerde waarden van de functie in een reeks punten aan te wenden. De algebraïsche beschrijving van deze methoden is tamelijk complex zodat we hier enkel een representatief voorbeeld zullen aanhalen.

Laten we een functie f voorstellen als derde–graads Taylorveelterm (met sluitterm) rond een punt x_0, en de waarde ervan bepalen in de punten $x_0 + h$ en $x_0 - h$, i.e.

$$\begin{aligned} f(x_0+h) &= f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 \\ &\quad + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi_1)h^4 \qquad \text{en} \qquad (7.22) \\ f(x_0-h) &= f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{1}{2}f''(x_0)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_0)h^3 \\ &\quad + \frac{1}{24}f^{(4)}(\xi_{-1})h^4 \qquad (7.23) \end{aligned}$$

met $x_0 - h < \xi_{-1} < x_0 < \xi_1 < x_0 + h$. Tellen we beide vergelijkingen op dan bekomen we

$$f(x_0+h) + f(x_0-h) = 2f(x_0) + f''(x_0)h^2 + \frac{1}{24}\Big[f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_{-1})\Big]h^4 \qquad (7.24)$$

of

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\Big[f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)\Big] - \frac{h^2}{24}\Big[f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_{-1})\Big]. \qquad (7.25)$$

Als $f^{(4)}$ continu is in $[x_0 - h\,,\, x_0 + h]$ laat het tussenliggende waarde theorema toe dit te herschrijven als

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\Big[f(x_0-h) - 2f(x_0) + f(x_0+h)\Big] - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi) \qquad (7.26)$$

met $x_0 - h < \xi < x_0 + h$.

Formule (7.26) bezit een foutterm van de orde h^2; in de praktijk zou het wenselijk zijn een methode te ontwikkelen om de nauwkeurigheid van de benadering te verbeteren. Hiertoe introduceren we een nieuwe en belangrijke procedure, gekend als de extrapolatie procedure van *Richardson.*

Veronderstel dat f ontwikkeld werd in een vijfdegraads Taylorveelterm i.p.v. in een derdegraadspolynoom. Dan kan gemakkelijk aangetoond worden dat de volgende betrekking kan afgeleid worden ;

$$\frac{1}{h^2}\Big[f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)\Big]=f''(x_0)+\frac{h^2}{12}f^{(4)}(x_0)+\frac{h^4}{360}f^{(6)}(\xi) \tag{7.27}$$

met $x_0-h<\xi<x_0+h$.

Als hierin h vervangen wordt door qh met q een willekeurige waarde verschillend van ±1 en 0, dan krijgen we

$$\begin{aligned}&\frac{1}{q^2h^2}\Big[f(x_0+qh)-2f(x_0)+f(x_0-qh)\Big]\\&\qquad=f''(x_0)+\frac{q^2h^2}{12}f^{(4)}(x_0)+\frac{q^4h^4}{360}f^{(6)}(\hat{\xi})\ ,x_0-qh<\hat{\xi}<x_0+qh\,.\end{aligned} \tag{7.28}$$

Uit (7.27) en (7.28) kunnen nu de termen van de orde h^2 geëlimineerd worden, i.e.

$$\begin{aligned}&\frac{q^2}{h^2(q^2-1)}\Big[f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)\Big]\\&\qquad\qquad-\frac{1}{(q^2-1)q^2h^2}\Big[f(x_0+qh)-2f(x_0)+f(x_0-qh)\Big]\\&\quad=f''(x_0)-\frac{q^2h^4}{(q^2-1)360}\Big[q^2f^{(6)}(\hat{\xi})-f^{(6)}(\xi)\Big]\end{aligned}$$

of ook

$$\begin{aligned}f''(x_0)\ &=\ \frac{1}{h^2q^2(q^2-1)}\Big[-f(x_0+qh)+q^4f(x_0+h)-(2q^4-2)f(x_0)\\&\qquad\qquad+q^4f(x_0-h)-f(x_0-qh)\Big]+\mathcal{O}(h^4)\,.\end{aligned} \tag{7.29}$$

Op deze wijze wordt $f''(x_0)$ bekomen nauwkeurig tot orde h^4.

