ZESZYTY NAUKOWE POLITECHNIKI ŚLĄSKIEJ 1989

Seria: ENERGETYKA z. 107 Nr kol. 1041

Kazimierz KURPISZ

Instytut Techniki Cieplnej
Politechniki Śląskiej

WYBRANE PROBLEMY NUMERYCZNE RÓŻNICZKOWANIA FUNKCJI ZADANEJ NIEDOKŁADNIE[x)]

Streszczenie. W pracy omówiono obliczeniowe aspekty różniczkowania funkcji zadanej w dyskretnych punktach i obarczonej błędami danych. Zadanie to należy do źle uwarunkowanych i uzyskanie stabilnych rezultatów wymaga specjalnych technik obliczeniowych. Artykuł nie zajmuje się teorią rozpatrywanych metod, a jedynie możliwościami ich praktycznego wykorzystania. Problem różniczkowania funkcji występuje m.in. przy rozwiązywaniu odwrotnych zadań przewodzenia ciepła.

1. ZADANIE RÓŻNICZKOWANIA FUNKCJI, JAKO PROBLEM ŹLE UWARUNKOWANY

Wiele zadań z dziedziny matematycznej sprowadza się do rozwiązywania równań operatorowych typu:

$$Az = y, \tag{1}$$

gdzie elementy z należą do pewnej przestrzeni metrycznej X, y - do przestrzeni Y, zaś A jest ciągłym operatorem przekształcającym elementy przestrzeni X w elementy przestrzeni Y.

W postaci równania (1) są często formułowane odwrotne problemy przewodzenia ciepła. W problemach tych prawa strona jest zwykle dana na podstawie wyników pomiarów. Zasadniczą sprawą jest zatem opracowanie stabilnych algorytmów rozwiązywania równań typu (1), tzn. takich, aby niewielkie niedokładności danych wpływały w sposób nieznaczny na wyniki obliczeń.

Zadanie typu (1) jest dobrze uwarunkowane, jeżeli spełnione są trzy warunki [1] :

a) rozwiązanie równania (1) istnieje dla dowolnego elementu $y \in Y$ - warunek rozwiązalności,
b) z warunku $Az_1 = Az_2$ wynika, że $z_1 = z_2$ - warunek jednoznaczności,
c) operator odwrotny A^{-1} jest ciągły w przestrzeni Y - warunek stabilności.

x) Praca wykonana w ramach CPBP nr 02.13, kierunek 2, zad. 2.2.1.1.

Niech teraz w miejsce dokładnych wartości elementów y znane są wartości przybliżone $y_\delta \in Y$ takie, że:

$$\varrho_Y(y, y_\delta) \leqslant \delta , \tag{2}$$

gdzie ϱ_Y jest metryką przestrzeni Y. Jeżeli z_δ jest przybliżonym rozwiązaniem równania (1), tzn.:

$$z_\delta = A^{-1} y_\delta , \tag{3}$$

to dla zadań dobrze uwarunkowanych słuszny jest warunek:

$$\varrho_X(z, z_\delta) \to 0 \qquad \text{dla} \qquad \delta \to 0. \tag{4}$$

Powyższy wniosek wydaje się oczywisty. Wraz ze zmniejszeniem niedokładności danych maleje niedokładność wyników. Oznacza to np., że przy całkowaniu numerycznym im drobniejszy podział przedziału całkowania, tym dokładniejszy wynik.

Zdarza się jednak dość często, że warunek c) nie jest spełniony. Tego typu zadania nazywane są źle uwarunkowanymi. Przez wiele lat tego typu zadaniami nie zajmowano się, nazywając je źle sformułowanymi fizycznie, bo trudno było takim niestabilnym wynikom nadać interpretację fizyczną.

Do grupy zadań źle uwarunkowanych należy m.in. zadanie różniczkowania funkcji zadanej niedokładnie.

