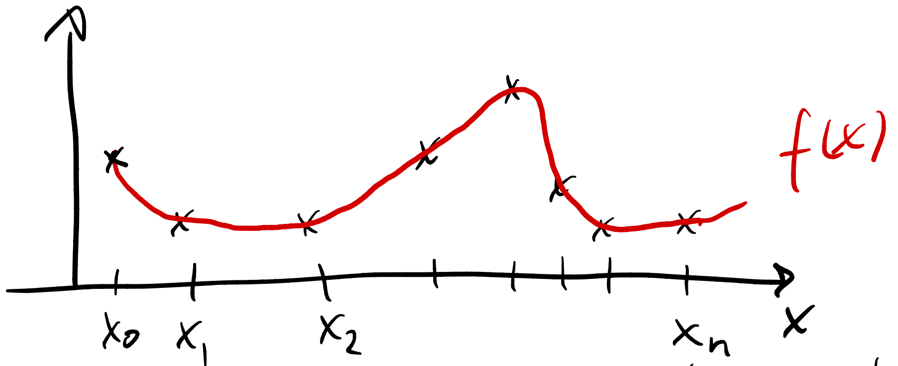
MAT-INF 1100 21/10

Numerisk derivasjon

Anta at vi kun kjenner funksjonen $f(x)$ i noen punkter

$(x_i, f(x_i))$ $i = 0, 1, \ldots, n$



($f(x_i)$ er f. eks målepunkter, eller det kan være dyrt å evaluere f).

Hvordan kan vi estimere den deriverte til f?

Enkleste måte: Estimer $f'(x)$ for $x \in [x_i, x_{i+1}]$ ved sekanten

$$\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \qquad (1)$$

(1) kan motiveres fra definisjonen

$$f'(a) := \lim_{h \to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}.$$

Når h er "liten", forventer vi at

$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}.$$

<u>Feilanalyse</u>

Vi søker et feilestimat

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| \leq \tilde{C} h^p,$$

dvs verdier for $\tilde{C}$ og p.

Taylorpolynom $T_1 f$ om a og restledd gir

$$f(x) = \underbrace{f(a) + f'(a)(x-a)}_{T_1 f(x)} + \underbrace{\frac{f''(c)}{2!}(x-a)}_{R_1 f(x)} \tag{2}$$

hvor $c \in (a, x)$.

Med $x = a+h$ gir (2)

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + f''(c)\frac{h^2}{2}$$

$$\Rightarrow \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = f'(a) + f''(c)\frac{h}{2}$$

$$\Rightarrow \left| \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - f'(a) \right| = f''(c)\frac{h}{2}$$

der $c \in (a, x) = (a, a+h)$.

$$\Rightarrow \left| \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - f'(a) \right| \leq M\frac{h}{2} \qquad (3)$$

hvor $M = \max\limits_{y \in [a, a+h]} |f''(y)|$.

Approksimasjonen $\frac{f(a+h) - f(a)}{h}$

kalles Newtons differenskvotient og er en første ordens approks. av $f'(a)$.

Eksempel

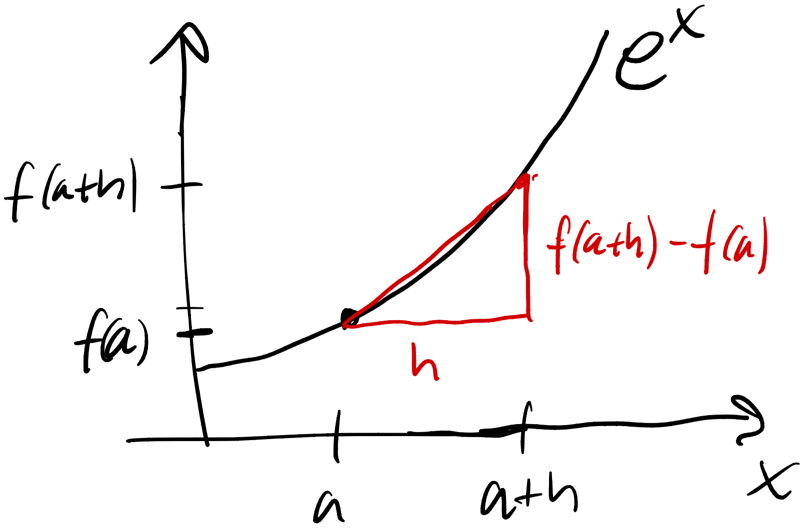
For $f(x) = e^x$ er $f'(x) = f''(x) = e^x$

