Numbriline diferentseerimine

Loeng 11

MTMM.00.005 Numbrilised meetodid

29.04.2019

Ülesanne 39 Ülesanne 40

Ülesande püstitus

Antud on sõlmed $x_0, \ldots, x_n$ ja neile vastavad arvud $f_0 = f(x_0), \ldots,$ $f_n = f(x_n)$. Kui interpolatsiooniülesandes tuli taastada funktsioon f, siis nüüd tuleb taastada funktsiooni f tuletis või kõrgemat järku tuletised.

Üks võimalus on funktsiooni f lähendada interpoleeriva funktsiooniga φ,

$$f(x) = \varphi(x) + R(x),$$

siis diferentseerimisel saadakse

$$f'(x) = \varphi'(x) + R'(x)$$

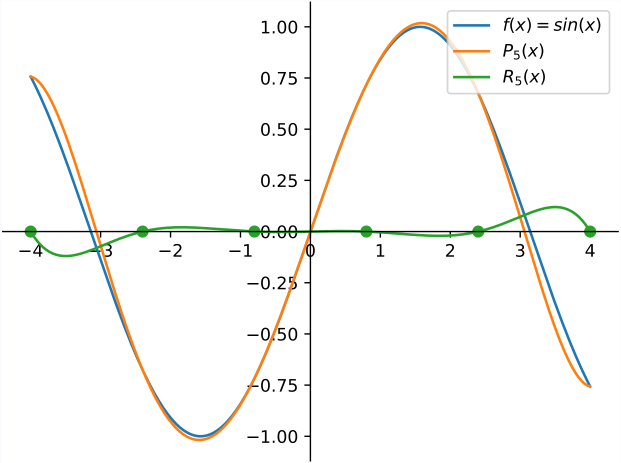
ja $f'(x)$ saab lähendada funktsiooniga $\varphi'(x)$. Analoogiliselt

$$f^{(k)}(x) = \varphi^{(k)}(x) + R^{(k)}(x)$$

ning $f^{(k)}(x)$ asemel võib kasutada $\varphi^{(k)}(x)$. Peab aga arvestama, et kui $R(x)$ on väike, siis $R'(x), \ldots, R^{(k)}(x)$ ei tarvitse olla väikesed.

Näide

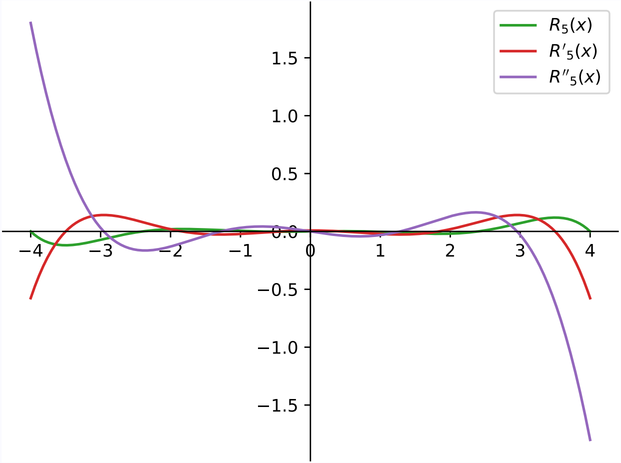
Lähendame funktsiooni $f(x) = \sin(x)$ 5-astme interpolatsiooni-polünoomiga ühtlasel võrgul. Viga $|R_5(x)| = |f(x) - P_5(x)| \leq 0.12$.



Ülesande püstitus

Näide jätkub

Lähendades tuletisi interpolatsioonipolünoomi tuletistega, viga kasvab:
$|R_5(x)| \leq 0.12$, $|R_5'(x)| \leq 0.58$, $R_5''(x)| \leq 1.81$.