Een meer diepgaander toepassing van Richardson's extrapolatie wordt besproken in het volgende voorbeeld.

Voorbeeld 7.2.1

Beschouw vergelijkingen (7.12) en (7.13) uitgebreid met hogere–orde termen, i.e.

$$f(x+h)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}h^kf^{(k)}(x) \tag{7.30}$$

en

$$f(x-h)=\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{1}{k!}h^kf^{(k)}(x)\,. \tag{7.31}$$

Als de tweede vergelijking afgetrokken wordt van de eerste, verdwijnen alle termen in even machten van h, d.i.

$$\begin{aligned} f(x+h) - f(x-h) &= 2hf'(x) + \frac{2}{3!}h^3 f'''(x) \\ &+ \frac{2}{5!}h^5 f^{(5)}(x) + \dots , \end{aligned}$$

waaruit

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \Big[\frac{1}{3!}h^2 f^{(3)}(x) \\ &+ \frac{1}{5!}h^4 f^{(5)}(x) + \frac{1}{7!}h^6 f^{(7)}(x) + \dots\Big] . \end{aligned}$$

Deze vergelijking heeft de vorm

$$L = \phi(h) + a_2h^2 + a_4h^4 + a_6h^6 + \dots , \tag{7.32}$$

waarbij L een andere notatie is voor $f'(x)$ en $\phi(h)$ de numerieke afleidingsformule (7.10) zonder foutterm voorstelt. Het numerieke algoritme (7.32) is beschikbaar om een benadering van L te evalueren. De functie ϕ is zo gedefinieerd dat ze kan bepaald worden zolang als $h > 0$. Voor elke $h > 0$ wordt de fout gegeven door de rij termen $a_2h^2 + a_4h^4 + \dots$. In de veronderstelling dat $a_2 \neq 0$ zien we dat de eerste term a_2h^2 groter is dan de andere wanneer h voldoende klein is. Onze hierop volgende analyse slaat op vergelijking (7.32), maar zal ook toepasbaar zijn voor andere numerieke processen (zie ook paragraaf 8.4.3)

Schrijf vergelijking (7.32) uit met h vervangen door $h/2$:

$$L = \phi(h/2) + a_2h^2/4 + a_4h^4/16 + a_6h^6/64 + \dots \tag{7.33}$$

De leidende term in de fout kan geëlimineerd worden tussen de formules (7.32) en (7.33), resulterend in:

$$L = \frac{4}{3}\phi(h/2) - \frac{1}{3}\phi(h) - a_4h^4/4 - 5a_6h^6/16 - \dots \tag{7.34}$$

De laatste vergelijking beschrijft de eerste stap in Richardson's extrapolatie. Deze stap hebben we ook toegepast bij de bepaling van (7.29). Het toont aan dat een eenvoudige combinatie van $\phi(h)$ en $\phi(h/2)$ een schatting voor L oplevert met een nauwkeurigheid $\mathcal{O}(h^4)$.

Het is evident dat de techniek toegepast op vergelijking (7.32) kan overgedaan worden op (7.34). Volgende stappen moeten hiertoe verricht worden: substitueer

$$\psi(h) = \frac{4}{3}\phi(h/2) - \frac{1}{3}\phi(h)$$

in vergelijking (7.34). Dan verkrijgen we

$$L = \psi(h) + b_4 h^4 + b_6 h^6 + \dots$$

en ook

$$L = \psi(h/2) + b_4 h^4/16 + b_6 h^6/64 + \dots\,,$$

waaruit de h^4 term kan geëlimineerd worden; dit levert:

$$L = \frac{16}{15}\psi(h/2) - \frac{1}{15}\psi(h) - b_6 h^6/20 - \dots\,. \tag{7.35}$$

Opnieuw kan dit proces herhaald worden door

$$\Phi(h) = \frac{16}{15}\psi(h/2) - \frac{1}{15}\psi(h)$$

in te voeren in (7.35) zo dat

$$L = \Phi(h) + c_6 h^6 + c_8 h^8 + \dots\,.$$

Op een analoge wijze als in de voorgaande stappen volgt hieruit dat

$$L = \frac{64}{63}\Phi(h/2) - \frac{1}{63}\Phi(h) - 3c_8 h^8/252 - \dots\,.$$

□

Uit deze bespreking moet het duidelijk zijn dat bij elke nieuwe stap een formule wordt bereikt met betere nauwkeurigheid. Hierop steunend kan een volgend algoritme voor M stappen van de Richardson extrapolatie als volgt worden geformuleerd:

(a) selecteer een aanvaardbare stap h (bv. $h = 1$) en bereken

$$D(n, 0) = \phi(h/2^n)$$

voor $n = 0, 1, \dots, M$.

