NUMERISK DIFFERENTIATION

Billeder:

Forside: ©iStock.com/iunewind
Side 5: ©iStock.com/cienpies
Desuden egne illustrationer

Numerisk differentiation

I en del situationer har man ikke en forskrift for en funktion. Det kunne for eksempel være et forsøg, hvor man har en række målepunkter. Man kunne da tro, at man er afskåret fra at *differentiere*, altså finde tangenthældninger. Det er heldigvis ikke tilfældet: man kan benytte *numerisk differentiation*. For at det skal kunne lykkes på en fornuftig måde, skal datapunkter helst ligge ret tæt og ikke være behæftet med for store usikkerheder eller støj. Lad os tage udgangspunkt i en funktion og forsøge at udvikle en teknik, som giver tilnærmede værdier for differentialkvotienterne i en række punkter.

Af definitionen på differentiabilitet ved vi, at en funktion er differentiabel, hvis *differenskvotienten* har en grænseværdi for $\Delta x \to 0$, og differentialkvotenten er da lig med den pågældende grænseværdi:

(1) $$\frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x} \to f'(x_0) \quad \text{for} \quad \Delta x \to 0$$

Sætning 1

Hvis *f* er en funktion, som er differentiabel i x_0, så gælder følgende:

(2) $$\frac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0-\Delta x)}{2\cdot\Delta x} \to f'(x_0) \quad \text{for} \quad \Delta x \to 0$$

Bevis: Fra definitionen af differentiabilitet ved vi, at grænseværdien af differenskvotienten skal være den samme, uanset om Δx nærmer sig til 0 fra højre eller fra venstre. I stedet for at sige at Δx går mod 0 fra venstre, kan vi lige så godt udskifte Δx med $-\Delta x$ i (1), uden at det ændrer på grænseværdien. Vi har altså:

(3) $$\frac{f(x_0-\Delta x)-f(x_0)}{-\Delta x} \to f'(x_0) \quad \text{for} \quad \Delta x \to 0$$

Hvis vi ganger (1) med $\frac{1}{2}$ og ganger (3) med $\frac{1}{2}$ og lægger sammen, så får vi umiddelbart (2). Detaljerne overlades til læseren.

□

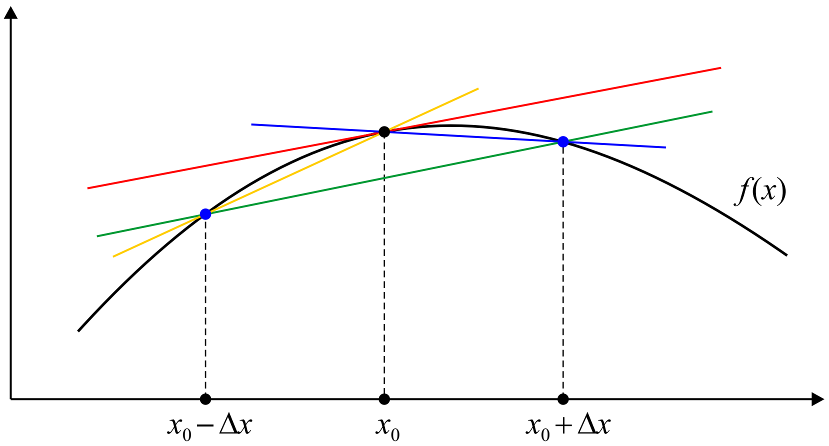
Grunden til at vi i det følgende vil bruge grænseværdien (2) fremfor grænseværdien (1) er, at (2) normalt *konvergerer* hurtigst af de to. Hermed menes, at udtrykket på venstre side i (2) normalt nærmer sig hurtigere til differentialkvotienten, når $\Delta x \to 0$, end den normale differenskvotient gør. Situationen kan ses på grafen på næste side. Vi ønsker en tilnærmet værdi for differentialkvotienten $f'(x_0)$ i x_0, dvs. en værdi for hældningen af den røde tangent. Her vil udtrykket på venstre side i (2), som grafisk er hældningen af den grønne sekant, normalt være en bedre tilnærmelse til tangentens hældning, end differenskvotienten er. Denne påstand virker også sandsynlig, når man kigger på grafen på næste side.

(4) $f'(x_0) \;=\;$ hældning af den røde linje

(5) $\dfrac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0)}{\Delta x} \;=\;$ hældning af den blå linje

(6) $\dfrac{f(x_0)-f(x_0-\Delta x)}{\Delta x} \;=\;$ hældning af den gule linje

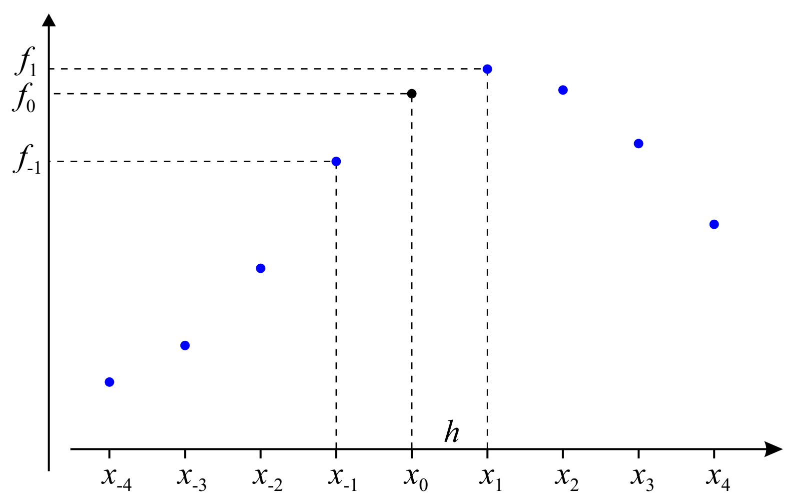
(7) $\dfrac{f(x_0+\Delta x)-f(x_0-\Delta x)}{2\cdot\Delta x} \;=\;$ hældning af den grønne linje



Øvelse 2

Forklar hvorfor (7) er rigtigt, dvs. at udtrykket er lig hældningen af sekanten gennem de to punkter på hver side af x_0.

Vi vil i vore metoder kræve, at datapunkternes x-værdier ligger ligeligt fordelt hen ad x-aksen, dvs. at der er samme *skridtlængde* overalt. Den vil vi betegne med h. Den kommer til at svare til Δx ovenfor. For at gøre det mere overskueligt, vælger man ofte at ændre notationen: x-koordinaten for det punkt, vi er i færd med at betragte, vil vi betegne med x_0. Punkterne til højre for skal have x-koordinater $x_1, x_2, \ldots$, mens dem til venstre for skal have x-koordinater $x_{-1}, x_{-2}, \ldots$



Vi vil endvidere lade f_0' betegne differentialkvotienten i x_0. Med disse nye betegnelser kommer (5), (6) og (7) til at give anledning til følgende numeriske metoder til bestemmelse af tilnærmede værdier for differentialkvotienten i x_0:

(8) $$f_0' \approx \frac{f_1 - f_0}{h}$$ (*Forward difference*)

(9) $$f_0' \approx \frac{f_0 - f_{-1}}{h}$$ (*Backward difference*)

(10) $$f_0' \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}$$ (*Central difference*)

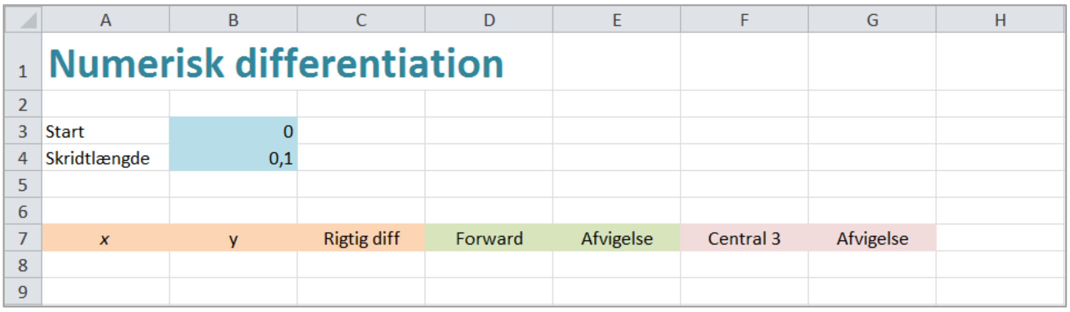
Metodernes respektive navne på engelsk er angivet i parentes. Vi ser, at forward difference involverer det betragtede punkt og det næste punkt. Backward difference involverer det betragtede punkt og det forrige punkt. Central difference involverer både det næste og det forrige punkt, men ikke det aktuelle punkt selv. Central difference metoden er normalt klart den mest nøjagtige af de tre.

I det næste afsnit vil vi i programmet Excel teste metoderne forward difference og central difference på data fra en kendt funktion. I det efterfølgende afsnit vil vi se på numeriske metoder anvendt på rigtig data fra et forsøg i programmet Logger Pro. Endelig vil vi i sidste afsnit med titlen "Taylorpolynomier og andet godt" otale andre numeriske metoder og hvordan man kan vurdere, hvor nøjagtige metoderne er. Sidste afsnit er ikke specielt rettet mod gymnasieelever, da sværhedsgraden er ret høj.

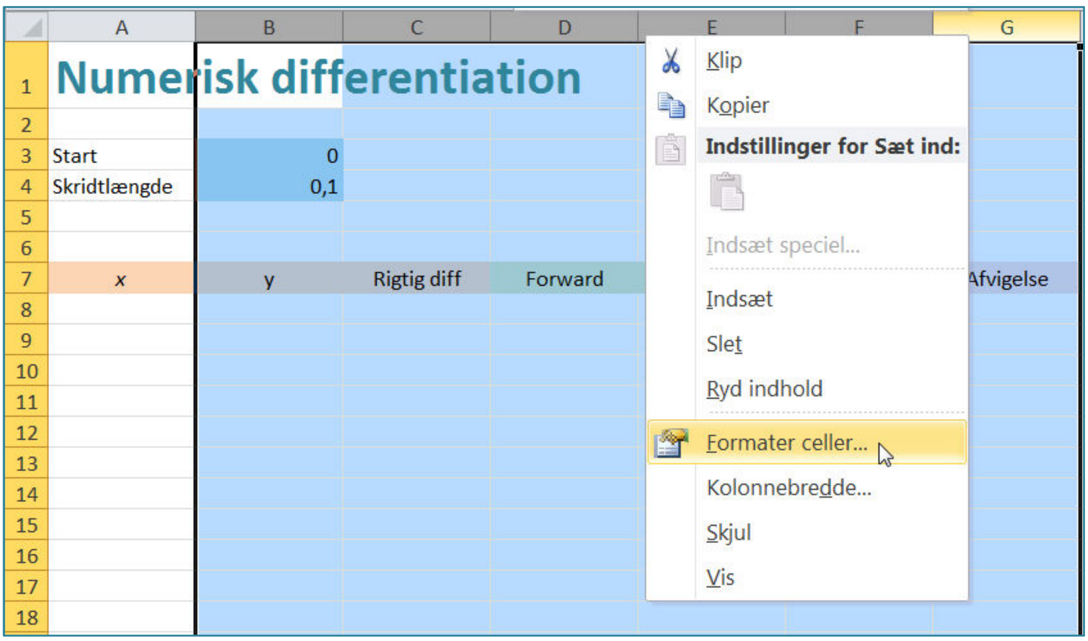
Eksperiment i Excel med data fra kendt funktion

I denne øvelse skal du teste forskellen på, hvor god metoden *central difference* er sammenlignet med metoden *forward difference* i tilfældet, hvor data følger funktionsværdierne for en kendt funktion. Det sætter os nemlig i stand til at sammenligne de numeriske værdier for differentialkvotienterne med de rigtige. Programmet Microsoft Excel er meget velegnet til opgaven. Nedenfor vil jeg give detaljer til, hvordan det udføres for de læsere, som ikke er så rutinerede i brugen af Excel. Vi vil undersøge funktionen $f(x) = x \cdot \sin(x)$. Det er et mere eller mindre tilfældigt valg. Vi betragter funktionen i intervallet $[0,7]$ og vælger en skridtlængde på $0{,}1$.

