فصل ۴

مشتق‌گیری عددی

۱.۴ مقدمه

اگر تابعی مشتق‌پذیر چون f داده شده باشد می‌توان برای یافتن مشتقِ آن اقدام کرد. با این حال اگر ضابطه‌ی تعریف f پیچیده باشد تعیین مشتق به صورت تحلیلی ممکن است چندان خوشایند نباشد. در چنین مواقعی ممکن است استفاده از مشتق‌گیری عددی بجای مشتق‌گیری تحلیلی مطلوب باشد. در این راهکار، تنها از ((مقدار)) تابع در برخی نقاط استفاده می‌شود.

موقعیت مهم دیگری که مشتق‌گیری عددی چاره‌ساز است هنگامی است که اصولا ضابطه‌ی تعریف تابع وجود نداشته و تمام آنچه داریم جدولی از مقادیر گسسته‌ی تابع در برخی نقاط است. این موقعیت به خصوص در کارهای عملی مثلا در آزمایشگاه پیش می‌آید.

فرمول‌های مشتق‌گیری عددی برای حل عددی معادلات دیفرانسیل با مشتقات معمولی و جزئی کاربردهای فراوانی دارند. رویکرد اولی که برای ساخت فرمول‌های مشتق‌گیری عددی اجرا می‌کنیم استفاده از ((چندجمله‌ای درونیاب)) است:

$$f(x) \approx p(x).$$

به طور کلی می‌توان این ایده را برای نقاطی با پراکندگی متفاوت (مانند نقاط چبیشفی و ...) بکار برد. اما ما در اینجا فقط حالتی را بررسی می‌کنیم که نقاطی که مقادیر تابع در آنها داده شده هم‌فاصله باشند.

در فصل قبل دیدیم که اگر مقادیر تابع f در نقاط هم‌فاصله‌ی $x_i, x_{i+1}, \cdots, x_{i+k}$ داده شده باشند چندجمله‌ای درونیاب (پیشروی نیوتن) مربوطه برابر است با

$$p\big(s(x)\big) = f_i + s\Delta f_i + \frac{s(s-1)}{2!}\Delta^2 f_i + \cdots + \frac{s(s-1)(s-2)\cdots(s-k+1)}{k!}\Delta^k f_i.$$

که در آن $s=\frac{x-x_i}{h}$ و برای $i=0,1,\cdots,k-1$ داریم $h=x_{i+1}-x_i$.

۲.۴ مشتق مرتبه‌ی اول

با مشتق‌گیری از چندجمله‌ای درونیاب (بعنوان تقریب تابع f) و با استفاده از قاعده‌ی زنجیره‌ای داریم

$$f'(x)=\frac{df}{dx}\approx\frac{d}{dx}p\big(s(x)\big)=\frac{dp}{ds}\frac{ds}{dx}.$$

با توجه به اینکه

$$\frac{dp}{ds}=\Delta f_i+\frac{2s-1}{2!}\Delta^2 f_i+\frac{3s^2-6s+2}{3!}\Delta^3 f_i+\cdots, \tag{۱.۴}$$

و

$$\frac{ds}{dx}=\frac{1}{h},$$

پس داریم

$$f'(x)\approx\frac{1}{h}\Big(\Delta f_i+\frac{2s-1}{2!}\Delta^2 f_i+\frac{3s^2-6s+2}{3!}\Delta^3 f_i+\cdots\Big).$$

حال اگر بخواهیم مشتق را در اولین نقطه یعنی $x=x_i$ تقریب بزنیم با توجه به رابطه‌ی $x=x_i+sh$ کافی است در فرمول قبل قرار دهیم $s=0$. در این صورت داریم:

$$f'_i:=f'(x_i)\approx\frac{1}{h}\Big(\Delta f_i-\frac{1}{2}\Delta^2 f_i+\frac{1}{3}\Delta^3 f_i-\frac{1}{4}\Delta^4 f_i+\cdots\Big). \tag{۲.۴}$$

معمولا برای محاسبه‌ی تقریبی از f'_i از یک یا چند جمله از سمت راستِ فرمول (۲.۴) استفاده می‌شود. مثلا با انتخاب تنها یک جمله داریم:

$$f'_i\approx\frac{\Delta f_i}{h}$$

یعنی

$$f'_i\approx\frac{f_{i+1}-f_i}{h} \tag{۳.۴}$$

که گاهی فرمول دونقطه‌ای (پیشروی) مشتق نامیده می‌شود. با انتخاب دو جمله از سمت راست فرمول

