Numeričko deriviranje

Semeš, Borna

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Borna Semeš

Numeričko deriviranje

Završni rad

Osijek, 2022.

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Borna Semeš

Numeričko deriviranje

Završni rad

Voditelj: doc. dr. sc. Suzana Miodragović

Osijek, 2022.

Numeričko deriviranje

Sažetak:

Tema ovog rada je numeričko deriviranje. Za početak ćemo iskazati Taylorov teorem, te koristeći Taylorovu formulu izvesti nekoliko formula za aproksimaciju prve derivacije funkcije. Zatim ćemo izvesti Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma i pokazati kako se primjenjuje u aproskimiranju derivacije. Konačno proučiti ćemo greške koje se javljaju kod numeričkog deriviranja i usporediti točnost pokazanih metoda.

Ključne riječi:
derivacija, Taylorov teorem, Lagrangeova metoda, interpolacijski polinom, ocjena pogreške

Numerical differentiation

Abstract:

The topic of this bachelor's thesis is numerical differentiation. We will start by stating Taylor's theorem, and using Taylor's formula express couple of formulas for approximation of the first derivative. Then, we will derive the Lagrange form of the interpolation polynomial and show how it is used in approximating derivatives. Finally, we will study the errors that occur in numerical differentiation and compare the accuracy of previously shown methods.

Keywords:
differentiation, Taylor's theorem, Lagrange method, interpolation polynomial, error analysis

Sadržaj

1. Uvod

Derivacija je jedan od najvažnijih pojmova matematičke analize i matematike općenito. Rješavanje mnogih problema iz različitih primjena matematike, pogotovo iz područja optimizacije, bilo bi nezamislivo bez poznavanja derivacija i svojstava derivabilnih funkcija. Formalno proučavanje derivacija započeli su njemački matematičar G.W.Leibniz (Leipzig, 1. srpnja 1646. - Hannover, 14. studeni 1716.) i engleski fizičar Isaac Newton (Woolsthorpe, 4. siječnja 1643. - London, 31. ožujka 1728.). U ovom završnom radu bavit ćemo se pojmom numeričke derivacije. Ono je od velike važnosti u računalnoj fizici, te i u drugim znanostima. Mnogi inžinjerski problemi zahtijevaju izračunavanje derivacije (određivanje brzine ili ubrzanja i sl.). Numeričko deriviranje se odnosi na računsku proceduru približnog određivanja derivacije funkcije u nekoj točki. Funkcija može biti zadana diskretno u konačno mnogo točaka domene, ali može biti zadana i analitički sa nekim kompliciranim izrazom. Analitički zadane funkcije ponekad zna biti vrlo teško egzaktno derivirati, pa je često dovoljno umjesto toga izračunati derivaciju u konačno mnogo točaka i za takvu funkciju poznavati samo vrijednost u konačno mnogo točaka domene. Nekoliko razloga za upotrebu metoda numeričkog deriviranja:

- Ne poznajemo funkciju nego samo njezinu vrijednost u nekoliko točaka.
- Analitički izraz funkcije je prekompleksan.
- Znamo egzaktno izračunati derivaciju, no funkcija je kompleksna i mnogo bi jednostavnije bilo izračunati njezinu aproksimaciju.
- Rješavanje običnih i parcijalnih diferencijalnih jednadžbi.

U prvom poglavlju ovog rada iskazati ćemo neke osnovne teoreme i definicije koje će nam biti potrebne za daljnje razumijevanje gradiva. U drugom poglavlju ćemo pokazati metodu aproskimacije derivacije funkcije primjenom Taylorovog reda i nekoliko različitih formula za aproksimiranje derivacije. Izvesti ćemo Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma i pokazati njegovu primjenu u aproskimiranju derivacija funkcije. Konačno, bavit ćemo se ocjenama pogrešaka, kako ih minimizirati i kako pronaći optimalni korak koji se koristi pri aproksimiranju derivacija funkcije Taylorovim redom.

1.1. Osnovni pojmovi

Ponovimo za početak neke osnovne definicije i teoreme koji će nam biti potrebni u daljnjem radu.