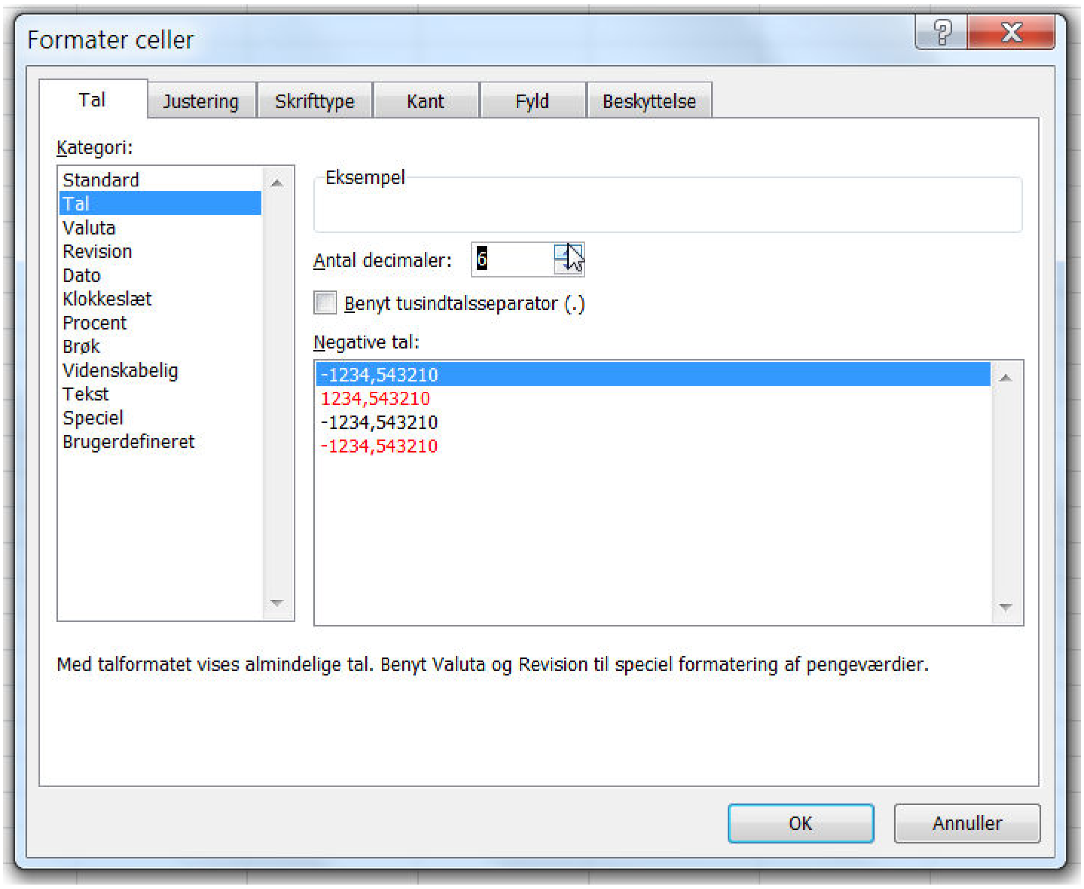
a) Åben et regneark og skriv i felterne, så det ser ud nogenlunde som nedenfor. Baggrundsfarverne hjælper til at give overblik.



b) Vi ønsker at alle tal, som står i kolonnerne fra B til og med G skal vises med 6 decimaler. Det klares ved at markere de seks kolonner i den grå vandrette linje med kolonne bogstaverne og derefter højreklikke, mens cursoren befinder sig et sted over det markerede område. I den fremkomne kontekstmenu vælges *Formater celler…*.

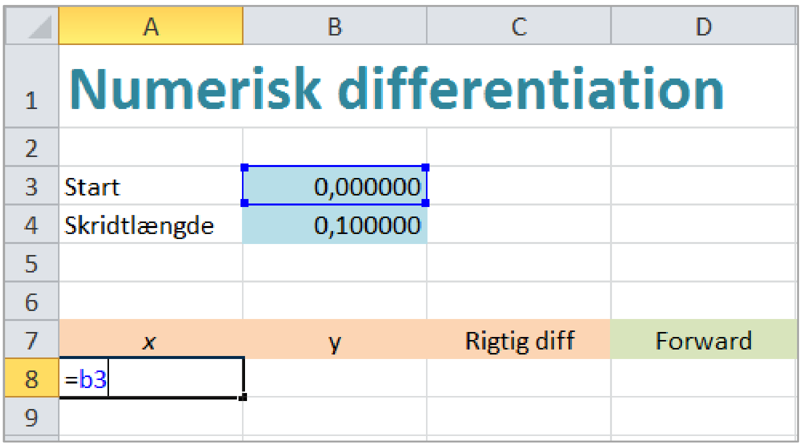


c) Under fanen *Tal* og kategorien *Tal* vælges antal decimaler til 6. Afslut med *OK*.



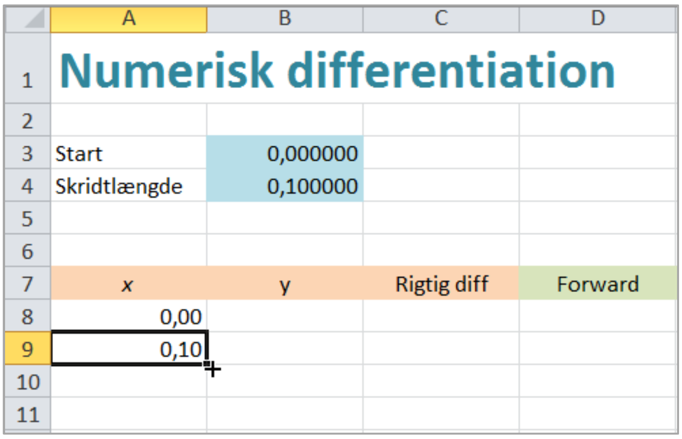
d) I kolonne A gør du det samme, bortset fra at antal decimaler sættes til 2.

e) Startværdien for x'erne står i felt B3 og skridtlængden står i felt B4. Grunden til at de er skrevet ovenfor det egentlige regneark er, at det så bliver nemmere at foretage ændringer i disse værdier, hvis vi senere vil foretage andre undersøgelser. Start med at skrive =B3 i feltet A8 og tryk **Enter**. Husk at når man skriver et lighedstegn som det første i et felt, så ved Excel, at man er i gang med at skrive en *formel*.



f) I felt B9 skrives formlen =A8+$B$4 og der afsluttes med **Enter**.

g) Vi skal nu til at *nedkopiere*. Det betyder, at vi sparer arbejdet med at gentage formlerne i hvert felt fra A10 til A78. Bemærk, at det var vigtigt, at vi i formlen i felt A9 anbragte dollartegn, da det sikrer at feltet B4 ikke ændrer sig ved nedkopiering. Derimod skal feltet A8 i formlen ændres til A9, A10, etc. når vi nedkopierer. Derfor ingen dollartegn her! Man nedkopierer ved at lade cursoren vandre ned i højre hjørne af feltet indtil cursoren bliver til et sort plus-tegn. Når cursoren ser således ud, trækker du nedad ind til og med felt A78.



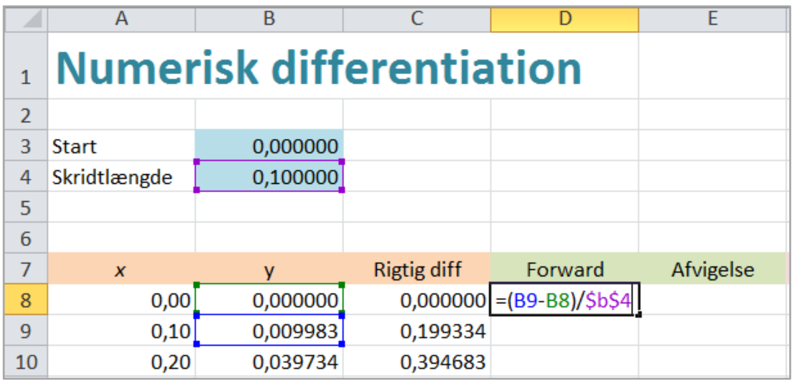
	A	B	C	D
1	Numerisk differentiation			
2				
3	Start	0,000000		
4	Skridtlængde	0,100000		
5				
6				
7	x	y	Rigtig diff	Forward
8	0,00			
9	0,10			
10				
11				

h) Du har nu tallene fra 0 til 7 i skrift på 0,1 i kolonne A. Vi skal derefter til kolonne B. Her ønsker vi de tilhørende funktionsværdier for funktionen $f(x) = x \cdot \sin(x)$. Anbring cursoren i feltet B8 og skriv formlen =A8*sin(A8) og afslut med **Enter**. Husk at feltet A8 indeholder *x*-værdien.

i) Nedkopier feltet B8 indtil felt B78.

j) Vi skal have de korrekte differentialkvotienter i kolonne C. Vi har på forhånd regnet ud, at $f'(x) = \sin(x) + x \cdot \cos(x)$. Derfor skriver du i feltet C8 følgende formel: =sin(A8)+A8*cos(A8), trykker **Enter** og nedkopierer derefter til feltet C78.

k) Vi skal nu have udregnet værdierne for differentialkvotienterne beregnet ved hjælp af *forward difference* metoden. I felt D8 skriver du formlen =(B9-B8)/$B$4, trykker **Enter** og nedkopierer derefter til feltet D77 (ikke D78!).



	A	B	C	D	E
1	Numerisk differentiation				
2					
3	Start	0,000000			
4	Skridtlængde	0,100000			
5					
6					
7	x	y	Rigtig diff	Forward	Afvigelse
8	0,00	0,000000	0,000000	=(B9-B8)/b4	
9	0,10	0,009983	0,199334		
10	0,20	0,039734	0,394683		

l) Bemærk lige fra forrige punkt, at formlen =(B9-B8)/$B$4 er logisk: Den tilnærmede værdi for differentialkvotienten i en given *x*-værdi er forskellen mellem funktionsværdien et skridt længere fremme og funktionsværdien i den aktuelle x-værdi og så divideret med skridtlængden, som står i feltet B4. Men vi skal have beregnet afvigelsen i forhold til den rigtige værdi for differentialkvotienten. Derfor skriver du i feltet E8 formlen =D8-C8, trykker **Enter** og nedkopierer ned til E77.