(۲.۴) داریم:

$$f'_i \approx \frac{1}{h}\Big(\Delta f_i - \frac{1}{2}\Delta^2 f_i\Big) = \frac{1}{h}\Big(f_{i+1} - f_i - \frac{1}{2}(f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i)\Big)$$

پس

$$f'_i \approx \frac{-f_{i+2} + 4f_{i+1} - 3f_i}{2h} \tag{۴.۴}$$

که فرمول سه‌نقطه‌ای (پیشروی) مشتق نامیده می‌شود. به طرز مشابه می‌توان فرمول چهارنقطه‌ای (پیشروی) مشتق را به صورت زیر به دست آورد:

$$f'_i \approx \frac{2f_{i+3} - 9f_{i+2} + 18f_{i+1} - 11f_i}{6h} \tag{۵.۴}$$

تمرین ۹. فرمول (۵.۴) را بسازید.

مثال ۱.۲.۴. جدول داده‌های را درنظر بگیرید.

x_i	1.3	1.5	1.7	1.9	2.1
f_i	3.669	4.482	5.474	6.686	8.166

۱. مقدار مشتق را در نقطه‌ی $x = 1.3$ با استفاده از تمام داده‌ها تقریب بزنید.

۲. مقدار مشتق را در نقطه‌ی $x = 1.7$ با استفاده از فرمول سه‌نقطه‌ای مشتق تخمین بزنید.

(محاسبات را با سه رقم اعشار انجام دهید.)

برای یافتن تقریبی برای $f'(1.3)$ به کمک تمام داده‌ها از رابطه‌ی (۲.۴) استفاده می‌کنیم. جدول تفاضلات پیشرو مربوط به صورت زیر است. از آنجا که در این مثال داریم $h = 0.2$ پس

$$f'(1.3) \approx \frac{1}{0.2}\Big(0.813 - \frac{0.179}{2} + \frac{0.041}{3} - \frac{0.007}{4}\Big) = 3.677.$$

x_i	f_i	Δf_i	$\Delta^2 f_i$	$\Delta^3 f_i$	$\Delta^4 f_i$
1.3	3.669				
		0.813			
1.5	4.482		0.179		
		0.992		0.041	
1.7	5.474		0.220		0.007
		1.212		0.048	
1.9	6.686		0.268		
		1.480			
2.1	8.166				

برای حل قسمت دوم با استفاده از فرمول (۴.۴) داریم:

$$f'(1.7) \approx \frac{-f(2.1)+4f(1.9)-3f(1.7)}{2\times 0.2} = \frac{-8.166+(4\times 6.686)-(3\times 5.474)}{0.4} = 5.390.$$

توضیح اضافه اینکه داده‌های این مثال، مقادیر تابع $f(x)=\exp(x)$ بوده‌اند که تا سه رقم اعشار گرد شده‌اند. بنابراین مقدار دقیق مشتق در دو نقطه‌ی خواسته‌شده عبارتند از

$$f'(1.3)=f(1.3)=\exp(1.3)\approx 3.669, \qquad f'(1.7)=f(1.7)=\exp(1.7)\approx 5.474.$$

۳.۴ خطای (تقریب یا برشی) مشتق‌گیری عددی

با این فرض که تابع f به اندازه‌ی کافی هموار باشد، می‌توان از بسط تیلور برای پیداکردن خطای فرمول‌های مشتق‌گیری عددیِ قبل استفاده کرد. بعنوان نمونه فرض کنید بخواهیم خطای فرمول دو نقطه‌ای

$$f_i' \approx \frac{f_{i+1}-f_i}{h}$$

را بیابیم. داریم

$$f_{i+1}=f(x_{i+1})=f(x_i+h)=f_i+hf_i'+\frac{h^2}{2!}f_i''+\frac{h^3}{3!}f_i'''+\cdots.$$

پس داریم:

$$\frac{f_{i+1}-f_i}{h} = f'_i + \frac{h}{2}f''_i + \frac{h^2}{6}f'''_i + \cdots . \qquad (۶.۴)$$

یعنی

$$\frac{f_{i+1}-f_i}{h} - f'_i = \frac{h}{2}f''_i + \frac{h^2}{6}f'''_i + \cdots$$