Niech funkcja $y(x)$ ma ciągłą pochodną w przedziale $[a, b]$. Wprowadzimy oznaczenie:

$$z = \frac{dy(x)}{dx} .$$

Niech teraz w miejsce $y(x)$ dane są przybliżone wartości $y_\delta(x) \in C[a, b]$, gdzie C oznacza przestrzeń funkcji ciągłych, przy czym spełniony jest warunek:

$$\varrho_C(y_\delta, y) = \max_{a \leqslant x \leqslant b} |y_\delta - y| \leqslant \delta .$$

Niedokładność funkcji y_δ może być modelowana w rozmaity sposób, np. za pomocą członu oscylacyjnego w postaci:

$$y_\delta(x) = y(x) + \delta \sin(x\delta^{-1}).$$

Łatwo zauważyć, że $y_\delta(x) \to y(x)$, jeżeli tylko $\delta \to 0$. Pochodna funkcji $y_\delta(x)$ wyraża się następująco:

$$z_\delta(x) = \frac{dy_\delta(x)}{dx} = z(x) + \cos(x\delta^{-1}),$$

stąd otrzymuje się:

$$\varrho_C(z, z_\delta) = 1,$$

dla każdego $\delta > 0$. Jak widać, dobre przybliżenie pochodnej otrzymuje się niekoniecznie dla $\delta \to 0$. Jedynie w przypadku $\delta = 0$ uzyskuje się dokładny wynik. Problem różniczkowania funkcji jest zatem klasycznym problemem źle uwarunkowanym.

Metody rozwiązywania zadań źle uwarunkowanych są przedmiotem licznych badań. W ciągu ostatnich piętnastu lat udało się też opracować wiele algorytmów stabilnego rozwiązywania zadań tej klasy. Potrzeba takich algorytmów wynika z faktu, że wiele problemów fizyki matematycznej, o dużym znaczeniu praktycznym, należy do źle uwarunkowanych, m.in. wspomniane już odwrotne zadania przewodzenia ciepła. Wiele metod rozwiązywania zadań odwrotnych wymaga także różniczkowania funkcji [5].

Spotykane w literaturze metody rozwiązywania problemów źle uwarunkowanych w znacznej części dotyczą przypadków, kiedy równanie (1) jest równaniem całkowym Fredholma lub Volterry I rodzaju. Zadanie różniczkowania funkcji może być w prosty sposób zamienione na problem rozwiązywania równania Volterry I rodzaju, jeżeli zauważyć, że j-ta pochodna funkcji f(x), tzn.:

$$z(x) = \frac{d^j f(x)}{dx^j}, \tag{5}$$

jest rozwiązaniem równania w postaci:

$$\int_{x_0}^{x} \frac{(x-\varrho)^{j-1}}{(j-1)!} z(\varrho)\, d\varrho = G(x), \tag{6}$$

gdzie:

$$G(x) = f(x) - \sum_{n=0}^{j-1} \frac{(x-x_0)^n}{n!} \left.\frac{d^n f(x)}{dx^n}\right|_{x=x_0}. \tag{7}$$

W dalszej części niniejszego artykułu przedstawiono wybrane metody wyznaczania pochodnych na podstawie rozwiązania równania (6), a uzyskane wyniki porównano z wynikami uzyskanymi za pomocą metod klasycznych, np. różnic skończonych.

2. PRZEGLĄD WYBRANYCH ALGORYTMÓW ROZWIĄZYWANIA RÓWNANIA $Az = y$

Wspomniano już, że w ostatnich latach opracowano liczne algorytmy rozwiązywania zadań źle uwarunkowanych. Szczegóły dotyczące ich teorii można znaleźć w wielu monografiach, np. [2, 3, 4]. Prezentowane tam metody pozwalają na uzyskiwanie stabilnych rezultatów, ale niekoniecznie dobrze zbieżnych z rozwiązaniem dokładnym. Poglądowo można by to opisać następująco: rozwiążmy kilkakrotnie równanie (1), nieznacznie zaburzając każdorazowo prawą stronę równania niedokładnościami. Dla algorytmów niestabilnych otrzymamy w każdym przypadku wyniki, mogące znacznie się różnić od siebie i dla których nie można znaleźć prawidłowości między wartością zaburzenia a wynikiem. Dla algorytmów stabilnych otrzymuje się natomiast w każdym przypadku wyniki zbliżone, choć niekoniecznie bliskie wartości dokładnej. Zwykle błędy wyników są większe od błędów danych.

