Numeerinen derivointi

ALGORITMIT MATEMATIIKASSA, MAA12

Palautellaan vielä mieleen derivaattaan liittyvät muutoskäsitteet:

Funktion f *keskimääräisen muutosnopeuden* $\frac{\Delta f}{\Delta x}$ arvo tarkasteltavalla välillä $[x_1, x_2] = \Delta x$ saadaan käyrälle $y = f(x)$ pisteiden $(x_1, f(x_1))$ ja $(x_2, f(x_2))$ kautta piirretyn *sekantin* jyrkkyydestä eli sekantin kulmakertoimen arvosta.

Hetkellisen muutosnopeuden $\frac{df}{dx}$ arvo on käyrälle $y = f(x)$ pisteeseen $(x_0, f(x_0))$ asetetun *tangentin* kulmakertoimen arvo.

Derivaatta on erotusosamäärän raja-arvo. Eli sekantit lähestyvät pisteeseen $(x_0, f(x_0))$ asetettua tangenttia. Derivaatan arvo tarkastelukohdassa vastaa tangentin kulmakertoimen arvoa ja erotusosamäärien arvot vastaavat sekanttien kulmakertoimien arvoja. Muista, Δ-merkki kuvaa aina laskettavaa erotusta.

MÄÄRITELMÄ *Jos erotusosamäärän raja-arvo*

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

on olemassa, niin sitä sanotaan funktion f derivaataksi kohdassa x ja merkitään

$$f'(x), \qquad Df(x), \qquad \frac{df}{dx}.$$

Tällöin funktio f on derivoituva kohdassa x.

$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{(x+\Delta x)-x} = \text{jokin luku},$

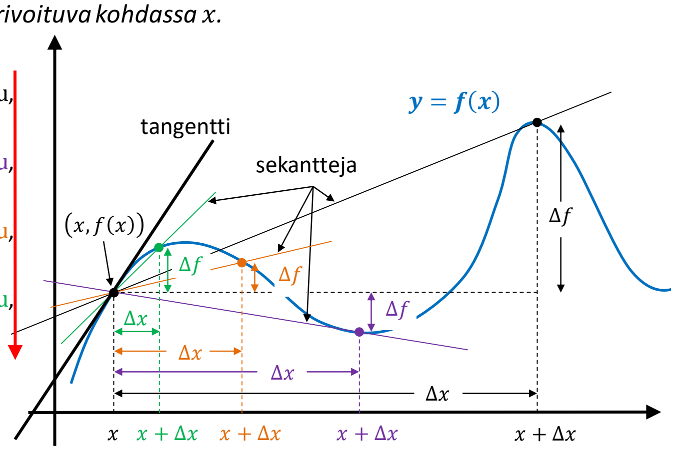
$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{(x+\Delta x)-x} = \text{jokin luku},$

$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{(x+\Delta x)-x} = \text{jokin luku},$

$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{(x+\Delta x)-x} = \text{jokin luku},$

$\vdots$

Se luku, mitä nämä luvut lähestyvät on derivaatan arvo kohdassa x.



Derivointi on derivaatan eli erotusosamäärän raja-arvon (ja toisaalta myös derivaattafunktion) muodostamista/laskemista.
Määritelmän kautta derivointi liian hidasta → on kehitetty derivoimissääntöjä, OK kurssit 6,7,8.

Esimerkki Funktion $f, f(x) = x^x$ $(x \neq 0)$ derivaatta on

$$f'(x) = Dx^x = De^{x \cdot \ln x} = e^{x \cdot \ln x} \cdot (1 + \ln x) = x^x(1 + \ln x).$$

Derivaatan $f'(1)$ tarkka arvo

$$f'(1) = 1^1(1 + \ln 1) = 1(1 + 0) = 1$$

on myös numeerisesti käyttökelpoinen. Vastaavasti

$$f'(2) = 2^2(2 + \ln 2) = 4 + 4 \cdot \ln 2\,,$$

mutta jos halutaan piirtää esimerkiksi tangentti, on käytettävä likiarvoa $f'(2) \approx 6{,}7726$.

Numeerinen derivointi on siis helppoa, kun tunnetaan funktion lauseke. Entä jos ei tunneta/tiedetä? Tiedetään vain funktion arvot tietyillä muuttujan arvoilla. Esimerkiksi jonkin fysikaalisen/kemiallisen kokeen mittaustulokset.
Tällöin derivaatta voidaan määritetään numeerisesti joko erotusosamäärän kautta tai *keskeisdifferenssin = keskeiserotusosamäärän* kautta.

Vaihtoehtoisesti voidaan muodostaa polynomifunktioita, joiden kuvaajat kulkevat mittaustuloksina saatujen pisteiden kautta ja laskea tarvittavat funktion arvot niiden avulla. Nämä polynomit ovat ns. *interpolointipolynomeja* ja niiden käyttöä funktion arvojen arvioimiseen, eli kyseistä menetelmää, kutsutaan *interpoloimiseksi*.

