NI-MPI přednáška 13

Numerická derivace

Štěpán Starosta

FIT ČVUT

17. 12. 2019

Autoři: Karel Klouda, Tomáš Kalvoda, Štěpán Starosta
Problémy, návrhy apod. hlaste v GitLabu.
Verze souboru: 2020-01-27 11:40.
sli.do událost: #Z883

9. Numerická derivace
   - Motivace
   - První diference
   - Jiné varianty

9. Numerická derivace
   - Motivace
   - První diference
   - Jiné varianty

Výpočet derivace (a derivace samotná) je základním analytickým matematickým nástrojem.
Umět počítat derivaci v nepřesné aritmetice je důležité pro mnoho dalších algoritmů.

Výpočet derivace (a derivace samotná) je základním analytickým matematickým nástrojem.
Umět počítat derivaci v nepřesné aritmetice je důležité pro mnoho dalších algoritmů.

Jedna z (dalších) komplikací, se kterou se při výpočtu derivace můžeme potkat, je že hodnoty derivované funkce známe jen v několika izolovaných bodech. Například měříme pozici auta každou minutu (např. pomocí GPS) a chceme zjistit jeho rychlost.

Pokud známe pozici jen v izolovaných bodech, tak není možné použít klasickou derivaci.

Jedním z řešení je použití přibližných (numerických) metod pro derivování.

Hlavní myšlenkou metod pro přibližný výpočet derivace je vyhodnocení funkce v několika bodech, najít polynom[1], který tyto body dostatečně dobře interpoluje, a spočítat derivaci tohoto polynomu.

[1] nebo obecně nějakou funkci

Hlavní myšlenkou metod pro přibližný výpočet derivace je vyhodnocení funkce v několika bodech, najít polynom[1], který tyto body dostatečně dobře interpoluje, a spočítat derivaci tohoto polynomu.

U této metody je důležité mít přehled o chybě, kterou napácháme, když derivujeme jinou funkci (interpolující polynom) než tu původní funkci. Tuto chybu budeme nazývat **chybou zanedbáním** (*truncation error*).

[1] nebo obecně nějakou funkci

Hlavní myšlenkou metod pro přibližný výpočet derivace je vyhodnocení funkce v několika bodech, najít polynom[1], který tyto body dostatečně dobře interpoluje, a spočítat derivaci tohoto polynomu.

U této metody je důležité mít přehled o chybě, kterou napácháme, když derivujeme jinou funkci (interpolující polynom) než tu původní funkci. Tuto chybu budeme nazývat **chybou zanedbáním** (*truncation error*).

Jedná se tedy o další zdroj chyby (spolu s chybami, které jsou zapříčiněny nepřesnou aritmetikou – zaokrouhlovacími chybami).

Jak uvidíme, numerická derivace je velice citlivá na chyby spojené s nepřesnou aritmetikou.

[1] nebo obecně nějakou funkci

Mějme funkci f, jejíž hodnoty známe pouze v několika izolovaných bodech.

Problém numerické derivace (*numerical differentiation*) spočívá ve výpočtu přibližné hodnoty derivace f' funkce f vhodnými kombinacemi znamých hodnot f.

Definice derivace $f'(a)$ je pomocí limity:

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

Předpokládejme dále, že tato limita existuje (tedy že f je diferencovatelná v bodě a).

Definice derivace $f'(a)$ je pomocí limity:

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

Předpokládejme dále, že tato limita existuje (tedy že f je diferencovatelná v bodě a).

Přirozenou aproximací hodnoty $f'(a)$ je výraz

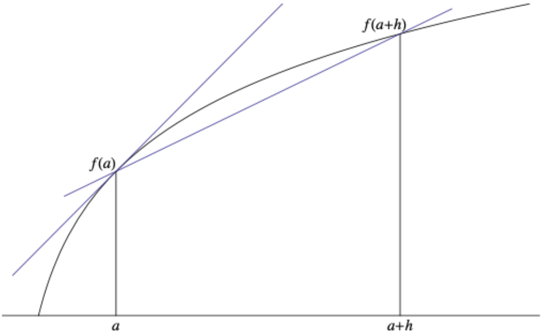
$$f'(a) \approx \frac{f(a+h) - f(a)}{h}.$$

kde h je (malé) kladné číslo.
Tato hodnota se nazývá **Newtonův diferenční kvocient** (*Newton's (difference) quotient*) nebo **první diference vpřed**. #Z883

