Сандық дифференциалдау

$\boldsymbol{f(x)}$ функциясын ескере отырып, берілген x кезінде $\boldsymbol{d^n f/dx^n}$ қалай есептелінеді.

Кіріспе

Сандық дифференциалдау келесі есеппен айналысады: Бізге $\mathbf{y} = \boldsymbol{f(x)}$ функциясы берілген және оның $\boldsymbol{x = x_k}$ нүктесінде туындыларының бірін алғымыз келеді. «Берілген» термині бізде функцияны есептеу алгоритмі бар екенін немесе бізде дискретті деректер нүктелерінің $(\boldsymbol{x_i, y_i}), \boldsymbol{i = 0, 1, \ldots, n}$ бар екенін білдіреді. Кез келген жағдайда, біз туындыны есептеуге болатын $(\boldsymbol{x, y})$ деректер жұптарының ақырлы санына қол жеткізе аламыз. Егер сандық дифференциалдау интерполяциямен байланысты деп ойласаңыз, дұрыс айтасыз — туындыны табудың бір жолы функцияны полином арқылы жуықтап, содан кейін оны дифференциалдау болып табылады. Негізгі тиімді құрал $\boldsymbol{x_k}$ нүктесіне қатысты $\boldsymbol{f(x)}$ Тейлор қатарына жіктеу болып табылады, оның артықшылығы бізге жуықтау кезіндегі қателік туралы ақпарат береді.

Сандық дифференциалдау ерекше дәл үрдіс емес. Ол дөңгелектеу қателері (машинаның шектеулі дәлдігінен туындаған) және интерполяцияға тән қателіктер арасындағы қайшылықтан зардап шегеді. Осы себепті функцияның туындысы ешқашан функцияның өзі сияқты дәлдікпен есептелмейді.

Ақырлы айырымдар жуықтаулары

$f(x)$ туындылары үшін ақырлы айырымдар жуықтаулары x қатысты $f(x)$ бойынша оң және сол жақ Тейлор қатарының жіктелуіне негізделген, мысалы:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots \qquad (a)$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots \qquad (b)$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) + \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots \quad (c)$$

$$f(x-2h) = f(x) - 2hf'(x) + \frac{(2h)^2}{2!}f''(x) - \frac{(2h)^3}{3!}f'''(x) + \frac{(2h)^4}{4!}f^{(4)}(x) + \cdots \quad (d)$$

Біз сонымен қатар қатардың қосындылары мен айырмасын жазамыз:

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + h^2 f''(x) + \frac{h^4}{12}f^{(4)}(x) + \cdots \qquad (e)$$

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{h^3}{3}f'''(x) + \cdots \qquad (f)$$

$$f(x+2h) + f(x-2h) = 2f(x) + 4h^2 f''(x) + \frac{4h^4}{3}f^{(4)}(x) + \cdots \qquad (g)$$

$$f(x+2h) - f(x-2h) = 4hf'(x) + \frac{8h^3}{3}f'''(x) + \cdots \qquad (h)$$

Қосындыларда тек жұп туындылар, ал айырымдарда тек тақ туындыларды бар екеніне назар аударуға болады. (a)–(h) теңдеулерін $f(x)$ әр түрлі туындылары үшін шешуге болатын теңдеулер жүйесі ретінде қарастыруға болады. Қатысқан теңдеулер саны және әрбір теңдеуде сақталатын мүшелер саны туындының ретіне және қажетті дәлдік дәрежесіне байланысты болады.

Бірінші орталық айырымдар жуықтаулары

$f'(x)$ үшін (f) теңдеудің шешімі

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(x) - \cdots$$

немесе

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \qquad (1)$$

Бұл $f'(x)$ үшін бірінші орталық айырымдар жуықтауы деп аталады. $\mathcal{O}(h^2)$ мүшесі қателік h^2 ретінде әрекет ететінін еске салады.

