# CS381: Numerical Computation & Softwares

## Numerical Derivation

Jakramate Bootkrajang

Department of Computer Science
Chiang Mai University

# Quote of the day

"Perseverance will be rewarded!"

*- Ralf Hiptmair -*

# Motivation

- ใช้หาอนุพันธ์ของฟังก์ชันที่ ทราบรูปแบบ แต่อาจคำนวณด้วยมือลำบาก

$$f(x) = \frac{\log(1 + \exp(5x^3))}{\sin(3x) + \cos(\frac{x}{6})}$$

- ใช้หาอนุพันธ์ของฟังก์ชันที่เรา ไม่ทราบรูปแบบ เช่น อยากหาความเร็ว (อนุพันธ์อันดับ 1) หรือความเร่ง (อนุพันธ์อันดับ 2) ของรถเมื่อทราบตำแหน่งของรถ ณ เวลาต่างๆ จากอุปกรณ์ GPS

# Problem of finding derivative [numerically]

**Numerical differentiation**

กำหนดฟังก์ชัน $f$ ซึ่งทราบค่า ณ บางตำแหน่ง ปัญหาของการทำ numerical differentiation คือการคำนวณหาค่าประมาณของ อนุพันธ์ของฟังก์ชันดังกล่าว ($f'$) โดยใช้ค่าของ $f$ ที่ทราบ

# How ?

1 หากเราทราบรูปแบบของฟังก์ชันเราอาจเริ่มจาก สมการพื้นฐานของอนุพันธ์

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

2 หรือหากเราทราบค่า ณ บางตำแหน่งของฟังก์ชัน เราสามารถ interpolate ข้อมูลขึ้นมาก่อนแล้วค่อย หาอนุพันธ์ของ interpolant อีกที

- โดยทั่วไปแล้ว interpolant มักเป็นนิพจน์ที่สามารถหาอนุพันธ์ได้ไม่ยาก

# Simple method

- วิธีที่ซับซ้อนน้อยที่สุดในการประมาณค่าของอนุพันธ์คือการยกนิยามของอนุพันธ์มาใช้ โดยกำหนดให้ $h$ มีค่าน้อยๆ

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

- เช่น การประมาณอนุพันธ์ของ $f(x) = \sin(x) + \cos(x)$ ทำได้โดยคำนวณ

$$f'(x) \approx \frac{\sin(x+0.0001) + \cos(x+0.0001) - \sin(x) - \cos(x)}{0.0001}$$

เมื่อกำหนด $h = 0.0001$

# Forward and Backward approach

- เราเรียกการคำนวณอนุพันธ์แบบใน slide ก่อนหน้า ว่าวิธี forward approach

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

- ทั้งนี้เราสามารถคำนวณอนุพันธ์โดยใช้วิธีที่เรียกว่า backward approach ได้ นั่นคือ

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

# Error of numerical differentiation

- หากเราต้องการทราบว่าการประมาณค่าอนุพันธ์โดยวิธี forward approach แม่นยำมากแค่ไหน
- เราสามารถคำนวณค่า error ที่เกิดขึ้นได้ แสดงฟังก์ชันที่ต้องการหาอนุพันธ์ในรูปของ Taylor's series
- ทบทวน Taylor expansion ของ ฟังก์ชัน $f(x)$ ณ จุด $a$ คือ อนุกรม

$$f(x) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}(x-a) + \frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2 + \frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3 + \dots$$

- ความน่าสนใจของ Taylor's series คือเราสามารถประมาณค่าของฟังก์ชัน $f(x)$ ได้หากทราบ ค่าของฟังก์ชันที่จุด $a$ ค่าอนุพันธ์อันดับ 1 ที่จุด $a$ เป็นต้น

# Truncation error (1/2)

- ก่อนอื่นพิจารณา Taylor expansion ของ ฟังก์ชัน $f(x+h)$

$$f(x+h) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}((x+h)-a) + \frac{f''(a)}{2!}((x+h)-a)^2 + \ldots$$