Přímka (chápána jako funkce x) p_1 interpolující f v a a $a+h$ je dána rovnicí

$$p_1(x) = f(a) + \frac{f(a+h) - f(a)}{h}(x-a).$$

Derivace funkce $p_1(x)$ je právě diferenční kvocient funkce f v a.
Jinými slovy, směrnice přímky p_1 je přibližnou hodnotou tečny funkce f v bodě a.



Alternativní možností je použít **první diference vzad**:

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

Tato aproximace se chová podobně, a její analýza je zcela analogická dopředné verzi, kterou budeme uvažovat.

Mějme $f(x) = \sin(x)$ v $a = 0.5$ a použijme dvojitou přesnost.

Víme, že derivace splňuje $f'(x) = \cos(x)$, tedy $f'(a) \approx 0.8775825619$ s 10 správnými ciframi.

h	$\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$	$f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$
10^{-1}	0.8521693479	$2.5 \cdot 10^{-2}$
10^{-2}	0.8751708279	$2.4 \cdot 10^{-3}$
10^{-3}	0.8773427029	$2.4 \cdot 10^{-4}$
10^{-4}	0.8775585892	$2.4 \cdot 10^{-5}$
10^{-5}	0.8775801647	$2.4 \cdot 10^{-6}$
10^{-6}	0.8775823222	$2.4 \cdot 10^{-7}$

Aproximace se zlepšuje se změnšujícím se h – očekávané chování!

K analýze chyb v numerické derivaci použijeme Taylorův polynom se zbytkem.

K analýze chyb v numerické derivaci použijeme Taylorův polynom se zbytkem.

$$f(a+h) = f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2} f''(\xi_h).$$

kde $\xi_h \in (a, a+h)$.

K analýze chyb v numerické derivaci použijeme Taylorův polynom se zbytkem.

$$f(a+h) = f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2} f''(\xi_h).$$

kde $\xi_h \in (a, a+h)$. Tedy

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

Toto je chyba zanedbáním této aproximace.

Mějme znovu $f(x) = \sin(x)$ v bodě $a = 0.5$. Platí $f''(x) = -\sin(x)$, takže chyba zanedbáním je

$$f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = \frac{h}{2}\sin(\xi_h) \qquad \text{kde } \xi_h \in (0.5, 0.5 + h).$$

Mějme znovu $f(x) = \sin(x)$ v bodě $a = 0.5$. Platí $f''(x) = -\sin(x)$, takže chyba zanedbáním je

$$f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = \frac{h}{2}\sin(\xi_h) \qquad \text{kde } \xi_h \in (0.5, 0.5 + h).$$

Pro $h = 0.1$ je tedy chyba zanedbáním v intervalu

$$[0.05\ \sin(0.5),\ 0.05\ \sin(0.6)] \approx [2.397 \cdot 10^{-2},\ 2.823 \cdot 10^{-2}].$$

Mějme znovu $f(x) = \sin(x)$ v bodě $a = 0.5$. Platí $f''(x) = -\sin(x)$, takže chyba zanedbáním je

$$f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = \frac{h}{2}\sin(\xi_h) \qquad \text{kde } \xi_h \in (0.5, 0.5+h).$$

Pro $h = 0.1$ je tedy chyba zanedbáním v intervalu

$$[0.05\,\sin(0.5),\ 0.05\,\sin(0.6)] \approx [2.397 \cdot 10^{-2},\ 2.823 \cdot 10^{-2}].$$

S menším h se bude číslo ξ_h blížit 0.5 a $\sin(\xi_h)$ se bude blížit $\sin(0.5) \approx 0.479426$. Tedy, pro $h = 10^{-n}$, bude chyba směřovat k

$$\frac{10^{-n}}{2}\sin(0.5) \approx 0.2397 \cdot 10^{-n}.$$

Pokud je $f''(x)$ spojitá, pak se obecně ξ_h bude blížit a pokud h půjde k nule. Můžeme tedy aproximovat $f''(\xi_h) \approx f''(a)$.