Numbrilise diferentseerimise valemid ühtlasel võrgul

Olgu antud sõlmed $x_i = x_0 + ih$, $i = -n, \ldots, n$, ning vastavad funktsiooniväärtused $f_i = f(x_i)$. Vaatleme järgnevas olulisemaid praktikas ettetulevaid valemeid:

kolme sõlme valemid:

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}(f_1 - f_{-1}) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \qquad \xi \in [x_{-1}, x_1],$$
$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}(f_{-1} - 2f_0 + f_1) - \frac{h^2}{12} f^{IV}(\xi), \qquad \xi \in [x_{-1}, x_1],$$

viie sõlme valemid:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}(f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2) + \frac{h^4}{30} f^{V}(\xi), \qquad \xi \in [x_{-2}, x_2],$$
$$f'''(x_0) = \frac{1}{2h^3}(-f_{-2} + 2f_{-1} - 2f_1 + f_2) - \frac{h^2}{4} f^{V}(\xi), \qquad \xi \in [x_{-2}, x_2].$$

Numbrilise diferentseerimise valemid ühtlasel võrgul

Tuletame nendest valemitest esimese kujul

$$f'(x) = \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) - \frac{h^2}{6}f'''(\xi).$$

Eeldame, et $f \in C^3[x-h, x+h]$. Kasutame Taylori arendisi

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1), \quad \xi_1 \in [x, x+h],$$
$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2), \quad \xi_2 \in [x-h, x],$$

siis

$$\frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) = \frac{1}{2h}\left(2hf'(x) + \frac{h^3}{6}(f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2))\right) =$$
$$= f'(x) + \frac{h^2}{6} \cdot \frac{f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)}{2}.$$

Numbrilise diferentseerimise valemid ühtlasel võrgul

Jääb näidata, et eksisteerib $\xi \in [x-h, x+h]$ nii, et

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

Eeldusel $f \in C^3[x-h, x+h]$ kehtib

$$2 \min_{x-h \le z \le x+h} f'''(z) \le f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2) \le 2 \max_{x-h \le z \le x+h} f'''(z)$$

ehk

$$\min_{x-h \le z \le x+h} f'''(z) \le \frac{f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)}{2} \le \max_{x-h \le z \le x+h} f'''(z).$$

Pidev funktsioon f''' saavutab kõik väärtused miinimumi ja maksimumi vahel, seepärast on olemas $\xi \in [x-h, x+h]$ nii, et $\frac{f'''(\xi_1)+f'''(\xi_2)}{2} = f'''(\xi)$.

Numbrilise diferentseerimise valemid ühtlasel võrgul

Teine võimalus diferentsvalemite tuletamiseks on madala astme Lagrange'i interpolatsioonivalemi diferentseerimine.

Vaatleme Lagrange'i interpolatsioonivalemit ühtlasel võrgul $x_{-1} = x_0 - h$, x_0, $x_1 = x_0 + h$,

$$f(x) = \sum_{i=-1}^{1} f_i \ell_{2i}(x) + R_2(x) = \sum_{i=-1}^{1} f_i \prod_{\substack{j=-1 \\ j \neq i}}^{1} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} + \frac{f'''(\xi)}{3!} \prod_{j=-1}^{1} (x - x_j).$$

Diferentseerides saame

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \sum_{i=-1}^{1} f_i \ell'_{2i}(x_0) + R'_2(x_0) = f_{-1} \frac{-h}{2h^2} + f_0 \frac{0}{-h^2} + f_1 \frac{h}{2h^2} + \frac{f'''(\xi)}{6}(-h^2) \\ &= \frac{1}{2h}(f_1 - f_{-1}) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \quad \xi \in [x_{-1}, x_1]. \end{aligned}$$

Ülesanne

39. Tuletada ülejäänud kolm numbrilise diferentseerimise valemit vastavalt eeldustel, et $f \in C^4$ või $f \in C^5$.

Näide

Kasutame valemeid

$$f'(x_0) = \frac{1}{2h}(f_1 - f_{-1}) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi) =: \tilde{f}'(x_0) + R_1$$

ja

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h}(f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2) + \frac{h^4}{30} f^{V}(\xi) =: \tilde{f}'(x_0) + R_2,$$

et leida funktsiooni $f(x) = x^4 - 3x$ tuletis punktis 1.2.

h	$\tilde{f}'(1.2)$	R_1	$\tilde{f}'(1.2)$	R_2
0.1	3.96000	-0.04800	3.912	0
0.05	3.92400	-0.01200	3.912	0
0.01	3.91248	-0.00048	3.912	0
0.005	3.91212	-0.00012	3.912	0

Vigade mõju numbrilisel diferentseerimisel

Numbrilisel diferentseerimisel (nagu ka interpoleerimisel) tähendab **tingimatu viga** ebatäpsusi funktsiooni väärtuste f_i leidmisel (vead mõõtmistulemustes või katseandmetes), **tinglik viga** on aga jääkliikme suurus või selle hinnang.