Spośród rozmaitych metod rozwiązywania równania (1) można wyróżnić dwie grupy. Do pierwszej należą algorytmy stabilne, takie jak metoda quasi-rozwiązania, odchyłek i regularyzacji. Do drugiej grupy należą metody, które tylko ograniczają niestabilność wyników, takie jak metoda różniczkowania funkcji przez różniczkowanie wielomianu aproksymującego zbiór wartości funkcji, metody iteracyjne, Nowikowa itd. W [5] wykazano także wielką przydatność rachunku wyrównawczego w zadaniu różniczkowania funkcji. Rachunek wyrównawczy wymaga jednak dodatkowych informacji o problemie.

2.1. Metoda quasi-rozwiązania

Quasi-rozwiązaniem równania (1) w zbiorze $M \subset X$ nazywa się element $z' \in M$, dla którego słuszna jest równość [4, 6]:

$$\varrho(Az', y) = \inf_{x \in M} \varrho(Az, y). \tag{8}$$

Jeżeli zbiór M zawiera dokładne rozwiązanie, to jest ono także quasi-rozwiązaniem. Efektywne wykorzystanie tej metody wymaga jednak zdefiniowania zbioru M. Zwykle przyjmuje się, że przestrzenie X, Y są przestrzeniami Hilberta, a zbiór M definiuje się następująco:

$$M = \left\{z: \|z\|_X \leqslant \tau\right\}, \tag{9}$$

gdzie $\|z\|_X$ oznacza normę elementu z w przestrzeni X.

Metoda ta może być zatem stosowana w takich przypadkach, w których potrafimy podać pewne dodatkowe warunki, jakie musi spełniać rozwiązanie zadania (warunek (9)). Jeżeli warunki te są znane, to zadanie sprowadza się do minimalizacji funkcjonału (8) z warunkiem (9), tzn. do poszukiwania ekstremum warunkowego.

2.2. Metoda odchyłek

Metoda odchyłek [4, 7] polega na minimalizacji pewnego funkcjonału $\Omega(z)$ przy warunku:

$$\rho_Y(Az, y_\delta) \leqslant \varphi(\delta), \tag{10}$$

gdzie: $\varphi(\delta) \geqslant \delta$ oraz $\varphi(\delta) \to 0$ dla $\delta \to 0$.

Najczęściej przyjmuje się $\varphi(\delta) \equiv \delta$.

Funkcjonał $\Omega(z)$ powinien charakteryzować się następującymi właściwościami:

a) dokładne rozwiązanie przynależy do dziedziny operatora,

b) przeciwdziedziną operatora są liczby rzeczywiste i dodatnie.

Jeżeli przestrzeń X jest przestrzenią Hilberta, to przyjmuje się:

$$\Omega(z) = \|z\|_X^2 . \tag{11}$$

Metoda odchyłek jest zatem także związana z poszukiwaniem minimum warunkowego.

2.3. Metoda regularyzacji

Metoda regularyzacji [2] stanowi dziś najbardziej rozwiniętą metodę rozwiązywania zadań źle uwarunkowanych. Ponieważ z dalszych rozważań niniejszego artykułu wyniknie, że jest ona także metodą najbardziej efektywną, omówiono ją bardziej szczegółowo.

W metodzie tej rozważa się następujący funkcjonał:

$$\Omega(z) = \|Az - y_\delta\|_Y^2 + \alpha\|z\|_X^2 , \tag{12}$$

gdzie: $\alpha > 0$ zwane jest parametrem regularyzacji, natomiast X i Y są przestrzeniami Hilberta. Prawdziwe jest teraz następujące twierdzenie:

jeżeli y_δ jest przybliżoną wartością prawych stron równania (1), spełniającą warunek:

$$\|y - y_\delta\|_Y < \delta,$$

a parametr $\alpha > 0$ został wybrany w następujący sposób:

$$\alpha = \alpha(\delta) \to 0, \qquad \text{dla} \qquad \delta \to 0,$$

$$\delta^2/\alpha(\delta) \to 0, \qquad \text{dla} \qquad \delta \to 0,$$

to

$$\| z_\delta^\alpha - z \|_X \to 0, \qquad \text{dla} \qquad \delta \to 0,$$

gdzie z_δ^α minimalizuje funkcjonał (12) dla danego α.
Element z_δ^α jest szukanym, stabilnym rozwiązaniem równania (1).

