TMV035 Analysis and Linear Algebra A, 2006

NUMERISK BERÄKNING AV DERIVATA

Vi skriver en funktionsfil `derivative.m` med anropet `y=derivative(f,x)` som beräknar en approximation av derivatan av f i punkten x. Funktionen ska användas i nästa studioövning som handlar om Newtons metod för lösning av $f(x) = 0$. Läraren går först igenom inledningen.

1. Inledning

Låt $f : I \to \mathbf{R}$ vara en deriverbar funktion (I är ett intervall). Derivatans definition är

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}. \tag{1}$$

Det betyder att vi kan approximera derivatan med en differenskvot:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \text{med } h \approx 0. \tag{2}$$

Vi ska nu diskutera felet i denna approximation. Vi måste då ta hänsyn till att datorn beräknar med ändlig precision, dvs räknar med ändligt många decimaler och att detta leder till avrundningsfel. Datorn beräknar alltså en approximation

$$\tilde{f}(x) \approx f(x) \tag{3}$$

där avrundningsfelet är

$$e_f(x) = \tilde{f}(x) - f(x) \tag{4}$$

med begränsningen

$$|e_f(x)| = |\tilde{f}(x) - f(x)| \le \delta_f, \quad x \in I. \tag{5}$$

I Matlab, som räknar med cirka 16 decimaler, kan vi antaga att $\delta_f \approx 10^{-15}$. Det vi beräknar är alltså

$$f'(x) \approx \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} \quad \text{med } h \approx 0. \tag{6}$$

Felet är

$$\begin{aligned}\frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} - f'(x) &= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) + \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \\ &= \Big(\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x)\Big) + \frac{e_f(x+h) - e_f(x)}{h}.\end{aligned}$$

Triangelolikheten ger

$$\Big|\frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h} - f'(x)\Big| \le \Big|\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x)\Big| + \Big|\frac{e_f(x+h) - e_f(x)}{h}\Big|. \tag{7}$$

Den första termen är diskretiseringsfelet och den andra är avrundningsfelet. För avrundningsfelet använder vi (5)

$$\Big|\frac{e_f(x+h) - e_f(x)}{h}\Big| \le \frac{|e_f(x+h)| + |e_f(x)|}{h} \le \frac{2\delta_f}{h}. \tag{8}$$

För diskretiseringsfelet använder vi en formel för linjäriseringsfelet (se Definition 8 och Theorem 9 i Adams 4.7 och Föreläsning 6.1)

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + E(x) \quad \text{med felet } E(x) = \frac{1}{2} f''(s)(x-a)^2, \tag{9}$$

Date: October 8, 2006, Stig Larsson, Mathematical Sciences, Chalmers University of Technology.

där s är en (obekant) punkt mellan x och a. Vi använder denna genom att byta ut x mot $x+h$ och a mot x:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(s)h^2 \quad \text{med } s \text{ mellan } x \text{ och } x+h. \tag{10}$$

Genom att dividera med h får vi

$$\Big|\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - f'(x)\Big| = \frac{1}{2}|f''(s)|h. \tag{11}$$

Eftersom s är okänd måste vi antaga att vi har en begränsning för f'',

$$|f''(x)| \le K_f, \quad x \in I. \tag{12}$$

Vi får då:

$$\Big|\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - f'(x)\Big| = \frac{1}{2}|f''(s)|h \le \frac{1}{2}K_f h. \tag{13}$$

För totala felet i (7) får vi med (13) och (8):

$$\Big|\frac{\tilde{f}(x+h)-\tilde{f}(x)}{h} - f'(x)\Big| \le \frac{1}{2}K_f h + \frac{2\delta_f}{h}. \tag{14}$$

Detta gäller för alla $x \in I$ och $x+h \in I$. Vi vill välja h så att felet blir minimalt. Vi ser att den första termen i $\frac{1}{2}K_f h + \frac{2\delta_f}{h}$ minskar då h minskar medan den andra ökar. Vi får minimum då båda är lika:

$$\frac{1}{2}K_f h = \frac{2\delta_f}{h}, \tag{15}$$

dvs

$$h^2 = \frac{4\delta_f}{K_f}, \quad h = 2\sqrt{\frac{\delta_f}{K_f}}. \tag{16}$$

(Man kan också visa detta genom att derivera $\frac{1}{2}K_f h + \frac{2\delta_f}{h}$ med avseende på h och sätta derivatan $= 0$.) Minimala felet blir då

$$\Big|\frac{\tilde{f}(x+h)-\tilde{f}(x)}{h} - f'(x)\Big| = \frac{1}{2}K_f h + \frac{2\delta_f}{h} = K_f h = 2\sqrt{K_f}\sqrt{\delta_f}. \tag{17}$$

I MATLAB med $\delta_f \approx 10^{-15}$ och med $K_f \approx 1$ (till exempel) får vi ungefär

$$h \approx 2\sqrt{\delta_f} \approx 2 \cdot 10^{-7.5} \approx 10^{-7}, \tag{18}$$

$$\Big|\frac{\tilde{f}(x+h)-\tilde{f}(x)}{h} - f'(x)\Big| \approx 2\sqrt{\delta_f} \approx 10^{-7}. \tag{19}$$

Dvs vi får ungefär 7 korrekta decimaler.