که خطای برشی فرمول دو نقطه‌ای است. از آنجا که h کوچک درنظر گرفته می‌شود، جمله‌ی با بیشترین تاثیر بر روی سمت راستِ رابطه‌ی بالا، جمله‌ی $\frac{h}{2}f''_i$ است. می‌گوییم خطا متناسب با h است یا از مرتبه‌ی h است یا $\mathcal{O}(h)$ است و می‌نویسیم:

$$\frac{f_{i+1}-f_i}{h} - f'_i = \mathcal{O}(h).$$

تعریف دقیق‌ترِ مفهوم نماد اُوی بزرگ به صورت زیر است:

تعریف ۱.۳.۴. اگر $f(h)$ و $g(h)$ دو تابع برحسب h باشند به طوری که $g(h) \neq 0$ و داشته باشیم:

$$\lim_{h\to 0}\frac{f(h)}{g(h)} = C \neq 0$$

در این صورت می‌گوییم

$$f(h) = \mathcal{O}(g(h)).$$

C ثابت خطای مجانبی نامیده می‌شود.

در حالت خاصی که $g(h) = h^p$ که در آن $0 < p \in \mathbb{R}$ داریم

$$f(h) = \mathcal{O}(h^p)$$

و هرچه p بزرگ‌تر باشد $f(h)$ سریع‌تر به صفر میل می‌کند.

در مثال قبل داشتیم:

$$g(h) = h^1, \qquad f(h) = \frac{f_{i+1}-f_i}{h} - f'_i.$$

و درنتیجه

$$\lim_{h\to 0}\frac{\frac{f_{i+1}-f_i}{h}-f'_i}{h}=\frac{1}{2}f''_i=C.$$

مثال ۱.۳.۴. ثابت کنید که

$$f'(x_i+\frac{h}{2})-\frac{f_{i+1}-f_i}{h}=\mathcal{O}(h^2)$$

این بدان معناست که خطای (برشی) فرمول

$$f'(x_i+\frac{h}{2})\approx\frac{f_{i+1}-f_i}{h}$$

از مرتبه‌ی h^2 است.

عبارت‌های معادلی را برای هر یک از دو سمت فرمول مشتق‌گیریِ داده شده می‌یابیم. ابتدا با استفاده از بسط تیلورِ تابع $f'(x)$ (و نه $f(x)$) برای سمت چپِ فرمول داریم:

$$f'(x_i+\frac{h}{2})=f'(x_i)+\frac{h}{2}f''(x_i)+\frac{(h/2)^2}{2!}f'''(x_i)+\cdots=f'_i+\frac{h}{2}f''_i+\frac{h^2}{8}f'''_i+\cdots.$$

از سوی دیگر (با استفاده از (۶.۴) که خود از بسط تیلور دیگری به دست آمد)، جایگزین زیر را برای سمت راست فرمول مشتق‌گیری داده‌شده در این مثال داریم:

$$\frac{f_{i+1}-f_i}{h}=f'_i+\frac{h}{2}f''_i+\frac{h^2}{6}f'''_i+\cdots.$$

پس با تفریق دو رابطه‌ی اخیر داریم:

$$f'(x_i+\frac{h}{2})-\frac{f_{i+1}-f_i}{h}=\frac{h^2}{8}f'''_i-\frac{h^2}{6}f'''_i+\cdots=\frac{-1}{24}h^2f'''_i+\cdots.$$

پس خطای فرمول $\mathcal{O}(h^2)$ است و ثابت خطای مجانبیِ نظیر نیز برابر است با $\frac{-1}{24}f'''_i$.

نکته‌ی ۱.۳.۴. در فرمول (۳.۴) از کسر $\frac{f_{i+1}-f_i}{h}$ برای تقریب $f'(x_i)$ استفاده کردیم. از سوی دیگر در مثال قبل از همان کسر این‌بار برای تقریب $f'(x_i+h/2)$ استفاده کردیم. این دو تناقضی با هم ندارند چرا که هیچ‌یک از دو فرمول دقیقا درست نیستند: دیدیم که در موقعیتِ دوم، خطا $\mathcal{O}(h^2)$ بود در حالی که در موقعیتِ اول، خطا $\mathcal{O}(h)$ بود. یعنی به طور کلی با استفاده از کسر $\frac{f_{i+1}-f_i}{h}$ برای تقریب $f'(x_i+h/2)$، درستی بیشتری حاصل خواهد شد در مقایسه با وقتی که از آن برای تقریب $f'(x_i)$ استفاده شود.