(b) Bereken bijkomende waarden m.b.v. de formule

$$D(n, k) = \frac{4^k}{4^k - 1} D(n, k-1) - \frac{1}{4^k - 1} D(n-1, k-1)\,, \tag{7.36}$$

waarbij $k = 1, 2, \dots, M$ en $n = k, k+1, \dots, M$.

Bemerk dat $D(0,0) = \phi(h), D(1,0) = \phi(h/2)$ en $D(1,1) = \psi(h)$. De grootheden $D(n,1)$ zijn verbonden met betrekking (7.34), terwijl de $D(n,2)$ corresponderen met vergelijking (7.35), etc.... Uit de gemaakte hypotheses en berekeningen is het duidelijk dat

$$\begin{aligned}
D(n,0) &= L + \mathcal{O}(h^2) \\
D(n,1) &= L + \mathcal{O}(h^4) \\
D(n,2) &= L + \mathcal{O}(h^6) \\
D(n,3) &= L + \mathcal{O}(h^8).
\end{aligned}$$

Algemeen kan men dit doortrekken tot

$$D(n,k-1) = L + \mathcal{O}(h^{2k})$$

Bemerk tevens dat deze gevoerde analyse kan toegepast worden op elk numeriek proces dat kan geschreven worden in de vorm (7.32). De formules gegeven voor $D(n,0)$ en $D(n,k)$ laten toe een driehoeksstructuur op te bouwen:

$$\begin{array}{ccccc}
D(0,0) & & & & \\
D(1,0) & D(1,1) & & & \\
D(2,0) & D(2,1) & D(2,2) & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
D(M,0) & D(M,1) & D(M,2) & \dots & D(M,M)
\end{array}$$

7.3 Discretizatie van afgeleiden m.b.v. operatoren

De operatoren die we verder zullen gebruiken worden verondersteld in te werken op functies die behoren tot een lineaire functieruimte. Zulke ruimte F wordt gedefinieerd als een verzameling functies f, $g, \dots$ die de eigenschap bezitten dat $f \in F$, $g \in F$ impliceert dat $\alpha f + \beta g \in F$ waarbij α en β arbitraire constanten zijn. Een lineaire operator is dan een afbeelding van F op een lineaire ruimte $F^\star$; normaal kiest men $F^\star = F$. Een operator is lineair wanneer $P(\alpha f + \beta g) = \alpha P f + \beta P g$ voor alle f, $g \in F$ met α en β willekeurige constanten. De operatoren die we zullen gebruiken zijn associatief en distributief, maar commuteren in het algemeen niet. Als we de operatoren algemeen noteren als P_1, P_2, $P_3, \dots$ dan nemen we aan dat de volgende wetten geldig zijn :

$$\begin{cases}
P_1 + (P_2 + P_3) = (P_1 + P_2) + P_3 \\
P_1(P_2 P_3) = (P_1 P_2) P_3 \\
P_1(P_2 + P_3) = P_1 P_2 + P_1 P_3 \,.
\end{cases}$$

Tevens zullen we aannemen dat de inverse P^{-1} van een operator P bestaat, i.e. $P^{-1}P = PP^{-1} = 1\,$.

In de verdere uiteenzetting zullen we volgende operatoren met hun hierna vermelde definitie gebruiken :
– de verschuivingsoperator : $Ef(x) = f(x+h)$
– de voorwaartse differentieoperator : $\Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$
(zie ook (5.18))
– de achterwaartse differentieoperator : $\nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$
(zie ook (5.24))
– de centrale differentieoperator : $\delta f(x) = f(x + \dfrac{h}{2}) - f(x - \dfrac{h}{2})$
– de gemiddelde waarde operator : $\mu f(x) = \frac{1}{2}[f(x + \dfrac{h}{2}) + f(x - \dfrac{h}{2})]$
– de afleidingsoperator : $Df(x) = f'(x)$.