Сол сияқты, $f''(x)$ үшін бірінші орталық айырымдар жуықтауын (e) теңдеуі береді:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(x) + \cdots$$

немесе

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2) \qquad (2)$$

Басқа туындылар үшін орталық айырымдар жуықтауы дәл осылай (a)–(h) теңдеулерден алуға болады. Мысалы, (f) және (h) теңдеулерден $f'(x)$ жою арқылы $f'''(x)$ үшін шешім

$$f'''(x) = \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + 2f(x-h) - f(x-2h)}{2h^3} + \mathcal{O}(h^2) \qquad (3)$$

(e) және (g) теңдеуден $f''(x)$ жойылғаннан кейін мына жуықтауды

$$f^{(4)}(x) = \frac{f(x+2h) - 4f(x+h) + 6f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{h^4} + \mathcal{O}(h^2) \qquad (4)$$

алуға болады. 1-кесте нәтижелерді қорытындылайды.

	$f(x-2h)$	$f(x-h)$	$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$
$2hf'(x)$		-1	0	1	
$h^2 f''(x)$		1	-2	1	
$2h^3 f'''(x)$	-1	2	0	-2	1
$h^4 f^{(4)}(x)$	1	-4	6	-4	1

1-кесте. $\mathcal{O}(h^2)$ орталық ақырлы айырымдар жуықтауының коэффициенттері

Бірінші орталық емес ақырлы айырымдар жуықтаулары

Орталық ақырлы айырымдар жуықтауы әрқашан қолданыла бермейді. Мысалы, функция $x_0, x_1, \ldots, x_n,\ n$ дискретті нүктелерінде берілген жағдайды қарастырайық. Орталық айырымдар x-тің әр жағындағы функция мәндерін пайдаланатындықтан, біз x_0 және x_n-де туындыларды есептей алмаймыз. Функцияны тек x-тің бір жағында бағалауды талап ететін ақырлы айырымдар өрнектерінің қажеттілігі анық. Бұл өрнектер сол және оң жақ ақырлы айырымдар жуықтаулары деп аталады.

Орталық емес ақырлы айырымдарды (a) – (h) теңдеулерден де алуға болады. $f'(x)$ үшін (a) теңдеу шешімі

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} f''(x) - \frac{h^2}{6} f'''(x) + \frac{h^3}{4!} f^{(4)}(x) - \cdots$$

Тек бірінші мүшені қалдыру бірінші оң жақ айырым жуықтауына әкеледі:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h) \qquad (5)$$

Сол сияқты, (b) теңдеуі бірінші сол жақ айырым жуықтауын береді:

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \mathcal{O}(h) \qquad (6)$$

Жуықтау қатесі қазір $\mathcal{O}(h)$ екенін ескеріңіз, ол орталық айырымдар жуықтауларында $\mathcal{O}(h^2)$ сияқты жақсы емес.

Біз дәл осылай жоғары туындылар үшін жуықтауларды шығара аламыз. Мысалы, (a) және (c) теңдеулерінен

$$f''(x) = \frac{f(x+2h) - 2f(x+h) + f(x)}{h^2} + \mathcal{O}(h) \qquad (7)$$

$$f''(x) = \frac{f(x) - 2f(x-h) + f(x-2h)}{h^2} + \mathcal{O}(h) \qquad (8)$$

Үшінші және төртінші туындыларды ұқсас жолмен шығаруға болады. Нәтижелер 2a және 2b кестелерінде көрсетілген.

	$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$	$f(x+3h)$	$f(x+4h)$
$hf'(x)$	-1	1			
$h^2f''(x)$	1	-2	1		
$h^3f'''(x)$	-1	3	-3	1	
$h^4f^{(4)}(x)$	1	-4	6	-4	1

2a -кесте. $\mathcal{O}(h)$ оң жақ ақырлы айырымдар жуықтауының коэффициенттері

	$f(x-4h)$	$f(x-3h)$	$f(x-2h)$	$f(x-h)$	$f(x)$
$hf'(x)$				-1	1
$h^2f''(x)$			1	-2	1
$h^3f'''(x)$		-1	3	-3	1
$h^4f^{(4)}(x)$	1	-4	6	-4	1

