Pracownia z analizy numerycznej

Sprawozdanie do zadania **P4.8.**
Prowadzący: dr Paweł Keller

Paweł Woźny*

Wrocław, dnia 3 listopada 2014 r.

1. Wstęp

Obliczanie pochodnej jest problemem pojawiającym się w naturalny sposób nie tylko w teorii, ale i w zastosowaniach praktycznych związanych np. z ekonomią, grafiką komputerową, fizyką czy chemią. Nie trzeba zatem nikogo przekonywać, że jest to zadanie ważne.

Najczęściej jednak funkcja f, której pochodną f' należy wyznaczyć, nie jest podana jawnym wzorem. Jedyne czym dysponujemy, to możliwość obliczenia jej wartości w pewnych (rzadziej: we wszystkich) punktach jej dziedziny. Mogą być to np. wyniki przeprowadzonych obserwacji czy pomiarów, albo wykonanych obliczeń numerycznych.

Głównym celem niniejszego sprawozdania jest sprawdzenie czy przybliżenie wartości pochodnej f' w punkcie x jej ilorazem różnicowym

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} \qquad (h \text{ – mała liczba}), \tag{1.1}$$

wyznaczonym przy pomocy komputera, jest dobrym pomysłem numerycznego obliczania pochodnej. Nie ograniczono się jednak tylko do tego, podjęto bowiem także próbę zaproponowania innych sposobów obliczania pochodnej z dużą dokładnością.

Dokładniej, w §§2–3 przedstawiono wyniki testów, m.in. tych zasugerowanych w treści zadania, i podjęto próbę ich zinterpretowania. W paragrafie 4 podano inne sposoby numerycznego obliczania pochodnej z dużą dokładnością, które – jak wskazują przeprowadzone doświadczenia – lepiej nadają się do zastosowania w praktyce i są pozbawione pewnych wad wskazanych w §3.

Wszystkie testy numeryczne przeprowadzono przy użyciu systemu algebry komputerowej Maple 8 symulując tryb pojedynczej (`Single`), albo podwójnej precyzji obliczeń (`Double`), tj. przymując `Digits:=8` i `Digits:=16`, odpowiednio.

* *Instytut Informatyki Uniwersytetu Wrocławskiego, ul. Joliot-Curie 15, 50-383 Wrocław*
e-mail: `Pawel.Wozny@ii.uni.wroc.pl`

Uwaga. Dokument ten jest przykładowym, a nie wzorcowym, sprawozdaniem z pracowni z analizy numerycznej. Zostało one ocenione na 8,5 punkta (na 10 możliwych do zdobycia).

2. Pierwsze podejście

Jak wiadomo, pochodną $f'(x)$ nazywamy wartość granicy

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

Stąd wynika, że dla małych wartości h zachodzi

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

Wydaje się zatem zasadne wykorzystanie tej obserwacji do numerycznego wyznaczania przybliżenia $f'(x)$.

TABLICA 1. Wartości df_i przy $h_i := 2^{-i}$.

i	`Single`	`Double`
0	4.6707743	4.670774270471605
1	3.5268146	3.526814483758040
2	3.0882448	3.088244516011184
3	**2**.8954800	**2**.895480163671888
4	**2**.8050256	**2**.805025851403456
5	**2.7**612032	**2**.761200888901824
⋮		
10	**2.71**97440	**2.71**9609546673152
⋮		
15	**2.71**64672	**2.718**323306561536
16	**2.7**262976	**2.718**302567333888
17	**2.71**31904	**2.7182**92197900288
18	**2.7**262976	**2.71828**7013609472
19	**2.7**262976	**2.71828**4421005312
20	**2**.8311552	**2.71828**3123916800

TABLICA 2. Wartości df_i przy $h_i := 2.2^{-i}$.

i	`Single`	`Double`
0	4.6707743	4.670774270471605
1	3.4413597	3.441360091847872
2	3.0194780	3.019477592128351
3	**2**.8500181	**2**.850016102024250
4	**2.7**771330	**2.7**77135770676923
5	**2.7**448296	**2.7**44825721251846
⋮		
10	**2.71**89394	**2.718**793618920401
⋮		
15	**2.7**239134	**2.7182**91757963982
16	**2.71**02254	**2.71828**6341948203
17	**2.71**62481	**2.71828**3880401089
18	**2.7**692481	**2.71828**2760644385
19	**2**.5651982	**2.71828**2255766744
20	**2**.1162885	**2.71828**2017203314