Z teorii metody wynika, że jeżeli rozwiązanie (1) jest równaniem całkowym Volterry I rodzaju, a tak jest w przypadku różniczkowania funkcji (por. równanie (6)), to przestrzeń Y powinna być przestrzenią L_2, tzn. przestrzenią funkcji ciągłych całkowalnych z kwadratem, a przestrzeń X przestrzenią W_2^1, tzn. przestrzenią funkcji ciągłych, całkowalnych z kwadratem i mających ciągłą pierwszą pochodną, całkowalną z kwadratem. Warunek ten zapewnia np. jednostajną zbieżność z_δ^α do z, przy $\delta \to 0$. Istnieją dwie metody poszukiwania ekstremum funkcjonału (12): bezpośrednia lub też przez rozwiązanie równania Eulera. Pierwszy sposób jest bardziej czasochłonny, natomiast drugi pozwala uzyskiwać rozwiązanie szybciej i mniejszym kosztem, ale wymaga dodatkowych informacji. Powinny być bowiem określone wartości brzegowe niewiadomych, tzn.:

$$z = z_a \qquad \text{dla} \qquad x = a,$$

oraz

$$z = z_b \qquad \text{dla} \qquad x = b,$$

przy czym:

$$a \leqslant x \leqslant b.$$

Jeżeli wartości te są znane, to równanie Eulera dla funkcjonału (12) może być przedstawione w postaci:

$$A^* Az - A^* y_\delta + \alpha z - \alpha z'' = 0 , \tag{13}$$

gdzie A^* jest operatorem sprzężonym z A.

Równanie powyższe jest równaniem całkowo-różniczkowym. Najprostszą metodą rozwiązywania tego typu równań jest metoda różnic skończonych. Z uwagi na przybliżone wartości danych nie ma potrzeby stosowania złożonych metod całkowania. Najwygodniej jest aproksymować funkcje z(x) i G(x) funkcjami schodkowymi. W tym celu cały przedział $a \leq x \leq b$ dzieli się na N podprzedziałów, przy czym najprostszą postać rozwiązania otrzymuje się w przypadku podziału równomiernego o kroku H, gdzie:

$$H = (a - b)/N. \tag{14}$$

W ten sposób pierwsza całka występująca w równaniu (13) może być przedstawiona w postaci sumy [8]:

$$I_k = \sum_{l=1}^{N} d_{k,l}\, \hat{z}_l + \sum_{l=1}^{k} w_{k,l}\, \hat{z}_l , \tag{15}$$

gdzie:

$$\hat{z}_l = \frac{1}{2}(z_{l-1} + z_l).$$

Drugą całkę w równaniu (13) oznaczmy chwilowo przez J_k. Druga pochodna funkcji z może być przedstawiona za pomocą różnic skończonych:

$$z_k'' = \frac{z_{k-1} - 2 z_k + z_{k+1}}{H^2} . \tag{16}$$

W ten sposób równanie (13) przyjmuje postać:

$$I_k + \alpha z_k - \alpha z_k'' = J_k . \tag{17}$$

Rozpisując tę zależność dla $k = 1,2,\ldots, N-1$, otrzymuje się układ N-1 równań algebraicznych, z którego wyznacza się $z_1, z_2,\ldots, z_{N-1}$. Wartości brzegowe $z_0 = z_a$ i $z_N = z_b$ należy wyznaczyć w odmienny sposób. Współczynniki $d_{k,l}$ mają postać następującą:

$$d_{k,l} = \frac{H^{2j}}{(j-1)!} \sum_{r=0}^{j-1} \frac{C_{j-1}^{r}}{j + r} \sum_{m=0}^{j-1-r} D_{j-1-r}^{m} \frac{(N-k)^{j-r-m-1}}{j+r+m+1} \cdot$$

$$\cdot \left[(N-l+1)^{j+r+m+1} - (N-l)^{j+r+m+1}\right] , \tag{18}$$

dla $l = 1,2,\ldots,N$ i $k = 1,2,\ldots, N-1$,

współczynniki $w_{k,l}$:

$$w_{k,l} = \frac{H^{2j}}{(2j)!} \left[(k-l+1)^{2j} - (k-l)^{2j}\right] \sum_{r=0}^{j-1} (-1)^{j-1-r} \frac{C_{j-1}^{r}}{j + r} , \tag{19}$$

dla $l = 1,2,\ldots,k$ oraz $k = 1,2,\ldots, N-1$, natomiast wielkości J_k:

$$J_k = \sum_{l=k+1}^{N} \left\{ \frac{H^j}{2j} \left[(l-k)^j - (l-k-1)^j \right] (f_l - f_{l-1}) - \right.$$

$$\left. - \sum_{n=0}^{j-1} \frac{f_0^{(n)}}{n!} H^{n+j} \sum_{m=0}^{n} C_n^m \frac{k^{n-m}}{j+m} \left[(l-k)^{j+m} - (l-k-1)^{j+m} \right] \right\}, \tag{20}$$

dla $k = 1,2,\ldots, N-1$

W równaniach tych j oznacza rząd pochodnych (por. równanie (5)), a f_l oznacza wartość funkcji dla punktu:

$$x_l = x_0 + lH \qquad l = 0,1,\ldots,N.$$

Współczynniki C_n^m i D_n^m oznaczają współczynniki rozwinięcia dwumianu Newtona:

$$(a + b)^n = \sum_{m=0}^{n} C_n^m a^m b^{n-m}, \quad (a-b)^n = \sum_{m=0}^{n} D_n^m a^m b^{n-m} .$$

Ostatecznie układ równań przyjmuje postać:

$$\sum_{l=1}^{N-1} \frac{1}{2}(d_{1,l} + d_{1,l+1})z_l - \frac{1}{2} w_{1,1} z_1 + \alpha\left(1 + \frac{2}{H^2}\right)z_1$$

$$- \frac{\alpha}{H^2} z_2 = \frac{1}{2}(w_{1,1} - d_{1,1})z_0 - \frac{1}{2} d_{1,N} z_N + \frac{\alpha}{H^2} z_0 + J_1$$

. . . .

$$\sum_{l=1}^{N-1} \frac{1}{2}(d_{k,l} + d_{k,l+1})z_l - \sum_{l=1}^{k-1} \frac{1}{2}(w_{k,l} + w_{k,l+1})z_l - \frac{1}{2} w_{k,k} z_k$$

$$- \frac{\alpha}{H^2} z_{k-1} + \alpha\left(1 + \frac{2}{H^2}\right)z_k - \frac{\alpha}{H^2} z_{k+1} = \frac{1}{2}(w_{k,1} - d_{k,1})z_0 - \frac{1}{2} d_{k,N} z_N + J_k, \tag{21}$$

dla $k = 2,3,\ldots,N-2$.

. . . .

$$\sum_{l=1}^{N-1} \frac{1}{2}(d_{N-1,l} + d_{N-1,l+1})z_l - \sum_{l=1}^{N-2} \frac{1}{2}(w_{N-1,l} + w_{N-1,l+1})z_l -$$

$$- \frac{1}{2} w_{N-1,N-1} z_{N-1} - \frac{\alpha}{H^2} z_{N-2} + \alpha(1 + \frac{2}{H^2})z_{N-1} =$$

$$= \frac{1}{2}(w_{N-1,1} - d_{N-1,1}) - \frac{1}{2} d_{N-1,N} z_N + \frac{\alpha}{H^2} z_N + J_{N-1} .$$

Powyższy układ równań jest dobrze uwarunkowany tylko w przypadku $\alpha > 0$.

Pozostał jeszcze do rozważenia problem wyboru parametru regularyzacji. Z teorii metody wynika, że powinien on wynikać z zasady odchyłek [2], tzn. powinien być pierwiastkiem równania:

$$\varrho(\alpha) = \| Az_\delta^\alpha - y_\delta \|_Y = \delta . \tag{22}$$

Funkcja $\varrho(\alpha)$ jest monotoniczna, rosnąca dla rosnącego α i ma dokładnie jeden pierwiastek. W praktyce nie ma potrzeby bardzo dokładnego rozwiązania równania (22), gdyż zależność z od α jest w szerokim przedziale dość płaska.