Kui vähendada jääkliiget, suureneb tingimatu vea mõju. Vaatleme selleks järgmist näidet.

Vigade mõju numbrilisel diferentseerimisel

Taylori arendisest $f(x_0+h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(\xi)$ saame numbrilise diferentseerimise valemi

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

Olgu $f \in C^2[x_0, x_0+\delta], |f''(x)| \le M, f_i = f(x_i), i = 0, 1.$ Leitakse $\tilde{f}_0 = f_0 \pm \varepsilon$, $\tilde{f}_1 = f_1 \pm \varepsilon$ ja arvutatakse $\frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h}$ kui tuletise $f'(x_0)$ lähend. Siis

$$\begin{aligned}\left|\frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h} - f'(x_0)\right| &= \left|\frac{\tilde{f}_1 - \tilde{f}_0}{h} - \frac{f_1 - f_0}{h} + \frac{f''(\xi)h}{2}\right| = \\ &= \left|\frac{\tilde{f}_1 - f_1}{h} - \frac{\tilde{f}_0 - f_0}{h} + \frac{f''(\xi)h}{2}\right| \le \\ &\le \frac{2\varepsilon}{h} + \frac{M}{2}h = g(h).\end{aligned}$$

Kui $h \to 0$, siis $\frac{M}{2}h \to 0$ (jääkliikme hinnang ehk tinglik viga väheneb), kuid $\frac{2\varepsilon}{h} \to \infty$ (tingimatu vea ε mõju suureneb).

Vigade mõju numbrilisel diferentseerimisel

Funktsiooni $g(h) = \frac{2\varepsilon}{h} + \frac{M}{2}h$ uurimisel saame $g'(h) = -\frac{2\varepsilon}{h^2} + \frac{M}{2}$ ja $g'(h) = 0$ annab $h = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{M}}$. Seejuures $g''(h) = \frac{4\varepsilon}{h^3} > 0$, mis tähendab, et $h = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{M}}$ korral on avaldis $g(h)$ minimaalne.

Praktikas võib see tähendada seda, et kui andmed f_i on saadud liiga väikese sammuga, tuleb osadest andmetest loobuda.

Näide

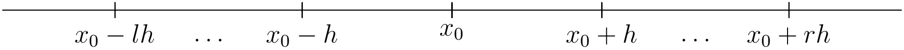
Kasutame valemit $f'(x) \approx \frac{1}{2h}\left(f(x+h) - f(x-h)\right)$, et leida funktsiooni $f(x) = \sin x$ tuletis punktis 0.8. Algandmed esitame 5 komakohaga ehk täpsusega $\varepsilon = 0.5 \cdot 10^{-5}$.

h	$\tilde{f}'(0.8)$	$f'(0.8) - \tilde{f}'(0.8)$
0.1	0.69555	0.00116
0.05	0.69640	0.00031
0.02	0.69675	-0.00004
0.01	0.69700	-0.00029
0.005	0.69700	-0.00029
0.002	0.69750	-0.00079
0.001	0.69500	0.00171

Täpseima tulemuse annab sammupikkus $h = 0.02$ (antud valemi ja fikseeritud ε korral).

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Vaatleme võrdsete vahemike tagant paiknevaid sõlmi $x_0 - lh, \dots, x_0 + rh$, kus $l, r \geq 0$.



Olgu antud numbrilise diferentseerimise valem

$$f^{(k)}(x_0) = \frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^{r} b_i f(x_0 + ih) + R_h(f). \tag{1}$$

Loeme k, l, r ja kordajad b_i fikseerituks. Valemis (1) esinevat osa $\frac{1}{h^k} \sum\limits_{i=-l}^{r} b_i f(x_0 + ih)$ nimetame diferentsavaldiseks.

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Definitsioon

Ütleme, et valem (1) või selles esinev diferentsavaldis koondub, kui iga funktsiooni $f \in C^k[x_0 - \delta, x_0 + \delta]$ korral protsessis $h \to 0$

$$\frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^{r} b_i f(x_0 + ih) \to f^{(k)}(x_0) \qquad (\text{ehk } R_h(f) \to 0).$$

Rõhutame, et koondumist käsitletakse siin protsessis, kus sõlmi ei võeta juurde, vaid nendevaheline kaugus väheneb piiramatult, kusjuures kasutatavad sõlmed paiknevad etteantud šablooni kohaselt.

