Санкт-Петербургский Государственный Университет

Вычислительный практикум

Нахождение производных таблично-заданной функции по формулам численного дифференцирования

Борис Мельников
b.melnikov17@gmail.com

под руководством Алцыбеева Глеба Олеговича
Преподаватель & Ассистент

май, 2023

Содержание

1 Введение

В очередной раз рассмотрим важную практическую задачу, которую в повседневной жизни часто приходится решать студенту математического факультета. Всем известно, что во многих алгоритмах, например, в поиске приближенного значения корня уравнения методом секущих, важно знание значениий производной функции в конкретной точке. Но порой даже этого мало – необходимы вычисленные значения производных высших порядков в той же точке.

Целью работы ставилось знакомство с методами вычисления данных значений и анализ корректности задачи численного дифференцирования как таковой. В ходе работы были сделаны попытки реализовать удобный для использования интерфейс между пользователем и компьютером через встроенное в Windows 11 решение PowerShell.

2 Постановка задачи

Пусть задана таблица значений вещественной функции $y = f(x)$:

x	$f(x)$
x_0	$f(x_0)$
x_1	$f(x_1)$
$\dots$	$\dots$
x_n	$f(x_n)$

Требуется найти значения производных функций $f'(x)$ и $f''(x)$ с погрешностью $O(h^2)$ для каждого из узлов из таблицы.

В качестве ответа выводить таблицу, где отражены следующие данные: x_i, $f(x_i)$, $f'_{alg}(x_i)$, $|f'_{alg}(x_i) - f'(x)|$, $\left|\frac{|f'_{alg}(x_i)-f'(x)|}{f'_{alg}(x_i)}\right|$, $f''_{alg}(x_i)$, $|f''_{alg}(x_i) - f''(x)|$, $\left|\frac{|f''_{alg}(x_i)-f''(x)|}{f''_{alg}(x_i)}\right|$.

3 Необходимая теория

3.1 Некорректность задачи

Довольно необычно, что поставленная задача на самом деле является некорректной. Далее покажем почему.

По определению прозводная функция есть предел $\lim\limits_{h\to 0} \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$ – видим, что что при уменьшении значения h уменьшается и модуль разности значений функции в точках $x + h$ и x. На парктике подобное приведет к тому, что влияние ошибки при вычислении соответствующих значений $f(x+h)$ и $f(x)$ будет расти, что может быть критично. Также нужно помнить про декларацию типа `double`, чтобы не допустить ситуации, когда решение зависит от значений, не входящих в разрядную сетку типа.

Конечно, объяснения выше не имеют ничего общего со строгим доказательством того, что задача некорректна, а лишь косвенно наводят на мысли, что проблемы при вычислении производных все же могут появиться. Но теперь мы введем определение, какую задачу будем называть корректной:

Опр. Задача называется корректной, если ее решение существует, единственно и непрерывно зависит от исходных данных.

Покажем, что для поставленной задачи нет непрерывной зависимости от исходных данных, т.е. малым изменениям начальных данных соответствуют сильные изменения в решении.

Пусть дана функция $f(x) = 1/x^2$, по которой построим функцию $\tilde{f}(x) = f(x) + \frac{1}{n} \cdot sin(n^2 x)$. Тогда $err = \max|\tilde{f}(x) - f(x)| = \frac{1}{n} \cdot sin(n^2 x) = \frac{1}{n}$, и очевидно, что $err \xrightarrow[n\to\infty]{} 0$. Но $\tilde{f}'_x(x) = f'(x) + n \cdot cos(n^2 x)$, и тогда $err' = \max|\tilde{f}'(x) - f'(x)| = n \cdot \max|cos(n^2 x)| \xrightarrow[n\to\infty]{} \infty$ – противоречит определению корректности.