Aby zweryfikować postawioną tezę przeprowadzono prosty eksperyment. Przyjęto $f(x) := e^x$. Wtedy $f'(x) = e^x$. Wykorzystując dołączony do sprawozdania skrypt `program.mws`, wyznaczono przybliżoną wartość $f'(1)$ obliczając odpowiedni iloraz różnicowy. W tablicy 1 podano wartości

$$df_i := \frac{f(1+h_i) - f(1)}{h_i}, \tag{2.1}$$

gdzie $h_i := 2^{-i}$ $(i = 0, 1 \ldots, 20)$, pogrubiając cyfry zgadzające się z wynikiem dokładnym:

$$f'(1) = 2.7182818284590452353602874713 5\ldots$$

Następnie eksperyment powtórzono przyjmując

$$h_i := 2.2^{-i}.$$

(patrz tablica 2).

Jak łatwo zauważyć, w obu wypadkach obliczenia wykonane z podwójną precyzją dają lepsze wyniki niż te przeprowadzone z pojedynczą precyzją. Co więcej, w pewnym momencie wyniki otrzymane w typie `Single` zaczynają się pogarszać, czego nie zauważamy w wypadku obliczeń dla typu `Double`. Bardziej interesujące jest to, że obliczenia, w których przyjęto $h_i := 2.2^{-i}$ są tylko nieznacznie dokładniejsze niż te wykonane dla $h_i := 2^{-i}$, a przecież ciąg $\{2.2^{-i}\}$ dąży do zera szybciej; w szczególności mamy

$$\frac{2^{-20}}{2.2^{-20}} = 6.72\ldots$$

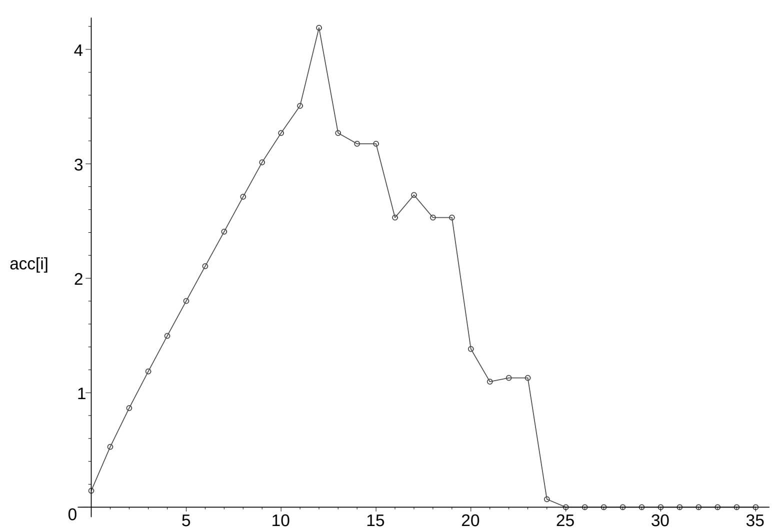
Być może pewnym wytłumaczeniem jest fakt, że liczby postaci 2^{-i} są reprezentowane w arytmetyce fl dokładnie, podczas gdy te postaci 2.2^{-i} – już nie, co może powodować utratę dokładności.

3. Kolejne testy i analiza zjawiska

Po 20 krokach udało się wyznaczyć przybliżenie wartość $f'(1)$, które ma tylko 6 cyfr dokładnych (typ `Double`). Wydaje się więc, że obliczenia powinno się kontynuować dla większych wartości i. Na rysunku 1 widać efekt tego postępowania. Zaznaczono na nim wielkości