Erotusosamäärän käyttö:
Derivaatalle saadaan kohtuullisen käyttökelpoinen arvio

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \qquad |h| \ll 1, \text{eli pieni.}$$

Huomaa, että kyseessä todella on erotusosamäärä, sillä

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

Esimerkki Tarkastellaan funktiota $f, f(x) = x^x$ $(x \neq 0)$ ja olkoon $h = 0{,}01$. Tällöin derivaatalle kohdassa $x = 1$ saadaan arvio

$$f'(1) \approx \frac{f(1 + 0{,}01) - f(1)}{1{,}01 - 1} = \frac{1{,}01^{1{,}01} - 1^1}{0{,}01} = \frac{0{,}0101005\ldots}{0{,}01} \approx 1{,}01$$

Esimerkki(jatkuu) Havaitaan, että melko hyvä arvio. Olkoon $h=-0{,}01$. Tällöin derivaatalle kohdassa $x=1$ saadaan arvio

$$f'(1)\approx\frac{f(1-0{,}01)-f(1)}{0{,}99-1}=\frac{0{,}99^{0{,}99}-1^1}{-0{,}01}=\frac{0{,}9900995\ldots-1}{-0{,}01}$$
$$=\frac{-0{,}00990049\ldots}{-0{,}01}\approx 0{,}99.$$

Eli yhtä hyvä arvio. Näin ei päde aina → esim. huono mittausdata.

Yleisesti voidaan osoittaa, että virhe mikä tässä menetelmässä tulee on suoraan verrannollinen h:n suuruuteen. Jos h puolitetaan, puolittuu myös virhe.

Keskeisdifferenssin käyttö:
Kun h on positiivinen voidaan muodostaa pisteessä x erotusosamäärät

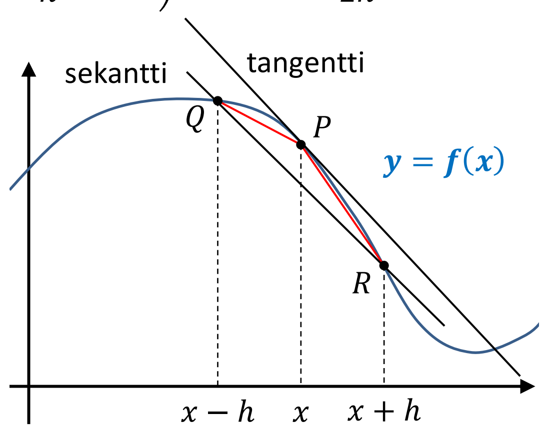
$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h},\qquad \frac{f(x)-f(x-h)}{h}.$$

Huomaa, että molemmat ovat derivaatan approksimaatioita.

Keskeisdifferenssi on näiden erotusosamäärien keskiarvo, siis

$$\frac{1}{2}\left(\frac{f(x+h)-f(x)}{h}+\frac{f(x)-f(x-h)}{h}\right)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}.$$

Geometrinen tulkinta:
Keskeisdifferenssi on oheisen kuvan pisteiden Q ja R kautta kulkevan sekantin kulmakertoimen arvo.
Yleensä se on parempi arvio tangentin kulmakertoimelle $f'(x)$ kuin pisteiden Q ja P tai P ja R kautta kulkevien sekanttien kulmakertoimien arvot.



Voidaan osoittaa, että keskeisdifferenssimenetelmässä eli ”$2h$”-menetelmässä virhe mikä tulee arviossa $f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$ on verrannollinen tekijään h^2. Jos h puolittuu, virhe pienenee ¼-osaan.

Esimerkki Lasketaan funktion $f, f(x) = x^x$ derivaatan $f'(2)$ liki-arvo käyttäen erotusosamäärää arvoilla $\pm 0{,}01$ ja keskeisdifferenssiä arvolla $0{,}01$.
Erotusosamäärät

$$\frac{1{,}99^{1{,}99} - 2^2}{-0{,}01} \approx 6{,}7057, \qquad \frac{2{,}01^{2{,}01} - 2^2}{0{,}01} \approx 6{,}8404$$

poikkeavat derivaatan $f'(2) \approx 6{,}7726$ nelidesimaalisesta likiarvosta noin 1%, mutta keskeisdifferenssi eli keskeiserotusosamäärä

$$\frac{2{,}01^{2{,}01} - 1{,}99^{1{,}99}}{0{,}02} \approx 6{,}7731$$

vain noin $0{,}007\%$.
Numeeriseen derivointiin liittyy ongelma, joka esitellään seuraavassa esimerkissä ja tietokoneharjoitus 2:ssa. Liian pienellä h:oon arvolla menetetään merkitseviä numeroita, jolloin poikkeama oikeasta arvosta suurenee eikä pienene.
Lisäksi derivaatta on määritelmän nojalla pisteittäinen ominaisuus. Funktio saattaa heilahdella rajusti tarkastelukohdan ympäristössä.

Esimerkki Tiedetään, että funktion f: $f(x) = e^x$ derivaatta $f'(x) = e^x$ja $f'(1) = e \approx 2{,}7183$. Määritetään derivaatan $f'(1)$ liki-arvo käyttäen neljän desimaalin tarkkuutta ja h:n arvoja 0,005 ja 0,0005.
Saadaan

$$f'(1) \approx \frac{e^{1{,}005} - e^{0{,}995}}{0{,}01} \approx \frac{2{,}7319 - 2{,}7047}{0{,}01} = 2{,}7200$$

$$f'(1) \approx \frac{e^{1{,}0005} - e^{0{,}9995}}{0{,}001} \approx \frac{2{,}7196 - 2{,}7169}{0{,}001} = 2{,}72000$$

Havaitaan, että pienemmällä h:n arvolla saatiin huonompi tulos, vaikka derivaatan määritelmän mukaan pitäisi käydä päinvastoin. Syy on siinä, että vähennettäessä toisistaan kovin lähekkäisiä lukuja menetetään merkitseviä numeroita. Pienillä luvuilla jakaminen taas kasvattaa jo syntynyttä virhettä.
Väärän tuloksen vaara liittyy siihen, että numeerisessa derivoinnissa funktion arvoja lasketaan yksittäisissä pisteissä eikä tällöin mitenkään ennakoida funktion käyttäytymistä laskentapisteiden välillä.