Αριθμητική προσέγγιση παραγώγων

Δ. Γ. Παπαγεωργίου
Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

dpapageo@uoi.gr
http://pc164.materials.uoi.gr/dpapageo

Αριθμητική προσέγγιση παραγώγων

Γιατί χρειάζεται ;

Οι πλέον αποδοτικές μέθοδοι βελτιστοποίησης χρησιμοποιούν παραγώγους (πρώτες ή/και δεύτερες).

Όμως δεν είναι πάντα εφικτό να τις έχουμε σε αναλυτική μορφή.

Χρησιμοποιώντας τον ορισμό

Ο ορισμός της παραγώγου είναι:

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

Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε τον ορισμό με κάποιο μικρό h (αφού δεν μπορούμε να βάλουμε $h = 0$).

Ποια όμως είναι η σωστή τιμή του h ;

Το σφάλμα στον αριθμητικό υπολογισμό της παραγώγου

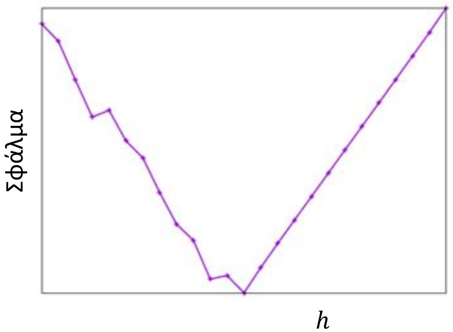
Θεωρείστε τη συνάρτηση

$$f(x) = e^x$$

Η παράγωγός της είναι:

$$f'(x) = e^x$$

h	Σφάλμα
10^{-1}	3.8×10^{-1}
10^{-2}	3.7×10^{-2}
10^{-3}	2.9×10^{-3}
10^{-5}	1.9×10^{-3}
10^{-6}	2.4×10^{-1}
10^{-7}	7.4



Υπάρχει ένα βέλτιστο h που δίνει το μικρότερο δυνατό σφάλμα στον αριθμητικό υπολογισμό της παραγώγου.

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

Σφάλμα αποκοπής

Η σειρά Taylor της συνάρτησης γράφεται:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \cdots + \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(x) + R_n$$

Το υπόλοιπο R_n είναι:

$$R_n = \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$$

με $x < \xi < x + h$

Αν κρατήσουμε μόνο τον όρο πρώτης τάξης:

$$f(x+h) = f(x) + hf'\,(x) + \frac{h^2}{2} f''(\xi) \Rightarrow$$

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

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

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

$$\underbrace{f'_\pi(x)}_{\text{Προσεγγιστική τιμή}} = \underbrace{f'(x)}_{\text{Ακριβής τιμή}} + \underbrace{\sigma_\alpha(h)}_{\text{Σφάλμα αποκοπής}}$$

Παρατηρείστε ότι το σφάλμα αποκοπής είναι ανάλογο του h

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

Σφάλμα στρογγύλευσης

Η ακρίβεια με την οποία αναπαρίσταται κάθε αριθμός στον ΗΥ είναι πεπερασμένη.

Συμβολίζουμε με $fl(a)$ την αναπαράσταση του αριθμού a στον ΗΥ.

Το σχετικό σφάλμα στον υπολογισμό της $f(x)$ είναι ε, δηλαδή

$$\left|\frac{fl\big(f(x)\big)-f(x)}{f(x)}\right| = \varepsilon$$

Για απλές συναρτήσεις το ε είναι όσο η ακρίβεια της μηχανής

$\varepsilon \approx 10^{-7}$ για υπολογισμούς απλής ακρίβειας

$\varepsilon \approx 10^{-15}$ για υπολογισμούς διπλής ακρίβειας

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

Μπορούμε να πάρουμε μια εκτίμηση για το σφάλμα στρογγύλευσης ως εξής:

$$\sigma_\sigma(h) = \left|fl\big(f'_\pi(x)\big) - f'_\pi(x)\right| =$$
$$\varepsilon|f'_\pi(x)| =$$
$$\frac{\varepsilon}{h}|f(x+h)-f(x)| \leq$$
$$\frac{\varepsilon}{h}(|f(x+h)|+|f(x)|) \leq$$
$$\frac{2\varepsilon}{h}\tilde{f}$$

όπου $\tilde{f}$ είναι η απόλυτη μέγιστη τιμή της $f(x)$ στο διάστημα $[x, x+h]$

Παρατηρείστε ότι το σφάλμα στρογγύλυσης είναι αντιστρόφως ανάλογο του h

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

Επιλογή του κατάλληλου h

Το συνολικό σφάλμα είναι:

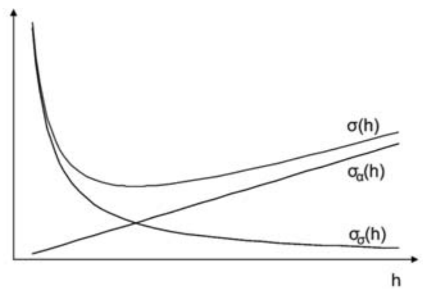
$$\sigma(h) = |\sigma_\alpha(h)+\sigma_\sigma(h)| \leq$$
$$|\sigma_\alpha(h)| + |\sigma_\sigma(h)| =$$
$$\frac{h}{2}|f''(\xi)| + \frac{2\varepsilon}{h}\tilde{f}$$