3.2 Формулы численного дифференцирования

Как будет ниже описано, таблица из условия представляет собой упорядоченные значения с шагом h, поэтому для каждой точки можно использовать следующие соображения: будем строить интерполирующий функцию $f(x)$ многочлен 2-го порядка $P_2(x)$ методом Ньютона, а поскольку точки равноотостоят друг от друга, можем в качестве 2-го и 3-го узлов для построения использовать узлы с индексами $i-1$ и $i+1$ (в качестве 1-го узла выбирается тот, в точке которого вычисляются значения производных; затем строим производные функции $P'_2(x)$ и $P''_2(x)$. Ясно, что для 1-ой и последней точек таблицы не существуют узлы с индексами $0-1$ и $n+1$ соответственно – заменим эти узлы узлами с индексами 2 и $n-2$ соответственно. Получим следующие результаты:

1) $i = 0$: $P_2(x) = f(a) + f(a; a+h) \cdot (x-a) + f(a; a+h; a+2h) \cdot (x-a)(x-a-h)$;
2) $i \neq 0, n$: $P_2(x) = f(a-h) + f(a-h; a) \cdot (x-a-h) + f(a-h; a; a+h) \cdot (x-a+h)(x-a)$;
3) $i = n$: $P_2(x) = f(a-2h) + f(a-2h; a-h) \cdot (x-a+2h) + f(a-2h; a-h; a) \cdot (x-a+2h)(x-a+h)$;

И тогда производные $P'_2(x)$ и $P''_n(x)$ записываются так:

$\underline{i = 0}$:

$P'_2(x) = f(a; a+h) + 2 \cdot f(a; a+h; a+2h) \cdot (x - a - \frac{h}{2})$;

$P''_2(x) = 2 \cdot f(a; a+h; a+2h)$;

$\underline{i \neq 0, n}$:

$P'_2(x) = f(a-h; a) + 2 \cdot f(a-h; a; a+h) \cdot (x - a + \frac{h}{2})$;

$P''_2(x) = 2 \cdot f(a-h; a; a+h)$;

$\underline{i = n}$:

$P'_2(x) = f(a-2h; a-h) + 2 \cdot f(a-2h; a-h; a) \cdot (x - a + \frac{3h}{2})$;

$P''_2(x) = 2 \cdot f(a-2h; a-h; a)$;

Тогда производные в точке a можно записать так:

$\underline{i = 0}$:

$P'_2(a) = f(a; a+h) - h \cdot f(a; a+h; a+2h)$;

$P''_2(a) = -h \cdot f(a; a+h; a+2h)$;

$\underline{i \neq 0, n}$:

$P'_2(a) = f(a-h; a) + h \cdot f(a-h; a; a+h)$;

$P''_2(h) = h \cdot f(a-h; a; a+h)$;

$\underline{i = n}$:

$P'_2(a) = f(a-2h; a-h) + 3h \cdot f(a-2h; a-h; a)$;

$P''_2(x) = 3h \cdot f(a-2h; a-h; a)$;

3.3 Точность представленных формул

В первом пункте данной секции мы установили, что здача численного дифференцирования некорректна, однако приближенные значения для производных функции $f(x)$ выражаем как значения производных интерполирующего многочлена $P_n(x) \approx f(x)$. Может сложиться ложное впечатление, что используемый подход неверен, однако следующие пояснения развеят сомнения.

Понятно, что т.к. $P_n(x) \approx f(x)$, то $P_n^{(k)}(x) \approx f^{(k)}(x)$, и нужно определить, насколько сильно значение $P_n^{(k)}(x)$ близко к $f^{(k)}(x)$, т.е. установить, насколько велико значение $R_n^{(k)}(x) = P_n^{(k)}(x) - f^{(k)}(x)$. Следующая теорема дает ответ на этот вопрос:

Теорема Пусть функция f имеет конечную производную порядка $n+1$ на отрезке $[a,b]$, где $a = \min\{x_0,\dots,x_n,\tilde{x}\}$, $b = \max\{x_0,\dots,x_n,\tilde{x}\}$. Тогда справедливо выражение:

$$R_n^{(k)}(\tilde{x}) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!}\omega_{n+1}^{(k)}(\tilde{x})$$

если выполнено одно из следующих условий:

1) $x_i \notin (\alpha,\beta)$, где $\alpha = \min\{x_0,\dots,x_n\}$, $\beta = \max\{x_0,\dots,x_n\}$;

2) $k = 1$ и $\tilde{x} = x_i$.