Chyba zanedbáním při použití první diference vpřed k aproximaci $f'(a)$ je přibližně dána

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| \approx \frac{h}{2} \left| f''(a) \right|.$$

Skutečná hodnota chyby zanednáním je dána

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| = \frac{h}{2} \left| f''(\xi_h) \right| \qquad \text{kde } \xi_h \in (a, a+h).$$

Skutečná hodnota chyby zanedňáním je dána

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| = \frac{h}{2} \left| f''(\xi_h) \right| \qquad \text{kde } \xi_h \in (a, a+h).$$

Věta 10.1

Nechť f má spojité druhé derivace na okolí bodu a.
Chyba zanedbání je omezena

$$\left| f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} \right| \leq \frac{h}{2} \max_{x \in [a, a+h]} \left| f''(x) \right| .$$

Všimněte si, že je třeba zahrnout i hranici intervalu $[a, a+h]$.

Počítáme-li aproximace pomocí malých hodnot h musíme provádět kritickou operaci $f(a+h) - f(a)$, tedy odčítání dvou téměř stejných čísel, což může být zdrojem nežádoucích chyb (krácení).

Počítáme-li aproximace pomocí malých hodnot h musíme provádět kritickou operaci $f(a+h)-f(a)$, tedy odčítání dvou téměř stejných čísel, což může být zdrojem nežádoucích chyb (krácení).

Mějme znovu $f(x)=\sin(x)$ v bodě $a=0.5$ a $f'(0.5)\approx 0.8775825619$ s 10 správnými ciframi. Prověřme hodnoty h menší než 10^{-6}:

h	$\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$	$f'(a)-\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$
10^{-7}	0.85775825372	$2.5\cdot 10^{-8}$
10^{-8}	0.8775825622	$-2.9\cdot 10^{-10}$
10^{-9}	0.8775825622	$-2.9\cdot 10^{-10}$
10^{-11}	0.8775813409	$1.2\cdot 10^{-6}$
10^{-14}	0.8770761895	$5.1\cdot 10^{-4}$
10^{-15}	0.8881784197	$-1.1\cdot 10^{-2}$
10^{-16}	1.110223025	$-2.3\cdot 10^{-1}$
10^{-17}	0.0000000000	$8.8\cdot 10^{-1}$

Označme ϵ^* maximální relativní chybu, která je napáchána při výpočtu funkce f (může též záviset na bodě, ve kterém hodnotu počítáme) za předpokladu, že nedojde k přetečení ani podtečení:

$$\widehat{f}(a) = \mathrm{fl}(f(a)) = f(a)(1+\epsilon_1) \quad \text{a} \quad \widehat{f}(a+h) = \mathrm{fl}(f(a+h)) = f(a+h)(1+\epsilon_2).$$

kde $|\epsilon_i| \leq \epsilon^*$ pro $i = 1, 2$.

Hlavním zdrojem chyb v diferenčím kvocientu je odečítání v čitateli. Dovolíme si proto zanedbad dělení, a vypočítanou aproximaci budeme brát dle vzorce

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

Hlavním zdrojem chyb v diferenčím kvocientu je odečítání v čitateli. Dovolíme si proto zanedbad dělení, a vypočítanou aproximaci budeme brát dle vzorce

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

Tedy

$$\begin{aligned} f'(a)-\frac{\widehat{f}(a+h)-\widehat{f}(a)}{h} &= f'(a)-\frac{f(a+h)-f(a)}{h}-\frac{f(a+h)\epsilon_2-f(a)\epsilon_1}{h} \\ &= -\frac{h}{2}f''(\xi_h)-\frac{f(a+h)\epsilon_2-f(a)\epsilon_1}{h}. \end{aligned}$$

kde $\xi_h \in (a, a+h)$.

