2 Numerieke differentiatie

2.1 Eenvoudige formules. Effect van afrondfouten

2.1A Vanwege de definitie $f'(x_0) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$ zou men $f'(x_0)$ kunnen benaderen met het eindige quotiënt, een zogenaamde *differentie quotiënt*. Als we schrijven

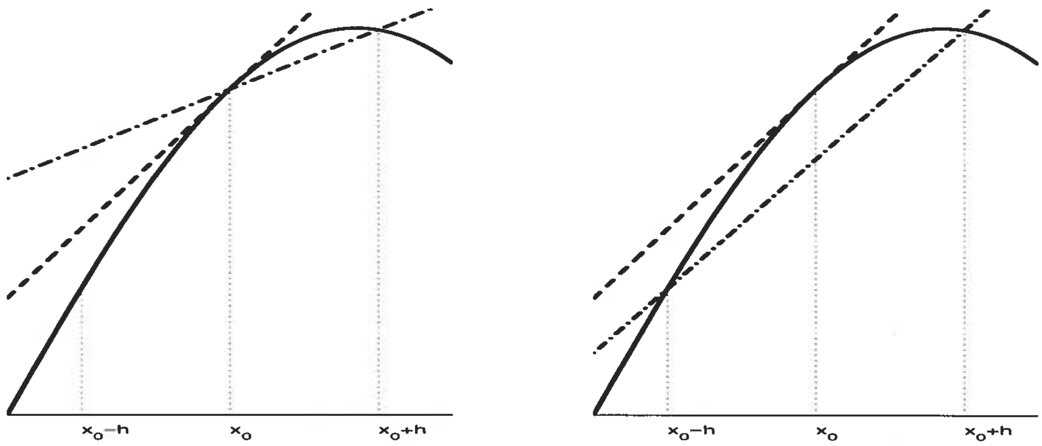
$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + R_1(h), \tag{17}$$

dan is $R_1(h)$ de fout bij de *stapgrootte* h.

Aannemend dat $f \in C^2[x_0, x_0+h]$, vinden we door $f(x_0+h)$ in een Taylor reeks te ontwikkelen een uitdrukking voor $R_1(h)$:

$$R_1(h) = -\frac{h}{2} f''(\xi), \quad \text{met } \xi \text{ tussen } x_0 \text{ en } x_0 + h. \tag{18}$$

Voor h klein zal $f''(\xi)$ niet veel verschillen van $f''(x_0)$, en we zien dat, indien $f''(x_0) \neq 0$, asymptotisch de fout linear met h afneemt .



FIGUUR 6: *De richting van de raaklijn (— — —) aan de grafiek (—) van de functie f is de afgeleide $f'(x)$ die we willen benaderen. De richting van de koorde (– · –·) in het rechter figuur doet dat veel beter dan die in het linker figuur.*

2.1B Uit het linker plaatje in figuur 6 zien we dat het quotiënt in (17) niet zo'n goede keuze is. Veel betere resultaten kunnen we verwachten van de in het rechter plaatje gesuggereerde benadering. We schrijven

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} + R_2(h). \tag{19}$$

Als de derde afgeleide van f bestaat en continu is vinden we door $f(x_0+h)$ en $f(x_0-h)$ volgens Taylor te ontwikkelen in x_0 de restterm

$$R_2(h) = -\frac{h^2}{6} f'''(\xi), \quad x_0 - h < \xi < x_0 + h. \tag{20}$$

De fout gaat nu inderdaad veel sneller naar nul voor $h \to 0$, nl. indien $f'''(x_0) \neq 0$, asymptotisch met het kwadraat van de stapgrootte h.

2.1C Laten we voor verschillende stapgrootten h, rekenend met zes cijfers, eens de afgeleiden van de exponentiële functie e^x in $x_0 = 1$ bepalen met behulp van (19).

x	e^x
0.8000	2.22554
0.9000	2.45960
0.9900	2.69123
0.9990	2.71556
0.9999	2.71801
1.0000	2.71828
1.0001	2.71855
1.0010	2.72100
1.0100	2.74560
1.1000	3.00417
1.2000	3.32012

h	benadering	fout
0.2000	2.73644	0.01816
0.1000	2.72285	0.00457
0.0100	2.71850	0.00022
0.0010	2.72000	0.00172
0.0001	2.70000	0.01828

We zien dat voor dalende h de benadering aanvankelijk beter wordt, maar daarna verslechtert. De reden voor dit verschijnsel is niet moeilijk aan te geven. Voor bijv. $h = 0.0010$ hebben we de volgende situatie:

$$\begin{array}{rcl} f(x_0 + h) & = & 2.72100 \\ f(x_0 - h) & = & \underline{2.71556} \\ & & 0.00544 \end{array}$$

Bij het aftrekken vallen de eerste drie cijfers tegen elkaar weg, en we houden er slechts drie over. Dit heeft de volgende consequenties:

De oorspronkelijke waarden van f zijn belast met afrondfouten. De absolute grootte van deze fouten is hoogstens 5.10^{-6}, en de relatieve fouten zijn dus hoogstens $5.10^{-6}/2.7 \approx 2.10^{-6}$.