Definicija 1.1. *Za točku $P_0 \in \mathbb{R}^n$ kažemo da je gomilište skupa $D \subseteq \mathbb{R}^n$ ukoliko svaka njezina okolina sadrži beskonačno mnogo članova iz D. Sa D' označavamo skup svih gomilišta skupa D.*

Definicija 1.2. *Neka je $D \subseteq \mathbb{R}^n$, $f : D \to \mathbb{R}^n$ i $P_0 \in D'$. Za $L \in \mathbb{R}^n$ kažemo da je limes funkcije f u točki P_0 ukoliko vrijedi*

$$(\forall \varepsilon > 0)\ (\exists \delta > 0)\ (\forall P \in D) : 0 < \|P - P_0\| < \delta \Rightarrow \|f(P) - L\| < \varepsilon.$$

Definicija 1.3. *Neka je* $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ *otvoreni skup i* $f : \Omega \to \mathbb{R}$ *funkcija. Kažemo da je* f *derivabilna ili diferencijabilna u točki* $x_0 \in \Omega$ *ako postoji limes*

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}. \tag{1}$$

Ako limes (1) *ne postoji, onda* f *nije derivabilna u točki* $x_0 \in \Omega$*. Ako je* f *derivabilna u točki* $x_0 \in \Omega$ *onda se limes* (1) *zove derivacija funkcije* f *u točki* $x_0 \in \Omega$ *i označava s* $f'(x_0)$.

Napomena 1.1. *Sa* $\Omega \subseteq \mathbb{R}$ *označavamo otvoreni skup u* $\mathbb{R}$*, to jest skup sa svojstvom :*

$$(\forall x \in \Omega)\ (\exists \varepsilon > 0) : \langle x - \varepsilon, x + \varepsilon \rangle \subseteq \Omega.$$

Primjerice otvoren skup u $\mathbb{R}$ *je svaki otvoreni interval* $\langle a, b \rangle$ *,* $a, b \in \mathbb{R}$.

Teorem 1.1 (O međuvrijednostima). *(vidjeti [3, Teorem 3]). Neka je* $I = [a, b]$ *segment u* $\mathbb{R}$*,* $f : I \to \mathbb{R}$ *neprekidna funkcija i neka je* x *broj takav da* $f(a) < x < f(b)$*. Tada postoji* $c \in < a, b >$ *takav da je* $f(x) = c$.

2. Numeričko deriviranje

U ovom poglavlju opisati ćemo dvije metode za numeričko deriviranje te proučiti pogreške koje se javljaju pri korištenju tih metoda.

2.1. Taylorov teorem

Nazvan po engleskom matematičaru Brook Tayloru, Taylorov teorem nam daje aproksimaciju funkcije oko neke točke polinomom.

Teorem 2.1. *(vidjeti [2, Teorem 7]). Neka je* $\langle a, b \rangle$*,* $c \in \langle a, b \rangle$*,* $f : \langle a, b \rangle \to \mathbb{R}$ *funkcija koja ima* $(n + 1) -$ *vu derivaciju na intervalu* $\langle a, b \rangle$ *i* p *bilo koji prirodan broj. Tada za svaki* $x \in \langle a, b \rangle$ *postoji realan broj* ξ_x *(*$c < \xi_x < x$ *za* $x > c$*, odnosno* $x < \xi_x < c$ *za* $x < c$*), takav da vrijedi:*

$$f(x) = f(c) + \frac{f'(c)}{1!}(x-c) + \frac{f^{(2)}(c)}{2!}(x-c)^2 + \frac{f^{(3)}(c)}{3!}(x-c)^3 + \cdots + \frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x-c)^n + R_n(f, c; x), \tag{2}$$

gdje je

$$R_n(f, c; x) = \left(\frac{x - c}{x - \xi_x} \right)^p \cdot \frac{(x - \xi_x)^{n+1}}{n!p} f^{n+1}(\xi_x)$$

Formulu (2) *nazivamo Taylorovom formulom funkcije f u točki c, dok polinom:*

$$T_n(f, c; x) = f(c) + \frac{f'(c)}{1!}(x - c) + \frac{f^{(2)}(c)}{2!}(x - c)^2 + \frac{f^{(3)}(c)}{3!}(x - c)^3 + \cdots + \frac{f^{(n)}(c)}{n!}(x - c)^n$$

nazivamo n*-tim Taylorovim polinomom funkcije f u točki c. Za* $R_n(f, c; x)$ *kažemo da je* n*-ti ostatak funkcije* f *u točki* c.

Dokaz *Teorema* 1.1 možemo pronaći u [2], str. 204.

