10 Numbriline diferentseerimine

10.1 I järku täpsusega diferentsvalemid

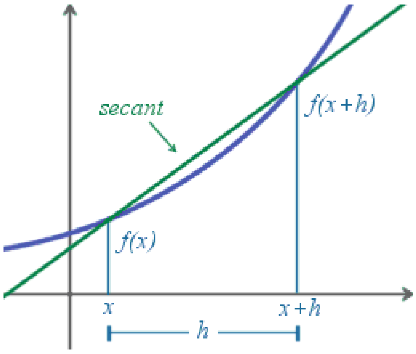
Olgu antud võrdsete vahemikega sõlmed

$$x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, \ldots, n,$$

ning funktsiooni f väärtused

$$f(x_i) = f_i, \quad i = 0, \ldots, n.$$

Numbrilise diferentseerimise valemid võimaldavad leida funktsiooni tuletise (ka kõrgemat järku tuletiste) ligikaudseid väärtusi sõlmedes.



Joonis: Wikipedia

Esimest järku täpsusega diferentsvalemid, mis kasutavad funktsiooni väärtusi kahes sõlmes:

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi), \quad \xi \in (x_i, x_{i+1}), \tag{10.1}$$

$$f'(x_i) = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi), \quad \xi \in (x_{i-1}, x_i). \tag{10.2}$$

Praktikas tuleb diferentsvalemis ära jätta jääkliikme osa.

10.2 II järku täpsusega diferentsvalemid

Teist järku täpsusega diferentsvalemid:

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi), \quad \xi \in (x_{i-1}, x_{i+1}), \tag{10.3}$$

$$f'(x_i) = \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi), \quad \xi \in (x_i, x_{i+2}), \tag{10.4}$$

$$f'(x_i) = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi), \quad \xi \in (x_{i-2}, x_i). \tag{10.5}$$

10.3 Ümardamisvigade mõju

Kui täpsete väärtuste f_i asemel on teada ligikaudsed väärtused $\tilde{f}_i$ veaga $\varepsilon_i = |\tilde{f}_i - f_i|$, siis lisaks tinglikule veale, mis tekib jääkliikme ärajätmisel, avaldab mõju ka tingimatu viga - algandmete täpsus ε_i. Kui samm h väheneb, siis kasvab tingimatu vea mõju.

Näide. Vaatleme valemit (10.3) ning hindame tekkivat viga. Ligikaudse tuletise jaoks kasutame valemit ilma jääkliikmeta,

$$|\tilde{f}'(x_i) - f'(x_i)| = \left| \left(\frac{\tilde{f}_{i+1} - \tilde{f}_{i-1}}{2h} \right) - \left(\frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi) \right) \right| \le \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M,$$

kus $\varepsilon = \max\{\varepsilon_{i-1}, \varepsilon_{i+1}\}$ ning $|f'''(\xi)| \le M$, $\xi \in (x_{i-1}, x_{i+1})$. Eeldusel, et ε ja M on piisavalt täpsed hinnangud, saame leida optimaalse h väärtuse, mille korral veahinnang on minimaalne.

Selleks leiame $E(h) = \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M$ statsionaarsed punktid. Võrdusest

$$E'(h) = -\frac{\varepsilon}{h^2} + \frac{h}{3} M = 0$$

saame

$$h_{opt} = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}}$$

ning kuna $E''(h_{opt}) = \frac{2\varepsilon}{h_{opt}^3} + \frac{M}{3} > 0$, on tegemist miinimumkohaga.

Märkus 10.1

Kuna arvutis on reaalarvude mällu salvestamisele omad piirangud, siis on tingimatu viga arvu ümardamise näol paratamatu. Standardsete topelttäpsusega ujukomaarvude korral on masinatäpsuseks $\varepsilon_{mach} = 2^{-52} \approx 2.22 \cdot 10^{-16}$.

Näites leitud $h_{opt} = \sqrt[3]{\frac{3\varepsilon}{M}}$ jaoks näeme, et masinatäpsuse $\varepsilon = \varepsilon_{mach}$ korral saame ligikaudu $h_{opt} \approx 10^{-5}$. Sellest väiksemate h väärtuste kasutamisel viga mitte ei vähene, vaid üldjuhul suureneb.

Märkus 10.2

Praktikas ei ole optimaalse sammu h leidmine võimalik, kuna puudub informatsioon jääkliikmes esineva kõrgemat järku tuletise kohta. Oluline on aga teada, et sammu vähendamine ei lisa alati tulemusele täpsust, vaid juhtuda võib hoopis vastupidine efekt.

10.4 Ülesanded

Arvestuslik ülesanne 10.1

Tähtaeg: 24. aprill 2015. Olgu meil funktsioonid

$$f_1(x) = \frac{\alpha}{1+x}, \quad f_2(x) = \sin(\alpha x).$$

Analoogiliselt näitega, hinnake nende funktsioonide jaoks viga valemis (10.1) (või (10.2)) ning (10.5) (vihje: teise ja kolmanda tuletise ligikaudse hinnangu M jaoks saab kasutada Mathcadi tuletisoperaatoreid kohal $x = 1$ või $x = \pi/3$).

Leidke $f_1'(1)$ ja $f_2'(\pi/3)$ ligikaudsed väärtused valemitega (10.1) (või (10.2)) ning (10.5), kasutades sammupikkust $h = 10^{-1}, 10^{-2}, \ldots, 10^{-16}$. Esitage tulemused tabelitena, kus tabeli igas reas on kasutatud sammupikkus h, tuletise väärtus $\tilde{f}'$ ja absoluutne viga $|\tilde{f}' - f'|$. Kas teoreetiline optimaalne h pikkus läheb kokku arvuliste tulemustega?

Vihje: veeruvektoreid saab ühendada käsuga *augment()*.