	A	B	C	D	E	F
1	Numerisk differentiation					
2						
3	Start	0,000000				
4	Skridtlængde	0,100000				
5						
6						
7	*x*	y	Rigtig diff	Forward	Afvigelse	Central 3
8	0,00	0,000000	0,000000	0,099833	=D8-C8	
9	0,10	0,009983	0,199334	0,297505		
10	0,20	0,039734	0,394683	0,489222		
11	0,30	0,088656	0,582121	0,671113		

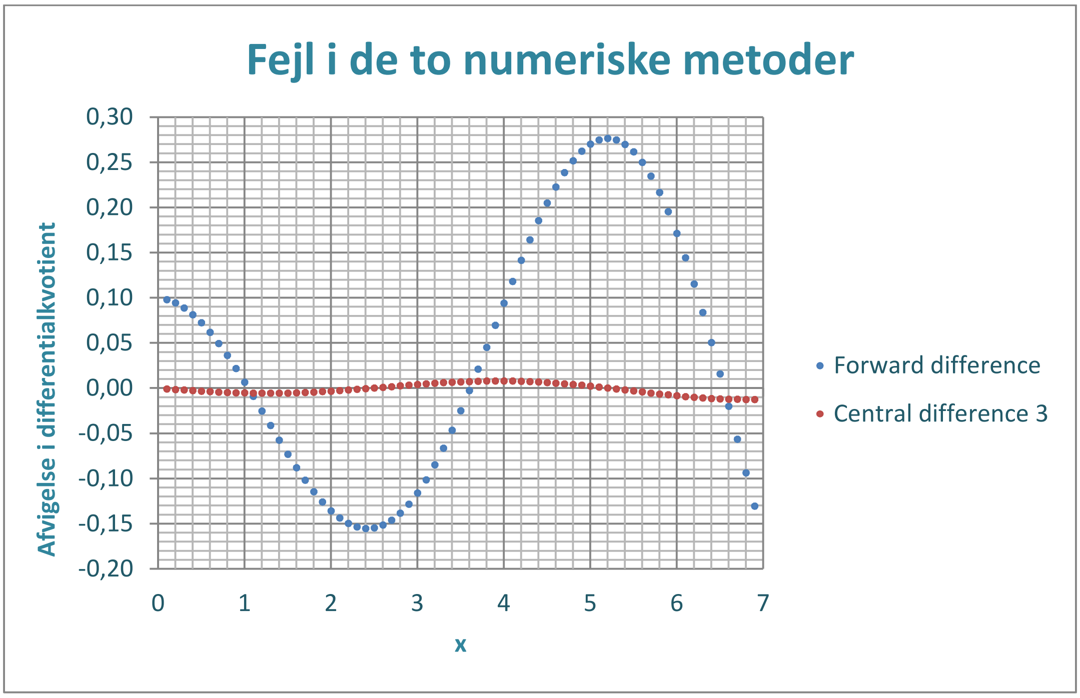
m) Vi er nu klar til den numeriske metode kaldet *central difference*, som vi formoder e r mere nøjagtig end forward difference metoden. Bemærk i øvrigt, at der er tilføjet et 3-tal i navnet. Det skyldes, at der findes en central difference metode for hvert ulige tal. I de metoder med højere nummer medtages blot flere funktionsværdier på højre og venstre side af den aktuelle *x*-værdi. I feltet F9 (ikke F8!) skriver du følgende formel: =(B10-B8)/(2*$B$4), trykker på **Enter** og nedkopierer til feltet F77. Grunden til, at du skal starte i feltet F9 og ikke allerede i felt F8 er naturligvis, at der ikke er nogen funktionsværdi *før* den første *x*-værdi, og det kræves jo af metoden. Så vi starter altså i næste *x*-værdi!

	A	B	C	D	E	F	G
1	Numerisk differentiation						
2							
3	Start	0,000000					
4	Skridtlængde	0,100000					
5							
6							
7	*x*	y	Rigtig diff	Forward	Afvigelse	Central 3	Afvigelse
8	0,00	0,000000	0,000000	0,099833	0,099833		
9	0,10	0,009983	0,199334	0,297505	0,098171	=(B10-B8)/(2*$B$4)	
10	0,20	0,039734	0,394683	0,489222	0,094539		
11	0,30	0,088656	0,582121	0,671113	0,088992		
12	0,40	0,155767	0,757843	0,839454	0,081612		

n) Tilsvarende som under punkt l), kan du nu bestemme afvigelserne ved i feltet G9 af skrive formlen =F9-C9 og derefter nedkopiere …

o) Nu kan du inspicere og sammenligne fejlene i de to numeriske metoder i tilfældet med denne funktion ved at kigge i tallene i kolonne E og G. Det kan dog give et større overblik, hvis man laver en graf over fejlene som funktion af x-værdien. Det kan du gøre ved at markere alle felterne fra A9 til og med A77, holde **Ctrl**-tasten nede, mens du også markerer felterne fra E9 til og med E77 og felterne G9 til og med G77 og derefter vælge menuen *Indsæt* > *Punktdiagram* (kun med datamærker). Så får du en meget visuel indikation, at metoden central difference 3 er meget mere nøjagtig end forward difference. Efter lidt formatering og retten til, kan det komme til at se ud som nedenfor …

	A	B	C	D	E	F	G
1	**Numerisk differentiation**						
2							
3	Start	0,000000					
4	Skridtlængde	0,100000					
5							
6							
7	*x*	y	Rigtig diff	Forward	Afvigelse	Central 3	Afvigelse
8	0,00	0,000000	0,000000	0,099833	0,099833		
9	0,10	0,009983	0,199334	0,297505	0,098171	0,198669	-0,000665
10	0,20	0,039734	0,394683	0,489222	0,094539	0,393364	-0,001319
11	0,30	0,088656	0,582121	0,671113	0,088992	0,580167	-0,001954
12	0,40	0,155767	0,757843	0,839454	0,081612	0,755284	-0,002559
13	0,50	0,239713	0,918217	0,990727	0,072510	0,915091	-0,003126
14	0,60	0,338785	1,059844	1,121669	0,061825	1,056198	-0,003646

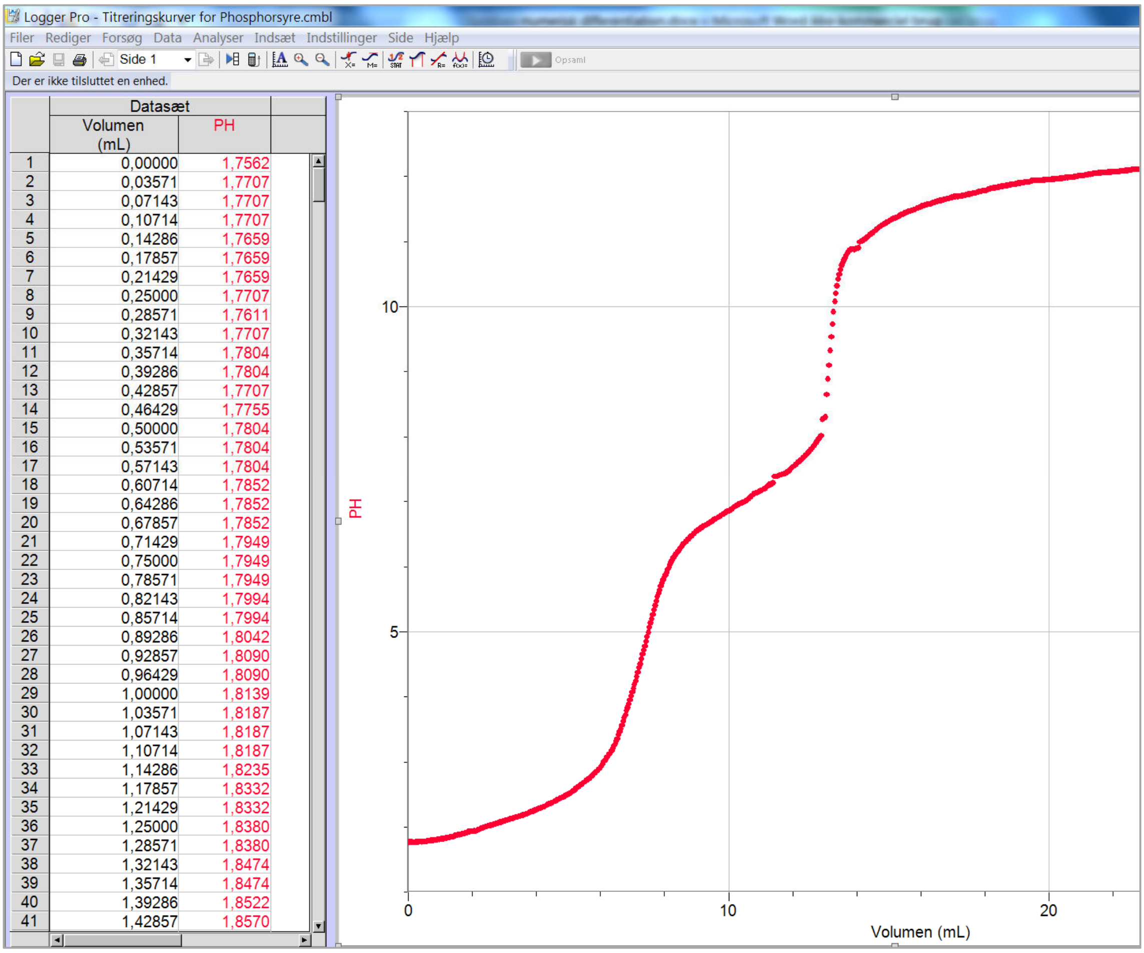


p) Man kan naturligvis også ønske at tegne grafen for de numeriske differentialkvotienter som funktion af x-værdien. Det kan gøres på lignende måde som under punkt o). Detaljerne overlades til læseren.

Analyse af eksperimentel data med støj i Logger Pro

I mange anvendelser af numerisk differentiation har man blot en liste af datapunkter fra et forsøg. Udover at disse datapunkter ikke nødvendigvis behøver følge en teoretisk kurve, er de desuden ofte behæftet med støj/usikkerhed. Vi kan dog gøre brug af numerisk differentiation alligevel. Hvilken metode, der er mest velegnet, afhænger dog af datapunkternes forløb og graden af støj. Der findes i øvrigt adskilligt flere metoder til bestemmelse af numeriske værdier for differentialkvotienter end de tre, der er omtalt tidligere i dette dokument.