og
$$\frac{f(a+h)-f(a)}{h} = \frac{e^{a+h} - e^a}{h}$$

$$= \frac{\overbrace{e^a + e^a h}^{T_1 f(a+h)} + \overbrace{e^c \frac{h^2}{2}}^{R_1 f(a+h)} - e^a}{h}$$

$$= e^a \frac{\cancel{h}}{\cancel{h}} + \frac{e^c}{2} h \quad , \quad c \in (a, a+h)$$

$$\Rightarrow \left| \frac{f(a+h)-f(a)}{h} - f'(a) \right| \leq \underbrace{e^{a+h}}_{=M} \frac{h}{2}$$



Avrundingsfeil

Som regel vil differenskvotienten beregnes med flyttall.

La $\overline{f(a)}$ være 64-bits flyttallsrep. av $f(a)$. Da vet vi at

$$\frac{\overline{f(a)} - f(a)}{f(a)} =: \epsilon_1 \simeq 10^{-16},$$

som vi kan skrive

$$\overline{f(a)} = f(a)(1+\epsilon_1).$$

På samme måte er

$$\overline{f(a+h)} = f(a+h)(1+\epsilon_2), \quad \text{hvor } \epsilon_2 \simeq 10^{-6}.$$

I praksis approksimeres $f'(a)$ med

$$\frac{\overline{f(a+h)} - \overline{f(a)}}{h}.$$ Hvor stor er feilen?

$$\left|\frac{\overline{f(a+h)}-\overline{f(a)}}{h}-f'(a)\right| = \left|\frac{f(a+h)(1+\epsilon_2)-f(a)(1+\epsilon_1)}{h}-f'(a)\right|$$

$$=\left|\frac{f(a+h)-f(a)}{h}-f'(a)+\frac{\epsilon_2 f(a+h)-\epsilon_1 f(a)}{h}\right|$$

$$\overset{|x+y|\le|x|+|y|}{\le} \left|\frac{f(a+h)-f(a)}{h}-f'(a)\right|+\frac{|\epsilon_2 f(a+h)-\epsilon_1 f(a)|}{h}$$

$$\le M_1\frac{h}{2}+\frac{|\epsilon_2||f(a+h)|+|\epsilon_1||f(a)|}{h}$$

$$\le M_1\frac{h}{2}+\frac{2\epsilon M_2}{h} =: feil(h)$$

hvor $M_1=\max_{a\le x\le a+h}|f''(x)| \simeq |f''(a)|$

$\epsilon=\max\{|\epsilon_1|,|\epsilon_2|\}\simeq 10^{-16}$

og $M_2=\max_{a\le x\le a+h}|f(x)| \simeq |f(a)|$.

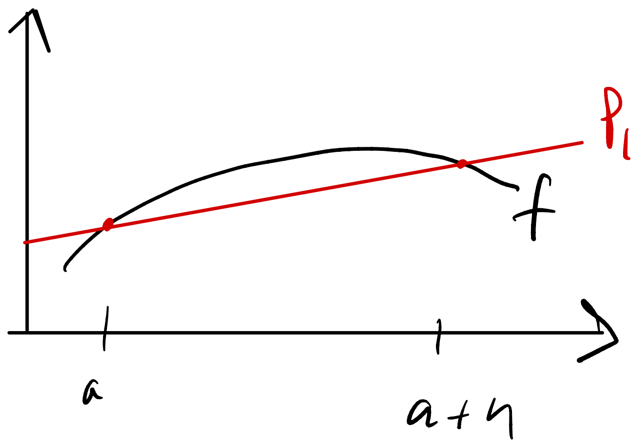
Observasjon: $feil(h)$ minker med h til et visst punkt $h^*\simeq 2\sqrt{\frac{10^{-16}|f(a)|}{|f''(a)|}}$, mens for $h<h^*$ så vokser $feil(h)$ når h minker på grunn av det andre leddet.