Zwykle postępuje się w sposób następujący: przyjmuje się pewną wielką liczbę α^* taką, by spełniony był warunek:

$$\varrho(\alpha^*) > \delta .$$

Następne wartości parametru α wyznacza się z zależności:

$$\alpha_l = \alpha^* \beta^{\gamma_l} , \qquad l = 1,2,\ldots,$$

gdzie $0 < \beta < 1$, a jako γ_l można wprost przyjmować 1,2,...
Obliczenia przerywa się, jeżeli:

$$\varrho(\alpha_l) \leqslant \delta .$$

Można teraz zagęścić podział, ale jest to na ogół niepotrzebne.

Stosowanie tej metody wymaga znajomości niedokładności danych δ. W zagadnieniach różniczkowania jest to możliwe praktycznie przy obliczaniu pierwszej pochodnej. Przy braku informacji o wartości δ można stosować metody quasi-optymalne. Do najbardziej zalecanych [2] należy metoda, w której wartość α dobiera się z warunku:

$$M = \sup_{y:\| y_\delta - y\| \leqslant \delta} \| \alpha \frac{dz_\delta^\alpha}{d\alpha} \|_X \longrightarrow \min. \tag{23}$$

Jeżeli

$$\alpha_{l-1} - \alpha_l = \text{const}$$

to warunek (23) może być zapisany jako:

$$M_1 = \sum_{k=1}^{N} \left(z_\delta^{\alpha_l} - z_\delta^{\alpha_{l-1}}\right)^2 \longrightarrow \min. \tag{24}$$

Warto tu jednak dodać, że funkcjonał (23) może mieć ekstrema lokalne, a zatem należy przeszukać dość szeroki przedział zmienności α.

2.4. Inne metody

Z innych metod, które tylko ograniczają niestabilności wyników, warto wspomnieć o metodzie Nowikowa [9]. Może ona być stosowana do równań całkowych I rodzaju typu splotowego. Idea metody jest bardzo prosta. Parametr regularyzacji α wprowadza się wprost do jądra równania, tzn. zmienia się postać jądra z $K(x-\xi)$ na $K(x - \xi + \alpha)$. Jest jeszcze wiele innych metod cytowanych w literaturze [4], które jednak nie będą tu omawiane.

3. WYNIKI OBLICZEŃ I WNIOSKI

Na podstawie przedstawionych w poprzednim punkcie metod przeprowadzono liczne obliczenia, mające na celu sprawdzenie ich przydatności, praktyczne zbadanie ich właściwości oraz nabranie doświadczenia w ich stosowaniu.

Efektywność stabilnych metod quasi-rozwiązania, odchyłek i regularyzacji analizowano na przykładzie równania całkowego Fredholma I rodzaju, opisanego szczegółowo w [4]. Równanie to w postaci:

$$\int_0^1 K(t, s)\, z(s)\, ds = y(t), \qquad 0 \leqslant t \leqslant 1, \tag{25}$$

gdzie:

$$K(t,s) = \begin{cases} t(1 - s), & \text{dla} \quad 0 \leqslant t \leqslant s \leqslant 1, \\ s(1 - t), & \text{dla} \quad 0 \leqslant s \leqslant t \leqslant 1, \end{cases}$$

rozwiązano numerycznie za pomocą metody prostokątów.
Prowadzi to do układu równań algebraicznych, który jest bardzo źle uwarunkowany. Przy podziale przedziału całkowania na 30 podprzedziałów i zaokrąg-

leniu wartości $y(t)$ do trzech miejsc po przecinku rzeczywiste wartości funkcji $z(t)$ zmieniają się w zakresie:

0,0164, 0,0475, 0,0764...,

Wartości uzyskane z rozwiązania zwykłego układu równań algebraicznych są następujące:

- 0,9, 0,0, 0,9,...,

Obliczona dla tego przypadku norma:

$$\varrho = \| z_\delta - z \|_{l_2} = 0{,}712, \tag{26}$$

gdzie l_2 jest dyskretnym analogonem przestrzeni L_2.

Ponieważ znane jest dokładne rozwiązanie równania (25) można dokładnie określić warunki dla metody quasi-rozwiązania. Dla wyników uzyskanych za pomocą tej metody norma określona równaniem (26) wynosi $\varrho = 0{,}057$. Analogiczna norma określona dla wyników uzyskanych metodą odchyłek wynosi $\varrho = 0{,}018$.