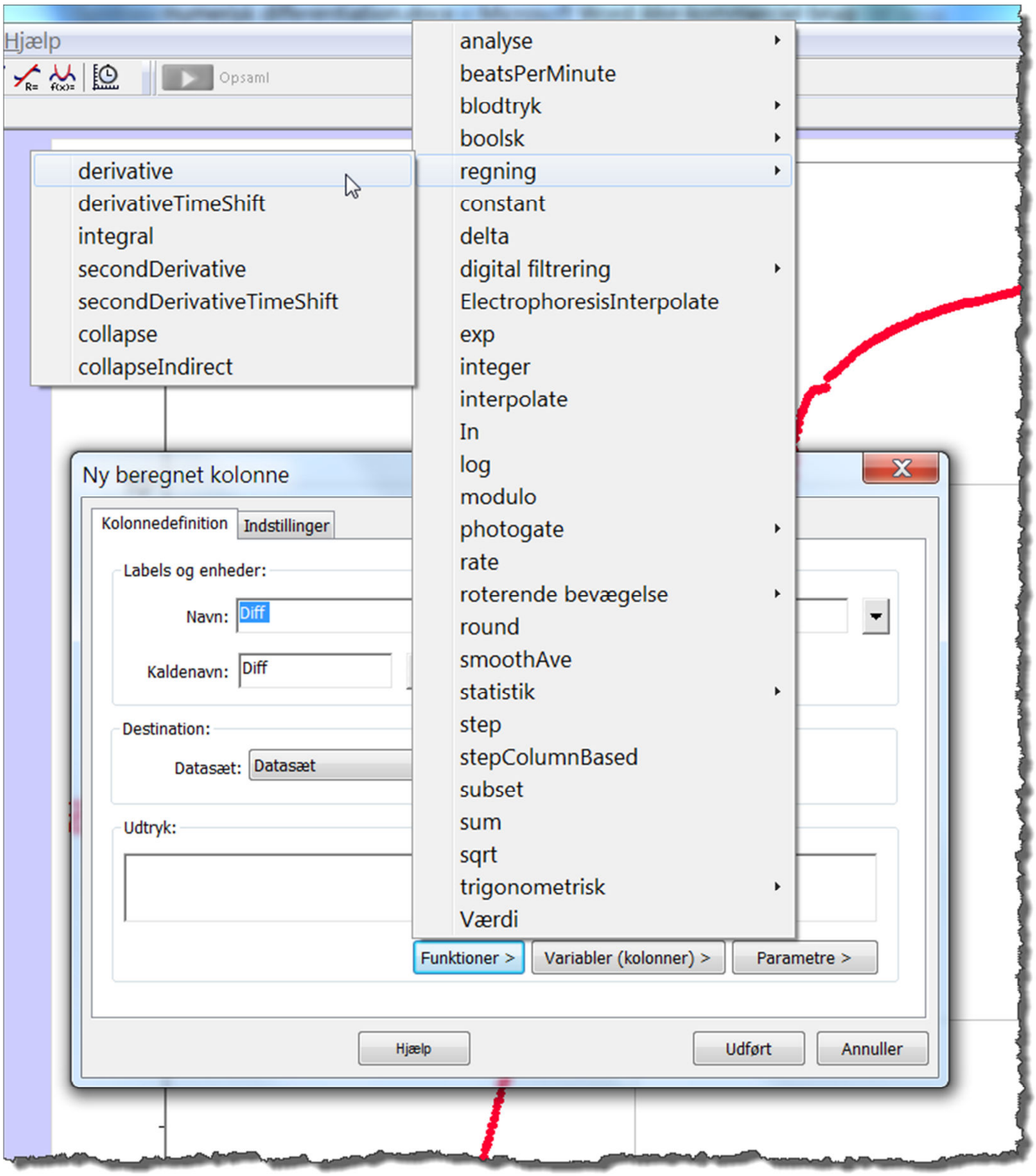
Lad os sige, at vi har optaget målinger af PH-værdien under en titreringsøvelse, hvor vi løbende tilsætter dråber af NaOH til en opløsning af H_3PO_4. Vi ønsker at bestemme *ækvivalenspunktet* så nøjagtigt som muligt. Dette punkt findes, hvor hældningskoefficienten på kurven er størst mulig. Man indser, at det svarer til at finde det sted, hvor differentialkvotienten har maksimum. I det følgende antages, at data er optaget ved hjælp af for eksempel en PH-elektrode og en dråbetæller tilsluttet en LabQuest, samt at data er registreret i de to første søjler i software programmet *Logger Pro*.



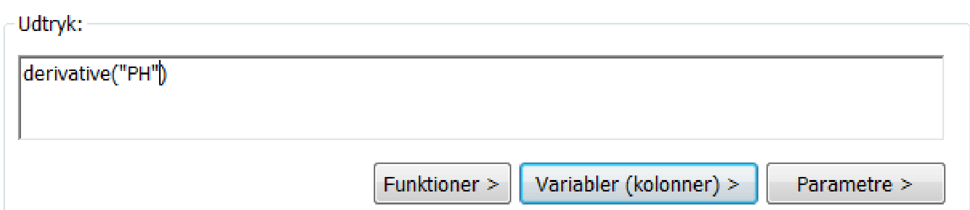
Logger Pro har indbygget faciliteter til numerisk differentiation:

a) Vælg menuen *Data* > *Ny beregnet kolonne*… I den fremkommende dialogboks anfører du navne. Dernæst trykkes på knappen *Funktioner*.

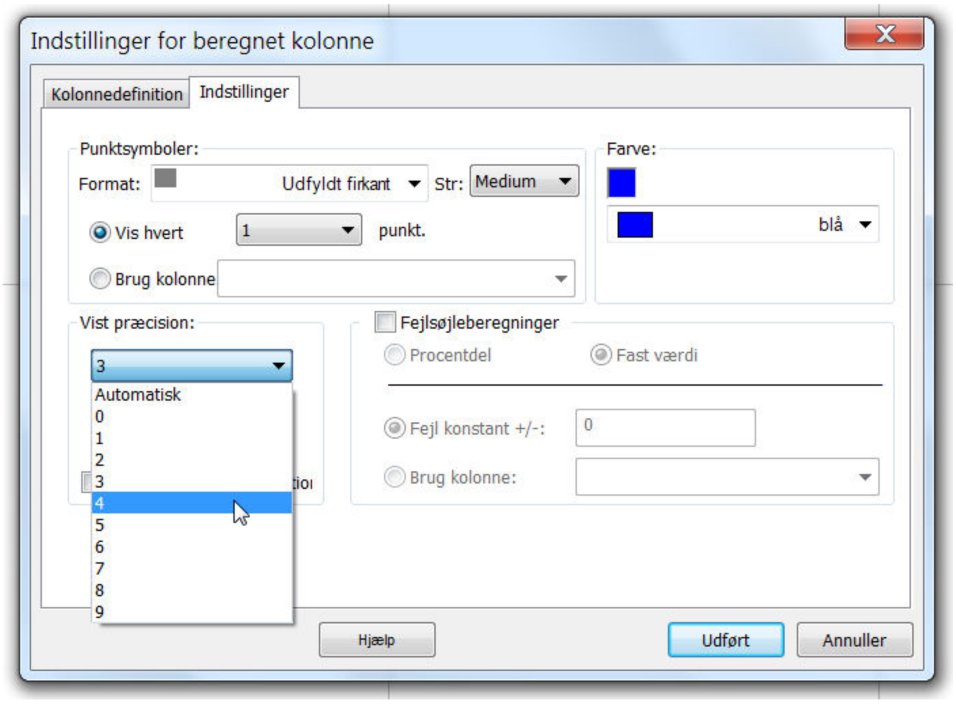
b) I funktionsmenuen vist nedenfor vælges punktet *regning* > *derivative*. Sidstævnte er det engelske ord for differentialkvotient.



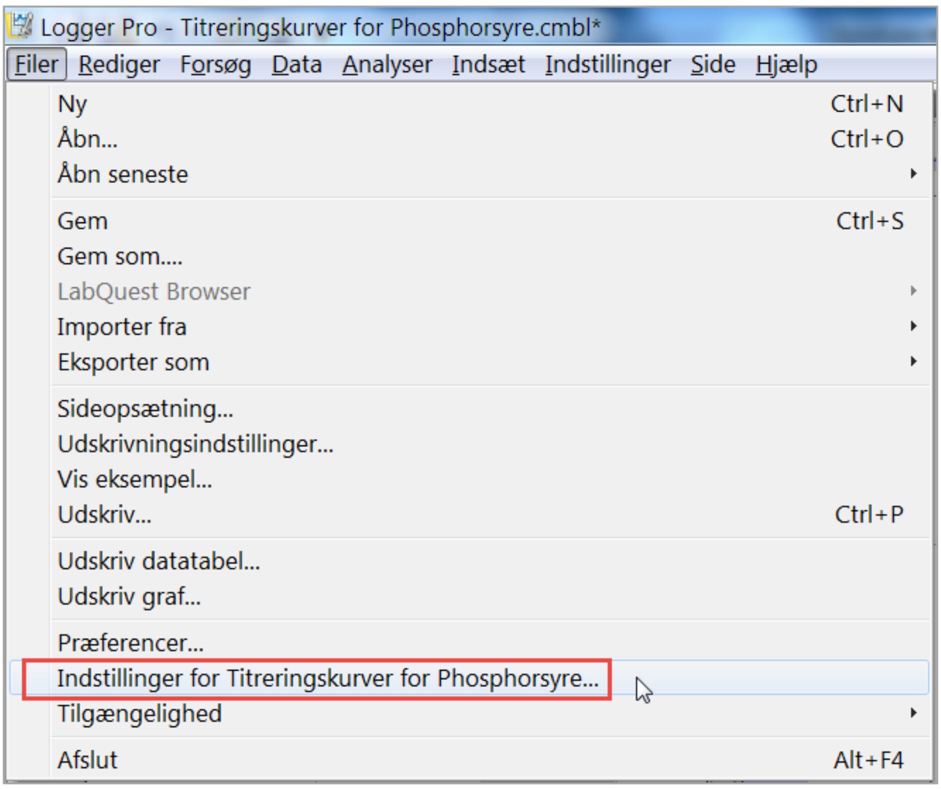
c) Efter punkt b) er der skrevet følgende i feltet *Udtryk* i dialogboksen: derivative(). Mens cursoren står midt mellem parenteserne, skal du have fortalt, hvad der skal differentieres. Det kan gøres ved at trykke på knappen *Variabler*, hvorefter der vælges "PH" i dropdown-menuen – da det jo er navnet på vore funktionsværdier! Herefter skulle det gerne se således ud i feltet *Udtryk*:



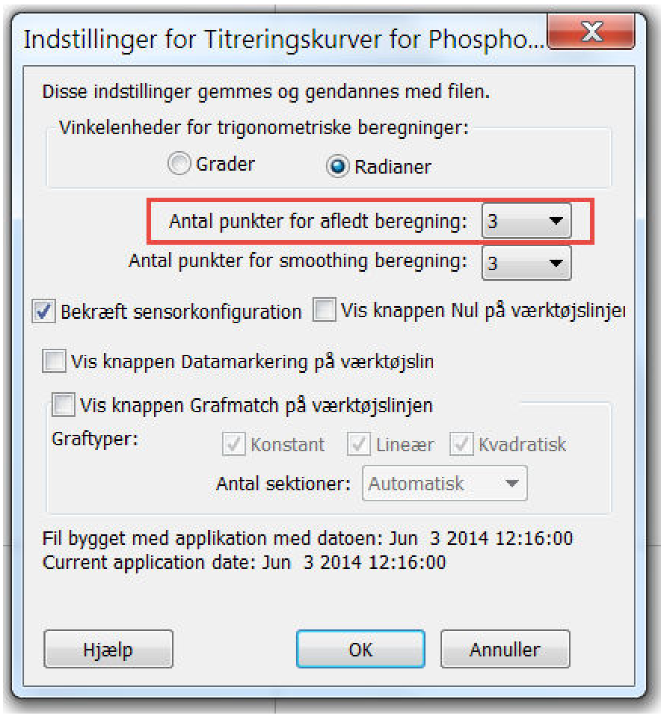
d) Vi skal have valgt det antal decimaler, som tallene i vores nye kolonne skal vises med. Tryk på fanen *Indstillinger* og vælg mindst 4, som vist nedenfor. Afslut ved at trykke på knappen *Udført*.



