

# Αριθμητική προσέγγιση παραγώγων

Δ. Γ. Παπαγεωργίου  
Τμήμα Μηχανικών Επιστήμης Υλικών  
Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων

dpapageo@cc.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

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

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

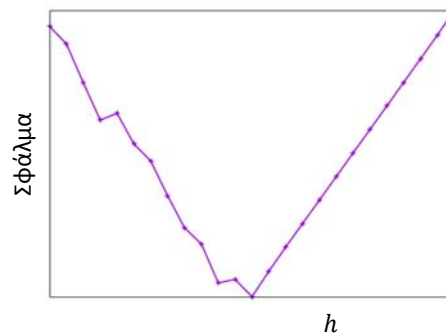
Θεωρήστε τη συνάρτηση

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

Η παράγωγός της είναι:

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

$h$	Σφάλμα
$10^{-1}$	$3.8 \times 10^{-1}$
$10^{-2}$	$3.7 \times 10^{-2}$
$10^{-3}$	$2.9 \times 10^{-3}$
$10^{-5}$	$1.9 \times 10^{-3}$
$10^{-6}$	$2.4 \times 10^{-1}$
$10^{-7}$	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:

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

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

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

Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

$$f'_\pi(x) = f'(x) + \sigma_\alpha(h)$$

$\downarrow$                        $\downarrow$                        $\downarrow$   
 Προσεγγιστική    Ακριβής            Σφάλμα  
 τιμή                    τιμή                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  $\varepsilon$ , δηλαδή

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

Για απλές συναρτήσεις το  $\varepsilon$  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:

$$\sigma_\sigma(h) = |fl(f'_\pi(x)) - f'_\pi(x)| =$$

$$\varepsilon |f'_\pi(x)| =$$

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

$$\frac{\varepsilon}{h} (|f(x+h)| + |f(x)|) \leq$$

$$\frac{2\varepsilon}{h} \tilde{f}$$

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

Παρατηρείστε ότι το σφάλμα στρογγύλευσης είναι αντιστρόφως ανάλογο του  $h$

## Τύπος εμπρόσθιας διαφοράς

### Επιλογή του κατάλληλου $h$

Το συνολικό σφάλμα είναι:

$$\sigma(h) = |\sigma_\alpha(h) + \sigma_\sigma(h)| \leq$$

$$|\sigma_\alpha(h)| + |\sigma_\sigma(h)| =$$

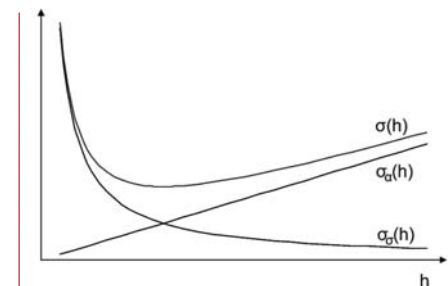
$$\frac{h}{2} |f''(\xi)| + \frac{2\varepsilon}{h} \tilde{f}$$

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:

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

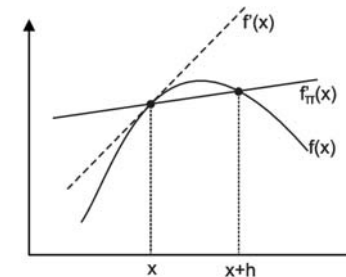
Στην πράξη χρησιμοποιούμε:

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

## 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**:

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

## 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:

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

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

Τύπος κεντρικής διαφοράς

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:

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

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

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

Το βέλτιστο βήμα παραγωγίσης είναι:  $h = |x|^{\frac{5}{3}}\epsilon$

## 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:

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2f''(x)$$

Από όπου προκύπτει:

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

Το βέλτιστο βήμα παραγωγίσης είναι:  $h = |x|^{\frac{4}{3}}\epsilon$