Najlepsze rezultaty daje metoda regularyzacji. Przy parametrze regularyzacji $\alpha = 0{,}00025$ norma wynosi $\varrho = 0{,}0071$, a uzyskane rezultaty są bardzo stabilne. Także dla wielu innych przykładów cytowanych w literaturze [2] słuszny jest wniosek, że metodą dającą najlepsze rezultaty jest metoda regularyzacji. W związku z tym wnioskiem analizę stabilnych metod różniczkowania funkcji ograniczono do metody regularyzacji.

Obliczenia przeprowadzono dla rozmaitych funkcji elementarnych, takich jak sinus, cosinus, exponent. Dotyczyły one rozmaitych kroków H (równanie (14)) i rozmaitych przedziałów zmienności argumentu funkcji. Dla każdego przypadku obliczano pierwiastek sumy kwadratów odchyłek między uzyskanym wynikiem a wartością dokładną, dzielony przez liczbę punktów wchodzących w skład sumy, jako miarę odchylenia standardowego σ. Poniżej przedstawiono wnioski z przeprowadzonych obliczeń, ilustrowane rezultatami uzyskanymi podczas obliczania kolejnych czterech pochodnych (tzn. do czwartego rzędu włącznie) funkcji e^{-x} dla $x = 0{,}0,\ 0{,}08,\ 0{,}016,\ldots$, tzn. z krokiem $H = 0{,}08$.

W trakcie obliczeń okazało się, że jeżeli tylko przeprowadzono je z dokładnością ograniczoną do czterech cyfr znaczących, to uzyskuje się poprawne wyniki, stosując nawet zwykłe różnice skończone. Odchylenia standardowe wynosiły (dla kolejnych pochodnych): 0,0132, 0,026, 0,038, 0,05, co przy wartościach pochodnych zmieniających się w zakresie 1,0, 0,923, 0,852, ..., 0,670 można uznać za rezultat zupełnie poprawny.

Jeszcze lepsze wyniki otrzymuje się stosując metodę różniczkowania wielomianu aproksymacyjnego: 0,0001, 0,0007, 0,0011, 0,04.

Sytuacja radykalnie zmienia się, jeżeli dane obarcza się przypadkowymi błędami. Błędy te losowano z przedziału [- 0,005, 0,005] za pomocą generatora liczb pseudolosowych o rozkładzie równomiernym. Dla metody różnic skończonych odchylenia standardowe wyniosły: 0,024, 0,411, 10,8, 283,1, a więc wyniki były zupełnie niestabilne, przy czym nawet dla pierwszej pochodnej nie występowały żadne prawidłowości w jej przebiegu (powinna to być funkcja monotoniczna, stale ujemna). Lepsze rezultaty uzyskano dla metody wielomianów, gdzie odchylenia wyniosły 0,023, 0,22, 3,124, 36,9, przy czym dla pierwszej i drugiej pochodnej zachowane zostały cechy monotoniczności. Dodać jednak należy, że zastosowano wielomiany algebraiczne 5 stopnia, oparte na 7 węzłach, co w świetle wniosków przestawionych w [5] jest zbyt małą liczbą. Ograniczenie to wynikało z chęci porównania tej metody z innymi przy tej samej ilości informacji.

Obliczenia pochodnych przeprowadzone za pomocą metody Nowikowa potwierdziły jej przydatność, ale tylko do pochodnej drugiego rzędu włącznie. Odchylenia standardowe wyniosły: 0,0062, 0,0436, 0,161, 0,314. Zauważono przy tym dość słaby wpływ parametru α na wyniki obliczeń. Tym niemniej im wyższy jest rząd pochodnej, tym wyższe są optymalne wartości α.

Obliczenia potwierdziły dużą efektywność metody regularyzacji. Przede wszystkim okazało się, że z uwagi na błędy numeryczne przy rozwiązywaniu układu równań (21) korzystniej jest wyznaczać pochodne wyższych rzędów, jako pochodne pochodnych. Najmniej dokładne rezultaty uzyskuje się w pobliżu granic przedziału, co wynika z konieczności określenia warunków brzegowych.

