تقریب تابع و مشتقات آن بکمک سری تیلور:

اساس بسیاری از روشها در محاسبات عددی بر مبنای سری تیلور می‌باشد. قضیه تیلور را در یک بعد می‌توان بصورت زیر بیان کرد. فرض کنید تابع $f(x)$ روی پاره خط $[a,b]$ تعریف شده و $n+1$ بار مشتق‌پذیر باشد. نقطه $x_0 \in (a,b)$ را در نظر بگیرید. برای هر $x \in (a,b)$ بطوریکه $x = x_0 + \Delta x$، یک عدد ξ بین دو نقطه x_0 و x وجود دارد بطوریکه تساوی زیر برقرار باشد: ($(x+\Delta x \in (a,b))$):

$$f(x_0+\Delta x) = f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{\Delta x^n}{n!}f^{(n)}(x_0) + R_n(x_0+\Delta x) \qquad (۱)$$

$$R_n(x_0+\Delta x) = \frac{\Delta x^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi) \qquad x_0 \leqslant \xi \leqslant x \qquad (۲)$$

منظور از f^n در این روابط مشتق مرتبه n ام تابع می باشد. بطور مشابه می‌توان سری تیلور را برای نقطه $x = x_0 - \Delta x$ نوشت. در این حالت کافی است Δx را به $-\Delta x$ تبدیل کرد:

$$f(x_0-\Delta x) = f(x_0) - \Delta x f'(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{(-\Delta x)^n}{n!}f^{(n)}(x_0) + R_n(x_0-\Delta x) \qquad (۳)$$

$$R_n(x_0-\Delta x) = \frac{(-\Delta x)^{n+1}}{(n+1)!}f^{(n+1)}(\xi) \qquad x \leqslant \xi \leqslant x_0 \qquad (۴)$$

در عمل معمولا از از تعداد محدودی از جملات اول سری برای تقریب استفاده می‌شود. در این حالت بشرطی که مقدار Δx به اندازه کافی کوچک باشد، تقریب مناسبی از تابع در همسایگی x_0 بدست خواهد آمد. در صورتیکه تقریب تابع با سری تیلور برای n جمله اول انجام شود، مانده سری یا خطای تقریب متناسب با Δx^n خواهد بود. به دلیل وجود توان n این تقریب را اصطلاحا از درجه [۱] (n) می‌نامند و آن را با $O(\Delta x^n)$ نشان می‌دهند:

$$f(x_0+\Delta x) = f(x_0) + \Delta x f'(x_0) + \frac{\Delta x^2}{2!}f''(x_0) + \cdots + \frac{\Delta x^{n-1}}{n-1!}f^{(n-1)}(x_0) + O(\Delta x^n) \qquad (۵)$$

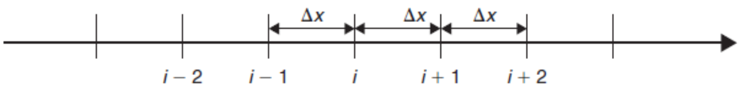
توجه شود که در عمل معمولا مقدار مطلق خطا مشخص نیست اما درصورتیکه اطلاعات کافی از مشتق مرتبه (n) تابع موجود باشد، می‌توان حد بالایی خطا را تقریب زد. بعنوان مثال تقریب تاب $\cos x$ را در همسایگی $x_0 = 0$ در نظر بگیرید. سه جمله اول از سری تیلور این تابع بصورت زیر خواهد بود:

$$\cos(0+\Delta x) = 1 - \frac{1}{2}(\Delta x)^2 + O(\Delta x^3)$$

در این حالت مانده تقریب برابر $\frac{\Delta x^3}{6}\sin\xi$ خواهد بود. از آنجا که مقدار بیشینه تابع $\sin(x)$ برابر ۱ است، مقدار مطلق خطای این تقریب همواره کمتر مساوی $\frac{\Delta x^3}{6}$ خواهد بود که نشان می‌دهد با کوچکتر کردن مقدار Δx می توان مقدار مطلق خطا را کاهش داد. در موارد خاص که تابع بصورت یک چند جمله ای درجه $(n-1)$ باشد، می توان با استفاده از n جمله اول سری تیلور مقدار دقیق تابع را ارزیابی کرد. توجه شود که در این حالت ضریب مانده سری که مشتق مرتبه n تابع است برابر صفر می‌باشد.