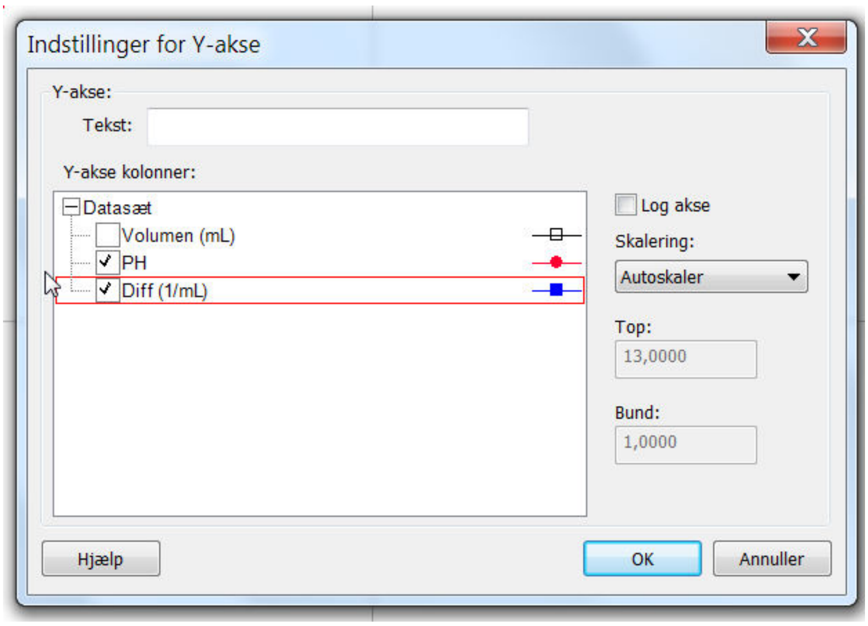
e) Du skal nu vælge hvilken numerisk metode, som du vil bruge til at differentiere med. Det gøres i menuen *Filer* > *Indstillinger for* efterfuldt af navnet på filen.



f) Hvis du som nedenfor vælger 3 i dropdown-menuen for *Antal punkter for afledt beregning*, så anvendes faktisk metoden *central difference 3*, som vi har behandlet tidligere i denne note. Hvis du gerne vil overbevise dig om rigtigheden heri, kan du jo for eksempel kopiere værdierne fra de to første søjler i Logger Pro over i et Excel regneark og så selv udregne differentialkvotienterne ved hjælp af central difference 3 metoden for at se, at det giver det samme som Logger Pro giver i tredje kolonne - som omtalt i afsnittet *Eksperiment i Excel med data fra kendt funktion*.

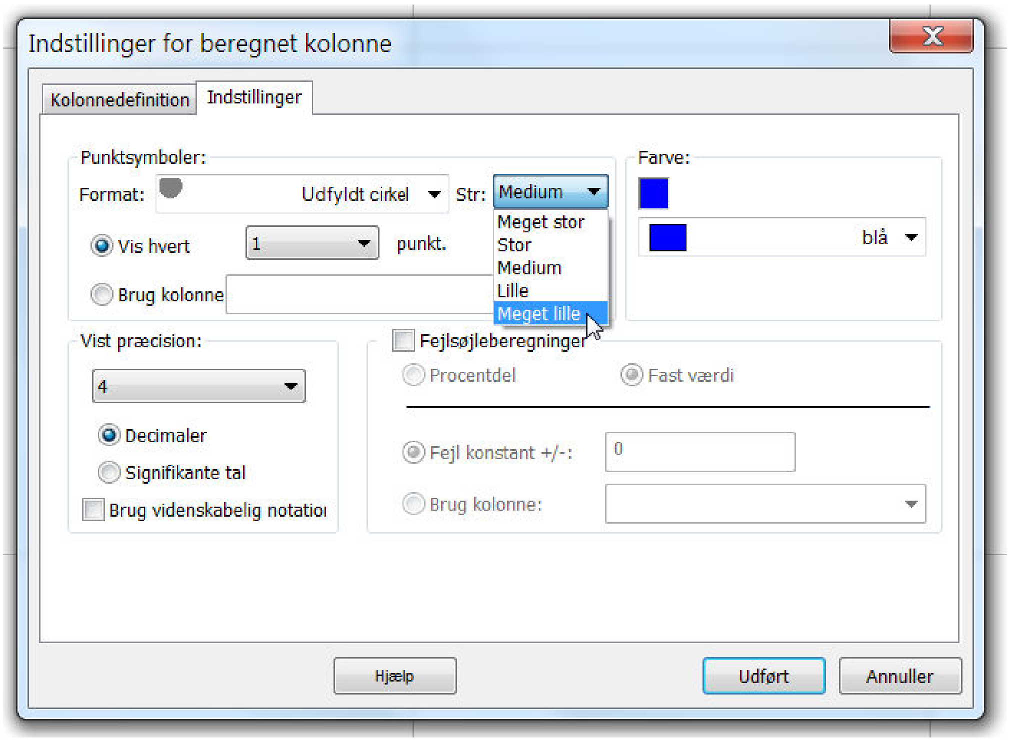


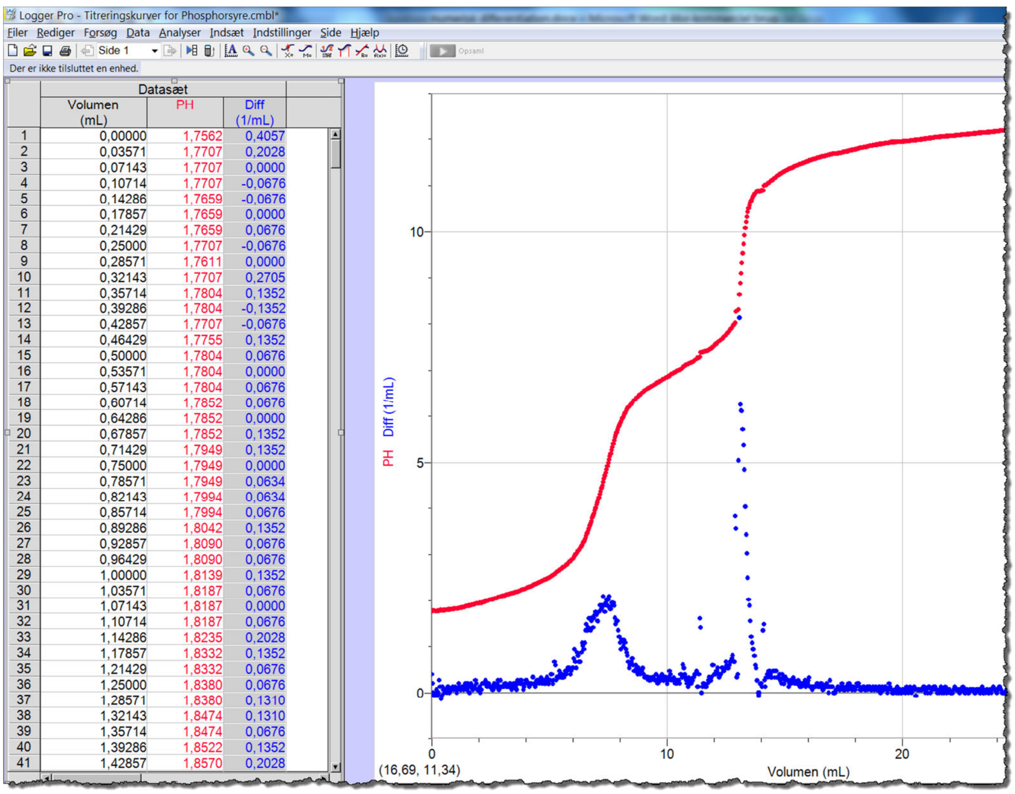
g) Du mangler at få vist grafen for differentialkvotienterne. Det gøres meget nemt i Logger Pro ved at klikke et sted på anden-aksen. Herved får du adgang til en lille menu, hvor du vælger punktet *Mere…*. I den nye dialogboks skal du afkrydse feltet *Diff*, som jo er navnet på vores kolonne med differentialkvotienter!



h) Når du har afsluttet med *OK*, får du grafen for differentialkvotienterne vist sammen med grafen for PH værdierne.

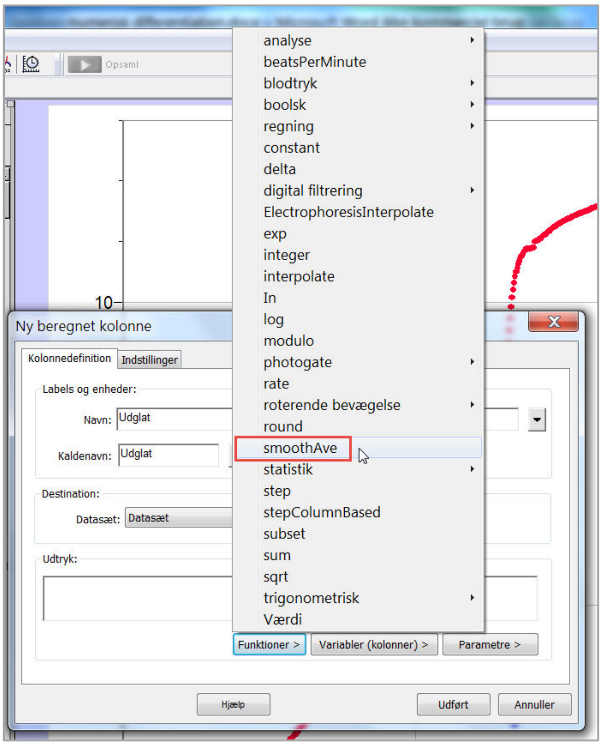
i) Datapunkterne i den nye graf kan synes noget store. Det kan heldigvis ændres ved at dobbeltklikke på overskriften i kolonne 3. Herved popper en dialogboks op, hvor du kan indstille datapunkterne til en rund cirkel og størrelsen af punkterne som *Meget lille*. Afslut med at trykke på knappen *Udført*.