De absolute afrondfout in het verschil kan dus oplopen tot 10.10^{-6} (namelijk bij tegengestelde tekens van de afrondfouten), hetgeen een relatieve fout in het verschil veroorzaakt van

$$10.10^{-6}/0.0054 \approx 2.10^{-3},$$

dat is dus 1000 maal zo groot als de maximale relatieve fout in de f-waarden. Dit effect wordt natuurlijk sterker naarmate h kleiner wordt.

We zijn hier aangelopen tegen bekend probleem in de numerieke wiskunde: Het aftrekken van twee bijna even grote getallen.

Voor de benaderingsformule (19) betekent dit dat de te bereiken nauwkeurigheid gelimiteerd is. Enerzijds wil je h zo klein mogelijk hebben om de rest klein te maken; anderzijds mag h niet klein zijn om bovengenoemde reden. Er zal dus een optimale waarde van h zijn waarbij de uitkomst zo nauwkeurig mogelijk is. Aangezien de afrondfout onbekend is kunnen we deze waarde niet bepalen. Wel kan men een majorant, d.w.z. bovengrens, van de fout minimaliseren, en wel als volgt.

Laat de waarden van f belast zijn met afrondfouten hoogstens ϵ. Dit levert dan een bijdrage van hoogstens $S_2(h) = 2\epsilon/2h$ tot de absolute fout in de numerieke benadering voor $f'(x_0)$. De tweede bijdrage is de restterm $R_2(h)$ als in (20). De totale fout wordt dus gemajoreerd door de grootheid $\varphi(h)$ die gegeven wordt door

$$\varphi(h) = \frac{\epsilon}{h} + \frac{h^2}{6}m \tag{21}$$

waarin m een majorant is voor $|f'''(x)|$ op een voldoend grote maar ook weer niet al te grote omgeving $[x_0 - h_0,\ x_0 + h_0]$ van x_0. Deze functie heeft een minimum $\sqrt[3]{\frac{9}{8}\epsilon^2 m}$ voor $h = \sqrt[3]{3\epsilon/m}$. Wanneer voor deze h geldt $h \leq h_0$ dan beschouwt men hem als de optimale.

In het voorbeeld met e^x vinden we zo met $x_0 = 1$, $\epsilon = 5.10^{-6}$, $h_0 = 0.2$, $m = 3.32$ dat $h = 0.0165$ en $\phi(h) = 0.00045$.

2.1D De *tweede afgeleide* kunnen we benaderen door met (19) eerst $f'(x_0 + \frac{1}{2}h)$ en $f'(x_0 - \frac{1}{2}h)$ te benaderen, en hiermede vervolgens de benadering

$$\frac{f'(x_0 + \frac{1}{2}h) - f'(x_0 - \frac{1}{2}h)}{h} \tag{22}$$

voor $f''(x_0)$ te construeren. Met enig rekenen en Taylor vinden we

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + R_3(h), \quad R_3(h) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi). \tag{23}$$

2.1E De effecten van afrondfouten zijn nu nog ernstiger. Analoog aan 2.1C vinden we nu $S_3(h) = \frac{4\epsilon}{h^2}$ als bovengrens voor het effect van de afrondfouten in de f-waarde op de numerieke benadering voor $f''(x_0)$ en dat loopt snel op bij dalende h.

Formule (23) levert met $h = 0.01$ en de tabel van 2.1C voor $f''(1)$ een waarde 2.70 en voor $h = 0.1$ een waarde 2.72.

Men kan een analogon van (21) opstellen, en vindt dan een optimale foutschatting 0.0042 voor $h \approx 0.1$.

2.1F Formules (19) en (23) zijn equidistante formules. Een generalisatie van (23) wordt gegeven door

$$f''(x_0) = \frac{h_1 f(x_0 + h_2) - (h_1 + h_2) f(x_0) + h_2 f(x_0 - h_1)}{h_1 h_2 (h_1 + h_2)/2} + R_4(h_1, h_2) \tag{24}$$

waarin

$$R_4(h_1, h_2) = -\frac{h_2^2 f'''(\xi_2) - h_1^2 f'''(\xi_1)}{3(h_1 + h_2)}, \quad \xi_2 \in (x_0, x_0 + h_2) \text{ en } \xi_1 \in (x_0 - h_1, x_0). \tag{25}$$

Merk op dat i.h.a. slechts $R_4(h_1, h_2) = \mathcal{O}(\max\{h_1, h_2\})$.

2.2 Nauwkeuriger formules

De formules in sectie 2.1 zijn enigzins adhoc afgeleid en hebben geen erge hoge nauwkeurigheidsorde.