یکی از مهمترین کاربردهای سری تیلور تقریب مشتقات تابع با استفاده از مقدار تابع می باشد. مطابق شکل ؟؟ فرض کنید دامنه تعریف تابع $f(x)$ به تعداد محدودی پاره خط با فواصل مساوی Δx تقسیم بندی شده است و مقدار تابع در نقاط $x = i\Delta x$ موجود می باشد (i یک عدد صحیح می‌باشد).

[۱] Order



شکل ۱: گسسته‌سازی دامنه تعریف تابع f.

مقدار تابع در این نقاط را به اختصار با f_i نشان می دهیم. نقطه $x_0 = i\Delta x$ را که آنرا به اختصار با نقطه i نشان می دهیم در نظر بگیرید. می‌توان بسط سری تیلور را حول این نقطه بصورت زیر نوشت:

$$f_{i+1} = f_i + \Delta x f_i' + O(\Delta x^2) \qquad (۶)$$

با انجام عملیات ساده جبری مقدار مشتق تابع در نقطه i از عبارت زیر محاسبه می شود:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + O(\Delta x) \qquad \texttt{Forward Difference} \qquad (۷)$$

توجه شود که مرتبه خطا در این تقریب از درجه اول خواهد بود (تقسیم شدن مرتبه خطا بر Δx را حین انجام محاسبات جبری در نظر بگیرید). به این تقریب مشتق اصطلاحا تفاضل پیشرو [۲] گویند. بطور مشابه می توان تقریب مشتق بکمک تفاضل پسرو [۳] حول نقطه i را محاسبه کرد:

$$f_{i-1} = f_i - \Delta x f_i' + O(\Delta x^2) \qquad (۸)$$

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + O(\Delta x) \qquad \texttt{Backward Difference} \qquad (۹)$$

درصورتیکه تقریب با درجه دقت بالاتر مطلوب باشد می‌توان با انجام عملیات جبری مناسب ترمهای مرتبه بالای موجود در سری تیلور را حذف کرده و تقریبی با خطای کمتر بدست آورد. بعنوان مثال داریم:

$$f_{i+1} = f_i + \Delta x f_i' + \frac{\Delta x^2}{2} f_i'' + O(\Delta x^3) \qquad (۱۰)$$

$$f_{i-1} = f_i - \Delta x f_i' + \frac{\Delta x^2}{2} f_i'' + O(\Delta x^3) \qquad (۱۱)$$

با تفریق رابطه (؟؟) از (؟؟) و انجام عملیات جبری ساده خواهیم داشت:

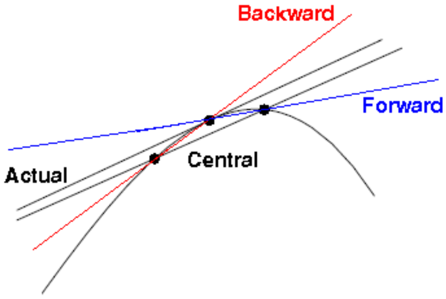
$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \qquad \texttt{Central Difference} \qquad (۱۲)$$

به این روش تفاضل مرکزی [۴] گویند. علت این نامگذاری تقارن مولکول محاسباتی این روش حول نقطه مورد است. شکل ؟؟ بصورت شماتیک نمایش هندسی این سه روش را در تقریب مشتق تابع نشان می‌دهد.