Niewiadome na brzegach wyznaczono za pomocą metody różnic skończonych. Stąd też celowe wydaje się dzielenie przedziału [a, b] na podprzedziały. Wystąpi wtedy tylko problem wyznaczenia warunku brzegowego dla $x = a$ oraz dla prawego brzegu, przesuwającego się z kolejnymi podprzedziałami. Obliczenia potwierdziły dużą stabilność wyników. Przy wartości $\alpha = 1$ otrzymano dla pierwszej pochodnej $\sigma = 0,07$, a dla trzeciej pochodnej $\sigma = 0,072$. Rozwiązanie jest też bardziej czułe na zmiany α niż w przypadku metody Nowikowa. Wartość optymalna α w przypadku np. pochodnej pierwszego rzędu wynosiła (wg (24)) $\alpha = 0,01$, a pochodnej trzeciego rzędu $\alpha = 1,0$. Odpowiednie wartości odchylenia standardowego wyniosły: $\sigma = 0,0027$, i $\sigma = 0,072$. Natomiast w przypadku $\alpha = 0,001$ uzyskano dla pochodnej trzeciego rzędu $\sigma = 4,61$. Tak więc problem doboru α jest bardzo istotny.

Powyższe wyniki potwierdzają wniosek, że metoda regularyzacji zapewnia stabilne wyniki dla zadań źle uwarunkowanych, a więc także dla zadania różniczkowania funkcji. Wniosek ten został także potwierdzony podczas obliczeń dla innych przykładów. Dodać jednak należy, że stabilne wyniki nie zawsze oznaczają dokładne wyniki, gdyż nie można wyeliminować całkowicie złego uwarunkowania problemu.

LITERATURA

[1] Hadamard J.: Le probleme do Cauchy et les equations aux derives partielles lineaires hiperboliques, Ed. Hermann, Paris 1932.

[2] Tichonow A.N., Arsenin W.J.: Mietody rieszenija niekorrektnych zadacz, Izd. Nauka, Moskwa 1979.

[3] Tichonow A.N., i in.: Riegularizijuszczije algoritmy i apriornaja informacija, Izd. Nauka, Moskwa 1983.

[4] Kryłow W.I. i in.: Wyczyslitielnyje mietody. Cz. II, Izd. Nauka, Moskwa 1977.

[5] Kurpisz K.: Wyznaczanie pola temperatury w ciałach stałych na podstawie obserwacji temperatury lub gęstości strumienia ciepła w wybranych punktach ciała. ZN Pol. Śl. s. Energetyka, z. 84, 1984.

[6] Iwanow W.K.: O niekorretno postawlonnych zadaczach. Mat. Sbornik, t. 61, No 2, (1963) s. 211-223.

[7] Phillips D.L.: A technique for the Numerical Solutions of Certain Integral Equations of the First Kind (1962), J. Assoc. Comput. Machin., vol. 9., No 1, pp. 4-57.

[8] Kurpisz K., Skorek J.: Zagadnienia odwrotne teorii przewodzenia ciepła. Spr. z pracy nauk.-bad. realizowanej w ramach problemu CPBP 02.18 temat 2.2.1.1., etap I, Gliwice 1986.

[9] Nowikow I.A.: O reszenii liniejnych granicznych obratnych zadacz tiepłoprowodnosti. IFŻ, 34, No 3, (1976), s. 529-535.

ИЗБРАННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ НЕТОЧНО ЗАДАННОЙ ФУНКЦИИ

Р е з ю м е

В работе оговорены расчетные аспекты дифференшрования функции заданной в дискретных точках с ошибками данных. Задача эта принадлежит к плохо обусловленным, поэтому получение стабильных результатов требует специальных расчетных техник. В статье не освещаются вопросы теории рассматриваемых методов а только лишь возможности их практического применения.

NUMERICAL PROBLEMS OF DIFFERENTIATING INACCURATELY GIVEN FUNCTIONS

S u m m a r y

Calculation aspects of differentiating the function given at discrete points and burdened with data errors have been discussed in the paper. This problem belongs to the ill-conditioned ones and obtainment of stable results requires special calculation technique. The paper does not deal with the theory of the methods discussed but only with possibilities of their practical use.
The problem of function differentiation arises, among others, when solving the inverse heat conduction problems.