$$\texttt{acc[i]} := -\log_{10}\left|1 - \frac{df_i}{f'(1)}\right| \tag{3.1}$$

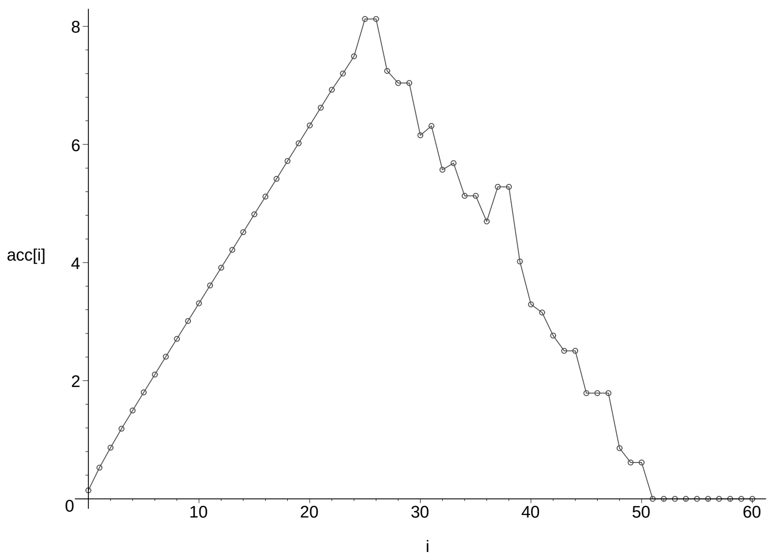
mierzące liczbę dokładnych cyfr dziesiętnych jakie daje przybliżenie df_i (patrz (2.1)) wyznaczone w arytmetyce pojedynczej precyzji przy $h_i := 2^{-i}$. Rysunek 2 przedstawia wyniki tych samych obliczeń, ale dla typu `Double`.



Rysunek 1. Wielkości (3.1), typ `Single`.

Jak można się było spodziewać, wyniki poprawiają się (udało uzyskać się dokładność czterech i ośmiu cyfr dziesiętnych w arytmetyce pojedynczej i podwójnej precyzji, odpowiednio)

– jednak tylko do pewnego momentu. Krytycznymi okazują się być wartości $i = 12$ (typ `Single`) oraz $i = 26$ (typ `Double`). Po nich bowiem zaczynamy obserwować utratę dokładności obliczeń. Co jednak najważniejsze, z wykresu odczytać można, że dla $i \geq 25$ (typ `Single`) oraz $i \geq 51$ (typ `Double`) wartość ilorazu różnicowego wynosi 0. Zauważamy tutaj rozbieżność pomiędzy teorią a praktyką. Przecież dla coraz mniejszych wartości h_i wyniki powinny być coraz dokładniejsze. Dlaczego więc tak się nie dzieje?



Rysunek 2. Wielkości (3.1), typ `Double`.

Na postawione przed chwilą pytanie odpowiedziano w dalszej części tego paragrafu. Wcześniej sprawdzono czy opisane zjawisko zależy od doboru głównych danych, tj. fukcji f oraz punktu x. W tym celu przeprowadzono testy w arytmetyce podwójnej precyzji dla następujących funkcji:

$$f_1(x) := e^x, \qquad f_2(x) := \sin\left(\frac{\pi x}{10}\right), \qquad f_3(x) := \log(x + 5.1),$$

$$f_4(x) := x^2 + x - 1, \qquad f_5(x) := \frac{1}{x^2 + 1},$$

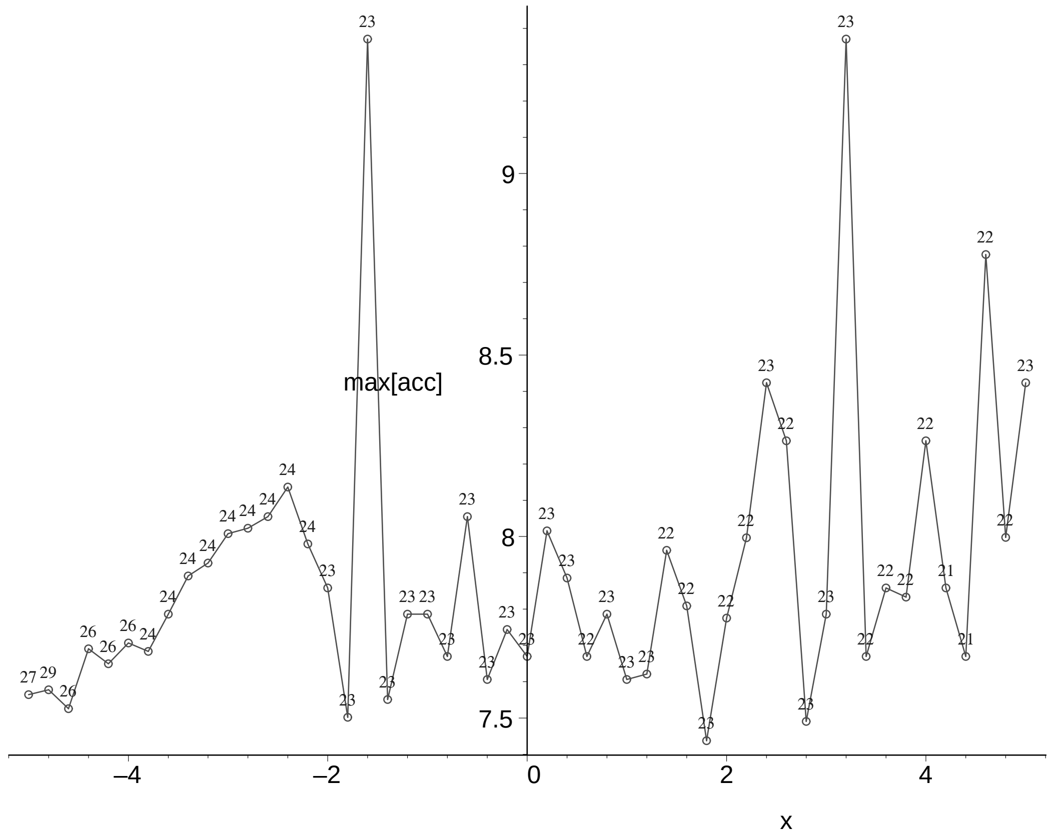
przybliżając wartości ich pochodnych, w opisany wyżej sposób, w 51 równoodległych punktach przedziału $[-5, 5]$, tzn. dla