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Võtame kasutusele diferentsavaldise karakteristliku funktsiooni

$$\chi(z) = \sum_{i=-l}^{r} b_i z^i,$$

kus vaatame $\chi\colon \mathbb{C} \to \mathbb{C}$ või $\chi\colon \mathbb{C} \setminus \{0\} \to \mathbb{C}$. Osutub, et valemi (1) paljud omadused sõltuvad selle funktsiooni käitumisest.

Teoreem

Selleks, et numbrilise diferentseerimise valem (1) koonduks, on tarvilik ja piisav, et

$$\chi(1) = 0,\ \chi'(1) = 0, \dots, \chi^{(k-1)}(1) = 0,\ \chi^{(k)}(1) = k! \tag{2}$$

Numbriline diferentseerimise valemite koonduvus

Näide

Vaatleme numbrilise diferentseerimise valemit

$$f'''(x_0) = \frac{1}{2h^3}(-f(x_0-2h)+2f(x_0-h)-2f(x_0+h)+f(x_0+2h)) \underbrace{-\frac{h^2}{4}f^V(\xi)}_{R_h(f)}.$$

Moodustame karakteristliku funktsiooni

$$\chi(z) = \sum_{i=-2}^{2} b_i z^i = -\frac{1}{2z^2} + \frac{1}{z} - z + \frac{1}{2}z^2.$$

Kontrollime tingimusi (2): $\chi(1) = 0$, $\chi'(z) = \frac{1}{z^3} - \frac{1}{z^2} - 1 + z$, $\chi'(1) = 0$, $\chi''(z) = -\frac{3}{z^4} + \frac{2}{z^3} + 1$, $\chi''(1) = 0$, $\chi'''(z) = \frac{12}{z^5} - \frac{6}{z^4}$, $\chi'''(1) = 6 = 3!$, seega teoreemi põhjal

$$\frac{1}{2h^3}(-f(x_0-2h)+2f(x_0-h)-2f(x_0+h)+f(x_0+2h)) \underset{h\to 0}{\to} f'''(x_0).$$

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Teoreemi tõestus. Kasutame diferentsavaldises Taylori arendisi

$$\frac{1}{h^k}\sum_{i=-l}^{r} b_i f(x_0+ih) =$$

$$= \frac{1}{h^k}\sum_{i=-l}^{r} b_i \left(f(x_0) + f'(x_0)ih + \frac{f''(x_0)}{2} i^2h^2 + \cdots + \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!} i^k h^k + \alpha_i \right) =$$

$$= \frac{f(x_0)}{h^k}\left(\sum_{i=-l}^{r} b_i\right) + \frac{f'(x_0)}{h^{k-1}}\left(\sum_{i=-l}^{r} b_i i\right) + \frac{f''(x_0)}{2h^{k-2}}\left(\sum_{i=-l}^{r} b_i i^2\right) + \ldots +$$

$$+ \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}\left(\sum_{i=-l}^{r} b_i i^k\right) + \sum_{i=-l}^{r} b_i \frac{\alpha_i}{h^k}$$

kus $\frac{\alpha_i}{h^k} \to 0$ protsessis $h \to 0$, kui $f \in C^k$.

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Vaatame võrdusi

$$\begin{cases} \sum_{i=-l}^{r} b_i = 0 & (f(x_0) \text{ kordaja}), \\ \sum_{i=-l}^{r} b_i i = 0 & (f'(x_0) \text{ kordaja}), \\ \sum_{i=-l}^{r} b_i i^2 = 0 & (f''(x_0) \text{ kordaja}), \\ \dots \\ \sum_{i=-l}^{r} b_i i^{k-1} = 0, \\ \sum_{i=-l}^{r} b_i \frac{i^k}{k!} = 1 & \text{ehk} \quad \sum_{i=-l}^{r} b_i i^k = k! \end{cases} \tag{3}$$

Arvestades, et $\sum_{i=-l}^{r} b_i \frac{\alpha_i}{h^k} \to 0$, kui $h \to 0$, saame, et tingimuste (3) täidetuse korral (1) koondub ehk $R_h(f) \to 0$ iga $f \in C^k$ korral.