Για να βρούμε το κατάλληλο h απαιτούμε το συνολικό σφάλμα να είναι ελάχιστο:

$$\min_h \sigma(h)$$

$$\sigma'(h) = \frac{|f''(\xi)|}{2} - \frac{2\varepsilon}{h^2}\tilde{f}$$

$$\sigma'(h) = 0 \;\Rightarrow$$



$$\frac{|f''(\xi)|}{2} - \frac{2\varepsilon}{h^2}\tilde{f} = 0 \;\Rightarrow$$
$$\frac{|f''(\xi)|}{2} = \frac{2\varepsilon}{h^2}\tilde{f} \Rightarrow$$
$$h = \sqrt{\frac{4\tilde{f}}{|f''(\xi)|}\varepsilon}$$

Το σφάλμα είναι ανάλογο του $\sqrt{\varepsilon}$

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

Βρήκαμε ότι:

$$h = \sqrt{\frac{4\tilde{f}}{|f''(\xi)|}\varepsilon}$$

Δεν γνωρίζουμε όμως το $\tilde{f}$ και το $f''(\xi)$.

Προσεγγίζουμε την $f(x)$ με μια σειρά Taylor, δηλαδή ένα πολυώνυμο βαθμού m.

$$f(x) \approx P_m(x) = \sum_{k=0}^{m} a_k x^k$$

Η δεύτερη παράγωγος του $P_m(x)$ είναι ένα άλλο πολυώνυμο βαθμού $m-2$

$$f''(x) \approx P_m''(x) = Q_{m-2}(x)$$

Ο λόγος $f(x)/f''(x)$ προσεγγίζεται ως:

$$\frac{f(x)}{f''(x)} \approx \frac{P_m(x)}{Q_{m-2}(x)} \propto x^2$$

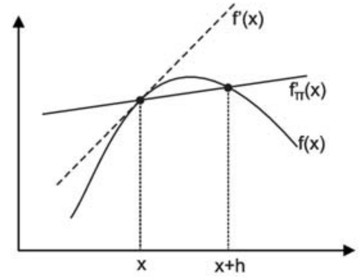
Στην πράξη χρησιμοποιούμε:

$$h = |x|\sqrt{\varepsilon}$$

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

Γεωμετρική ερμηνεία του τύπου εμπρόσθιας διαφοράς

Η ακριβής $f'(x)$ είναι η κλίση της ευθείας που εφάπτεται της $f(x)$ στο σημείο x



Αντίστοιχα, υπάρχει ο τύπος **οπίσθιων διαφορών**:

$$f_\pi'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

Τύπος κεντρικής διαφοράς

Γράφουμε τη σειρά Taylor στα σημεία $x+h$ και $x-h$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(\xi)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(\xi)$$

Αφαιρούμε κατά μέλη:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + 2\frac{h^3}{6}f^{(3)}(\xi) \;\Rightarrow$$

$$\boxed{\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x)} + \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi)$$

Τύπος κεντρικήςδιαφοράς

Τα σφάλματα είναι:

$$\sigma_\alpha(h) = \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\xi)$$

$$\sigma_\sigma(h) = \frac{\varepsilon}{h}\tilde{f}$$

Τύπος κεντρικής διαφοράς

Επιλογή του κατάλληλου h

Το κατάλληλο h προσδιορίζεται από την απαίτηση το συνολικό σφάλμα να είναι ελάχιστο:

$$\min_h \left(\frac{h^2}{6}\left|f^{(3)}(\xi)\right| + \frac{\varepsilon}{h}\tilde{f} \right)$$

Προκύπτει ότι:

$$h = \sqrt[3]{\frac{3\tilde{f}}{|f'''(\xi)|}\varepsilon}$$

Με όμοιο τρόπο όπως στον τύπο εμπρόσθιας διαφοράς βρίσκουμε ότι:

$$h = |x|\sqrt[3]{\varepsilon}$$

Τύποι μεγαλύτερης ακρίβειας

Μπορούμε να κατασκευάσουμε ακριβέστερους τύπους κρατώντας περισσότερους όρους στο ανάπτυγμα Taylor.

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x)$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2}f''(x) - \frac{(2h)^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{(2h)^4}{24}f^{(4)}(x)$$

$$f(x-2h) = f(x) - 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2}f''(x) - \frac{(2h)^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{(2h)^4}{24}f^{(4)}(x)$$

Σύστημα 4 εξισώσεων με 4 αγνώστους: $f'(x)$, $f''(x)$, $f^{(3)}(x)$, $f^{(4)}(x)$

Λύνοντας παίρνουμε

$$f'_\pi(x) = \frac{1}{3}\left(4\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} - \frac{f(x+2h)-f(x-2h)}{4h}\right)$$

Το βέλτιστο βήμα παραγώγισης είναι: $h = |x|\sqrt[5]{\varepsilon}$

Δεύτερες παράγωγοι

Γράφουμε τη σειρά Taylor στα σημεία $x+h$ και $x-h$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x)$$

Προσθέτοντας κατά μέλη:
$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x)$

Από όπου προκύπτει:

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

Το βέλτιστο βήμα παραγώγισης είναι: $h = |x|\sqrt[4]{\varepsilon}$