$$x_k := -5 + \frac{k}{5} \qquad (k = 0, 1, \ldots, 50),$$

przy $h_i := 2^{-i}$ $(i = 0, 1, \ldots, 60)$.

We wszystkich testach zaobserwowano to samo zjawisko co poprzednio: na początku ilorazy różnicowe dla rosnących i przybliżają coraz lepiej wartość f', a po przekroczeniu pewnej granicy tracą na dokładności, aż w końcu zawsze otrzymujemy 0 dla $i \geq I$ dla pewnego $I \in \mathbb{N}$.

Wykresy przedstawiające wyniki doświadczeń (obliczenia wykonano z podwójną precyzją) dla funkcji f_k $(k = 1, 2, \ldots, 5)$ zamieszczono w skrypcie `program.mws`. Ponieważ charakter wszystkich jest podobny, w sprawozdaniu ograniczono się do podania jedynie dwóch, dotyczących funkcji $f_3(x) = \log(x + 5.1)$.



RYSUNEK 3. Maksymalna dokładność przybliżenia dla $f_3(x) = \log(x + 5.1)$, typ `Double`.

I tak, rysunek 3 przedstawia maksymalną dokładność jaką udało się uzyskać przybliżając $f_3'(x_k)$ $(k = 0, 1, \ldots, 50)$ ilorazem różnicowym postaci

$$\frac{f_3(x_k + h_i) - f(x_k)}{h_i} \qquad (h_i := 2^{-i};\ i = 0, 1, \ldots, 60),$$

podając dodatkowo wartość i mu odpowiadającą. Z rysunku 4 odczytać można natomiast wartość I przy której

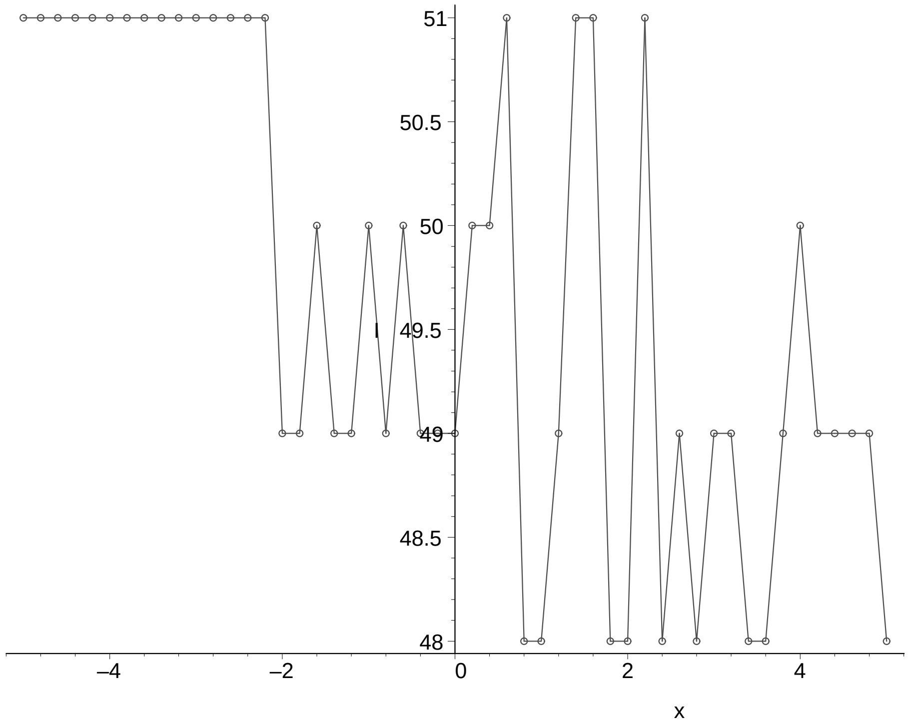
$$\mathsf{fl}\left(\frac{f_3(x_k + h_i) - f(x_k)}{h_i}\right) = 0$$

dla $i \geq I$.