In hetgeen volgt zullen we relaties tussen de verschillende operatoren nodig hebben. Vooreerst merken we op dat de operator E^{-1} moet geïnterpreteerd worden als $E^{-1}f(x) = f(x-h)$. Om een eerste verband te leggen maken we gebruik van Taylor's ontwikkeling

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \ldots$$

of in operatornotatie

$$Ef(x) = (1 + hD + \frac{h^2D^2}{2} + \ldots)f(x) = e^{hD}f(x)\,,$$

d.w.z. dat de Taylor reeksontwikkeling in compacte gedaante te schrijven is als

$$E = e^{hD} = e^U \qquad\qquad (\text{met } U = hD)\,.$$

In tabel 4 sommen we de overige relaties op tussen bovengenoemde operatoren. De meeste van deze relaties zijn gemakkelijk te verifiëren (doe dit als oefening).

	E	Δ	∇	δ	U
E	E	$1+\Delta$	$(1-\nabla)^{-1}$	$1+\frac{1}{2}\delta^2+\delta\sqrt{1+\frac{\delta^2}{4}}$	e^U
Δ	$E-1$	Δ	$(1-\nabla)^{-1}-1$	$\frac{1}{2}\delta^2+\delta\sqrt{1+\frac{\delta^2}{4}}$	e^U-1
∇	$1-E^{-1}$	$1-(1+\Delta)^{-1}$	∇	$-\frac{1}{2}\delta^2+\delta\sqrt{1+\frac{\delta^2}{4}}$	$1-e^{-U}$
δ	$E^{1/2}-E^{-1/2}$	$\Delta(1+\Delta)^{-1/2}$	$\nabla(1-\nabla)^{-1/2}$	δ	$2\,\mathrm{sh}\,\frac{U}{2}$
U	$\ln E$	$\ln(1+\Delta)$	$-\ln(1-\nabla)$	$2\,\mathrm{sh}^{-1}\,\frac{\delta}{2}$	U
μ	$\frac{1}{2}(E^{1/2}+E^{-1/2})$	$(1+\frac{\Delta}{2})(1+\Delta)^{-1/2}$	$(1-\frac{\nabla}{2})(1-\nabla)^{-1/2}$	$\sqrt{1+\frac{\delta^2}{4}}$	$\mathrm{ch}\,\frac{U}{2}$

tabel 4

In het bijzonder wensen we de aandacht te vestigen op

$$\frac{\delta}{2} = \frac{E^{1/2} - E^{-1/2}}{2} = \frac{e^{1/2U} - e^{-1/2U}}{2} = \mathrm{sh}(\frac{U}{2})$$

en

$$\begin{aligned} 2\mu + \delta &= E^{1/2} + E^{-1/2} + E^{1/2} - E^{-1/2} = 2E^{1/2} \\ 2\mu - \delta &= E^{1/2} + E^{-1/2} - E^{1/2} + E^{-1/2} = 2E^{-1/2} \end{aligned}$$

waaruit

$$(2\mu + \delta)(2\mu - \delta) = 4 \qquad \text{of} \qquad (4\mu^2 - \delta^2) = 4 \qquad \text{of}$$
$$\mu = \sqrt{1 + \frac{\delta^2}{4}}\ .$$

Eén van de essentiële relaties voor wat afgeleiden betreft is $U = hD = \ln(1+\Delta) = -\ln(1-\nabla)$. D.m.v. reeksontwikkeling bekomen we formeel dat

$$hD = \ln(1 + \Delta) = \Delta - \frac{1}{2}\Delta^2 + \frac{1}{3}\Delta^3 - \dots\ .$$

of

$$hD = -\ln(1 - \nabla) = \nabla + \frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{3}\nabla^3 + \dots\ .$$