- หาก expand ณ จุด $a = x$ เราจะได้ อนุกรม

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + \frac{f'(x)}{1!}((x+h)-x) + \frac{f''(x)}{2!}((x+h)-x)^2 + \ldots \\ &= f(x) + \frac{f'(x)}{1!}(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 + \ldots \\ &= f(x) + f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 + \ldots \end{aligned}$$

# Truncation error (2/2)

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

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

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{f''(\xi)}{2!}(h) \text{ where } \xi \in \{x, x+h\}$$

- พจน์ $-\frac{f''(\xi)}{2!}(h)$ คือ error ของการทำ forward differentiation
- ซึ่งมีชื่อเรียกว่า truncatation error - (truncate แปลว่า ตัดตัวท้าย)
- Truncation error is mathematical error. (คำนวณบนกระดาษก็เกิด error นี้)

# Round-off and cancellation errors

- นอกจาก truncation error แล้ว การประมาณอนุพันธ์ด้วยวิธีข้างต้นยังต้องประสบกับปัญหา numerical error
- Numerical error เกิดจากการลบกันของตัวเลขที่มีค่าใกล้เคียงกันสองตัวคือ $f(x+h)$ และ $f(x)$
- ซึ่งเราเรียก error นี้ประกอบด้วย round-off error และ cancellation error

# Tradeoff: Mathematical error vs numerical error

- การจะลด truncation error , $-\frac{f''(\xi)}{2!}(h)$, เราจำเป็นต้องลดค่าของ $h$
- แต่ค่า $h$ ที่น้อยลง ทำให้ $f(x+h)$ และ $f(x)$ ใกล้กันมากขึ้น และเกิด cancellation error ที่มากขึ้น
- ในทางทฤษฎีเราสามารถหาค่า $h$ ที่ทำให้ error ทั้งสองลดน้อยที่สุด โดยจะได้ว่า

$$h^* \approx 2\frac{\sqrt{\epsilon|f(a)|}}{\sqrt{|f''(a)|}}$$

อ่านเพิ่มเติมได้จาก `https://www.uio.no/studier/emner/matnat/math/MAT-INF1100/h08/kompendiet/diffint.pdf` หน้า 8

# A symmetric method

- เราทราบว่าวิธี forward/backward approach มี truncation error เกิดขึ้น
- ในทางทฤษฎีเราสามารถ หาวิธีคำนวณแบบอื่นที่ลด truncation error ได้โดยไม่ต้องลดค่า $h$ ให้มากเกินไป
- แนวทางก็คือ เราจะเอา forward approach กับ backward approach มาใช้ร่วมกัน

# Taylor expansions of $f\,(x + h)$ and $f\,(x - h)$ (1/2)

$$
\begin{aligned}
&f\,(x+h) \\
&= f\,(x) + \frac{f'(x)}{1!}((x+h)-x) + \frac{f''(x)}{2!}((x+h)-x)^2 + \frac{f'''(x)}{3!}((x+h)-x)^3 \,. \\
&= f\,(x) + \frac{f'(x)}{1!}(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 + \frac{f'''(x)}{3!}(h)^3 \ldots \\
&= f\,(x) + \frac{f'(x)}{1!}(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 + \frac{f'''(\xi)}{3!}(h)^3 \\
&f\,(x-h) \\
&= f\,(x) - \frac{f'(x)}{1!}(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 - \frac{f'''(\xi)}{3!}(h)^3
\end{aligned}
$$

# Taylor expansions of $f(x+h)$ and $f(x-h)$ (2/2)

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 + \frac{f'''(\xi_1)}{3!}(h)^3 \quad (1)$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 - \frac{f'''(\xi_2)}{3!}(h)^3 \quad (2)$$