در صورتیکه محاسبه مشتق بصورت یکطرفه با دقت بالا مطلوب باشد، می توان با نوشتن بسط تیلور حول چند نقطه در همسایگی نقطه مطلوب و انجام عملیات جبری مناسب، تقریب مورد نظر را بدست آورد. برای روشن شدن بهتر مطلب به این مثال توجه کنید. فرض کنید مطلوب یافتن عبارتی شامل f_i، f_{i-1} و f_{i-2} باشد. فرض کنید عبارت تقریب بصورت زیر است:

$$f_i' = \frac{af_i + bf_{i-1} + cf_{i-2}}{\Delta x} + O(?) \qquad (۱۳)$$

[۲] Forward Difference
[۳] Backard Difference
[۴] Central Difference



شکل ۲:

حال باید ضرایب مجهول a، b و c را محاسبه کنیم. برای اینمنظور مقدار تقریب سری تیلور را حول نقطه i برای نقاط $i-1$ و $i-2$ می‌نویسیم:

$$f_{i-1} = f_i - \Delta x f_i' + \frac{\Delta x^2}{2} f_i'' + O(\Delta x^3) \qquad (۱۴)$$

$$f_{i-2} = f_i - 2\Delta x f_i' + \frac{4\Delta x^2}{2} f_i'' + O(\Delta x^3) \qquad (۱۵)$$

با استفاده از روابط (؟؟) و (؟؟) داریم:

$$af_i + bf_{i-1} + cf_{i-2} = (a+b+c)f_i + \Delta x(b+2c)f_i' + \frac{\Delta x^2}{2}(b+4c)f_i'' + O(\Delta x^3) \qquad (۱۶)$$

در نتیجه:

$$\frac{af_i + bf_{i-1} + cf_{i-2}}{\Delta x} = (a+b+c)\frac{f_i}{\Delta x} - (b+2c)f_i' + \frac{\Delta x}{2}(b+4c)f_i'' + O(\Delta x^2) \qquad (۱۷)$$

با هم ارز قرار دادن رابطه (؟؟) و (؟؟) خواهیم داشت:

$$a+b+c=0, \qquad b+2c=-1, \qquad b+4c=0$$

که نتیجه می دهد: $a=3/2, b=-2, c=1/2$. در نتیجه:

$$f_i' = \frac{3f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \qquad (۱۸)$$

بصورت مشابه می‌توان عبارت مشتق با درجه دقت مرتبه دوم را بصورت پیشرو محاسبه کرد که نتیجه نهایی آن برابر است با:

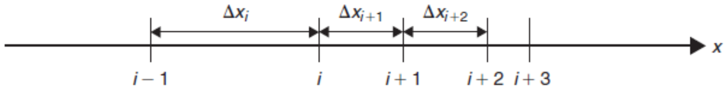
$$f_i' = \frac{-3f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}}{\Delta x} + O(\Delta x^2) \qquad (۱۹)$$

با انجام عملیاتی مشابه می توان مقدار مشتق مرتبه اول را با مرتبه دقت بالاتر بصورت پیشرو، پسرو و مرکزی بدست آورد. بعنوان مثال با انجام عملیاتی مشابه می‌توان نشان داد روابط زیر برقرار هستند (تمرین):

$$f_i' = \frac{2f_{i+1} + 3f_i - 6f_{i-1} + f_{i-2}}{6\Delta x} + O(\Delta x^3) \qquad (۲۰)$$

$$f_i' = \frac{-f_{i+2} + 6f_{i+1} - 3f_i - 2f_{i-1}}{6\Delta x} + O(\Delta x^3) \qquad (۲۱)$$

$$f_i' = \frac{-f_{i+2} + 8f_{i+1} - 8f_{i-1} + f_{i-2}}{6\Delta x} + O(\Delta x^4) \qquad (۲۲)$$



شکل ۳: گسسته‌سازی دامنه تعریف تابع f با Δx متغیر.