Hlavním zdrojem chyb v diferenčím kvocientu je odečítání v čitateli. Dovolíme si proto zanedbad dělení, a vypočítanou aproximaci budeme brát dle vzorce

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

Tedy

$$\begin{aligned} f'(a)-\frac{\widehat{f}(a+h)-\widehat{f}(a)}{h} &= f'(a)-\frac{f(a+h)-f(a)}{h}-\frac{f(a+h)\epsilon_2-f(a)\epsilon_1}{h} \\ &= -\frac{h}{2}f''(\xi_h)-\frac{f(a+h)\epsilon_2-f(a)\epsilon_1}{h}. \end{aligned}$$

kde $\xi_h \in (a, a+h)$.

Chyba zanedbání je úměrná h, kdežto zaokrouhlovací chyba je úměrná $1/h$.

Je-li h malé, platí $f(a+h) \approx f(a)$. Tedy

$$f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a)}{h} \approx -\frac{h}{2} f''(a) - \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{h} f(a).$$

Je-li h malé, platí $f(a+h) \approx f(a)$. Tedy

$$f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a)}{h} \approx -\frac{h}{2} f''(a) - \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{h} f(a).$$

Člen $\epsilon_2 - \epsilon_1$ je zdrojem nejvíce nejistoty, protože neznáme znaménka obou hodnot. Pokud jsou znaménka opačná, musíme odhadout $\epsilon_2 - \epsilon_1$ hodnotou $2\tilde{\epsilon}$, kde $|\tilde{\epsilon}(h)| < \epsilon^*$. (Je vyzdvihnuta závislost na h, jelikož bereme h jako parametr. Obecně $\tilde{\epsilon}$ závisí i na a.)

$$f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a)}{h} \approx -\frac{h}{2} f''(a) - \frac{2\tilde{\epsilon}(h)}{h} f(a).$$

Je-li h malé, platí $f(a+h) \approx f(a)$. Tedy

$$f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a)}{h} \approx -\frac{h}{2} f''(a) - \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{h} f(a).$$

Člen $\epsilon_2 - \epsilon_1$ je zdrojem nejvíce nejistoty, protože neznáme znaménka obou hodnot. Pokud jsou znaménka opačná, musíme odhadout $\epsilon_2 - \epsilon_1$ hodnotou $2\tilde{\epsilon}$, kde $|\tilde{\epsilon}(h)| < \epsilon^*$. (Je vyzdvihnuta závislost na h, jelikož bereme h jako parametr. Obecně $\tilde{\epsilon}$ závisí i na a.)

$$f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a)}{h} \approx -\frac{h}{2} f''(a) - \frac{2\tilde{\epsilon}(h)}{h} f(a).$$

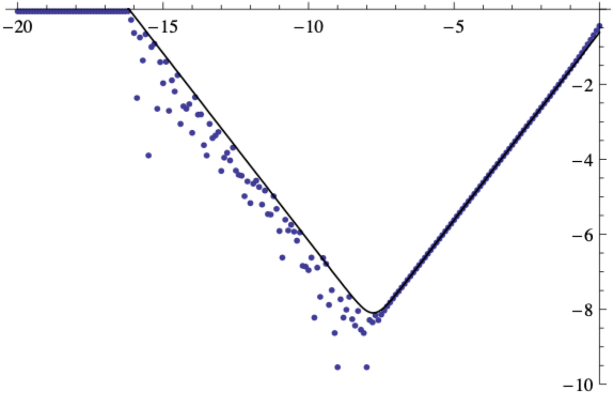
Tedy

$$\tilde{\epsilon}(h) \approx -\frac{h}{2f(a)} \left(f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a)}{h} + \frac{h}{2} f''(a). \right)$$

Mějme opět $f(x) = \sin(x)$ v bodě $a = 0.5$ a správnou hodnotu s 10 ciframi $f'(0.5) \approx 0.8775825619$.

