7 Numerisk derivasjon

Hva om du ønsker å finne stigningen til en funksjon som er tabulert? Vi skal gå gjennom en sentral teknikk for numerisk derivasjon som kalles *endelige differanser*. Det er to grunner til dette: for det første trenger vi det for å lage numeriske skjema for differensiallikninger, og for det andre gir det en fryktelig transparent illustrasjon av dette med feil.

Sekanter og tangenter

I M1 definerte vi den deriverte til en funksjon f som

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

Uttrykket

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

er stigningstallet til sekanten til f mellom punktene x og $x+h$. For små h er denne sekanten en grei tilnærming til stigningstallet $f(x)$:

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

På papiret er det slik at jo mindre h, desto bedre tilnærming.

Eksempel 7.1. La $f(x) = e^x$, og la $h = 0.1$. Vi beregner

$$f'(1.5) \approx \frac{e^{1.6}-e^{1.5}}{0.1} = 4.7134.$$

Merk at

$$f'(1.5) = e^{1.5} = 4.4817,$$

så denne tilnærmingen bommer med rundt $2 \cdot 10^{-1}$. Vi kan også prøve $h = 0.01$. Da får vi

$$f'(1.5) \approx \frac{e^{1.51}-e^{1.5}}{0.01} = 4.5042.$$

som er noe bedre, nå er feilen på rundt $2 \cdot 10^{-2}$. Vi knekker til med enda en:

$$f'(1.5) \approx \frac{e^{1.501}-e^{1.5}}{0.001} = 4.4839,$$

og får en feil på rundt $2 \cdot 10^{-3}$. △

Merk. Feilen i forrige eksempel er tydelig proporsjonal med h - deler du h på 10, deler du feilen på 10. En god illustrasjon av lineær feil.

Taylorutvikling

I M1 lærte du også taylorutvikling. Anta f er analytisk funksjon. Det går an å utlede formelen

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

ved å bruke taylorutviklingen til f i punktet x:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \cdots.$$

Stigningen til sekanten kan skrives

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + \frac{f''(x)}{2}h + \cdots$$

og vi ser at dette stigninstallet består av den eksakte verdien for $f'(x)$ pluss resten av taylorrekken til f

$$\frac{f''(x)}{2}h + \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \cdots$$

Denne halen forteller oss noe om feilen. Dersom h er liten nok, vil h være mye større enn h^2, og vi skriver

$$\frac{f''(x)}{2}h + \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \cdots = O(h)$$

for å signalisere at feilen er proporsjonal med h.

Høyere ordens tilnærminger

Vi kan relativt lett forbedre den lineære tilnærmingen fra forrige avsnitt ved å skrive

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \cdots$$

og sette opp tilnærmingen

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{f'''(x)}{3!}h^2 + \frac{f^5(x)}{5!}h^4 + \cdots$$

Feilen i denne tilnærmingen er

$$\frac{f'''(x)}{3!}h^2 + \frac{f^5(x)}{5!}h^4 + \cdots$$

Hvis h er liten, er det rimelig å anta denne feilen er mye mindre enn for den første tilnærmingen, siden $h^2 << h$.

Eksempel 7.2. La $f(x) = e^x$, og la $h = 0.1$. Vi beregner

$$f'(1.5) \approx \frac{e^{1.6}-e^{1.4}}{0.2} = 4.489162287752202,$$

som gir en feil på rundt $7.5 \cdot 10^{-3}$. Mye bedre enn i sted. Vi kan prøver også $h = 0.01$:

$$f'(1.5) \approx \frac{e^{1.51}-e^{1.49}}{0.02} = 4.481763765529401$$

som er noe bedre, nå er feilen på rundt $7.5 \cdot 10^{-5}$. Knekker vi til med $h = 0.001$, får vi

$$f'(1.5) \approx \frac{e^{1.501}-e^{1.499}}{0.002} = 4.481689817286139$$

som gir en feil på $7.5 \cdot 10^{-7}$. △

Merk. Legg merke til hvordan feilen i forrige eksempel er nærmest perfekt kvadratisk - vi får to nye desimaler hver gang vi deler h på 10. Feilen deles altså på 100 når h deles på 10.

Hvis du virkelig vil slå på stortrommen, kan du bruke formelen

$$f'(x) = \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h}$$

Eksempel 7.3. Vi bruker den store formelen med $h = 0.1$, $h = 0.01$ og $h = 0.001$. Då får vi feil på 10^{-5}, 10^{-9}, og 10^{-13}. Fire nye desimaler hver gang h deles på 10. Prøv selv. △

Høyere ordens deriverte

Dersom du trenger en tilnærming for $f''(x)$, kan du bruke den andre ordens sentraldifferansen

$$\frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} = f''(x) + O(h^2)$$

Nå bør det etterhvert være klart hvordan en slik derivasjonsformel konstrueres - man søker en lineærkombinasjon av funksjonsverdier $f(x), \quad f(x-h)$ og $f(x+h)$ og lignende ledd, for å oppnå to ting:

- Korrekt tilnærming av den n-te deriverte.
- Så høy orden som mulig.

Richardsonekstrapolasjon

Det går an å kombinere tilnærminger av forskjellig orden til å oppnå høyere ordens tilnærminger. Vi definerer

$$\phi(h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Da har vi at

$$\phi(h) = f'(x) + h^2 \frac{f'''(x)}{6} + h^4 \frac{f^5(x)}{120} + \cdots$$

og

$$\phi\left(\frac{h}{2}\right) = f'(x) + \left(\frac{h}{2}\right)^2 \frac{f'''(x)}{6} + \left(\frac{h}{2}\right)^4 \frac{f^5(x)}{120} + \cdots$$

Her er trikset.

$$\frac{4\phi\left(\frac{h}{2}\right) - \phi(h)}{3} = f'(x) - \left(\frac{h}{2}\right)^4 \frac{f^5(x)}{480} + \cdots$$

Med andre ord: den rette lineærkombinasjonen av to estimater med forskjellige gitterfinheter kan få et (eller flere) ledd i feilutviklingen til å forsvinne, og da får vi en høyere ordens tilnærming.

Eksempel 7.4. Hvis vi setter $h = 0.1$, og tar to tidligere approksimasjoner,

$$\phi(0.1) = \frac{e^{1.6} - e^{1.4}}{0.2} = 4.489162287752202,$$

med en feil på rundt $7.5 \cdot 10^{-3}$, og

$$\phi(0.01) = \frac{e^{1.51} - e^{1.49}}{0.02} = 4.481763765529401$$

med en feil på rundt $7.5 \cdot 10^{-5}$, og og kombinerer dem, får vi

$$\frac{100\phi\left(\frac{h}{10}\right) - \phi(h)}{99} = 4.481689032981695$$

som gir en feil på $-3.73 \cdot 10^{-8} \approx \left(\frac{h}{10}\right)^4$. △

Det går an å formulere presise teoremer som forteller hvordan man skal lineærkombinere tilnærminger til høyere ordens tilnærminger, men vi nøyer oss med denne lille smakebiten.