ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

Задача численного дифференцирования появляется при работе со сложными аналитическими или таблично заданными функциями, а также при разностной аппроксимации дифференциальных уравнений.

7.1. Полиномиальные формулы

По таблице функции строится полином Ньютона или сплайн, и за производную от функции принимается производная от полинома.

Полином Ньютона

$$y(x) \approx y(x_0) + \sum_{k=1}^{n} (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_{k-1})\ y(x_0,..., x_k).$$

Продифференцируем полином

$$y'(x) = y(x_0, x_1) + [(x - x_0) + (x - x_1).]y(x_0, x_1, x_2) +$$

$$+ [(x - x_0)(x - x_1) + (x - x_0)(x - x_2) + (x - x_1)(x - x_2)] \times y(x_0, x_1, x_2, x_3) + ...$$

$$y''(x) = 2y(x_0, x_1, x_2) + 2[(x - x_0) + (x - x_1) + (x - x_2)]y(x_0, x_1, x_2, x_3) + ...$$

$$y'''(x) = 2 \cdot 3y(x_0, x_1, x_2, x_3) + ...$$

Вообще

$$y^{(n)}(x) = n!\,y(x_0, x_1, x_2, ...x_n) + ...$$

Порядок точности выписанных формул дифференцирования по отношению к шагу сетки равен разности между количеством узлов и порядком производной, т.е. если ограничиться только первым членом разложения, то порядок точности будет первым.

На практике точность определяется добавлением и соответствующим оцениванием новых членов ряда.

Использование кубического сплайна для определения первой и второй производных может дать неплохие результаты в силу непрерывности этих производных. Но метод достаточно громоздок для массового применения.

Хорошие результаты дает применение полинома Эрмита, особенно если в таблице заданы производные порядков, совпадающих с порядком тех производных, которые подлежат вычислению.

7.2. Разложение в ряды Тейлора

Это наиболее универсальный метод построения формул численного дифференцирования заданных порядков точности относительно шага сетки (таблицы). При этом достаточно просто получается оценка погрешности формул.

Таблица задана на множестве значений аргумента, которые при постоянном шаге h образуют сетку $\omega_h = \{x_n : x_n = x_0 + nh,\ n = 0,1,...N\}$, точки x_n называются узлами сетки. Выберем тройку узлов таблицы (x_{n-1}, x_n, x_{n+1}). Для сокращения записи введем обозначения $y'(x_n) = y'_n$, $y''(x_n) = y_n''$, ... $y^{(m)}(x_n) = y_n^{(m)}$.

Выполним разложение функции в ряд Тейлора, приняв за центр разложения точку x_n

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{1!}y'_n + \frac{h^2}{2!}y_n'' + \frac{h^3}{3!}y_n''' + \frac{h^4}{4!}y_n^{IV} + ... \qquad (1)$$

$$y_{n-1} = y_n - \frac{h}{1!}y'_n + \frac{h^2}{2!}y_n'' - \frac{h^3}{3!}y_n''' + \frac{h^4}{4!}y_n^{IV} - .... \qquad (2)$$

Получим разностные формулы для вычисления первых производных.

Из (1)

$$y'_n = \frac{y_{n+1} - y_n}{h} - \frac{h}{2!}y_n'' + O(h^2)$$

или

$$y'_n = \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + O(h). \qquad (3)$$

Из (2)

$$y'_n = \frac{y_n - y_{n-1}}{h} + \frac{h}{2!} y_n'' + O(h^2)$$

или

$$y'_n = \frac{y_n - y_{n-1}}{h} + O(h)\,. \qquad (4)$$

Выражение (3) называется **правой** разностной производной (или правосторонней формулой), (4) - **левой** разностной производной (или левосторонней формулой).

Вычитая (2) из (1), получим **центральную** формулу для первой производной

$$y'_n = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} + \frac{h^2}{3!} y_n''' + O(h^4)$$

или

$$y'_n = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} + O(h^2)\,. \qquad (5)$$

Односторонние формулы (3), (4) имеют самый низкий, первый порядок точности относительно шага, формула (5) более точная, у нее порядок точности второй. Если же формулы (3), (4) применять для вычисления производной в средней точке интервала сетки $x_{n+1/2}$ или $x_{n-1/2}$, то порядок точности повышается до 2.

Точно так же, получим разностный аналог второй производной. Сложим (1) и (2)

$$y_n'' = \frac{y_{n-1} - 2y_n + y_{n+1}}{h^2} + O(h^2)\,. \qquad (6)$$

Наконец, остановимся на вычислении производной в крайних узлах (x_0 и x_N). Формула центральной разности здесь не применима, односторонние же разностные производные имеют низкий порядок точности. Вопрос рассмотрим на примере получения численной формулы для первой производной в левом крайнем узле y'_0 со вторым порядком точности. Выполним разложение в ряд Тейлора в двух узлах, примыкающих к x_0: x_1 и x_2

$$y_1 = y_0 + \frac{h}{1!} y'_0 + \frac{h^2}{2!} y_0'' + \frac{h^3}{3!} y_0''' + \frac{h^4}{4!} y_0^{IV} + \ldots \qquad (7)$$

$$y_2 = y_0 + \frac{2h}{1!} y'_0 + \frac{(2h)^2}{2!} y_0'' + \frac{(2h)^3}{3!} y_0''' + \frac{(2h)^4}{4!} y_0^{IV} + ... \tag{8}$$

Чтобы обеспечить точность $O(h^2)$ для определения y'_0, надо из системы (7), (8) исключить слагаемое, содержащее h^2. Выполняя данное преобразование, получим уже трехчленную формулу

$$y'_0 = \frac{-3y_0 + 4y_1 - y_2}{2h} + \frac{2h^2}{3!} y'''_0 + ... = \frac{-3y_0 + 4y_1 - y_2}{2h} + O(h^2)\,. \tag{9}$$

В случае, если требуется построить формулу еще более высокого порядка точности, то придется подключать дополнительно новые узлы. Так, для получения точности $O(h^3)$ надо написать в дополнение к (7), (8) ряд для узла x_3 и из полученных 3-х разложений исключить члены, содержащие h^2 и h^3 .