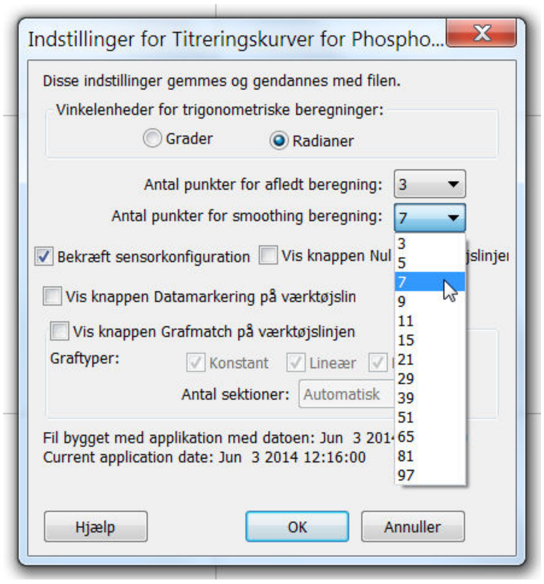


j) Ækvivalenspunkterne kan nu nemmere aflæses, ved at kigge på den differentierede graf. Bemærk, at du sagtens kan ombestemme dig og vælge en anden numerisk metode ved at gå ind i menuen *Filer* > *Indstillinger for…*

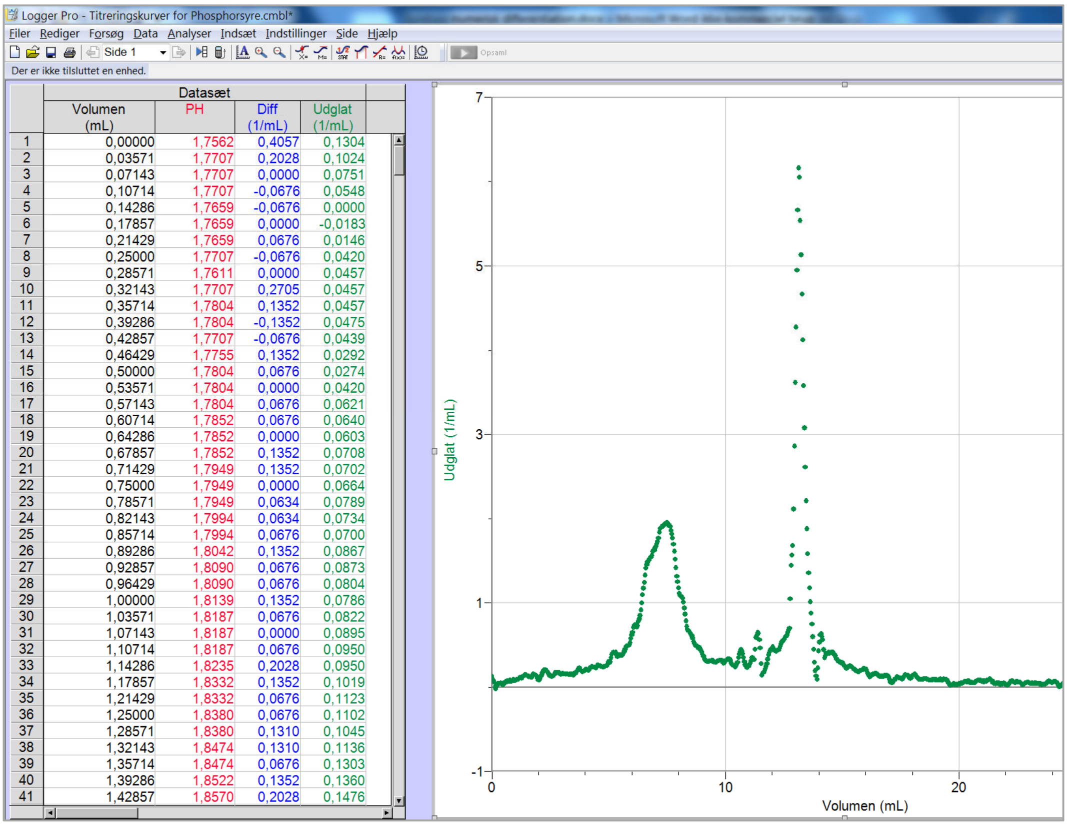
k) Hvis støjen er så stor, at man ikke synes de numeriske metoder er tilstrækkelige, kan man også foretage *udglatning*. Man kan for eksempel lave en ny beregnet kolonne og kalde den "Udglat". Tryk på knappen *Funktioner* og vælg *smoothAVE*. Tryk derefter på *Variabler* knappen og vælg *Diff* var det er navnet på den kolonne, vi ønsker udglattet.



l) Bemærk, at du kan styre graden af udglatning via menuen *Filer* > *Indstillinger for…* under punktet *Antal punkter for smoothing beregning*:



m) Herefter kan du nemt få vist den udglattede graf ved at klikke på anden-aksen …



	Datasæt			
	Volumen (mL)	PH	Diff (1/mL)	Udglat (1/mL)
1	0,00000	1,7562	0,4057	0,1304
2	0,03571	1,7707	0,2028	0,1024
3	0,07143	1,7707	0,0000	0,0751
4	0,10714	1,7707	-0,0676	0,0548
5	0,14286	1,7659	-0,0676	0,0000
6	0,17857	1,7659	0,0000	-0,0183
7	0,21429	1,7659	0,0676	0,0146
8	0,25000	1,7707	-0,0676	0,0420
9	0,28571	1,7611	0,0000	0,0457
10	0,32143	1,7707	0,2705	0,0457
11	0,35714	1,7804	0,1352	0,0457
12	0,39286	1,7804	-0,1352	0,0475
13	0,42857	1,7707	-0,0676	0,0439
14	0,46429	1,7755	0,1352	0,0292
15	0,50000	1,7804	0,0676	0,0274
16	0,53571	1,7804	0,0000	0,0420
17	0,57143	1,7804	0,0676	0,0621
18	0,60714	1,7852	0,0676	0,0640
19	0,64286	1,7852	0,0000	0,0603
20	0,67857	1,7852	0,1352	0,0708
21	0,71429	1,7949	0,1352	0,0702
22	0,75000	1,7949	0,0000	0,0664
23	0,78571	1,7949	0,0634	0,0789
24	0,82143	1,7994	0,0634	0,0734
25	0,85714	1,7994	0,0676	0,0700
26	0,89286	1,8042	0,1352	0,0867
27	0,92857	1,8090	0,0676	0,0873
28	0,96429	1,8090	0,0676	0,0804
29	1,00000	1,8139	0,1352	0,0786
30	1,03571	1,8187	0,0676	0,0822
31	1,07143	1,8187	0,0000	0,0895
32	1,10714	1,8187	0,0676	0,0950
33	1,14286	1,8235	0,2028	0,0950
34	1,17857	1,8332	0,1352	0,1019
35	1,21429	1,8332	0,0676	0,1123
36	1,25000	1,8380	0,0676	0,1102
37	1,28571	1,8380	0,1310	0,1045
38	1,32143	1,8474	0,1310	0,1136
39	1,35714	1,8474	0,0676	0,1303
40	1,39286	1,8522	0,1352	0,1360
41	1,42857	1,8570	0,2028	0,1476

Lad os stoppe databehandlingen i Logger Pro her.

Taylorpolynomier og flere differensmetoder

Dette afsnit og de følgende er dedikeret til folk, som vil have et lidt større overblik over området med numerisk differentiation. Stoffet er nok i overkanten af, hvad de fleste elever i gymnasiet med rimelighed kan tilegne sig. Det er derfor for viderekomne.

Lad *f* være en funktion, som er differentiabel i x_0. Fra gymnasiet kender vi ligningen for tangenten til grafen for *f* i punktet x_0:

(11) $$y = f'(x_0)\cdot(x-x_0)+f(x_0)$$

Vi ved, at tangenten til grafen for *f* i x_0 tilnærmer funktionen omkring dette punkt. Hvis vi kigger på det fra et funktionssynspunkt, så kan vi definere følgende funktion:

(12) $$P_1(x) = f(x_0)+f'(x_0)\cdot(x-x_0)$$

som er et førstegradspolynomium i *x* – husk at x_0 er konstant! Men som nævnt er $P_1(x)$ kun en tilnærmelse til $f(x)$. Forskellen mellem $f(x)$ og $P_1(x)$ vil vi betegne $R_1(x)$. Det betegnes også *restleddet*. Vi har dermed:

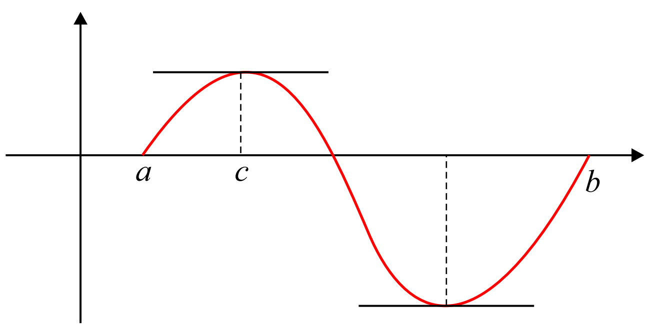
(13) $$f(x) = f(x_0)+f'(x_0)\cdot(x-x_0)+R_1(x)$$

Vi er interesseret i at få lidt mere styr på dette restled. Kan vi sætte en øvre grænse for, hvor stor det kan være? Svaret er bekræftende, hvis vi antager, at funktionen er to gange kontinuert differentiabel i et interval omkring x_0. Vi skal have fat i den anden afledede af funktionen. Men før vi ser på den, skal vi formulere og bevise en berømt og smuk sætning, som ofte viser sig velegnet i beviser.

Sætning 3 (Rolles sætning)

Lad *f* være en funktion, som er kontinuert i det lukkede interval $[a,b]$, differentiabel i det tilsvarende åbne interval $]a,b[$ og som opfylder at $f(a)=f(b)=0$. Så findes der et $c\in]a,b[$, så $f'(c)=0$.

Bevis: Rent intuitivt virker sætningen indlysende, når man kigger på en figur. Hvis grafen for *f* har endepunkter på *x*-aksen, så må der være mindst et sted imellem, hvor der er vandret tangent. I tilfældet på figuren er der endda to mulige valg for *c*.



Vi vil dog alligevel give et formelt bevis. Hvis funktionen er identisk nul i hele det lukkede interval $[a,b]$, så er $f'(x)$ lig med 0 for alle $x \in]a,b[$. I det tilfælde kan ethvert punkt i det åbne interval vælges som *c*. Hvis *f ikke* er konstant lig med 0 i det lukkede interval, så bruger vi kontinuiteten af *f* til at konkludere, at der må findes et maksimum og et minimum for *f* i $[a,b]$. De kan ikke begge være 0, eftersom *f* ikke er konstant lig med 0. Det punkt på *x*-aksen, hvori der er et maksimum eller et minimum, som er forskellig fra 0, kan bruges som *c*. Dels er der klart vandret tangent i dette punkt og dels er det et indre punkt i intervallet. Det sidste følger af, at funktionsværdien er $\neq 0$ her, mens funktionsværdierne i endepunkterne er 0.

□

Sætning 4 (Taylors formel for $n = 2$)

Antag at funktionen er to gange kontinuert differentiabel i et interval *I*, hvor $x_0 \in I$. For ethvert $x \in I$ findes da et *c* mellem *x* og x_0, så

(14) $$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot (x - x_0) + \tfrac{1}{2} \cdot f''(c) \cdot (x - x_0)^2$$

Bevis: Ifølge (12) kan (14) også udtrykkes ved

(15) $$f(x) = P_1(x) + \tfrac{1}{2} \cdot f''(c) \cdot (x - x_0)^2$$

hvor P_1 er det approksimerende førstegradspolynomium. Lad *x* og x_0 være givet. Vi vil da definere en størrelse *K* ved

(16) $$K = \frac{f(x) - P_1(x)}{(x - x_0)^2}$$

Dermed haves:

(17) $$f(x) = P_1(x) + K \cdot (x - x_0)^2$$

Vi indfører nu en hjælpefunktion:

(18) $$H(t) = f(t) - P_1(t) - K \cdot (t - x_0)^2$$

For det første ser vi, at *K* ikke afhænger af *t*, så den vil fungere som en konstant i hjælpefunktionen. Lad os differentiere hjælpefunktionen et par gange:

(19) $$H'(t) = f'(t) - P_1'(t) - 2K \cdot (t - x_0)$$

(20) $$H''(t) = f''(t) - P_1''(t) - 2K = f''(t) - 2K$$

I (20) har vi udnyttet, at P_1 er et førstegradspolynomium og derfor giver 0, når den differentieres to gange. Lad os indsætte x_0 i både *H* og H':

(21) $$H(x_0) = f(x_0) - P_1(x_0) - K \cdot (x_0 - x_0)^2 = f(x_0) - P_1(x_0) = 0$$

(22) $$H'(x_0) = f'(x_0) - P_1'(x_0) - 2K \cdot (x_0 - x_0) = f'(x_0) - P_1'(x_0) = 0$$

Af (17) og (18) får vi at $H(x) = 0$. Da hjælpefunktionen er 0 i både *x* og x_0, kan vi bruge Rolles sætning til at konkludere, at der findes et c_1 mellem *x* og x_0, så $H'(c_1) = 0$.