همانطور که مشاهده می‌شود، فرمولهای مربوط به تفاضل مرکزی در هنگامی که تعداد نقاط بکار رفته یکسان هستند دقت بیشتری نسبت به فرمولهای مربوط به تفاضل پیشرو یا پسرو دارند.

توجه شود که در محاسبه مشتق به روش تفاضل محدود، لزوما نباید فواصل نقاط یکسان باشد. بعنوان مثال مطابق شکل ؟؟ گسسته سازی دامنه تعریف تابع f را با Δx متغیر در نظر بگیرید. در این حالت با نوشتن سری تیلور حول نقطه i برای تقریب مقدار تابع در نقاط $i-1$ و $i+1$ مقدار مشتق تابع در نقطه i بروش تفاضل مرکزی از رابطه زیر بدست خواهد آمد (تمرین):

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} + \frac{1}{2}(\Delta x_{i+1} - \Delta x_i) f''_i + O(\Delta x^2) \tag{۲۳}$$

هنگامی که $\Delta x_{i+1} = \Delta x_i$ ترم دوم سمت راست این رابطه صفر شده و مرتبه دقت از درجه دوم خواهد بود. در غیر این صورت این ترم مخالف صفر بوده و مطابق رابطه زیر مرتبه دقت از درجه اول خواهد بود:

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i} + O(\Delta x) \tag{۲۴}$$

در صورتی که تغییرات Δx کم باشد یا $\Delta x_{i+1} \approx \Delta x_i$ می‌توان دقتی معادل مرتبه دوم را انتظار داشت. البته با انجام برخی از روشهای ابتکاری می توان روی دقت درجه دوم را نیز برای ارزیابی این مشتق بدست آورد. بعنوان مثال می‌توان رابطه زیر را با استفاده از سری تیلور استخراج کرد:

$$f'_i = \frac{1}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i}\left[\frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}}(f_{i+1} - f_i) + \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i}(f_i - f_{i-1})\right] - \frac{\Delta x_{i+1}\Delta x_i}{6} f''_i + O(\Delta x^3) \tag{۲۵}$$

از آنجا که ظریب ترم شامل مشتق دوم حاصلظرب دو Δx می‌باشد، مرتبه این عبارت درجه دوم است و خواهیم داشت:

$$f'_i = \frac{1}{\Delta x_{i+1} + \Delta x_i}\left[\frac{\Delta x_i}{\Delta x_{i+1}}(f_{i+1} - f_i) + \frac{\Delta x_{i+1}}{\Delta x_i}(f_i - f_{i-1})\right] + O(\Delta x^2) \tag{۲۶}$$

محاسبه مشتقات مرتبه بالاتر بکمک سری تیلور را نیز می توان بصورت مشابه انجام داد. بعنوان مثال برای محاسبه مشتق دوم تابع حول نقطه i کافی است سری تیلور حول این نقطه را برای نقاط $i+1$ و $i-1$ نوشته

$$f_{i+1} = f_i + \Delta x f'_i + \frac{\Delta x^2}{2} f''_i + \frac{\Delta x^3}{6} f'''_i + O(\Delta x^4) \tag{۲۷}$$

$$f_{i-1} = f_i - \Delta x f'_i + \frac{\Delta x^2}{2} f''_i - \frac{\Delta x^3}{6} f'''_i + O(\Delta x^4) \tag{۲۸}$$

و با جمع دو رابطه مقدار مشتق دوم را محاسبه کنیم:

$$f''_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + O(\Delta x^2) \tag{۲۹}$$

در صورتیکه مطابق شکل ؟؟ فواصل شبکه محاسباتی متغیر باشد، با انجام محاسبات ساده فرمول زیر حاصل می شود:

$$f''_i = \frac{2(\Delta x_i f_{i+1} - (\Delta x_i + \Delta x_{i+1}) f_i + \Delta x_{i+1} f_{i-1})}{\Delta x_i \Delta x_{i+1}(\Delta x_i + \Delta x_{i+1})} + O(\Delta x) \tag{۳۰}$$