Željeli bismo primjeniti Taylorovu formulu za aproksimiranje derivacija.
Derivacija je matematički definirana kao

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{3}$$

gdje je h veličina koraka. Jednostavna aproksimacija prve derivacije bi nam tada bila

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{4}$$

gdje je $h > 0$. Izraz sa desne strane biti će egzaktna derivacija za linerane funkcije, no to neće vrijediti za skoro sve ostale funkcije. Pa izračunajmo pogrešku aproksimacije. Prema Taylorovoj formuli je:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2} f''(\xi(x)) \tag{5}$$

za neki ξ između x i $x_0 \in \langle a, b \rangle$. Ako uzmemo $x = x_0 + h$ imamo:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi). \tag{6}$$

Obzirom da je ova aproksimacija derivacije bazirana na vrijednostima funkcije u točkama x_0 i $x_0 + h$, aproksimaciju (4) nazivamo **deriviranje unaprijed**. Aproksimacija derivacije koja je bazirana na vrijednostima funkcije u $x_0 - h$ i x_0 ,

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}, \tag{7}$$

nazivamo **deriviranje unazad**. Drugi član u izrazu (6) nazivamo greška diskretizacije ili greška odsijecanja. Umjesto izraza (6) moguće je dobiti točniji izraz za prvu derivaciju. Na primjer, točnija aproksimacija bi bila formula za **centralno deriviranje** koja je bazirana na vrijednostima funkcije u točkama $f(x_0 - h)$ i $f(x_0 + h)$:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}. \tag{8}$$

Potvrdimo da je to uistinu točnija formula nego (4). Proširenjem članova na desnoj strani formule (8) po Taylorovom redu imamo:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2} + f'''(\xi_1)\frac{h^3}{6} \tag{9}$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2} - f'''(\xi_2)\frac{h^3}{6} \tag{10}$$

pri čemu su $\xi_1 \in (x_0, x_0 + h)$ i $\xi_2 \in (x_0 - h, x_0)$. Oduzimanjem gornja dva izraza i dijeljenjem sa $2h$ dobivamo:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - h) - f(x_0)}{h} - \frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)],$$

što znači da nam je greška aproksimacije (8) jednaka

$$-\frac{h^2}{12}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)].$$

Ako je derivacija trećeg reda neprekidna funkcija na intervalu $[x_0 - h, x_0 + h]$, onda nam Teorem o međuvrijednostima 1.1 implicira da postoji točka $\xi \in (x_0 - h, x_0 + h)$ takva da

$$f'''(\xi) = \frac{1}{2}[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)].$$

Zato

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - h) - f(x_0)}{h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi). \tag{11}$$

Analogno možemo izvesti izraz za drugu derivaciju. Proširimo (9) i (10) za jedan član:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2} + f'''(x_0)\frac{h^3}{6} + f^{(4)}(\xi_1)\frac{h^4}{24}$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - f'(x_0)h + f''(x_0)\frac{h^2}{2} - f'''(x_0)\frac{h^3}{6} + f^{(4)}(\xi_2)\frac{h^4}{24},$$

gdje su $\xi_1 \in (x_0, x_0 + h)$ i $\xi_2 \in (x_0 - h, x_0)$. Zbrajanjem ova dva izraza i dijeljenjem s h^2 dobivamo

$$\frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} = f''(x_0) + \frac{h^2}{24}(f^{(4)}(\xi_1) + f^{(4)}(\xi_2)), \tag{12}$$

Korištenjem teorema o međuvrijednostima 1.1 imamo:

$$\frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} = f''(x_0) + \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \tag{13}$$

gdje pretpostavljamo da je $\xi \in (x_0 - h, x_0 + h)$. To jest imamo:

$$f''(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - 2f(x_0) + f(x_0 - h)}{h^2} + \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi). \tag{14}$$

Usporedimo formule za deriviranje unaprijed (4), deriviranje unazad (7) i za centralno deriviranje (8) na nekoliko primjera:

Primjer 2.1. *Neka je $f(x) = e^x$ dana funkcija,te $h = 10^{-3}$ veličina koraka. Usporedimo vrijednosti prve derivacije funkcije f tako da ju aproksimiramo u točkama 2,3,5,7 formulama* (4),(7) *i* (8).

x	*der. unaprijed* (4)	*der. unazad* (7)	*centralno der.* (8)	*egzaktna der.*
2	7.39275	7.38536	7.38906	7.38906
3	20.09558	20.07549	20.08554	20.08554
5	148.48739	148.33897	148.41318	148.41316
7	1097.18166	1096.08502	1096.63334	1096.63316

Možemo primjetiti kako formula za centralno deriviranje daje točniju aproskimaciju nego ostale dvije formule.