2b -кесте. $\mathcal{O}(h)$ сол жақ ақырлы айырымдар жуықтауының коэффициенттері

Екінші орталық емес ақырлы айырымдар жуықтаулары

Қысқаша айтқанда, $\mathcal{O}(h)$ ақырлы айырымдар жуықтаулары танымал емес. Жалпы есеп шығаруда $\mathcal{O}(h^2)$ өрнектерін қолдану болып табылады. Осы реттегі орталық емес айырымдар формулаларын алу үшін Тейлор қатарында көбірек мүшелерді сақтау керек. мысал ретінде $f'(x)$ өрнегін шығарамыз. Біз (a) және (c) теңдеулерді қолданамыз

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + \cdots \qquad (a)$$

$$f(x+2h) = f(x) + 2hf'(x) + 2h^2f''(x) + \frac{4h^3}{3}f'''(x) + \frac{2h^4}{3}f^{(4)}(x) + \cdots \ (c)$$

Бірінші теңдеуді 4-ке көбейтіп, екінші теңдеуден азайту арқылы $f''(x)$ жоямыз. Нәтижесінде

$$f(x+2h) - 4f(x+h) = -3f(x) - 2hf'(x) + \frac{2h^3}{3}f'''(x) + \frac{h^4}{2}f^{(4)}(x) + \cdots$$

Осыдан,

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

немесе

$$f'(x) = \frac{-f(x+2h) + 4f(x+h) - 3f(x)}{2h} + \mathcal{O}(h^2) \qquad (8)$$

(8) теңдеу екінші оң жақ ақырлы айырымдар жуықтауы деп аталады.

Жоғары туындылар үшін ақырлы айырымдар жуықтауын шығару қосымша Тейлор қатарын қамтиды. Осылайша, $f''(x)$ үшін оң жақ айырымдар жуықтауы $f(x+h), f(x+2h)$ және $f(x+3h)$ қатарларды пайдаланады; $f'''(x)$ үшін жуықтауы $f(x+h), f(x+2h), f(x+3h), f(x+4h)$ және т.б. үшін Тейлор жіктеулерін қамтиды. Көріп отырғанымыздай, жоғары ретті туындылар үшін есептеулері ұзақ болуы мүмкін. Оң және сол жақ ақырлы айырымдар үшін нәтижелер 3a және 3b кестелерінде жинақталған.

	$f(x)$	$f(x+h)$	$f(x+2h)$	$f(x+3h)$	$f(x+4h)$	$f(x+5h)$
$2hf'(x)$	-3	4	-1			
$h^2f''(x)$	2	-5	4	-1		
$2h^3f'''(x)$	-5	18	-24	14	-3	
$h^4f^{(4)}(x)$	3	-14	26	-24	11	-2

3a -кесте. $\mathcal{O}(h^2)$ оң жақ ақырлы айырымдар жуықтауының коэффициенттері

	$f(x-5h)$	$f(x-4h)$	$f(x-3h)$	$f(x-2h)$	$f(x-h)$	$f(x)$
$2hf'(x)$				1	-4	3
$h^2f''(x)$			-1	4	-5	2
$2h^3f'''(x)$		3	-14	24	-18	5
$h^4f^{(4)}(x)$	-2	11	-24	26	-14	3

3b -кесте. $\mathcal{O}(h^2)$ сол жақ ақырлы айырымдар жуықтауының коэффициенттері

Ақырлы айырымдар жуықтауындағы қателіктер

Барлық ақырлы айырымдар өрнектерінде коэффициенттердің қосындысы нөлге тең болатынын байқауға болады. Дөңгелектеу қателігіне әсері маңызды болуы мүмкін. Егер h өте аз болса, $f(x), f(x \pm h), f(x \pm 2h)$ және т.б. мәндері шамамен тең болады. Оларды коэффициенттерге көбейтіп, қосқанда бірнеше мәнді сандар жоғалуы мүмкін. Дегенмен, біз h мәнін тым үлкен етіп жасай алмаймыз, өйткені бұл жағдайда жуықтау қателігі шамадан тыс болады. Бұл келеңсіз жағдайды түзеу мүмкін емес, бірақ біз келесі сақтық шараларын қолдану арқылы біраз жеңілдік ала аламыз:

- Еселі дәлдіктегі(double-precision) арифметиканы қолданыңыз.