Biorąc pod uwagę wykonane doświadczenia, można stwierdzić, że poczynione wcześniej obserwacje (patrz str. 3) potwierdzają się. Jak więc je wytłumaczyć?

Nie jest to trudne. Można sprawdzić, np. eksperymentalnie, albo biorąc pod uwagę architekturę komputera, że dla ustalonego $a \in X_{\mathsf{fl}}$ istnieje w arytmetyce fl taki zbiór liczb $\mathcal{A}_{\mathsf{fl}}$, że

$$\mathsf{fl}(a + \alpha) = a \qquad (\alpha \in \mathcal{A}_{\mathsf{fl}}).$$



RYSUNEK 4. Wartość I dla $f_3(x) = \log(x + 5.1)$, typ `Double`.

Tłumaczy to fakt, że

$$\mathsf{fl}\left(\frac{f(x_k + h_i) - f(x_k)}{h_i}\right) = 0$$

dla $i \geq I$. Mamy wtedy najczęściej

$$\mathsf{fl}(f(x_k + h_i)) = \mathsf{fl}(f(x_k)),$$

(porównaj z [3, przykład 1.7]). Co więcej, w arytmetyce fl nie można wykluczyć sytuacji, w której implementacja funkcji różnowartościowej f (także bibliotecznej) jest taka, że

$$\mathsf{fl}(f(x_k + h_i)) = \mathsf{fl}(f(x_k)),$$

chociaż $\mathsf{fl}(x_k + h_i) \neq \mathsf{fl}(x_k)$. To także może być przyczyną zaobserwowanego zjawiska.

4. Obliczanie pochodnej z dużą dokładnością

Z wykonanych eksperymentów jak i z analizy przeprowadzonej w poprzednim paragrafie wynika, że numeryczne przybliżanie wartości pochodnej $f'(x)$ przy pomocy ilorazu różnicowego (1.1) nie jest dobrym pomysłem. W większości testów udało się uzyskać dokładność równą jedynie mniej więcej połowie dokładności z jaką wykonywane były obliczenia, a więc ok. 4–5 cyfr dziesiętnych dla typu `Single` i ok. 7–8 cyfr w wypadku typu `Double`.

Nie jest to rezultat satysfakcjonujący. Ale czy mogło być inaczej? Stosując wzór Taylora, łatwo uzasadnić, że

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h).$$

Tak więc, przybliżenie $f'(x)$ ilorazem różnicowym (1.1) obarczone jest błędem proporcjonalnym do h. Dodając do tego specyfikę arytmetyki fl, jasne już staje się dlaczego podejście takie nie jest właściwe.

Jak zatem wyznaczyć numerycznie pochodną z większą dokładnością? Można stosować np. metody związane z interpolacja czy aproksymacją, albo jeszcze bardziej wyrafinowane podejścia. Jak się jednak okazuje istnieją prostsze, a równie skuteczne, metody bazujące jedynie na wzorze Taylora. W paragrafie tym krótko je opisano.

Stosując technikę omówioną na jednym z repetytoriów z analizy numerycznej, tj. wykorzystując odpowiednie rozwinięcia w szereg Taylora, a następnie rozwiązując pewne układy równań liniowych, można wyprowadzić następujące wzory (szczegółowe obliczenia pominięto):

$$
\begin{aligned}
f'(x) &= \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2),\\
f'(x) &= \frac{f(x-2h)-8f(x-h)+8f(x+h)-f(x+2h)}{12h} + \mathcal{O}(h^4),\\
f'(x) &= \frac{1}{60h}\Big(f(x+3h)-9f(x+2h)+45f(x+h)-\\
&\qquad\qquad -45f(x-h)+9f(x-2h)-f(x-3h)\Big)+\mathcal{O}(h^6).
\end{aligned}
$$

Podane wyżej wyrażenia lepiej przybliżają wartość $f'(x)$. Ich błąd jest proporcjonalny do h^2, h^4 i h^6, odpowiednio. Co prawda, aby je wyznaczyć należy obliczyć wartość funkcji f w większej liczbie punktów, ale – jak wynika z przeprowadzonych doświadczeń (patrz dołączony do sprawozdania skrypt `program.mws`) i podanych niżej wykresów – warto ponieść dodatkowy koszt, aby uzyskać większą dokładność.