Provjerimo sada formulu za aproksimaciju druge derivacije

Primjer 2.2. *Izračunajte aproksimaciju druge derivacije funkcije* $f(x) = x^3 \sin x$ *u točki* $x = 7$ *i uzimajući h=0.1, koristeći formulu* (14).

Rješenje:

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - 2f(x_0) + f(x_0-h)}{h^2},$$

tj. u našem slučaju

$$f''(7) \approx \frac{f(7+0.1) - 2f(7) + f(7-0.1)}{0.1^2} = 23.589996.$$

Sad izračunajmo egzaktnu vrijednost

$$\begin{aligned} f(x) &= x^3 \sin x \\ f'(x) &= 3x^2 \sin x + x^3 \cos x \\ f''(x) &= 6x \sin x + 6x^2 \cos x - x^3 \sin x \\ f''(7) &= 42 \sin 7 + 294 \cos 7 - 343 \sin 7 = 23.894297 \end{aligned}$$

Možemo vidjeti da je aproskimacija poprilično točna obzirom da smo uzeli veliku vrijednost za h.

2.2. Lagrangeova metoda

U ovom poglavlju prikazat ćemo kako se aproksimiraju derivacije korištenjem Lagrangeovog oblika interpolacijskog polinoma. Najprije ćemo definirati što je to uopće interpolacija i interpolacijski polinom.
Za neku funkciju f često nemamo analitički izraz, no poznajemo njezinu vrijednost u konačno mnogo točaka: $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$. Trebamo aproksimirati funkciju f u intervalu $[x_0, x_n]$ nekom jednostavnijom funkcijom g, tako da vrijedi:

$$g(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \ldots, n. \tag{15}$$

Problem određivanja takve funkcije g koja zadovoljava zahtjev (15) nazivamo problem interpolacije. Funkciju g obično biramo u klasi polinoma, racionalnih, trigonometrijskih, eksponencijalnih ili nekih drugih jednostavnijih funkcija. Kada smo odredili takvu funkciju g, onda možemo aproksimirati vrijednost početne funkcije f u točki x, $x \neq x_i$, tako da stavimo $f(x) \approx g(x)$. Jedna od metoda određivanja takve funkcije g je Lagrangeova metoda kojom se mi trenutno bavimo. Izvedimo Lagrangeov oblik interpolacijskog polinoma:
Neka je $\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ skup točaka na segmentu $[a, b]$ i pretpostavimo $x_{j+1} - x_j = h$ za $j = 0, 1, \ldots, n-1$. Trebamo pronaći polinom p_i stupnja n takav da vrijedi

$$p_i(x_j) = \begin{cases} 1 & , j = i \\ 0 & , j \neq i \end{cases}, \tag{16}$$

za $i, j = 0, 1, \ldots, n$. To znači kako treba pronaći polinom čiji će graf presijecati os x u točkama $x_0, x_1, \ldots, x_{i-1}, x_{i+1}, \ldots, x_n$, dok će u točki x_i poprimiti vrijednost 1. Kako polinom p_i u točkama $x_0, x_1, \ldots, x_{i-1}, x_{i+1}, \ldots, x_n$ iznosi nula, onda je

$$p_i(x) = C_i(x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n), \tag{17}$$

pri čemu je C_i konstanta koja se odredi iz uvjeta $p_i(x_i) = 1$

$$C_i = \frac{1}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)}. \tag{18}$$

Uvrštavajući (18) u (17) dobivamo traženi polinom

$$p_i(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)} = \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \tag{19}$$