Если оба условия выполнены одновременно, то $\omega_{n+1}^{(k)}(\tilde{x}) \neq 0$.

Задача предполагает нахождение производных в узлах интерполирования, поэтому для производных 1-го порядка сразу же выполняется условие 1 из теоремы, поэтому можем дать следующие оценки:

$i = 0$:

$\omega_3'(a) = 2h^2$; $R_2'(a) = \frac{f^{(3)}(\xi_1)}{6} \cdot 2h^2 = O(h^2)$;

$\omega_3'(a) = -h^2$; $R_2'(a) = \frac{f^{(3)}(\xi_2)}{6} \cdot (-h^2) = O(h^2)$;

$\omega_3'(a) = 2h^2$; $R_2'(a) = \frac{f^{(3)}(\xi_3)}{6} \cdot 2h^2 = O(h^2)$;

Для оценки точности производных формул используется метод неопределенных коэффициентов построения формул численного дифференцирования (объясняется в [2]), который дает оценку $R_2^(2)(a) = -\frac{h^2}{12} \cdot f^{(4)}(\xi_4) = O(h^2)$.

Остается рассмотреть вопрос того, насколько малый h нужно брать при вычислениях. Покажем, что максимально близкое к 0 значение выбирать нецелесообразно, поскольку существует такое значение h_{opt}, при котором значение ошибки $R_n^{(k)}(a)$ минимально (иными словами, скажем о неустранимой ошибке). Например, значение производной в точке a вычисляется как $\tilde{f}'(a) = \frac{\tilde{f}(a+h)-\tilde{f}(a)}{h}$, где $\tilde{f}(a+h) = f(a+h)+\varepsilon_0$, $\tilde{f}(a) = f(a)+\varepsilon_1$. В таком случае $R_1'(a) = -\frac{f''(\xi_opt}{2} \cdot h$ и при этом $\rho = f'(a) - \tilde{f}'(a) = R_1'(a) - \frac{\varepsilon_0-\varepsilon_1}{h}$. Пусть $|\varepsilon_0, 1| \le \varepsilon$, тогда $\rho \le R_1'(a) + \frac{2\varepsilon}{h} = \frac{mh}{2} + \frac{2\varepsilon}{h} = \zeta(h)$. Найдя точки экстремума для $\zeta(h)$, поймем, что минимум достигается при $h_{opt} = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{m}}$, и при этом неустранимая ошибка будет равна $\zeta(h_{opt} = 2\sqrt{m\varepsilon}$.

4 Практическая реализация

Итак, теперь опишем данные для задачи, которую предстоит решить. Будем решать задачу из варианта #10 со следующими начальными данными:

$f(x) = exp(1.5 * x)$;

$a = 0$;

$h = 0.0001$;

$m = 20$;

Перед непосредственным подсчетом значений производных в узлах, зададим сами узлы: будет $m+1$ узел, каждый последующий из которых получается прибавлением к предыдущему числа h, т.е. $a_{i+1} = a_i$, где $a_0 = a$. Значения m, a, h хранятся в соответствующих константах `int m`, `fouble a`, `double h`. Соответствующие значения функции $f(x)$ вычисляются в функции `double f(double x)`, в теле которой прописано `exp(1.5 * x)`.

Выше установили формулы для вычисления производных в точке. После подсчета разделенных разностей, получим следующие формулы:

$f'(x_0) = \frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h}$;

$f''(x_0) = \frac{f(x_0)-2f(x_1)+f(x_2)}{h^2}$;

$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}$;