Vi kan gentage successen med H'. Den er nemlig nul i både c_1 og x_0 ifølge (22). Dermed kan Rolles sætning bruges igen. Vi slutter at der findes et c mellem c_1 og x_0, så $H''(c)=0$. Ifølge (20) betyder det, at $f''(c)-2K=0 \Leftrightarrow K=\frac{1}{2}\cdot f''(c)$. Dnne værdi kan indsættes i (17), hvoraf vi får $f(x) \;=\; P_1(x)+\frac{1}{2}\cdot f''(c)\cdot(x-x_0)^2$ og dermed (14), som ønsket. Værdien c ligger desuden klart mellem x og x_0.

□

Den bør bemærkes, at c normalt afhænger af x og x_0. At sætningen alligevel er meget brugbar kan demonstreres ved et eksempel.

Eksempel 5

Betragt funktionen $f(x)=\sin(x)$. Når vi differentierer et par gange, får vi umiddelbart følgende: $f'(x)=\cos(x)$ og $f''(x)=-\sin(x)$. Vi ønsker at udregne det approksimerende 1. gradspolynomium i punktet $x_0=\frac{\pi}{4}$:

$$f(x_0)=f(\tfrac{\pi}{4})=\sin(\tfrac{\pi}{4})=\tfrac{\sqrt{2}}{2}, \quad f'(x_0)=f(\tfrac{\pi}{4})=\cos(\tfrac{\pi}{4})=\tfrac{\sqrt{2}}{2}$$

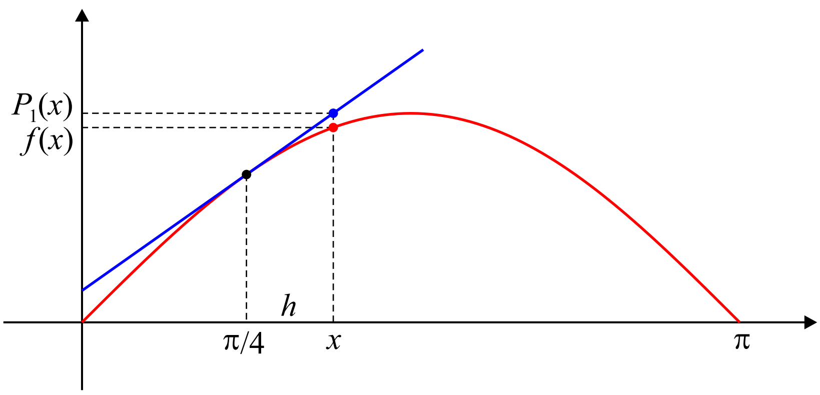
som giver:

$$P_1(x) \;=\; f(\tfrac{\pi}{4})+f'(\tfrac{\pi}{4})\cdot(x-\tfrac{\pi}{4})=\tfrac{\sqrt{2}}{2}+\tfrac{\sqrt{2}}{2}(x-\tfrac{\pi}{4})=\tfrac{\sqrt{2}}{2}x+\tfrac{\sqrt{2}}{2}\cdot(1-\tfrac{\pi}{4})\approx 0{,}7071x+0{,}1517$$

Spørgsmålet er hvor præcis approksimationen er, hvis man ønsker at indsætte en x værdi i $P_1(x)$ fremfor at indsætte i $f(x)$ selv? Lad os sige, at x ligger stykket h fra x_0, dvs. at $h=x-x_0$. Vi kan vurdere restleddets numeriske størrelse idet vi bemærker, at sinus altid ligger mellem -1 og 1.

$$\left|R_1(x)\right| \;\le\; \tfrac{1}{2}\cdot \max_{c \text{ mellem } x \text{ og } x_0} \left|f''(c)\right|\cdot\left|x-x_0\right|^2 \;=\; \tfrac{1}{2}\cdot \max_{c \text{ mellem } x \text{ og } x_0} \left|-\sin(c)\right|\cdot h^2 \;=\; \tfrac{1}{2}h^2$$

Fejlen er altså højest af størrelsen $\frac{1}{2}h^2$. Situationen er illustreret på figuren nedenfor.



□

Det er klart at matematikere ikke stiller sig til tåls med at approksimere en funktion med et 1. gradspolynomium. De vil automatisk tage skridtet videre: Kunne vi ikke approksimere funktionen med et polynomium af højere grad? Det leder os frem til den generelle formel for Taylorpolynomiet.

Sætning 6 (Taylors formel)

Lad f være en funktion, som er $n+1$ gange kontinuert differentiabel i et interval I, hvor $x_0 \in I$. For ethvert $x \in I$ findes da et c mellem x og x_0, så

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} \cdot (x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2} \cdot (x-x_0)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} \cdot (x-x_0)^n$$
$$+ \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!} \cdot (x-x_0)^{n+1}$$

Bevis: Sætningen kan bevises analogt til den måde vi beviste sætning 4 på. Vi vil ikke give detaljer her.

□

Vi kan dele udtrykket i sætning 6 op i to dele: $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$, hvor

(23) $$P_n(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!} \cdot (x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2} \cdot (x-x_0)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} \cdot (x-x_0)^n$$

(24) $$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(c)}{(n+1)!} \cdot (x-x_0)^{n+1}$$

Her kaldes $P_n(x)$ for *Taylorpolynomiet* af orden n for $f(x)$, med *udviklingspunkt* x_0. Størrelsen kan også betegnes det *approksimerende polynomium af højst n'te grad for* $f(x)$ *i punktet* x_0. Leddet $R_n(x)$ kaldes for *restleddet*. Vi skal kigge på et eksempel.

Eksempel 7

I eksempel 5 tilnærmede vi sinus-funktionen med et approksimerende 1. gradspolynomium i punktet $x_0 = \frac{\pi}{4}$. Nu vil vi bestemme det approksimerende 3. gradspolynomium til $f(x) = \sin(x)$ i punktet $x_0 = 0$. Vi differentierer fire gange:

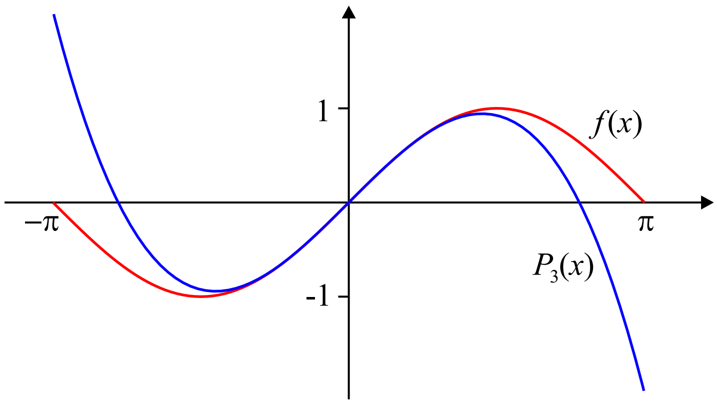
$$f'(x) = \cos(x),\ f''(x) = -\sin(x),\ f'''(x) = -\cos(x),\ f^{(4)}(0) = \sin(x)$$

Hvilket med $x_0 = 0$ indsat giver følgende værdier:

$$f(0) = \sin(0) = 0,\ f'(0) = \cos(0) = 1,\ f''(0) = -\sin(0) = 0,,\ f'''(0) = -\cos(0) = -1$$

Vi har dermed:

$$\begin{aligned} P_3(x) &= f(0) + \frac{f'(0)}{1!}(x-0) + \frac{f''(0)}{2!}(x-0)^2 + \frac{f'''(0)}{3!}(x-0)^3 \\ &= 0 + \frac{1}{1!} \cdot x + \frac{0}{2!}x^2 + \frac{-1}{3!}x^3 \\ &= x - \tfrac{1}{6}x^3 \end{aligned}$$



Figuren viser, at det approksimerende tredjegradpolynomium giver en meget fin tilnærmelse til sinus-funktionen, især i nærheden af udviklingspunktet $x_0 = 0$. Afvigelsen er bestemt ved restleddet, som vi kan vurdere lidt på samme måde som i eksempel 5:

$$\left|R_3(x)\right| \le \frac{1}{4!}\cdot \max_{c \text{ mellem } 0 \text{ og } x} \left|f^{(4)}(c)\right|\cdot\left|x-x_0\right|^4 = \tfrac{1}{24}\cdot \max_{c \text{ mellem } 0 \text{ og } x_0} \left|\sin(c)\right|\cdot h^4 = \tfrac{1}{24}h^4$$

Vi slutter eksemplet her.

□

Grunden til, at vi har gennemgået teorien for Taylorpolynomierne ovenfor er, at vi kan bruge dem til at udvikle nye metoder til numerisk differentiation. Lad os kigge på Taylorpolynomiet for funktionen f i punktet x_0 og indsætte forskellige værdier for x omkring x_0, nærmere bestemt $x_0 - 2h,\ x_0 - h,\ x_0,\ x_0 + h$ og $x_0 + 2h$. Det giver følgende:

$$f(x_0-2h) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}\cdot(-2h) + \frac{f''(x_0)}{2!}\cdot(-2h)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\cdot(-2h)^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}\cdot(-2h)^4 + \ldots$$

$$f(x_0-h) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}\cdot(-h) + \frac{f''(x_0)}{2!}\cdot(-h)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\cdot(-h)^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}\cdot(-h)^4 + \ldots$$

$$f(x_0) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}\cdot 0 + \frac{f''(x_0)}{2!}\cdot 0^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\cdot 0^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}\cdot 0^4 + \ldots$$

$$f(x_0+h) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}\cdot h + \frac{f''(x_0)}{2!}\cdot h^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\cdot h^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}\cdot h^4 + \ldots$$

$$f(x_0+2h) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}\cdot(2h) + \frac{f''(x_0)}{2!}\cdot(2h)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\cdot(2h)^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}\cdot(2h)^4 + \ldots$$

Man kunne nu få den gode idé at gange den første ligning med a_{-2}, den næste ligning med a_{-1}, den midterste ligning med a_0 og de to efterfølgende ligninger med henholdsvis a_1 og a_2 og derefter lægge alle ligningerne sammen! Derefter kunne man forsøge at bestemme koefficienterne $a_{-2}, a_{-1}, a_0, a_1, a_2$, så funktionsværdien i x_0, og alle afledede i x_0 op til og med 4. orden går ud, med undtagelse af den første afledede, hvis koefficient vi vil have til at give h. Vi ønsker altså at finde koefficienter $a_{-2}, a_{-1}, a_0, a_1, a_2$, så følgende er opfyldt:

$$\text{(25)}\quad \begin{aligned} & a_{-2}\cdot f(x_0-2h)+a_{-1}\cdot f(x_0-h)+a_0\cdot f(x_0)+a_1\cdot f(x_0+h)+a_2\cdot f(x_0+2h) \\ =\ & 0\cdot f(x_0)+h\cdot f'(x_0)+0\cdot f''(x_0)+0\cdot f'''(x_0)+0\cdot f^{(4)}(x_0)+rest \end{aligned}$$

