XV Международная школа-семинар "Информационные технологии в задачах математического моделирования"

СИСТЕМА КОМПЬЮТЕРНОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ ФУНКЦИЙ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

В.Н.Рокитянская
Институт проблем машиностроения Национальной академии наук Украины
Харьков, Украина

Актуальность проблемы компьютерного дифференцирования в математических науках очевидна и подсказана практической деятельностью человека. Общеизвестно, что редукция многих прикладных задач приводит к вычислению частных производных функций многих переменных. В системах анализа, контроля, синтеза и многих других при исследовании влияния шумов и помех на расчетные параметры также требуется выполнять операции дифференцирования.

В данной работе предлагается комплекс программ, предназначенный для автоматизации процесса вычисления частных производных функций без ограничения на порядок производных и количество независимых переменных.

В основу концепции компьютерного дифференцирования положена идея декомпозиции частной производной сложной функции в последовательность частных производных элементарных функций (x^2, $\sin x$ и т.п.) и операций (сложение, умножение и т. д.), например

$$\frac{\partial}{\partial x} f(g(x))\Big|_{x=x_0} = \left(\frac{\partial}{\partial s} f(s)\Big|_{s=g(x)}\right)\left(\frac{\partial}{\partial x} g(x)\Big|_{x=x_0}\right).$$

Значение функции и всех ее частных производных в некоторой точке мы будем называть дифференциальным кортежем [1]. Дифференциальные кортежи всех базисных элементарных операций и функций реализованы в виде точных аналитических выражений и подчиняются законам кортежной алгебры. Применяя многократно правило дифференцирования сложной функции к суперпозиции элементарных выражений, можно автоматизировать процесс получения дифференциальных кортежей функции.

Операцию дифференцирования суперпозиции функций можно представить следующим образом. Пусть $f=f(u_1, u_2, ..., u_k)$, $u_i=u_i(x_1, x_2, ..., x_n)$. Введем обозначения

$$F_{|\mu|=0}^{\xi_1\xi_2...\xi_k} = \frac{\partial^{|\xi|} f}{\partial u_1^{\xi_1}\partial u_2^{\xi_2}...\partial u_k^{\xi_k}}, \quad F_{\mu_1\mu_2...\mu_n}^{|\xi|=0} = \frac{\partial^{|\mu|} f}{\partial x_1^{\mu_1}\partial x_2^{\mu_2}...\partial x_n^{\mu_n}}.$$

Тогда можно записать рекуррентное выражение для нахождения производной от суперпозиции функций

$$F_{\mu_1,\mu_2,...\mu_n}^{\xi_1,\xi_2,...\xi_k} = \begin{cases} \dfrac{\partial^{|\xi|} f}{\partial u_1^{\xi_1}\partial u_2^{\xi_2}\dots\partial u_k^{\xi_k}}, & \text{если } |\mu| = 0, \\ \displaystyle\sum_{\alpha_1=0}^{\mu_1}\sum_{\alpha_2=0}^{\mu_2}\dots\sum_{\alpha_{p-1}=0}^{\mu_{p-1}}\sum_{\alpha_p=0}^{\mu_p-1}\sum_{\alpha_{p+1}=0}^{\mu_{p+1}}\dots\sum_{\alpha_n=0}^{\mu_n} C_{\mu_1}^{\alpha_1}C_{\mu_2}^{\alpha_2}\dots C_{\mu_{p-1}}^{\alpha_{p-1}}C_{\mu_p-1}^{\alpha_p}C_{\mu_p}^{\alpha_{p+1}}\dots C_{\mu_n}^{\alpha_n} \times & \\ \displaystyle\times\sum_{i=1}^{k} F_{\alpha_1\alpha_2...\alpha_n}^{\xi_1+\delta_1\cdot\xi_2+\delta_2...\xi_k+\delta_k} \frac{\partial^{|\mu|-|\alpha|} u_i}{\partial x_1^{\mu_1-\alpha_1}\partial x_2^{\mu_2-\alpha_2}\dots\partial x_n^{\mu_n-\alpha_n}}, & \text{если } |\mu| \neq 0, \end{cases}$$

где $|\mu| = \sum_{i=0}^{n}\mu_i$, $|\alpha| = \sum_{i=0}^{n}\alpha_i$, $|\xi| = \sum_{j=0}^{k}\xi_j$ $\delta_j = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & \text{i = j, j = 0,1,...k} \end{cases}$,

$0 \le |\mu| \le m, \quad m = \min(m_{u_i}, m_f)$ - порядок результирующего кортежа [2].

Преимущества данного способа компьютерного дифференцирования заключаются, во-первых, в возможности вычисления частных производных по точным алгоритмам, во-вторых, в отсутствии ограничения на порядок производных и количество независимых переменных. Следует отметить, что все ограничения, накладываемые на размерности величин и поля данных, зависят только от параметров вычислительной среды, в которой выполняется программа.

Программная реализация кортежной алгебры выполнена по методологии объектно-ориентированного проектирования и представлена совокупностью классов, реализованных на языке C++. Классы включают практически полный набор математических, логических операций, функций специального вида, которые используются для построения аналитических выражений над дифференциальными кортежами и вычисления их значений. Помимо этого, предусмотрены средства, необходимые при решении краевых задач математической физики в областях сложной формы методом RFM (Rvachev's functions method [3]), - модели разнообразных геометрических объектов, интегрирование и др.

Предложенные алгоритмы и программный комплекс прошли тестирование на задачах с известными аналитическими решениями. Проведенные вычислительные эксперименты подтвердили точность рассматриваемой концепции и показали надежность системы [4].

Таким образом, предлагаемые классы дифференциальных кортежей являются удобным средством организации процесса дифференцирования. Они просты в численной реализации и на их основе можно создавать программируемые структуры для решения широкого спектра задач прикладного характера.

1. *Рвачев В. Л., Шевченко А. Н.* Проблемно-ориентированные языки и системы для инженерных расчетов. - Киев: Техніка, 1988. - 187 с.
2. *Шевченко А. Н., Рокитянская В. Н.* К вопросу об автоматическом дифференцировании функций нескольких переменных // Кибернетика и системный анализ. - 1996. - N 5. - С. 38-58.
3. *Рвачев В. Л.* Теория R-функций и некоторые ее приложения. - Киев: Наукова думка, 1982. - 552 с.
4. *Шевченко А. Н., Рокитянская В. Н.* Компьютерное моделирование многомерных краевых задач математической физики // Информационные технологии: наука, техника, образование: Сб. научн. труд. Харьков: ХГПУ. Выпуск 6., Ч.1, 1998.- С.157-161.