مشابه قبل می‌توان مشتق دوم را بروش تفاضل پیشرو و پسرو نیز محاسبه کرد. بعنوان مثال می توان بسهولت صحت روابط زیر را نشان داد:

$$f_i'' = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + f_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x) \quad (۳۱)$$

$$f_i'' = \frac{f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i}{\Delta x^2} + O(\Delta x) \quad (۳۲)$$

روش عمومی برای توسعه فرمولهای تفاضل محدود با دقت دلخواه استفاده از اپراتورهای مشتق‌گیر است. حسن استفاده از این روش سادگی و عمومیت آن می‌باشد. از آنجا که این مبحث از محدوده این درس خارج است علاقمندان می توانند برای اطلاع از جزئیات روش به بخش $A4.4$ مرجع [?] مراجعه کنند.

سری تیلور در چند بعد (خارج از سیلابس درس – فقط برای مطالعه بیشتر):

مطالب گفته شده تنها برای تقریب یک تابع یک متغیره قابل استفاده هستند (البته در موارد خاص ممکن است بتوان آنها را برای تابع چند متغیره تیز استفاده کرد). فرض کنید تابع f وری فضای برداری $\mathbb{R}^n$ تعریف شده است. با فرض اینکه تابع روی این فضا به اندازه کافی مشتق‌پذیر است، بصورت مشابه می توان بسط تیلور این تابع را برای نقاطی در همسایگی نقطه $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n (\mathbf{x}_0 = (x_1, x_2, \cdots, x_n))$ بصورت زیر نوشت:

$$f(\mathbf{x}_0 + \Delta\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}_0) + \Delta\mathbf{x} \cdot \nabla f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2}\Delta\mathbf{x}^T \cdot \nabla\nabla f(\mathbf{x}_0) \cdot \Delta\mathbf{x} + \cdots \quad (۳۳)$$

در این رابطه $\Delta\mathbf{x} = (\Delta x_1, \Delta x_2, \cdots, \Delta x_n)$، بردار $\nabla f = (\partial f/\partial x_1, \partial f/\partial x_2, \cdots, \partial f/\partial x_n)$ گرادیان تابع و تانسور مرتبه دوم $\nabla\nabla f$ برابر هسیین تابع (گرادیان مرتبه دوم) می باشد. ترمهای مرتبه بالاتر را نیز بصورت حاصلضرب تانسوری تانسورهای مرتبه بالاتر بیان کرد که در اینجا از بیان آنها صرفنظر شده است. بعنوان مثال برای حالت دوبعدی (یا سه بعدی) می توان بسط بالا را ساده کرده و بصورت گسترده تر بیان کرد:

$$\begin{aligned} f(x_0 + \Delta x, y_0 + \Delta y) = f(x_0, y_0) + \Delta x \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y} \\ + \frac{1}{2}\Delta x^2 \, \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x^2} + \Delta x \Delta y \, \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial x \partial y} + \frac{1}{2}\Delta y^2 \, \frac{\partial^2 f(x_0, y_0)}{\partial y^2} + O(\Delta\mathbf{x}^3) \end{aligned} \quad (۳۴)$$

در این رابطه $\mathbf{x} = (x, y)$ و $\Delta\mathbf{x} = (\Delta x, \Delta y)$ می باشد. در بسیاری از روشهای عددی خصوصا توسعه برخی از روشهای حل معادلات دیفرانسیل پاره ای بدون شبکه محاسباتی [۵] از سری تیلور چند بعدی استفاده می‌شود. بعنوان مثال با در نظر گرفتن تعداد مشخصی نقطه مجزا در مکانهای دلخواه در فضا می توان مشتقات مورد نظر تابع را با دقت دلخواه توسط سری تیلور چند بعدی محاسبه کرد.

مراجع

[1] C. Hirsch. *Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 1: Fundamentals of Computational Fluid Dynamics, Second edition*. Butterworth-Heinemann, 2007.

[۵] Meshless methods