- Кем дегенде $\mathcal{O}(h^2)$ дәлдігі бар ақырлы айырымдар формулаларын қолданыңыз.

Қателіктерді көрсету үшін, $x = 1$ нүктесіндегі $f(x) = e^{-x}$ екінші ретті туындысын орталық айырымдар (2) теңдеу формуласымен есептейік. Есептерді алты және сегіз таңбалы дәлдікпен h-тың әр түрлі мәндерін пайдалана отырып жүргіземіз. 4-кестеде көрсетілген нәтижелерді $f(x) = e^{-1} = 0.367\,879\,44$ мәнімен салыстырамыз.

h	Алты таңбалы дәлдік	Сегіз таңбалы дәлдік
0.64	0.380 160	0.380 609 11
0.32	0.371 035	0.371 029 39
0.16	0.371 711	0.368 664 84
0.08	**0.368 281**	0.368 076 56
0.04	0.368 75	0.367 831 25
0.02	0.37	**0.3679**
0.01	0.38	0.3679
0.005	0.40	0.3676
0.0025	0.48	0.3680
0.00125	1.28	0.3712

4-кесте. $(e^{-x})''$-ты $x = 1$ кезінде орталық ақырлы айырымдар жуықтауы

Алты таңбалы дәлдікпен есептеулерде h-тың оңтайлы мәні 0.08 болып, үш мәнді санға дейін дәл нәтиже береді. Осылайша, жуықтау және дөңгелектеу қателіктерінің тіркесіміне байланысты үш маңызды цифр жоғалады. Оңтайлы h-тан жоғары мәндерде, басым қателік жуықтаудан туындайды; оның кіші мәндерінде дөңгелектеу қателігінен болады. Сегіз таңбалы есептеу арқылы алынған ең жақсы нәтиже төрт маңызды санға дәл келеді. Қосымша дәлдік дөңгелектеу қателігін азайтатындықтан, оңтайлы h алты фигуралық есептеулерге қарағанда кішірек (шамамен 0,02).

Ричардсон экстраполяциясы

Ричардсон экстраполяциясы – белгілі бір сандық есептеулердің дәлдігін арттырудың қарапайым әдісі, соның ішінде ақырлы айырымдар жуықтауы.

Қандай да бір G шамасының жуықтап есептеу құралы бар делік. Сонымен қатар, нәтиже h параметріне тәуелді делік. Жуықтауды $g(h)$ арқылы белгілей отырып, бізде $G = g(h) + E(h)$ бар, мұндағы $E(h)$ қателікті білдіреді. Ричардсон экстраполяциясы қателікті жоя алады, егер оның $E(h) = ch^p$ пішіні болса, c және p тұрақты болады. Біз h-тың кейбір мәні бар $g(h)$ есептеуден бастаймыз, айталық $h = h_1$ болсын. Бұл жағдайда бізде бар

$$G = g(h_1) + \ ch_1^p \qquad (i)$$

Содан кейін $h = h_2$ арқылы есептеуді қайталаймыз, осыдан

$$G = g(h_2) + \ ch_2^p \qquad (j)$$

c-ны жойып және (i) және (j) теңдеулерді G-ды тапсақ

$$G = \frac{(h_1/h_2)^p g(h_2) - g(h_1)}{(h_1/h_2)^p - 1} \qquad (9)$$

бұл Ричардсон экстраполяция формуласы. Әдетте $h_2 = h_1/2$ пайдаланылады, бұл жағдайда (8) теңдеу мына түрде болады