En bättre approximation. Vi får en bättre approximation om vi ersätter den ensidiga differenskvoten i (2) med den symmetriska differenskvoten

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \quad \text{med } h \approx 0. \tag{20}$$

Det totala felet blir nu istället för (7)

$$\Big|\frac{\tilde{f}(x+h)-\tilde{f}(x-h)}{2h} - f'(x)\Big| \le \Big|\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - f'(x)\Big| + \Big|\frac{e_f(x+h)-e_f(x-h)}{2h}\Big|. \tag{21}$$

Man kan visa att detta begränsas av

$$\Big|\frac{\tilde{f}(x+h)-\tilde{f}(x-h)}{h} - f'(x)\Big| \le \frac{1}{6}M_f h^2 + \frac{\delta_f}{h}, \tag{22}$$

där δ_f är som förut och M_f är en begränsning av f''':

$$|f'''(x)| \le M_f, \quad x \in I. \tag{23}$$

Vi gör en överslagsberäkning baserad på antagandena $\delta_f \approx 10^{-15}$, $M_f \approx 1$. Feluppskattningen i (22) blir approximativt minimum då båda termerna är approximativt lika:

$$h^2 \approx \frac{\delta_f}{h}, \quad h^3 \approx \delta_f, \quad h \approx \delta_f^{1/3} \approx 10^{-5}, \tag{24}$$

och då blir minimala felet ungefär

$$\Big|\frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x-h)}{2h} - f'(x)\Big| \approx h^2 \approx \delta_f^{2/3} \approx 10^{-10}. \tag{25}$$

Jämfört med (19) har vi cirka 3 decimaler noggrannare approximation av derivatan. Men man ska komma ihåg att (19) och (25) beror också på K_f och M_f, vilket kan påverka jämförelsen om någon av dessa är stor. (Exakt värde i (24) är $h = (3\delta_f/M_f)^{1/3}$ och i (25) $cM_f^{1/3}\delta_f^{2/3}$ med $c \approx 1$.)

Bevis av (22)**.** (Överkurs, kan skippas.) Avrundningsfelet uppskattas som förut i (8). För diskretiseringsfelet använder vi Taylors formel (se Theorem 10 i Adams 4.8 och Föreläsning 6.2–6.3)

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \frac{1}{2}f''(a)(x-a)^2 + E(x) \quad \text{med felet } E(x) = \frac{1}{6}f'''(s)(x-a)^3, \tag{26}$$

där s är en (obekant) punkt mellan x och a. Vi använder denna genom att byta ut x mot $x+h$ och a mot x:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2 + \frac{1}{6}f'''(s_1)h^3, \tag{27}$$

$$f(x-h) = f(x) + f'(x)(-h) + \frac{1}{2}f''(x)(-h)^2 + \frac{1}{6}f'''(s_2)(-h)^3, \tag{28}$$

med s_1, s_2 mellan x och $x+h$. Detta ger

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{1}{12}f'''(s_1)h^2 + \frac{1}{12}f'''(s_2)h^2. \tag{29}$$

Diskretiseringsfelet blir

$$\Big|\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f'(x)\Big| \le \frac{1}{12}|f'''(s_1)|h^2 + \frac{1}{12}|f'''(s_2)|h^2. \tag{30}$$

Eftersom s_1, s_2 är okända måste vi antaga att vi har en begränsning för f''',

$$|f'''(x)| \le M_f, \quad x \in I. \tag{31}$$

Vi får då:

$$\Big|\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - f'(x)\Big| \le \frac{1}{6}M_f h^2. \tag{32}$$

Detta visar (22).

2. Övning 1

Skriv nu en funktionsfil `derivative1.m` som implementerar den ensidiga differenskvoten i (2). Funktionen ska ha anropet `y=derivative1(f,x,h)`, där `f` är ett funktionshandtag.

Prova programmet med `f=@sin` och `x=pi/4`. Jämför med Matlabs `cos(pi/4)`. Obs att detta är också en approximation, men beräknad med högre noggrannhet.

Skriv en scriptfil `testderivative.m` med en `for`-loop som genererar en lista av h-värden,

$$h = (10^{-1}, \dots, 10^{-16}).$$

För varje $h(i)$ beräknas approximativa derivatan $Df(i)$ och absolutbeloppet av felet

$$e(i) = |Df(i) - \cos(\pi/4)|.$$

Alltsammans presenteras i en tabell med h, Df, e i de tre kolumnerna. Tips: `a=[h', Df', e']`.

Jämför med teorin i (18), (19).

Obs att Matlabs `input` och `display` har ingen användning här och bör **absolut inte** användas i denna övning.

3. Övning 2

Gör samma undersökning med den symmetriska differenskvoten i (20). Kalla funktionsfilen `derivative2.m`. Jämför med teorin i (24), (25).

4. Övning 3

När vi nu vet ungefär vilket h som är optimalt, så tar vi bort h från input-listan och bygger in $h = 10^{-5}$ i funktionsfilen. Spara `derivative2.m` som `derivative.m` och gör dessa ändringar. Funktionen ska nu ha anropet `y=derivative(f,x)`, där `f` är ett funktionshandtag. Spara filen, den ska användas i nästa studioövning.

Prova `derivative.m` genom att derivera $f(x) = 3x^3$ i $x = 2$. Detta kräver att du skriver en funktionsfil `funk.m` som implementerar funktionen $f(x) = 3x^3$. Beräkna och plotta derivatan på intervallet $[-3, 3]$.

`/stig`