Hieruit halen we dan rechtstreeks dat

$$f'(x) = \frac{1}{h}(\Delta f(x) - \frac{1}{2}\Delta^2 f(x) + \frac{1}{3}\Delta^3 f(x) - \dots)\ . \tag{7.37}$$

of ook

$$f'(x) = \frac{1}{h}(\nabla f(x) + \frac{1}{2}\nabla^2 f(x) + \frac{1}{3}\nabla^3 f(x) + \dots)\ . \tag{7.38}$$

Wanneer slechts de eerste term in het rechterlid van (7.37) wordt weerhouden vinden we betrekking (7.1) terug. Wanneer de eerste twee termen worden in acht genomen bekomen we relatie (7.9). Evenzo met in achtname van vier termen in het rechterlid bekomen we (7.21).

Hogere–orde afgeleiden worden langs die operatorrelaties ook veel gemakkelijker afgeleid. Uit (7.38) verkrijgen we

$$D^r = h^{-r}[\ln(1 + \Delta)]^r \tag{7.39}$$

Het rechterlid kan verder uitgewerkt worden door te steunen op de MacLaurinreeksontwikkeling van $\ln(1+x)^r$ rond het punt $x = 0$, welke met Maple gemakkelijk realizeerbaar is voor elke r-waarde. Volgende resultaten werden bekomen voor $D^r, (r = 2, 3)$:

$$D^2 = h^{-2}\left(\Delta^2 - \Delta^3 + \frac{11}{12}\Delta^4 - \frac{5}{6}\Delta^5 + \frac{137}{180}\Delta^6 + \ldots\right) \tag{7.40}$$

en

$$D^3 = h^{-3}\left(\Delta^3 - \frac{3}{2}\Delta^4 + \frac{7}{4}\Delta^5 - \frac{15}{8}\Delta^6 + \frac{29}{15}\Delta^7 + \ldots\right) \tag{7.41}$$

Op analoge wijze kunnen achterwaartse vormen worden opgesteld.

Uit de voorgaande paragrafen blijkt dat er ook centrale benaderngsformules voor afgeleiden bestaan. Deze kunnen ook bekomen worden door te steunen op operatorvormen; in het bijzonder spelen hier de centrale differentieoperator en de gemiddelde waarde operator een fundamentele rol. Om de nuttige formules op te stellen vertrekken we de relaties uit tabel 4, nl.

$$\frac{U}{\mu} = \frac{2\,\mathrm{sh}^{-1}(\delta/2)}{\sqrt{1+\frac{\delta^2}{4}}} = \frac{2arcsh(\delta/2)}{\sqrt{1+\frac{\delta^2}{4}}} \tag{7.42}$$

en

$$U^2 = 4arcsh(\delta/2)^2 \tag{7.43}$$

welke terug kunnen in MacLaurinreeks ontwikkeld worden rondom het punt $\delta = 0$.

$$\begin{aligned} \frac{U}{\mathrm{ch}(U/2)} &= \frac{U}{\mu} \\ &= \delta(1 - \frac{\delta^2}{6} + \frac{\delta^4}{30} - \frac{\delta^6}{140} + \frac{\delta^8}{630} - \ldots)\,. \end{aligned} \tag{7.44}$$

Evenzo kan men rechtstreeks afleiden dat

$$U^2 = \delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \frac{\delta^6}{90} - \frac{\delta^8}{560} + \frac{\delta^{10}}{3150} + \ldots\ , \tag{7.45}$$

Opnieuw kan men verifiëren dat bovenstaande relaties kunnen gebruikt worden voor de opstelling van formules (7.10), (7.20), (7.26) en (7.29) neergeschreven voor $q = 2$.

Algemene nota

Het is duidelijk dat de theorie over het numeriek berekenen van afgeleiden eerder beperkt is. Het is evident dat, als een functievoorschrift gegeven is, de afgeleide van die functie eveneens in een gesloten gedaante kan weergegeven worden. Een numerieke methode wordt dan ook in hoofdzaak gebruikt wanneer een functie slechts in getabelleerde vorm is gedefinieerd. Zoals reeds in de doelstelling bij dit hoofdstuk is aangegeven, zullen bovenstaande benaderingen voor afgeleiden een belangrijke rol spelen bij de algoritmen voor het integreren van randwaarde problemen

---