Tada polinom P_n za koji vrijedi $P_n(x_i) = f(x_i) = y_i$, $i = 0, 1, \dots, n$, gdje je f neprekidna funkcija čiji interpolacijski polinom tražimo, uz uvjet $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$, glasi:

$$\begin{aligned} P_n(x) &= \sum_{i=0}^{n} y_i p_i(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \frac{(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})\dots(x - x_n)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\dots(x_i - x_n)} \\ &= \sum_{i=0}^{n} y_i \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}. \end{aligned} \tag{20}$$

i

$$f(x) = P_n(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_n)}{(n+1)!} \tag{21}$$

za neke $\xi(x) \in [a, b]$. Zato

$$\begin{aligned} f'(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) p_k'(x) + \frac{d}{dx}\left(\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)\right)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \\ + \frac{\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)}{(n+1)!}\frac{d}{dx} f^{(n+1)}(\xi(x)) \end{aligned} \tag{22}$$

te vrijedi

$$f'(x_l) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) p_k'(x_l) + \left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq l}}^{n}(x_l - x_i)\right)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x_l))}{(n+1)!} \quad za\ x = x_l. \tag{23}$$

Zato, $f'(x_l) \approx \sum_{k=0}^{n} f(x_n) p_k'(x_l)$, jer je

$$\left(\prod_{\substack{i=0 \\ i \neq l}}^{n}(x_l - x_i)\right)\frac{f^{(n+1)}(\xi(x_l))}{(n+1)!} \tag{24}$$

generalno malen.
Razmotrimo, na primjer, $n = 2$ sa $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_1 + h$. Tada je

$$\begin{aligned} f'(x_l) =& f(x_0)\left[\frac{2x_l - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}\right] + f(x_1)\left[\frac{2x_l - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}\right] \\ &+ f(x_2)\left[\frac{2x_l - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)}\right] + \frac{1}{6} f'''(\xi_l) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq l}}^{2}(x_l - x_i). \end{aligned} \tag{25}$$

Uzimajući da je $x_l = x_1$ dobivamo

$$\begin{aligned} f'(x_1) &= -\frac{1}{2h}f(x_0) + 0f(x_1) + \frac{1}{2h}f(x_2) - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^2 \\ &= \frac{1}{2h}[f(x_1+h) - f(x_1-h)] - \frac{1}{6}f'''(\xi_1)h^2 \end{aligned} \tag{26}$$

što je formula za centralno deriviranje (8).

Primjer 2.3. *Korištenjem Lagrangeovog interpolacijskog polinoma aproksimirajte prvu derivaciju funkcije* $f(x) = x^3 - 2x + \ln x$ *u točkama* $x = 2, 5, 7$. *Za interpolacijski polinom uzmite točke* 5 , 5.2 , 5.4.

Rješenje:
Prvo trebamo odrediti interpolacijski polinom. On nam je dan formulom:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \prod_{j\neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

y_i – eve dobijemo tako da zadane točke $x = 5$, 5.2 , 5.4 uvrstimo u funkciju f. Na taj način dobijemo:

x	5	5.2	5.4
$y = f(x)$	116.60944	131.85666	148.350399

Sada uvrstimo te podatke u formulu (25)

$$\begin{aligned} f'(x_l) \approx & 116.60944 \left[\frac{2x_l - 5.2 - 5.4}{(5-5.2)(5-5.4)}\right] + 131.85666 \left[\frac{2x_l - 5 - 5.4}{(5.2-5)(5.2-5.4)}\right] \\ & + 148.350399 \left[\frac{2x_l - 5 - 5.2}{(5.4-5)(5.4-5.2)}\right] \end{aligned}$$

Uvrštavanjem $x_l = 2$ u tu formulu imamo

$$f'(2) = -20.3691,$$

dok egzaktna derivacija u točki $x = 2$ iznosi

$$f'(2) = 3 \times 2^2 - 2 + \frac{1}{2} = 10.5.$$

Naša aproksimacija znatno odstupa od prave vrijednosti. Aproksimirajmo sada derivaciju funkcije f u točki $x = 5$. Imamo:

$$\begin{aligned} f'(5) \approx & 116.60944 \left[\frac{10 - 5.2 - 5.4}{(5-5.2)(5-5.4)}\right] + 131.85666 \left[\frac{10 - 5 - 5.4}{(5.2-5)(5.2-5.4)}\right] \\ & + 148.350399 \left[\frac{10 - 5 - 5.2}{(5.4-5)(5.4-5.2)}\right] \\ & = 73.1198025. \end{aligned}$$

