Kap. 11 i kompendiet: Numerisk derivasjon

Hvordan kan vi finne/tilnærme den deriverte til en funksjon, basert bare på funksjonsverdiene i noen punkter $\{(x_i, f(x_i)\}_{i=0}^{n}$?

Enkleste eksempel: Hvis $f(a)$, $f(a+h)$, så er $\frac{f(a+h)-f(a)}{h} \approx f'(a)$ når h er liten, ved definisjonen av den deriverte:

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

Feilanalyse: Hva er feilen i denne tilnærmingen?
Kan vi finne $\tilde{C}, p$ s.a. $\left| f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h} \right| \leq \tilde{C} h^p$?
Da sier vi at tilnærmingen er av orden p.

Vi har $f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(c)}{2}h^2$ når f er to ganger deriverbar

Taylorutvikling av f om a, satt inn $x = a+h$ $(x-a) = a+h-a = h$
her er c et punkt i $[a, a+h]$.

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

altså $\left| f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h} \right| \leq \frac{M_2}{2}h$ der $M_2 = \max_{c \in [a,a+h]} |f''(c)|$

vi kan sette $p=1$, slik at metoden er av førsteorden.

Tilnærmingen $\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$ kalles **Newtons differenskvotient**.

Feilen $f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$ kalles for **trunkeringsfeilen**

Eksempel: Anta $f(x) = e^x$. Da er $f''(x) = e^x$, $M_2 = \max_{c \in [a,a+h]} |f''(c)| = e^{a+h}$

Derfor er $\left| f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h} \right| \leq \frac{e^{a+h}}{2} h$

Vi regner ut $\left| f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h} \right|$ for forskjellige h på datamaskin.
Ser da at feilen vokser når h blir veldig liten! Hvorfor?

Avrundingsfeil: Vi antar maskinen bruker 64 bits flyttall, og at maskinen erstatter $f(a)$ og $f(a+h)$ med nærmeste flyttall, betegnet med $\overline{f(a)}$ og $\overline{f(a+h)}$

Vi vet at $\underbrace{\frac{\overline{f(a)} - f(a)}{f(a)}}_{\text{relativ feil.}} = \varepsilon_1$, der $|\varepsilon_1| \le \varepsilon^* \approx 10^{-16}$

Dette kan også skrives: $\overline{f(a)} = f(a)(1+\varepsilon_1)$

På samme måte: $\overline{f(a+h)} = f(a+h)(1+\varepsilon_2)$ $\quad |\varepsilon_2| \le \varepsilon^*$

Maskinen regner ut $\dfrac{\overline{f(a+h)} - \overline{f(a)}}{h}$

Hvor stor er feilen $\left| f'(a) - \dfrac{\overline{f(a+h)} - \overline{f(a)}}{h} \right|$?

$$\left| f'(a) - \frac{\overline{f(a+h)} - \overline{f(a)}}{h} \right| = \left| f'(a) - \frac{f(a+h)(1+\varepsilon_2) - f(a)(1+\varepsilon_1)}{h} \right|$$

$$= \left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - \frac{\varepsilon_2 f(a+h) - \varepsilon_1 f(a)}{h} \right|$$

$$\overset{\text{trekantulikheten}}{\le} \underbrace{\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right|}_{\text{trunkeringsfeil.}} + \frac{|\varepsilon_2|\,|f(a+h)| + |\varepsilon_1|\,|f(a)|}{h}$$

$|\varepsilon_i| \le \varepsilon^*$

$|f(a)|, |f(a+h)| \le M_0$, der $M_0 = \max_{x \in [a, a+h]} |f(x)|$

$$\le \frac{M_2}{2} h + \frac{\varepsilon^* M_0 + \varepsilon^* M_0}{h} = \frac{M_2}{2} h + \frac{2\varepsilon^* M_0}{h}$$

Sett $g(h) = \dfrac{M_2}{2} h + \dfrac{2\varepsilon^* M_0}{h}$. Da er $g'(h) = \dfrac{M_2}{2} - \dfrac{2\varepsilon^* M_0}{h^2}$, $g''(h) = \dfrac{4\varepsilon^* M_0}{h^3}$

Vi har $g'(h) = 0$ når $h^2 = \dfrac{2\varepsilon^* M_0 \cdot 2}{M_2}$, s.o. $h = 2\sqrt{\dfrac{\varepsilon^* M_0}{M_2}}$

$$\approx 2\sqrt{\frac{\varepsilon^* |f(a)|}{|f''(a)|}}.$$

Dette er et minimum siden $g''(h) > 0$.

Derfor: feilen minker når h går med til $h^* \approx 2\sqrt{\dfrac{\varepsilon^* |f(a)|}{|f''(a)|}}$,
men når h minker videre, så vil feilen vokse.

Merk: La p_1 være det unike polynomet av grad ≤ 1 som interpolerer f i $a+h$ og a. Da er Newtonkvotienten lik $p_1'(a)$.

Bevis: Vi har at $p_1(x) = f(a) + \frac{f(a+h)-f(a)}{h}(x-a)$

$$\Downarrow$$

$$p_1'(a) = \frac{f(a+h)-f(a)}{h} = \text{Newtonkvotienten.}$$

Slik kan vi definere mer generelle metoder for numerisk derivasjon gjennom interpolasjon.

Eksempel: Symmetrisk Newtonkvotient

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

Interpolerende polynom, Newtonform:

$$p_2(x) = c_0 + c_1(x-x_0) + c_2(x-x_0)(x-x_1)$$

Vi første mandag:

$$c_0 = f(x_0)$$

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

$$c_2 = f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1,x_2]-f[x_0,x_1]}{x_2-x_0}$$

$$= \frac{\frac{f(x_2)-f(x_1)}{h} - \frac{f(x_1)-f(x_0)}{h}}{2h}$$

$$= \frac{f(x_2)-2f(x_1)+f(x_0)}{2h^2} = \frac{f(a+h)-2f(a)+f(a-h)}{2h^2}$$

$$p_2'(x) = c_1 + c_2(2x - x_0 - x_1)$$

$$p_2'(a) = c_1 + c_2(2a-(a-h)-a)$$

$$= c_1 + c_2 h$$

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

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

Man kan vise at

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a-h)}{2h} \right| \leq h^2 \frac{M_3}{6} + \varepsilon^* \frac{M_0}{h}$$

orden 2, vaskere mot 0.

der $M_0 = \max_{x \in [a, a+h]} |f(x)|$, $M_3 = \max_{x \in [a, a+h]} |f'''(x)|$

Metode: Når f er tre ganger deriverbar, skriv opp Taylorrekkene:

$$f(a+h) = f(a) + f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 + \frac{f'''(c_1)}{3!}h^3$$

$$f(a-h) = f(a) - f'(a)h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 - \frac{f'''(c_2)}{3!}h^3$$

og trekk disse fra hverandre.

Metoden kan også brukes for høyere deriverte:
En tilnærming til $f''(a)$ kan være $p_2''(a)$

$$p_2''(x) = 2c_2 = \frac{f(a+h) - 2f(a) + f(a-h)}{h^2} \approx f''(a)$$