h	$\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$	$f'(a) - \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$	$\tilde{\epsilon}$
10^{-7}	0.85775825372	$2.5 \cdot 10^{-8}$	-7.6×10^{-17}
10^{-8}	0.8775825622	$-2.9 \cdot 10^{-10}$	2.8×10^{-17}
10^{-9}	0.8775825622	$-2.9 \cdot 10^{-10} \downarrow$	$5.5 \times 10^{-19} \downarrow$
10^{-11}	0.8775813409	$1.2 \cdot 10^{-6} \uparrow$	$-1.3 \times 10^{-17} \uparrow$
10^{-14}	0.8770761895	$5.1 \cdot 10^{-4}$	5.3×10^{-18}
10^{-15}	0.8881784197	$-1.1 \cdot 10^{-2}$	1.1×10^{-17}
10^{-16}	1.110223025	$-2.3 \cdot 10^{-1}$	2.4×10^{-17}
10^{-17}	0.0000000000	$-9.2 \cdot 10^{-1}$	-9.2×10^{-18}

Vykresleme absolutní hodnotu celkové chyby numerické aproximace derivace funkce $f(x) = \sin(x)$ v bodě $x = 0.5$ v závislosti na h. Graf je typu $\log_{10} - \log_{10}$.



Celková chyba je dána:

$$\begin{aligned}
\left| f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a)}{h} \right| &\approx \left| -\frac{h}{2} f''(a) - \frac{\epsilon_2 - \epsilon_1}{h} f(a) \right| \\
&\leq \frac{h}{2} \left| f''(a) \right| + \frac{|\epsilon_2 - \epsilon_1|}{h} \left| f(a) \right| \\
&\leq \frac{h}{2} \left| f''(a) \right| + \frac{|\epsilon_2| + |\epsilon_1|}{h} \left| f(a) \right| \\
&\leq \frac{h}{2} |f''(a)| + \frac{2 \max\{|\epsilon_1|, |\epsilon_2|\}}{h} |f(a)|
\end{aligned}$$

Celková chyba je dána:

$$\begin{aligned}\left|f'(a)-\frac{\widehat{f}(a+h)-\widehat{f}(a)}{h}\right| &\approx \left|-\frac{h}{2}f''(a)-\frac{\epsilon_2-\epsilon_1}{h}f(a)\right| \\ &\leq \frac{h}{2}\left|f''(a)\right|+\frac{\left|\epsilon_2-\epsilon_1\right|}{h}\left|f(a)\right| \\ &\leq \frac{h}{2}\left|f''(a)\right|+\frac{\left|\epsilon_2\right|+\left|\epsilon_1\right|}{h}\left|f(a)\right| \\ &\leq \frac{h}{2}|f''(a)|+\frac{2\max\{|\epsilon_1|,|\epsilon_2|\}}{h}|f(a)|\end{aligned}$$

Celková chyba při použití první diference vpřed je k výpočtu přibližné hodnoty $f'(a)$ je zhruba omezena

$$\left|f'(a)-\frac{\widehat{f}(a+h)-\widehat{f}(a)}{h}\right| \lesssim \frac{h}{2}|f''(a)|+\frac{2\max\{|\epsilon_1|,|\epsilon_2|\}}{h}|f(a)|.$$

Věta 10.2

Nechť f *má spojité druhé derivace na okolí* a.
Pro celkovou chybu při použití první diference vpřed je k výpočtu přibližné hodnoty $f'(a)$ *platí:*

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

kde $M_1 = \max_{a \in [a,a+h]} |f''(x)|$ a $M_2 = \max_{x \in [a,a+h]} |f(x)|$.

Nastavme h tak, aby byla minimalizována celková chyba.
Je jednodušší použít hrubý odhad, protože M_1 a M_2 závisejí na h. Odhadneme-li (opět) ϵ_h číslem ϵ^*, dostaneme odhad

$$E(a,h) = \frac{h}{2}|f''(a)| \; + \; \frac{2\epsilon^*}{h}|f(a)|.$$

Nastavme h tak, aby byla minimalizována celková chyba.
Je jednodušší použít hrubý odhad, protože M_1 a M_2 závisejí na h. Odhadneme-li (opět) ϵ_h číslem ϵ^*, dostaneme odhad

$$E(a,h) = \frac{h}{2}|f''(a)| + \frac{2\epsilon^*}{h}|f(a)|.$$

Najdeme extrém tohoto odhadu:

$$E(a,h)' = \frac{|f''(a)|}{2} - \frac{2\epsilon^*}{h^2}|f(a)|.$$

Nastavme h tak, aby byla minimalizována celková chyba.
Je jednodušší použít hrubý odhad, protože M_1 a M_2 závisejí na h. Odhadneme-li (opět) ϵ_h číslem ϵ^*, dostaneme odhad

$$E(a,h) = \frac{h}{2}|f''(a)| + \frac{2\epsilon^*}{h}|f(a)|.$$

Najdeme extrém tohoto odhadu:

$$E(a,h)' = \frac{|f''(a)|}{2} - \frac{2\epsilon^*}{h^2}|f(a)|.$$

a řešíme $E(a,h)' = 0$.

Věta 10.3

Nechť f má spojité druhé derivace na okolí bodu a. Hodnota h minimalizující horní odhad na celkovou chybu je přibližně

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

Použití vzorce $\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$ pro aproximaci derivace není jedinou možností, jiné částé volby jsou:

1. $\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$ (symetrická verze nebo první centrální diference);
2. $\frac{f(a-2h)-8f(a-h)+8f(a+h)-f(a+2h)}{12h}$ (4-bodová verze).

Použití vzorce $\frac{f(a+h)-f(a)}{h}$ pro aproximaci derivace není jedinou možností, jiné částé volby jsou:

1. $\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$ (symetrická verze nebo první centrální diference);
2. $\frac{f(a-2h)-8f(a-h)+8f(a+h)-f(a+2h)}{12h}$ (4-bodová verze).

Další vylepšení jsou možná pomocí interpolací jinými funkcemi.

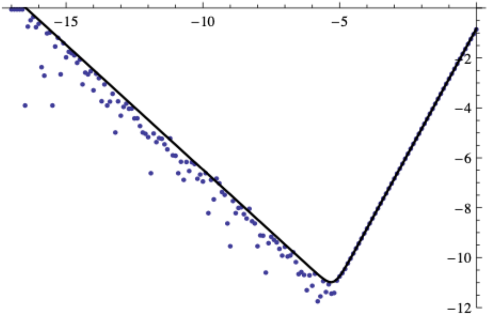
Aproximujeme $f'(a)$ pomocí hodnot $f(a-h)$ a $f(a+h)$.

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

Aproximujeme $f'(a)$ pomocí hodnot $f(a-h)$ a $f(a+h)$.

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

Odhad chyby: $\left| f'(a) - \frac{\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a-h)}{2h} \right| \lesssim \frac{h^2}{6} |f'''(a)| + \frac{\epsilon^* |f(a)|}{h}.$



(Význam os je stejný jako u grafu pro první diferenci.)

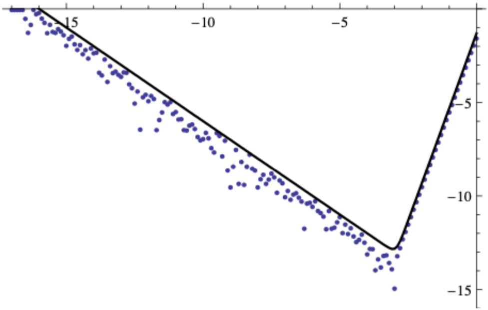
Aproximujeme pomocí hodnot $f(a-2h)$, $f(a-h)$, $f(a+h)$ and $f(a+2h)$.

$$f'(a) \approx \frac{f(a-2h) - 8f(a-h) + 8f(a+h) - f(a+2h)}{12h}.$$

Aproximujeme pomocí hodnot $f(a-2h)$, $f(a-h)$, $f(a+h)$ and $f(a+2h)$.

$$f'(a) \approx \frac{f(a-2h) - 8f(a-h) + 8f(a+h) - f(a+2h)}{12h}.$$

Odhad chyby: $\left| f'(a) - \frac{\widehat{f}(a-2h) - 8\widehat{f}(a-h)) + 8\widehat{f}(a+h) - \widehat{f}(a+2h)}{12h} \right| \lesssim \frac{h^4}{18} |f^{(5)}(a)| + \frac{3\epsilon^*}{h} |f(a)|.$



(Význam os je stejný jako u grafu pro první diferenci.)