12. Задача численного дифференцирования. Влияние вычислительной погрешности

Андрей Барeков Ярослав Пылаев
По лекциям Устинова С.М.

January 5, 2020

1 Задача численного дифференцирования

x	$f(x)$	$f'(x)$
x_0	$f(x_0)$	?
x_1	$f(x_1)$	?
$\cdots$	$\cdots$	$\cdots$
x_m	$f(x_m)$	?

Для таблично заданной функции требуется оценить значения производной $f(x)$ в узлах таблицы.

Но всегда помним, что писал Хемминг: *"Прежде, чем решать задачу, подумай, что делать с ее решением."*

PLOT THERE

Для функции $f(x)$ апроскимирующая функция $g(x)$ достаточно близка, поэтому близки и их интегралы, но производные совпадают лишь в нескольких точках.

Рассмотрим еще один убедительный пример. Имеются две функции $f(x)$ и $g(x)$ и их производные:

$$\begin{aligned} &f(x); && g(x) = f(x) + \frac{1}{N} sin(N^2 x); \\ &\frac{df(x)}{dx}; && \frac{dg(x)}{dx} = \frac{df(x)}{dx} + N cos(N^2 x). \end{aligned}$$

Очевидно, что, чем больше N,тем функции становятся ближе друг к другу, но в тот же момент их производные - наоборот. Таким образом, *близость f(x) и g(x) еще не гарантирует близости их производных.*

Для численного дифференцирования:

- функция должна изменяться достаточно плавно,
- шаг должен быть согласован с быстротой изменения функции,
- таблица не должна быть "зашумлена" погрешностью исходных данных.

Аппроксимуруем исходную функцию интерполяционным полиномом, и его производная даст формулу численного дифференцирования, а производная от остаточного члена позволит оценить погрешность:

$$f(x) = Q_m(x) + R_m(x)$$

$$f^{'}(x_k) \approx Q^{'}_m(x_k) \qquad (*)$$

$$\varepsilon = R^{'}_m(x_k) \qquad (**)$$

Получим формулы для численного дифференцирования для равноотстоящих узлов:

$$Q_1(x) = \frac{x - x_{k+1}}{x_k - x_{k+1}} f_k + \frac{x - x_k}{x_{k+1} - x_k} f_{k+1}$$

Дифференцируем и получаем значение производной в точках x_k и x_{k+1}

$$f^{'}(x_k) \approx \frac{f_{k+1} - f_k}{h} \quad (1)$$

$$f^{'}(x_{k+1}) \approx \frac{f_{k+1} - f_k}{h} \quad (2)$$

$$\varepsilon_1 = R_m^{'}(x_k)$$

$$R_1(x) = \frac{(x - x_k)(x - x_{k+1})}{2!} f^{''}(\eta) \qquad \eta \to \eta(x)$$

Остаточный член интерполяционного полинома

При взятии производной получаются три слагаемых

$$R_1^{'} = \frac{x - x_{k+1}}{2!} f^{''}(\eta) + \frac{x - x_k}{2!} f^{''}(\eta) + \frac{(x - x_k)(x - x_{k+1})}{2!} f^{'''}(\eta)\eta^{'}(x),$$

два из которых обращаются в 0 при подстановке x_k и x_{k-1}:

$$\varepsilon_1(x_k) = -\frac{h}{2} f^{''}(\eta) \quad (1^*)$$

$$\varepsilon_1(x_{k+1}) = \frac{h}{2} f^{''}(\eta). \quad (2^*)$$

Сделаем аналогичные вычисления для интерполяционного полинома 2-й стпени $Q_2(x)$ с узлами x_k, x_{k+1}, x_{k+2}.

$$f^{'}(x_k) \approx \frac{1}{2h}(-3f_k + 4f_{k+1} - f_{k+1}) \quad (3)$$

$$f^{'}(x_{k+1}) \approx \frac{1}{2h}(f_{k+2} - f_k) \quad (4)$$

$$f^{'}(x_{k+2}) \approx \frac{1}{2h}(3f_{k+2} - 4f_{k+1} + f_k) \quad (5)$$

Погрешность

$$R_2(x) = \frac{(x - x_k)(x - x_{k+1})(x - x_{k+2})}{3!} f^{'''}(\eta)$$

$$\varepsilon_2(x_k) = \frac{h^2}{3} f^{'''}(\eta) \quad (3^*)$$

$$\varepsilon_2(x_{k+1}) = -\frac{h^2}{6} f^{'''}(\eta) \quad (4^*)$$

$$\varepsilon_2(x_{k+2}) = \frac{h^2}{3} f^{'''}(\eta) \quad (5^*)$$

На меньшую погрешность можно расчитывать при использовании формулы (4), что и делает ее наиболее популярной; формулы (3) и (5) используются для дифференцирования в начале и конце таблицы.

Продифференцируем интерполяционный полином 2-й степени дважды, тогда простейшая формула для 2-й производной:

$$f''(x_{k+1}) \approx \frac{f_{k+2} - 2f_{k+1} + f_k}{h^2} \tag{6}$$

Привлекая новые узлы интерполирования, можно так и дальше дифференцировать полиномы.

Важным на практике является *выбор шага* h. Ограничение сверху накладывается величиной погрешности, а снизу - точностью табличных данных для $f(x)$.

2 Влияние вычислительной погрешности

$$f' \approx \frac{f_{k+1} - f_k}{h}$$
$$\varepsilon_1 = -\frac{h}{2} f''(\eta)$$

это формулы (1) и (1*)

Если значения f_k и f_{k+1} определены с погрешностью Δ_k и Δ_{k+1} соответсвенно, то

$$\boxed{|\varepsilon_{\text{общ}}| \leq \frac{h}{2}|f''(\eta)| + \frac{|\Delta_{k+1} - \Delta_K|}{h}}$$

Оптимальное значение шага $h_{\text{опт}}$ отвечает ситуации, когда оба слагаемых равны друг другу.

PLOT HERE