Аналогично строятся формулы для правого крайнего узла. Например, чтобы получить первую разностную производную второго порядка точности в узле x_N надо написать разложения для узлов x_{N-1} и x_{N-2} .

Отметим, что формулу (9) можно получить дифференцированием полинома Ньютона. Однако при этом не будет получен остаточный член, определяющий вид погрешности, как это имеет место в (9), т.к. при применении рядов Тейлора этот вопрос решается автоматически в ходе преобразований. Строя полином Ньютона для узлов x_0, x_1, x_2 получим

$$y'(x_0) = y(x_0, x_1) + (x_0 - x_1) y(x_0, x_1, x_2) = \frac{y_1 - y_0}{h} + \frac{h\left(\frac{y_1 - y_0}{h} - \frac{y_2 - y_1}{h}\right)}{2h} =$$
$$= \frac{-3y_0 + 4y_1 - y_2}{2h}$$

Пример 1. Показать, что формула для вычисления второй производной (6) в узле x_0 имеет только первый порядок точности, т.е.

$$y_0'' = \frac{y_0 - 2y_1 + y_2}{h^2} + O(h)\,.$$

Действительно погрешность формулы

$$R = y_0'' - \frac{y_0 - 2y_1 + y_2}{h^2} = y_0'' - \frac{1}{h^2}[y_0 - 2(y_0 + \frac{h}{1!}y'_0 + \frac{h^2}{2!}y_0'' + \frac{h^3}{3!}y_0''') +$$

$$+ y_0 + \frac{2h}{1!}y'_0 + \frac{(2h)^2}{2!}y_0'' + \frac{(2h)^3}{3!}y_0''' + ...] =$$

$$= y_0'' - \frac{1}{h^2}(h^2 y_0'' + \frac{6h^3}{3!}y_0''' \; ...) = -h\; y_0''' + ... = O(h),$$

как и было отмечено выше. Чтобы увеличить порядок точности до второго, надо подключить еще один узел и записать разложение в ряд Тейлора для узлов x_1, x_2, x_3. Затем из полученных выражений исключить члены, содержащие h и h^3.

7.3. Формулы Рунге

Погрешность вышеприведенных формул имеет вид $R = \psi(x)\, h^p$, где $\psi(x)$ - некоторая функция. Если некоторая приближенная формула Φ для вычисления величины Ω имеет структуру

$$\Omega = \Phi(h) + \psi(x) h^p + O(h^{p+1}), \qquad (10)$$

то записав (6) для сетки с шагом mh, получим

$$\Omega = \Phi(mh) + \psi(x)(mh)^p + O(h^{p+1}). \qquad (11)$$

Вычитая из (7) формулу (8), придем к **первой формуле Рунге**

$$\psi(x)\, h^p = \frac{\Phi(h) - \Phi(mh)}{m^p - 1} + O(h^{p+1}). \qquad (12)$$

Таким образом, выполнив расчет на второй сетке с другим шагом (удобно с увеличенным в 2 раза), можно оценить погрешность применения формулы численного дифференцирования на первой сетке с точностью до членов более высокого порядка малости.

Теперь комбинируя (10) и (11), получим **вторую формулу Рунге**, позволяющую за счет расчета на двух сетках с отличающимися шагами получить решение с более высокой точностью, чем заявленная теоретическая точность используемой формулы

$$\Omega = \Phi(h) + \frac{\Phi(h) - \Phi(mh)}{m^p - 1} + O(h^{p+1}). \qquad (13)$$

Повторим, что в этой формуле p - точность используемой формулы, например, p=2, если расчет ведется по центральной разностной формуле для нахождения первой производной.

Вывод формулы Рунге мы провели на примере операции дифференцирования. Однако все выкладки справедливы для любых других приближенных вычислений. Важно только, чтобы погрешность применяемых формул имела вид $R = \psi(x)\, h^p$.

В качестве примера рассмотрим построение формул численного интегрирования повышенной точности на основе формул более низкой точности. Построим формулу Симпсона на основе формулы трапеций. Обе эти формулы имеют указанную структуру погрешности и могут быть обработаны процедурой Рунге.

Выберем три узла x_n, x_{n+1}, x_{n+2}. Подставим во вторую формулу Рунге формулу трапеций, простроенную на двух сетках с шагами h и $2h$, т.е. m =2. Погрешность формулы трапеций относительно шага $O(h^2)$, т.е. p =2.

$$I = I_T(h) + \frac{I_T(h) - I_T(2h)}{2^2 - 1} = \frac{1}{3}[4I_T(h) - I_T(2h)],$$

здесь формулы трапеций имеют вид

$$I_T(h) = h\left(\frac{y_n}{2} + y_{n+1} + \frac{y_{n+2}}{2}\right),$$

$$I_T(2h) = 2h\left(\frac{y_n + y_{n+2}}{2}\right).$$

Окончательно

$$I = \frac{h}{3}(y_n + 4y_{n+1} + y_{n+2}),$$

но это есть формула Симпсона.

Разобранные примеры подводят к еще одному заключению. Применять формулу Рунге можно двояко: непосредственно работать с числовыми данными, выбирая нужные значения функции на разных сетках, или строя новые формулы более высокой точности.