Egzaktna derivacija u točki $x = 5$ iznosi

$$f'(5) = 3 \times 5^2 - 2 + \frac{1}{5} = 73.2.$$

Konačno, aproksmirajmo derivaciju funkcije f u točki $x = 7$. Uvrštavanjem $x_l = 7$ u formulu (25) dobivamo:

$$\begin{aligned} f'(7) \approx & 116.60944 \left[\frac{14 - 5.2 - 5.4}{(5 - 5.2)(5 - 5.4)} \right] + 131.85666 \left[\frac{14 - 5 - 5.4}{(5.2 - 5)(5.2 - 5.4)} \right] \\ & + 148.350399 \left[\frac{14 - 5 - 5.2}{(5.4 - 5)(5.4 - 5.2)} \right] \\ & = 135.44575, \end{aligned}$$

a egzaktna derivacija nam u točki $x = 7$ iznosi:

$$f'(7) = 3 \times 7^2 - 2 + \frac{1}{7} = 145.142856.$$

Možemo primjetiti da nam aproksimacije sve više odstupaju od pravih vrijednosti kako se udaljavamo od točaka koje smo koristili za izračunavanje interpolacijskog polinoma (čvorova interpolacije). Razlog tomu je što nam brojnik svakog člana u formuli (25) po apsolutnoj vrijednosti treba biti što manji.

2.3. Ocjena pogreške

Često se u praksi nameće potreba korištenja približnih umjesto stvarnih veličina, a umjesto stvarne situacije, često u praksi promatramo idealiziranu situaciju. Tako i umjesto stvarnog rezultata se često zadovoljavamo njegovom aproksimacijom. U takvim i sličnim situacijama moramo znati s kakvom pogreškom ulazimo u račun i kakve će to posljedice imati na konačan rezultat. To se posebno odnosi na numeričke metode.
Kod numeričkog izračunavanja realan broj $m \in \mathbb{N}$ obično zapisujemo kao

$$m = \pm n \times a^e, \tag{27}$$

gdje je $a \in \mathbb{N}$, $a \geq 2$ baza, $\frac{1}{a} \leq n < 1$ mantisa, a $e \in \mathbb{Z}$ eksponent broja m. U svakodnevnom životu se koristi dekadski brojevni sustav za koji je $a = 10$, dok se binarni ($a = 2$) i heksadekadski ($a = 16$) koriste u računalima. U računalnom zapisu koristi se tzv. **zapis s pomičnim zarezom** (floating-point representation) broja

$$m = \pm 0.n_1 n_2 \cdots n_k \times a^e, \tag{28}$$

gdje je mantisa $n = 0.n_1 n_2 \cdots n_k$ zapisana pomoću k nenegativnih cijelih brojeva $0 \leq n_i < b, n_1 \neq 0$. Kažemo da je broj m reprezentiran u k-znamenkastoj floating-point aritmetici. Broj k je fiksan je jedinstven za svako računalo i predstavlja običnu preciznost računala. Ako realni broj m ima više od k znamenki, računalo će ga postupkom zaokruživanja ili odbacivanja pretvoriti u k-znamenkasti broj.
Jedan problem sa numeričkim deriviranjem je taj što pogreška zaokruživanja može biti velika ako je h malen. U računalu,

$$f(x_0 + h) = \tilde{f}(x_0 + h) + e(x_0 + h),$$

te

$$f(x_0) = \tilde{f}(x_0) + e(x_0),$$

gdje su $e(x_0+h)$ i $e(x_0)$ pogreške zaokruživanja koje ovise o broju znamenki koje računalo koristi, a $\tilde{f}(x_0+h)$ i $\tilde{f}(x_0)$ aproksimacije funkcije f u točkama x_0+h, odnosno x_0 . Razmotrimo formulu za deriviranje unaprijed

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi(x)). \tag{29}$$

Pretpostavit ćemo da $|e(x)| \leq \epsilon |f(x)|$ za neku relativnu grešku ϵ, takvu da $|f(x)| \leq M_0$ za neku konstantu M_0, te da je $|f''(x)| \leq M_2$ za neku konstantu M_2, za sve vrijednosti od x u okolini x_0 koje se uzimaju u obzir. Zatim korištenjem ovih ograničenja i uzastopnom upotrebom svojstva nejednakosti trokuta dobivamo