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Teisipidi, eeldame, et (1) koondub ehk $R_h(f) \to 0$ iga $f \in C^k$ korral protsessis $h \to 0$. Kasutame testfunktsiooni f, mille korral

$$f(x_0) = 1, f'(x_0) = 0, \ldots, f^{(k)}(x_0) = 0,$$

siis saame esimese võrduse (3). Kui võtame f nii, et

$$f(x_0) = 0, f'(x_0) = 1, \ldots, f^{(k)}(x_0) = 0,$$

saame teise võrduse (3), kui aga f on selline, et

$$f(x_0) = 0, \ldots, f^{(k-1)}(x_0) = 0, f^{(k)}(x_0) = 1,$$

saame viimase võrduse (3). Sobivad testfunktsioonid on näiteks $f(x) = \frac{(x-x_0)^j}{j!}$, $j = 0, 1, \ldots, k$.

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Senise aruteluga oleme näidanud, et (1) koondub parajasti siis, kui kehtivad võrdused (3). Teoreemi väites olid aga võrdused

$$\begin{cases} \chi(1) &= \sum_{i=-l}^{r} b_i = 0, \\ \chi'(1) &= \sum_{i=-l}^{r} b_i i = 0, \\ \chi''(1) &= \sum_{i=-l}^{r} b_i i(i-1) = 0, \\ \dots & \\ \chi^{(k-1)}(1) &= \sum_{i=-l}^{r} b_i i(i-1)\dots(i-(k-2)) = 0, \\ \chi^{(k)}(1) &= \sum_{i=-l}^{r} b_i i(i-1)\dots(i-(k-1)) = k! \end{cases} \tag{4}$$

Esimesed kaks võrdust on komplektides (4) ja (3) samad. Arvestades teist võrdust on samaväärsed ka kolmandad. Selliselt jätkates (4) $\Leftrightarrow$ (3). $\square$

Ülesanne

40. **Ülesanne*** (1 p) Tõestada, et valem (1) koondub parajasti siis, kui tema karakteristlik funktsioon avaldub $\chi(z) = z^{-l}(z-1)^k Q(z)$, kus Q on polünoom ning $Q(1) = 1$.

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Näidetena vaatleme valemeid

1. $f'(x) = \frac{1}{h}(f(x+h) - f(x)) - \frac{h}{2} f''(\xi)$,
2. $f'(x) = \frac{1}{2h}(f(x+h) - f(x-h)) - \frac{h^2}{6} f'''(\xi)$,
3. $f''(x) = \frac{1}{h^2}(f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)) - \frac{h^2}{12} f^{\mathrm{IV}}(\xi)$.

Jääkliikmetele saab sellise esituse anda siis, kui $f \in C^2$, $f \in C^3$ ja $f \in C^4$ vastavalt valemile.

Esimeses valemis karakteristlik funktsioon on $\chi(z) = z - 1$, siis $\chi(1) = 0$, $\chi'(z) = 1$, $\chi'(1) = 1$! Teises valemis $\chi(z) = \frac{1}{2}\left(z - \frac{1}{z}\right)$, $\chi(1) = 0$, $\chi'(z) = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{1}{z^2}\right)$, $\chi'(1) = 1$! Kolmandas valemis $\chi(z) = z - 2 + \frac{1}{z}$, $\chi(1) = 0$, $\chi'(z) = 1 - \frac{1}{z^2}$, $\chi'(1) = 0$, $\chi''(z) = \frac{2}{z^3}$, $\chi''(1) = 2$! Seega, kui $f \in C^1$, siis esimeses ja teises valemis diferentsavaldis koondub tuletiseks, kui aga $f \in C^2$, siis kolmandas valemis diferentsavaldis koondub teiseks tuletiseks, kui $h \to 0$.

Numbrilise diferentseerimise valemite koonduvus

Jääkliikmete järgi saab otsustada valemite koonduvuskiiruse üle. Öeldakse, et valem (1) koondub kiirusega h^m, kui $|R_h(f)| \leqslant ch^m$ küllalt sileda funktsiooni f korral. Esimeses valemis on koonduvuskiirus h, teises ja kolmandas valemis h^2. Koonduvuskiirust valemis (1) on võimalik leida diferentsavaldise järgi, kasutades pikemaid Taylori arendisi.