

12. Задача численного дифференцирования. Влияние вычислительной погрешности

Андрей Бареков 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	$f(x_1)$?
\dots	\dots	\dots
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 $f(x)$ аппроксимирующая 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:

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

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.

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

$$\begin{aligned} f(x) &= Q_m(x) + R_m(x) \\ f'(x_k) &\approx Q'_m(x_k) & (*) \\ \varepsilon &= R'_m(x_k) & (**) \end{aligned}$$

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}

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

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

$$\varepsilon_1 = R'_m(x_k)$$

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

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 степени $Q_2(x)$ с узлами x_k, x_{k+1}, x_{k+2} .

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

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

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

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 рассчитывать 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:

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

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

$$\begin{aligned} f' &\approx \frac{f_{k+1} - f_k}{h} \\ \varepsilon_1 &= -\frac{h}{2} f''(\eta) \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{это} \\ \text{формулы} \\ (1) \text{ и } (1^*) \end{array}$$

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

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

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

PLOT HERE