$$G = \frac{2^p g(h_1/2) - g(h_1)}{2^p - 1} \qquad (10)$$

Ричардсон экстраполяциясын оны $x = 1$ кезінде $(e^{-x})''$-ты ақырлы айырымдар жуықтауына қолдану арқылы көрсетейік. Біз алты таңбалы дәлдікпен жұмыс істейміз және 4-кестедегі нәтижелерді қолданамыз. Экстраполяция тек жуықтау қателігінде жұмыс істейтіндіктен, біз h мәнін шамалы дөңгелектеуді тудыратын мәндермен шектеуіміз керек. 4-кестеде бізде

$$g(0.64) = 0.380\,610 \qquad g(0.32) = 0.371\,035$$

Орталық айырымдар жуықтауындағы қателік $E(h) = \mathcal{O}(h^2) = c_1h^2 + c_2h^4 + c_3h^6 + \ldots$шамасына тең. Сондықтан, егер (9) теңдеуге $p = 2$ және $h_1 = 0.64$ орнына қойсақ, бірінші (басым) қателік мүшесін жоя аламыз. Нәтижесінде:

$$G = \frac{2^2g(0.32) - g(0.64)}{2^2 - 1} = \frac{4(0.371\,035) - 0.380\,610}{3} = 0.367\,843$$

бұл $\mathcal{O}(h^4)$ қателігімен $(e^{-x})''$-ты жуықтауы. Оның 4-кестедегі сегіз таңбалы дәлдікпен есептеулер арқылы алынған ең жақсы нәтиже сияқты дәл екенін көруге болады.

МЫСАЛ 1

Біркелкі орналасқан деректер нүктелерін ескере отырып,

x	0	0.1	0.2	0.3	0.4
$f(x)$	0.0000	0.0819	0.1341	0.1646	0.1797

$x = 0$ және 0.2 кезінде $f'(x)$ және $f''(x)$мәндерін $\mathcal{O}(h^2)$ ақырлы айырымдар жуықтауы арқылы есептеңіз.

Шешуі. Біз $\mathcal{O}(h^2)$ ақырлы айырымдар жуықтауын қолданамыз. 3а-кестедегі оң жақ айырымдар кестелерінен аламыз

$$f'(0) = \frac{-3f(0) + 4f(0.1) - f(0.2)}{2(0.1)} = 0.967$$

$$f''(0) = \frac{2f(0) - 5f(0.1) + 4f(0.2) - f(0.3)}{(0.1)^2} = -3.77$$

1-кестедегі орталық айырымдар жуықтауы бізге мынаны береді

$$f'(0.2) = \frac{-f(0.1) + f(0.3)}{2(0.1)} = 0.4135$$

$$f''(0.2) = \frac{f(0.1) - 2f(0.2) + f(0.3)}{(0.1)^2} = -2.17$$

МЫСАЛ 2

$f'(0)$ мәнін барынша дәл есептеу үшін 1-мысалдағы деректерді пайдаланыңыз.

Шешуі. Есепті шешу жолдарының бірі – Ричардсон экстраполяциясын ақырлы айырымдар жуықтауына қолдану болып табылады. Біз $f'(0)$үшін $\mathcal{O}(h^2)$ оң жақ айырымдардың екі жуықтауынан бастаймыз: біреуі $h = 0.2$, екіншісі $h = 0.1$. 3а-кестедегі $\mathcal{O}(h^2)$ формулаларына сілтеме жасай отырып, келесіні аламыз

$$g(0.2) = \frac{-3f(0) + 4f(0.2) - f(0.4)}{2(0.2)} = 0.8918$$

$$g(0.1) = \frac{-3f(0) + 4f(0.1) - f(0.2)}{2(0.1)} = 0.9675$$

Еске салайық, екі жуықтаудағы қате $E(h) = c_1h^2 + c_2h^4 + c_3h^6 + \ldots$түрінде болады. Біз енді Ричардсон экстраполяциясын пайдалана аламыз, (9)теңдеудегі басты қателік мүшесін жою үшін $p = 2$ қоямыз

$$f'(0) \approx G = \frac{2^2 g(0.1) - g(0.2)}{2^2 - 1} = \frac{4(0.9675) - 0.8918}{3} = 0.9927$$

бұл $\mathcal{O}(h^4)$ шамасымен ақырлы айырымдар жуықтауы.