Eq. (1) - Eq. (2) จะได้การหาอนุพันธ์ที่เรียกว่าวิธี symmetric approach

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

# So....

- Truncation error ของ forward/backward approach คือ

$$-\frac{f''(\xi)}{2!}(h)$$

- Truncation error ของ symmetric approach คือ

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

- สังเกตว่า error ของ symmetric approach น้อยกว่า forward/backward approach ที่ค่า $h$ เดียวกัน

เราสามารถหาอนุพันธ์ลำดับที่สูงขึ้นได้จาก Taylor expansions ดังกล่าว เช่น

$$f(x+h) = f(x) + f'(x)(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 + \frac{f'''(\xi_1)}{3!}(h)^3 \tag{3}$$

$$f(x-h) = f(x) - f'(x)(h) + \frac{f''(x)}{2!}(h)^2 - \frac{f'''(\xi_2)}{3!}(h)^3 \tag{4}$$

หากนำ Eq. (3) + Eq. (4) เราจะได้

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

# Differiating via interpolation

- แนวคิดของการหาอนุพันธ์ผ่านการทำ interpolation นั้นค่อนข้างตรงตัวคือ

1. หา interpolant ที่ interpolate ชุดข้อมูลให้ได้ก่อน
2. คำนวณ derivative ของ interpolant โดยตรง (ทำด้วยมือ)

# Approximate $f$ with $Q_n$

- ปกติแล้วการทำ interpolation อาจมี error เกิดขึ้น (อ่านเพิ่มเติมได้จาก Section 3.7 ของ D.Levy)

$$f(x) = Q_n(x) + \epsilon(x)$$

- สมมุติให้ error ดังกล่าวแทนด้วย $\epsilon(x)$

# Approximate $f'$ with $Q_n{}'$

- การประมาณค่าอนุพันธ์ก็มี error เกิดขึ้นด้วยเช่นกัน

$$f'(x) = Q_n{}'(x) + \epsilon'(x)$$

- หากเราใช้ Lagrange interpolation เราจะประมาณอนุพันธ์ของ $f$ ได้โดย

$$\begin{aligned} f'(x) &= \sum_{i=0}^{n} f(x) L_n'(x) + \epsilon'(x) \\ &\approx \sum_{i=0}^{n} f(x) L_n'(x) \end{aligned}$$

# Example (1/3)

- สมมุติว่า GPS ของรถโดยสาร ณ เวลา $x_0$ อ่านค่าได้ $f(x_0)$ และ เวลา $x_1$ อ่านค่าได้ $f(x_1)$ ตามลำดับ นั่นคือ $f$ แสดงฟังก์ชันของระยะทาง

- หากต้องการหาความเร็วของรถโดยสารดังกล่าว เราสามารถทำได้โดยการหา $f'(x)$

- ขั้นแรกเราจะหา Lagrange interpolant ที่ interpolate ข้อมูลก่อน

$$Q_1(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x)$$

# Example (2/3)

- โดยที่

$$L_0(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} \text{ and } L_1(x) = \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}$$

- จากนั้นหาอนุพันธ์ของทั้งคู่

$$L_0'(x) = \frac{1}{x_0 - x_1} \text{ and } L_1'(x) = \frac{1}{x_1 - x_0}$$

# Example (3/3)

- ดังนั้นแล้วเราจะได้ว่า

$$
\begin{aligned}
f'(x) \approx Q_1{}'(x) &= f(x_0)L_0{}'(x) + f(x_1)L_1{}'(x) \\
&= \frac{f(x_0)}{x_0 - x_1} + \frac{f(x_1)}{x_1 - x_0} \\
&= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}
\end{aligned}
$$

- หากกำหนดให้ $x_1 = x_0 + h$ เราจะได้ว่า

$$
f'(x) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \qquad \leftarrow \text{forward approach!!}
$$

# Exercises

- Derive an equation to approximate the derivative via interpolation using four points.
- Implement a method to approximate the first and the second derivative of a function.

# References

- Introduction to numerical analysis by Doron Levy
- Differentiation and Integration `https://www.uio.no/studier/emner/matnat/math/MAT-INF1100/h08/kompendiet/diffint.pdf`