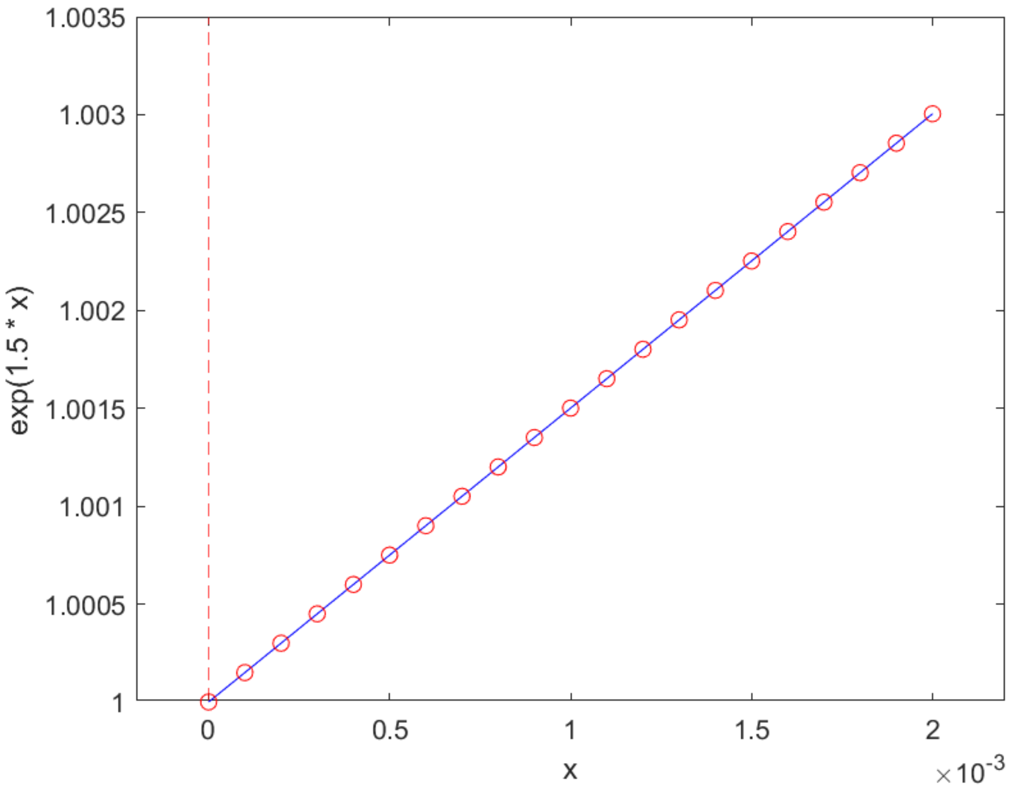

Рис. 1: График $f(x)$ на отрезке и соответствующие $m+1$ узлы

$f''(x_i) = \frac{f(x_{i-1})-2f(x_1)+f(x_{i+1})}{h^2}$;
$f'(x_m) = \frac{f(x_{m-2})-4f(x_{m-1})+3f(x_m)}{2h}$;
$f''(x_m) = \frac{f(x_{m-2})-2f(x_{m-1})+f(x_m)}{h^2}$;

Все подсчеты производятся в теле функции `int main()`.

Естественный вывод, который можно сделать, – при увеличении значения шага h растет значение ошибки вычисленных производных $f'(x)$ и $f''(x)$:

h = 0.0001

```
Output:
     val_1.1          val_1.2          val_2.1          val_2.2
1.125006e-08     7.500037e-09     3.375163e-04     1.499848e-04
5.625734e-09     3.749927e-09     8.984129e-09     3.992347e-09
5.626291e-09     3.749736e-09     1.168684e-08     5.192593e-09
5.627494e-09     3.749975e-09     3.922078e-09     1.742361e-09
5.628718e-09     3.750228e-09     1.212291e-08     5.384729e-09
```

h = 1

```
Output:
     val_1.1          val_1.2          val_2.1          val_2.2
4.079390e+00     1.581533e+00     9.872159e+00     8.143895e-01
2.820235e+00     2.955363e-01     2.038358e+00     1.681514e-01
1.263942e+01     2.955363e-01     9.135288e+00     1.681514e-01
5.664593e+01     2.955363e-01     4.094152e+01     1.681514e-01
2.538695e+02     2.955363e-01     1.834872e+02     1.681514e-01
```

Ссылка на репозиторий: `https://github.com/BoriskaCat/-CM-Projects.git`

```
Output:
output.txt
```

Список литературы

[1] Лебедева А.В., Пакулина А.Н. Практикум по методам вычислений. Часть 1. СПб., СПбГУ. 2021. 156 - стр.

[2] Мысовских И.П. Лекции по методам вычислений. СПб., СПбГУ. 1998. 463 - стр.