$$\begin{aligned}
\left| f'(x_0) - \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0)}{h} \right| &\leq |f'(x_0)| + \left| \frac{\tilde{f}(x_0+h) - \tilde{f}(x_0)}{h} \right| \\
&= \left| \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi(x)) \right| \\
&+ \left| \frac{f(x_0+h) - e(x_0+h) - f(x_0) + e(x_0)}{h} \right| \\
&\leq \left| \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \right| + \left| \frac{h}{2} f''(\xi(x)) \right| \\
&+ \left| \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \right| + \left| \frac{e(x_0-h) - e(x_0)}{h} \right| \\
&= \left| \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \right| + \left| \frac{h}{2} f''(\xi(x)) \right| \\
&+ |(-1)| \left| \frac{f(x_0) - f(x_0+h)}{h} \right| + \left| \frac{e(x_0-h) - e(x_0)}{h} \right| \\
&\leq \left| \frac{e(x_0-h) - e(x_0)}{h} \right| + \frac{h}{2} M_2 \\
&\leq \left| \frac{e(x_0+h)}{h} \right| + \left| \frac{e(x_0)}{h} \right| + \frac{h}{2} M_2 \\
&\leq \epsilon \left| \frac{f(x_0+h)}{h} \right| + \epsilon \left| \frac{f(x_0)}{h} \right| + \frac{h}{2} M_2 \\
&\leq 2\epsilon \frac{M_0}{h} + \frac{h}{2} M_2 = E(h),
\end{aligned} \tag{30}$$

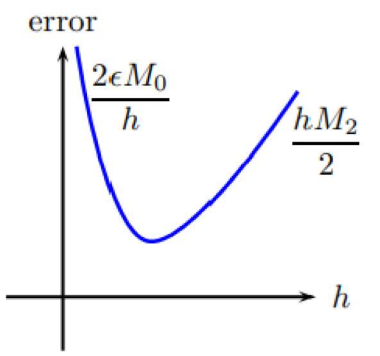
gdje je ϵ bilo koji broj takav da vrijedi $|e(x)| \leq \epsilon |f(x)|$ za sve x-eve koje uzimamo u obzir. To jest, greška je ograničena krivuljom kao na pripadnoj slici.

Možemo primjetiti ako je h premali, pogreška aproksimacije može biti velika. Računski možemo odrediti dovoljno malen h takav da je pogreška aproksimacije minimalna i njega ćemo označavati sa h_{opt}. Najmanja greška će biti kada je $e'(h) = \left(2\epsilon \frac{M_0}{h} + \frac{h}{2} M_2\right)' = 0$. Tu jednadžbu riješimo po h i dobijemo

$$h = \frac{2\sqrt{\epsilon M_0}}{\sqrt{M_2}}$$

što nam je i h_{opt}, tj.

$$h_{opt} = \frac{2\sqrt{\epsilon M_0}}{\sqrt{M_2}}, \tag{31}$$



Slika 1: Ilustracija ukupne greške (30)

sa najmanjom gornjom granicom

$$E(h_{opt}) = 2\sqrt{M_0 M_2}\sqrt{\epsilon}.$$

Pokažimo to na idućem primjeru:

Primjer 2.4. *Aproksimirajte vrijednost derivacije funkcije $f(x) = \sin x$ u točki $x = 0.5$. Procijenite optimalni korak h i maksimalnu ukupnu grešku. Zaokružujte na 10 znamenki.*

Rješenje:

Koristit ćemo formulu za deriviranje unaprijed:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Izračunajmo aproksimacije derivacije funkcije f za pojedini h:

h	$\frac{\sin(0.5+h)-\sin(0.5)}{h}$
10^{-1}	0.8521693479
10^{-2}	0.8751708278
10^{-3}	0.8773427028
10^{-4}	0.8775585891
10^{-5}	0.8775801647
10^{-6}	0.8775823222
10^{-7}	0.8775825371
10^{-8}	0.8775825622
10^{-9}	0.8775825622
10^{-10}	0.8775824511
10^{-11}	0.8775813409
10^{-12}	0.8775757898
10^{-13}	0.8776313009
10^{-14}	0.8770761895
10^{-15}	0.8881784197
10^{-16}	1.110223025
10^{-17}	0.000000000

Tablica 1: Aproksimacija prve derivacije funkcije f za različiti korak h.

Vrijednost egzaktne derivacije u točki $x = 0.5$ iznosi 0.8775825619. Stoga, možemo primjetiti kako najbolju aproksimaciju postižemo za $h = 10^{-8}$ i $h = 10^{-9}$. Potvrdimo to i računski:

$$h_{opt} = \frac{2\sqrt{\epsilon M_0}}{\sqrt{M_2}}.$$

Za ϵ ćemo uzeti $\epsilon = 7 \times 10^{-17}$, $M_0 = \max_{x\in[x_0,x_0+h]} |f(x)|$ što je u našem slučaju 1, te $M_2 = \max_{x\in[x_0,x_0+h]} |f''(x)|$ što je za naš slučaj također 1.