Størrelsen *rest* er en linearkombination af de restled, der ifølge sætning 6 med $n=4$, er på følgende form, hvor c_i ligger mellem x_0 og $x_0+i\cdot h$ for alle $i=-2,-1,0,1,2$:

$$\text{(26)}\quad \begin{aligned} rest\ =\ & a_{-2}\cdot\frac{f^{(5)}(c_{-2})}{5!}\cdot(-2h)^5+a_{-1}\cdot\frac{f^{(5)}(c_{-1})}{5!}\cdot(-h)^5+a_0\cdot\frac{f^{(5)}(c_0)}{5!}\cdot 0^5 \\ & +a_1\cdot\frac{f^{(5)}(c_1)}{5!}\cdot h^5+a_2\cdot\frac{f^{(5)}(c_2)}{5!}\cdot(2h)^5 \\ =\ & \frac{h^5}{5!}\cdot\Big[(-2)^5\cdot a_{-2}\cdot f^{(5)}(c_{-2})+(-1)^5\cdot a_{-1}\cdot f^{(5)}(c_{-1})+0^5\cdot a_0\cdot f^{(5)}(c_0) \\ & +1^5\cdot a_1\cdot f^{(5)}(c_1)+2^5\cdot a_2\cdot f^{(5)}(c_2)\Big] \end{aligned}$$

Lad os vende tilbage til ligningssystemet. Opgaven består i at løse 5 lineære ligninger med 5 ubekendte. Ligningssystemet kan meget overskueligt skrives på matrix-form på følgende måde, hvor koefficienterne $a_{-2}, a_{-1}, a_0, a_1, a_2$ altså er de ubekendte:

$$\text{(27)}\quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ (-2) & -1 & 0 & 1 & 2 \\ (-2)^2 & (-1)^2 & 0 & 1^2 & 2^2 \\ (-2)^3 & (-1)^3 & 0 & 1^3 & 2^3 \\ (-2)^4 & (-1)^4 & 0 & 1^4 & 2^4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{-2} \\ a_{-1} \\ a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Detaljerne overlades til læseren. Vi regner videre og får:

$$\text{(28)}\quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{-2} \\ a_{-1} \\ a_0 \\ a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Det viser sig, at ligningssystemet har følgende løsning:

$$\text{(29)}\quad a_{-2}=\tfrac{1}{12},\ a_{-1}=-\tfrac{2}{3},\ a_0=0,\ a_1=\tfrac{2}{3},\ a_2=-\tfrac{1}{12}$$

Lad os vende tilbage til leddet *rest* fra (26). Vi ved nu hvad koefficienterne er lig med.

$$\text{(30)}\quad \begin{aligned} rest\ =\ & \frac{h^5}{5!}\cdot\Big[(-2)^5\cdot\tfrac{1}{12}\cdot f^{(5)}(c_{-2})+(-1)^5\cdot(-\tfrac{2}{3})\cdot f^{(5)}(c_{-1})+0^5\cdot 0\cdot f^{(5)}(c_0) \\ & +1^5\cdot\tfrac{2}{3}\cdot f^{(5)}(c_1)+2^5\cdot(-\tfrac{1}{12})\cdot f^{(5)}(c_2)\Big] \end{aligned}$$

Lad os skrive *rest* på formen $rest = k \cdot h^5$, hvor k er en konstant, for at fremhæve afhængigheden af skridtlængden h. Hvis vi benytter den korte notation f_i for $f(x_0 + i \cdot h)$ og f_0' for $f'(x_0)$, så bliver (25) til følgende:

$$-\tfrac{1}{12} \cdot f_{-2} + \tfrac{2}{3} \cdot f_{-1} - \tfrac{2}{3} \cdot f_1 + \tfrac{1}{12} \cdot f_2 \; = \; f_0' \cdot h - k \cdot h^5$$

Ved at dividere med h på begge sider og flytte restleddet over, får vi det endelige udtryk for den metode, som går under navnet *5-point Central difference*, fordi den involverer fem punkter (hvor det ene godt nok er 0):

$$\text{(31)} \qquad f_0' \; = \; \frac{-\tfrac{1}{12} \cdot f_{-2} + \tfrac{2}{3} \cdot f_{-1} - \tfrac{2}{3} \cdot f_1 + \tfrac{1}{12} \cdot f_2}{h} + k \cdot h^4$$

som også kan skrives:

$$\text{(32)} \qquad f_0' \; = \; \frac{-f_{-2} + 8 \cdot f_{-1} - 8 \cdot f_1 + f_2}{12h} + k \cdot h^4$$

Bemærkning

Desværre afhænger leddet *rest* i (30) af den femte afledede i fem *forskellige* – i øvrigt ukendte – punkter. Det viser sig imidlertid, at man kan udskifte alle de fem afledede med en femte afledet evalueret i det *samme punkt*. Det omtalte fælles punkt vil vi betegne c. Derved bliver restleddet til: $rest = -\tfrac{1}{30} \cdot h^5 \cdot f^{(5)}(c)$. Det fælles punkt er også ukendt, men vi ved, at det skal ligge imellem $x_0 - 2h$ og $x_0 + 2h$. Derved får vi den kortfattede formel:

$$\text{(33)} \qquad f_0' \; = \; \frac{-f_{-2} + 8 \cdot f_{-1} - 8 \cdot f_1 + f_2}{12h} + \tfrac{1}{30} h^4 \cdot f^{(5)}(c)$$

hvor $c \in]x_0 - 2h, x_0 + 2h[$ eller $c \in]x_{-2}, x_2[$, hvis man foretrækker notationen fra side 4 tidligere i denne note. Forudsætningen for ovenstående er, at funktionen f skal være 5 gange kontinuert differentiabel i et interval I, som indeholder de fem punkter, som vi benytter: $x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2$. Med det mere præcise restled i (33) fremfor (32) kan vi nemmere foretage vurderinger af den begåede fejl, lidt som vi gjorde tidligere i eksempel 5 og eksempel 7. At restleddet kan skrives på formen $\tfrac{1}{30} h^4 \cdot f^{(5)}(c)$ i (33) fremgår ikke direkte af ovenstående. Restleddet kan imidlertid fås frem, hvis man tager et helt andet udgangspunkt end vi har taget ovenfor: Hvis man i stedet for Taylorpolynomier bruger *interpolationspolynomier* på Newtons form, kan man udlede det. Det vil føre for vidt at komme ind på det her. Man kan læse om metoden i [2] fra side 135. På side 179 omtales restleddet.

Central Difference formler

Vi har allerede set eksempler på to af den slags, som betegnes *Central difference* metoder. Den første er (10) side 5 og den anden er (33) ovenfor. Ordet "central" går på, at man benytter funktionsværdier i punkter, som ligger symmetrisk omkring det punkt x_0, hvori man ønsker den numeriske differentialkvotient. Det giver den bedste tilnærmelse.

I Wikipedia (se linket [3]), kan man finde en række central difference-formler. Omskrevet og med restled ser de således ud:

$$f_0' = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \tfrac{1}{6} \cdot h^2 \cdot f'''(c)$$

$$f_0' = \frac{-f_{-2} + 8 \cdot f_{-1} - 8 \cdot f_1 + f_2}{12h} + \tfrac{1}{30} h^4 \cdot f^{(5)}(c)$$

$$f_0' = \frac{-f_{-3} + 9 \cdot f_{-2} - 45 \cdot f_{-1} + 45 \cdot f_1 - 9 \cdot f_2 + f_3}{60h} - \tfrac{1}{140} \cdot h^6 \cdot f^{(7)}(c)$$

$$f_0' = \frac{3 \cdot f_{-4} - 32 \cdot f_{-3} + 168 \cdot f_{-2} - 672 \cdot f_{-1} + 672 \cdot f_1 - 168 \cdot f_2 + 32 \cdot f_3 - 3 \cdot f_4}{840h} + \tfrac{1}{630} \cdot h^8 \cdot f^{(9)}(c)$$

I nævnte rækkefølge har de navnene 3-punkt central difference, 5-punkt central difference, 7-punkt central difference og 9-punkt central difference. På samme hjemmeside kan man også finde ikke-centrerede differensmetoder, og endda også formler for højere afledede.

Savitsky-Golay filtre

Alle de metoder, som blev udviklet med Taylorpolynomier i forrige afsnit, har de egenskaber, at de er *eksakte* for alle *polynomier* af grad op til og med ordenen af metoden. Således er 3-punkt central difference eksakt for polynomier med grad op til og med 2. 5-punkt central difference er eksakt for polynomier af grad op til og med 4, etc. Denne påstand ses direkte af restleddets udseende. Det er det maksimalt opnåelige for det antal punkter, som er involveret i de enkelte metoder. Man skulle derfor tro, at man havde at gøre med i enhver henseende optimale numeriske metoder. Det viser sig imidlertid, at metoderne er temmelig følsomme, når de anvendes på hurtigt oscillerende funktioner. Derfor er der blevet udviklet numeriske metoder, som har en bedre egenskab her. En familie af disse er de såkaldte *Savitsky-Golay* filtre. Vi skal ikke gå i detaljer med dem her, blot henvise til Wikipedia i [4], hvor nedenstående metoder kan findes. Begge er 7-punktsmetoder. Den første har orden $O(h^2)$, mens den anden har orden $O(h^4)$:

$$f_0' \approx \frac{-3 \cdot f_{-3} - 2 \cdot f_{-2} - f_{-1} + f_1 + 2 \cdot f_2 + 3 \cdot f_3}{28h}$$

$$f_0' \approx \frac{22 \cdot f_{-3} - 67 \cdot f_{-2} - 58 \cdot f_{-1} + 58 \cdot f_1 + 67 \cdot f_2 - 22 \cdot f_3}{252h}$$

Disse filter har desuden ofte en udglattende virkning på data. Løst sagt er de blevet udledt ved at anvende *foldning* og tilnærme et antal datapunkter med et polynomium af relativ lav grad under anvendelse af *mindste kvadraters metode*.

Glatte støj-robuste differentiatorer

Nogle andre metoder, jeg er faldet over, er metoder udviklet af Pavel Holoborodko. De kan findes på hans hjemmeside [5]. Jeg vil give hans bud på to 7-punktsmetoder, den første af orden $O(h^2)$, den anden af orden $O(h^4)$:

$$f_0' \approx \frac{-f_{-3} - 6 \cdot f_{-2} - 14 \cdot f_{-1} + 14 \cdot f_1 + 6 \cdot f_2 + f_3}{128h}$$

$$f_0' \approx \frac{5 \cdot f_{-3} - 12 \cdot f_{-2} - 39 \cdot f_{-1} + 39 \cdot f_1 + 12 \cdot f_2 - 5 \cdot f_3}{96h}$$

Der kan siges meget mere om dette emne med numerisk differentiation. Vi afslutter dog diskussionen af emnet her.

Litteratur

[1] Helge Elbrønd Jensen m. fl. *Matematisk analyse 1*. 4. udgave. Institut for matematik, Danmarks Teknisk Universitet, 2000.

[2] Ward Cheney, David Kincaid. *Numerical Mathematics and Computing*. Fourth Edition. Brooks/Cole Publishing Company, 1999.

Links

[3] Wikipedia om Finite Differences:
http://en.wikipedia.org/wiki/Finite_difference_coefficient

[4] Wikipedia on Savitsky-Golay filter:
http://en.wikipedia.org/wiki/Savitzky%E2%80%93Golay_filter

[5] Pavel Holoborodko om Smooth noise-robust differentiators:
http://www.holoborodko.com/pavel/numerical-methods/numerical-derivative/smooth-low-noise-differentiators/