Poniżej omówiono pokrótce tylko jeden z przeprowadzonych eksperymentów. Niech będzie

$$f_2(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{10}\right)$$

oraz $x_k := -5 + \frac{k}{5}$ $(k = 0, 1, \ldots, 50)$. Do numerycznego przybliżenia wartości pochodnej w punktach x_k, tzn.

$$f_2'(x_k) = \frac{\pi}{10}\cos\left(\frac{\pi x_k}{10}\right) \qquad (k = 0, 1, \ldots, 50),$$

użyto następującego wzoru:

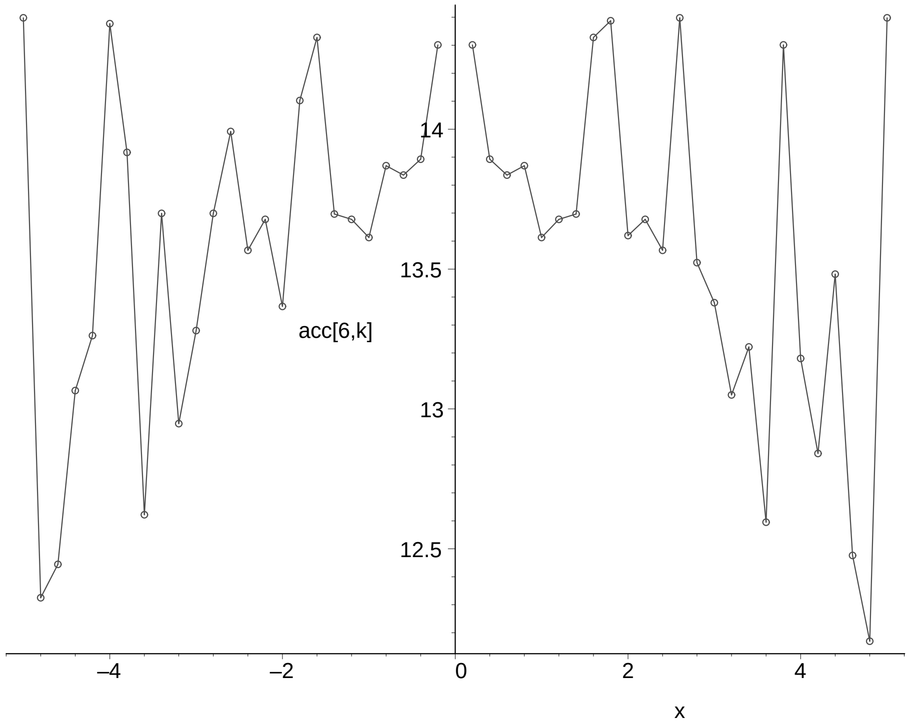
$$df_{2,k}^{[6]} := \frac{f_2(x+3h)-9f_2(x+2h)+45f_2(x+h)-45f_2(x-h)+9_2f(x-2h)-f_2(x-3h)}{60h},$$

przyjmując $h := 2^{-7}$ i wykonując obliczenia w typie podwójnej precyzji.

Rysunkek 5 przedstawia wielkości

$$
\texttt{acc[6,k]} := \begin{cases} -\log_{10}\left|df_{2,k}^{[6]}\right| & \text{dla } k=0 \text{ i } k=50,\\[2ex] -\log_{10}\left|1-\dfrac{df_{2,k}^{[6]}}{f_2'(x_k)}\right| & \text{dla } k=1,2,\ldots,49 \end{cases} \tag{4.1}
$$

(porównaj z (3.1)). Można z niego odczytać, że otrzymane wyniki są lepsze. Udało się uzyskać dokładność ok. 12–14 cyfr dziesiętnych.



RYSUNEK 5. Wielkości (4.1), typ `Double`.

Literatura

[1] A. Björck, G. Dahlquist, *Metody numeryczne*, PWN, 1987.

[2] W. Cheney, D. Kincaid, *Analiza numeryczna*, WNT, 2006.

[3] J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, cz. 1, WNT, 1988.

[4] S. Lewanowicz, *Notatki do wykładu z analizy numerycznej*, Wrocław, 2011.