Uvrštavajući te podatke u formulu (31) dobivamo

$$h_{opt} = \frac{2\sqrt{7 \times 10^{-17}}}{1} = 1.67 \times 10^{-8},$$

što se i podudara sa našim zaključkom. Za tu vrijednost h aproksimacija iznosi

$$\frac{\sin(0.5 + 1.67 \times 10^{-8}) - \sin(0.5)}{1.67 \times 10^{-8}} = 0.877582555644682.$$

Usporedimo na primjeru aproksimaciju derivacije funkcije Taylorovom metodom i Lagrangeovom metodom.

Primjer 2.5. *Neka je $f(x) = \sin x + \ln x$. Aproksimirajte prvu derivaciju funkcije f u točki $x = 3$ Taylorovom metodom i Lagrangeovom metodom te zatim usporedite preciznost tih aproksimacija. Za h uzmite 10^{-1}.*

Rješenje:
Koristit ćemo formulu za deriviranje unaprijed

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

Sada uvrstimo dobivene podatke

$$\begin{aligned} f'(3) &\approx \frac{f(3 + 10^{-1}) - f(3)}{10^{-1}} \\ &= \frac{\sin(3 + 10^{-1}) + \ln(3 + 10^{-1}) - \sin(3) - \ln(3)}{10^{-1}} \\ &= -0.667495 \end{aligned}$$

Sada izračunajmo interpolacijski polinom. U primjeru 2.3 smo pokazali da će aproksimacija korištenjem Lagrangeovog interpolacijskog polinoma biti točnija što su nam točke koje koristimo za računanje interpolacijskog polinoma bliže točki u kojoj računamo aproksimaciju prve derivacije. Sukladno tomu uzeti ćemo točke $x = 2.9,\ 3,\ 3.1$.

x	2.9	3	3.1
$f(x)$	1.30396	1.23973	1.17298

Uvrstimo podatke u formulu (25):

$$\begin{aligned} f'(3) \approx\ & 1.30396 \left[\frac{2 \times 3 - 3 - 3.1}{(2.9 - 3)(2.9 - 3.1)}\right] + 1.23973 \left[\frac{2 \times 3 - 2.9 - 3.1}{(3 - 2.9)(3 - 3.1)}\right] \\ & + 1.17298 \left[\frac{2 \times 3 - 2.9 - 3}{(3.1 - 2.9)(3.1 - 3)}\right] \end{aligned}$$

$$= -0.6549$$

Egzaktna vrijednost derivacije funkcije f iznosi $f'(x) = -0.656659$. Lagrange nam daje nešto bolju aproksimaciju nego Taylor za isti h. Važno je napomenuti kako za računanje aproksimacije prve derivacije Taylorovom formulom moramo znati vrijednosti funkcije f u točkama $x_0 + h$ i x_0, dok je za aproksimaciju korištenjem Lagrangeovog interpolacijskog polinoma poželjno znati vrijednost funkcije u barem tri točke koje se nalaze blizu točke u kojoj tražimo vrijednost aproksimacije prve derivacije, a to je često puno jači zahtjev nego onaj kod aproksimiranja derivacije Taylorovom formulom.

Literatura

[1] A. S. Aklech, E. J. Allen, R. B. Kearfott, P. Seshaiyer, *Classical and Modern Numerical Analysis: Theory, Methods, and Practice* , 2009.

[2] M. Crnjac, D. Jukić, R. Scitovski, *Matematika*, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Ekonomski fakultet u Osijeku, Osijek, 1994.
`http://www.mathos.unios.hr/images/uploads/261.pdf`

[3] A. Jurasić, *Introduction to Numerical Analysis*, 2012.
`https://www.math.uniri.hr/~ajurasic/predavanje6.pdf`

[4] D. Levy, *Introduction to Numerical Analysis*, 2012.
`https://www.math.umd.edu/~diom/courses/AMSC466/Levy-notes.pdf`

[5] R. Scitovski, *Numerička matematika - izmijenjeno i dopunjeno izdanje*, Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za matematiku, Osijek, 2015.