Alternativt perspektiv

Polynomet $P_1(x) = c_0 + c_1 x$ som tilfredstiller $P_1(a) = f(a)$ og $P_1(a+h) = f(a+h)$ kan skrives

$$P_1(x) = f(a) + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x-a).$$

Vi ser at $P_1'(a) = \dfrac{f(a+h) - f(a)}{h}$



Høyere ordens numerisk derivasjon

Ide:

1. Finn polynomet P_n slik at
$$P_n(x_i) = f(x_i) \qquad i = 0, 1, \ldots, n$$
for punkter x_i nærme a
2. Approksimer $f'(a) \approx P_n'(a)$.

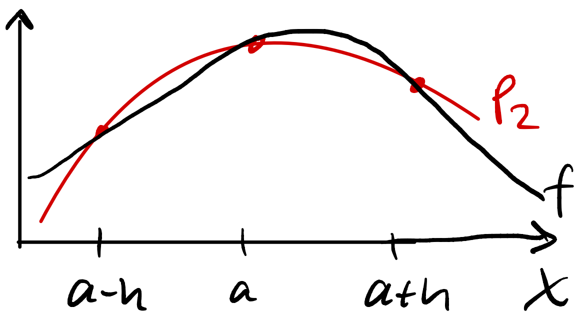
Eksempel (sentraldifferanse)

La $n=2$ og $x_0 = a-h$, $x_1 = a$, $x_2 = a+h$.

Vi søker $P_2(x) = c_0 + c_1(x-x_0) + c_2(x-x_0)(x-x_1)$

slik at

$P_2(x_i) = f(x_i)$. $i = 0, 1, 2$.



Det gir

$c_0 = f(a)$, $c_1 = [x_0, x_1]f = [a-h, a]f = \dfrac{f(a) - f(a-h)}{h}$

og $c_2 = [a-h, a, a+h]f$

$$= \frac{\dfrac{f(a+h) - f(a)}{h} - \dfrac{f(a) - f(a-h)}{h}}{2h}$$

$$= \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{2h^2}.$$

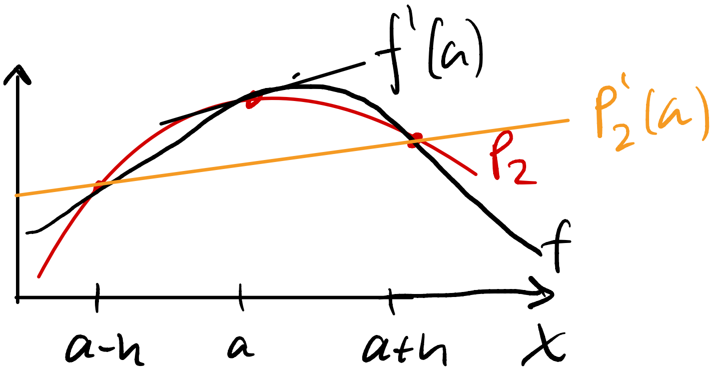
Og $P_2'(x) = c_1 + c_2(2x - x_0 - x_1)$

$= c_1 + c_2(2x - 2a + h)$

$$\Rightarrow P_2'(a) = c_1 + c_2 h$$

$$= \frac{f(a) - f(a-h)}{h} + \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{2h^{\cancel{2}}}\cancel{h}$$

$$= \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h}$$



Man kan vise at

$$\left| \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} - f'(a) \right| \leq h^2 \frac{M_1}{6} + \frac{\epsilon M_2}{h}$$

hvor $M_1 \approx |f'''(a)|$ og $M_2 \approx |f(a)|$

Sentraldifferansen gir en annen ordens metode (om vi ser bort fra avrundingsfeil).

Metoden kan også brukes for høyere ordens deriverte:

$$f''(a) \approx P_2''(a) = \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2}.$$