Een systematischer manier, waarmee ook hogere nauwkeurigheidsorden bereikt kunnen worden (als we afzien van het effect van afrondfouten), is de te differentiëren functie te benaderen met een Lagrange interpolatiepolynoom p_n op steunpunten $\{x_k : 0 \leq k \leq n\}$ en dit polynoom te differentiëren.

M.b.v. de Lagrange representatie uit (6) krijgt men zo

$$f^{(i)}(a) \approx p_n^{(i)}(a) = \sum_{k=0}^{n} L_{kn}^{(i)}(a) f(x_k) \tag{26}$$

waarbij de coëfficiënten $L_{kn}^{(i)}(a)$ dus onafhankelijk zijn van f. Duidelijk is dat de benadering (26) slechts zinnig is voor $i \leq n$. Aangezien (26) exact is voor $f \in P_n$, kunnen we voor vaste $\{x_k : 0 \leq k \leq n\}$, i en a, de factoren $L_{kn}^{(i)}(a)$ behalve door differentiatie van de Lagrange coëfficiënten ook bepalen door een stelsel van $n+1$ vergelijkingen op te lossen dat verkregen wordt door voor $f(x)$ achtereenvolgens $1, x, \ldots x^n$ te nemen. Men kan eenvoudig aantonen dat dit stelsel een unieke oplossing heeft.

Voor equidistante puntenrijen $\{x_k\}$, $i = n$ en met h de afstand tussen opvolgende steunpunten krijgt men de volgende formules:

$$f'(x_0 + \frac{1}{2}h) \approx [f(x_1) - f(x_0)]/h \tag{27}$$

$$f''(x_1) \approx [f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)]/h^2 \tag{28}$$

$$f'''(x_1 + \frac{1}{2}h) \approx [f(x_3) - 3f(x_2) + 3f(x_1) - f(x_0)]/h^3 \tag{29}$$

etc., welke voor voldoend gladde f een restterm $\mathcal{O}(h^2)$ hebben.

Formules met een restterm van hogere orde kan men verkrijgen door de techniek uit deze sectie met $n > i$ toe te passen. Een voorbeeld van een dergelijke formule met $n = 4$ en $i = 1$ is

$$f'(a) \approx \frac{1}{12h}[f(a-2h) - 8f(a-h) + 8f(a+h) - f(a+2h)] \tag{30}$$

met restterm $\mathcal{O}(h^4)$. De coëfficiënt voor $f(a)$ blijkt hier nul te zijn.

2.3 Experimenteel gevonden functiewaarden

Wanneer men een functie f wil differentiëren waarvan men slechts experimenteel gevonden functiewaarden kent dan kunnen de tot dusverre ontwikkelde differentiatieformules wel heel slecht uit de bus komen.

Voorbeeld 2.3.1 Stel dat men van de functie $f(x) = 1+x$ door meting functiewaarden bepaalt voor $x_k = \frac{1}{2} + \frac{k}{20}$ $(k = 0, \ldots 4)$, en dat de resultaten van onderstaande tabel worden verkregen. Men ziet dat de meetfout circa 0.005 bedraagt. Benadert men nu $f'(0.60)$ met behulp van de formule (30) dan vindt men $f'(0.60) \approx 1.10$, hetgeen 10% fout is.

x	$f(x)$
0.50	1.503
0.55	1.548
0.60	1.596
0.65	1.655
0.70	1.697

Een andere aanpak is nu dat we f niet benaderen met een 4-de graads polynoom en dat differentiëren (zoals in (30)), maar dat we een lineaire functie zo goed mogelijk aan de gevonden functiewaarden aanpassen, en dan die lineaire functie differentiëren. Kiezen we $\|g\| = \sqrt{\sum_{k=0}^{4} |g(x_k)|^2}$ als norm op functies gedefiniëerd op de punten x_k, dan levert elementair rekenwerk dat de beste benadering van f door een lineaire functie gegeven wordt door

$$x \mapsto \frac{\alpha_0\beta_1 - \alpha_1\beta_0}{\alpha_0\alpha_2 - \alpha_1^2}x + \frac{\alpha_2\beta_0 - \alpha_1\beta_1}{\alpha_0\alpha_2 - \alpha_1^2}$$

waarbij $\alpha_0 = n+1$, $\alpha_1 = \sum x_k$, $\alpha_2 = \sum x_k^2$, $\beta_0 = \sum f(x_k)$ en $\beta_1 = \sum f(x_k)x_k$. Het minimaliseren van de afstand in bovenstaande norm is bekend als de *kleinste kwadraten* *methode.* Het differentiëren van het verkregen lineair polynoom levert nu de benadering $f'(0.6) \approx \frac{\alpha_0\beta_1-\alpha_1\beta_0}{\alpha_0\alpha_2-\alpha_1^2} = 0.99$ hetgeen een heel wat beter resultaat is dan wat eerder werd verkregen.

Op soortgelijke wijze kan men, als men wat meer punten heeft, f aanpassen aan een polynoom van hogere graad, en dat dan differentiëren.