САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
SAMARA UNIVERSITY

Кафедра программных систем

Заболотнов Юрий Михайлович

Самара 2021

Постановка задачи.

Дана функция, оператор или алгоритм $y = f(x)$ для вычисления некоторой выходной характеристики ММ y по входному аргументу (или параметру) x .
Необходимо численно найти производную $k -$ ого порядка. x
Предполагается, что $f(x)$ непрерывно зависит от x на отрезке $[a, b]$.
Для приближенного вычисления производных будем использовать метод конечных разностей (МКР).

Вычисление первой производной.

Разобьем интервал точками $x_i = a + ih$, где $i = 0, 1, \ldots N$; $h = (b - a)/N$. В качестве приближенных выражений для первой производной для любой внутренней точки заданного интервала можно взять любую из следующих формул

$$\tilde{f}'(x_i) \approx (f_i - f_{i-1})/h \ , \qquad (1)$$

$$\tilde{f}'(x_i) \approx (f_{i+1} - f_i)/h \ , \qquad (2)$$

$$\tilde{f}'(x_i) \approx (f_{i+1} - f_{i-1})/2h \ , \qquad (3)$$

где $f_i = f(x_i)$, $f_{i-1} = f(x_{i-1})$, $f_{i+1} = f(x_{i+1})$.

Формулы (1), (2) и (3) называются соответственно левой, правой и центральной разностными производными функции $f(x)$ в точке $x = x_i$. Если точка x_i фиксирована, а $h \to 0$ $(N \to \infty)$, то каждое из выражений (1-3) в соответствии с определением первой производной стремится к точному значению производной $\tilde{f}'(x_i) \to f'(x_i)$. Поэтому в качестве приближенного выражения для оценки первой производной можно взять любую из этих формул.

Вычисление высших производных.

Аналогично может быть произведено численное вычисление второй производной функции $f(x)$. Вычитая правые части выражений для правой и левой разностных производных (2) и (1) друг из друга и разделив на шаг h, получим

$$\tilde{f}''(x_i) \approx (f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}) / h^2 \quad . \tag{4}$$

Используя формулу вычисления второй производной можно получить выражения для оценки третьей и четвертой производных функции $f(x)$

$$\tilde{f}'''(x_i) \approx (f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}) / 2h^3 \quad , \tag{5}$$

$$\tilde{f}^{IV}(x_i) \approx (f_{i+2} - 4f_{i+1} + 6f_i - 4f_{i-1} + f_{i-2}) / h^4 \quad . \tag{6}$$

Оценка методической погрешности вычисления первой производной
Для левой разности (1)

$$\tilde{f}'(x) \approx (f(x) - f(x-h))/h \quad , \qquad (7)$$

где $x = x_i$, $f(x) = f_i$, $f(x-h) = f_{i-1}$.

Определим значения $f(x-h)$, разложив функцию $f(x)$ в ряд Тейлора в точке x

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f''''(x)... \qquad (8)$$

Отсюда

$$\frac{f(x) - f(x-h)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(x) - ... \quad . \qquad (9)$$

Если функция $f(x)$ дифференцируема и ее вторая производная ограничена на интервале $[a,b]$ некоторой константой $M < \infty$, то из выражения (9) получим оценку (с точностью до слагаемых порядка h^2)

$$\left| f'(x) - \tilde{f}'(x) \right| < \frac{h}{2}M \quad . \qquad (10)$$

Иногда оценку (1.8) записывают по другому, используя символ порядка $O(h)$

$$\left| f'(x) - \tilde{f}'(x) \right| = O(h) \quad . \qquad (11)$$

Определение. Функция $F(h)$ является величиной порядка $h^k (k = 0, 1, \ldots)$, если

$$\lim_{h \to 0} \frac{F(h)}{h^k} = C_k \quad , \tag{12}$$

где $C_k < \infty$ - ограниченная константа.

Нетрудно показать, что точность оценки первой производной с помощью правой разностной производной та же (11). Однако вычисление первой производной с помощью центральной разностной схемы выше. Покажем это. Наряду с рядом (8) рассмотрим ряд

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{3!} f'''(x) + \frac{h^4}{4!} f''''(x) \ldots \tag{13}$$

Тогда вычитая левые и правые части выражений (13) и (8), получим

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{3!} f'''(x) + \ldots \quad .$$

Отсюда при условии ограниченности третьей производной функции $f(x)$, для центральной разностной схемы получаем

$$\left| f'(x) - \tilde{f}'(x) \right| = O(h^2) \quad . \tag{14}$$

Следовательно, центральная разностная схема в общем случае дает большую точность при численном вычислении первой производной, чем формулы правая и левая формулы.

ул. Московское шоссе, д.34, г.Самара, 443086, тел.: +7 (846) 335-18-26, факс: +7 (846) 335-18-36, сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru

Оценка погрешности численного дифференцирования

Аналогично может быть получена оценка точности вычисления второй производной (4). Для этого необходимо выписать ряды (8) и (13) до слагаемых порядка h^4 и подставить в формулу (1.4), тогда

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \frac{h^2}{12} f^{IV}(x) + \ldots$$

или при условии ограниченности четвертой производной

$$\left| f''(x) - \tilde{f}''(x) \right| < O(h^2) \quad . \tag{14}$$

Используя описанную выше методику, можно показать, что точность вычисления производных 3-ого и 4-ого порядков с помощью разностных схем определяется неравенством

$$\left| f^{(k)}(x) - \tilde{f}^{(k)}(x) \right| < O(h^k) \quad , \tag{15}$$

где $k = 3, 4$.

Формулы (1-2) – первого порядка точности *(p=1).*
Формулы (3-4)* – второго порядка точности *(p=2)
Формулы (5) и (6) - *p=3 и p=4* порядка точности.
В общем случае $\left| f^{(k)}(x) - \tilde{f}^{(k)}(x) \right| < O(h^p)$, **(16)**

где k **и** p **не всегда совпадают.**

О влиянии вычислительной погрешности.

При вычислении функции $f(x)$ может возникнуть вычислительная погрешность, например, $\tilde{f}_i = f_i + \delta_i$, $\tilde{f}_{i-1} = f_{i-1} + \delta_{i-1}$,

где δ_i, δ_{i-1} - вычислительная погрешность в точках x_i, x_{i-1}.

Тогда, например, для левой разности (2)

$$\tilde{f}'(x_i) \approx (f_i - f_{i-1})/h + (\delta_i - \delta_{i-1})/h \;.$$

В этом случае оценка для вычислительной погрешности δ_f определения производной дает

$$|\delta_f| = |(\delta_i - \delta_{i-1})/h| \le \frac{2\delta}{h} \;,$$

где $\delta = \max(|\delta_i|, |\delta_{i-1}|)$. Поэтому при $h \to 0$ вычислительная погрешность неограниченно возрастает.

- В общем случае существует некоторый минимальный шаг дискретизации h_o, при котором методическая и вычислительная погрешности приблизительно равны. Этот минимальный шаг дискретизации можно оценить, приравняв соответствующие погрешности. Так, для формулы (1) имеем

$$\frac{h_o}{2} M \approx \frac{2\delta}{h_o} \;.$$

Отсюда

$$h_o \approx 2\sqrt{\frac{\delta}{M}} = O(\sqrt{\delta}) \;.$$

При вычислении производных высших порядков влияние вычислительной погрешности может быть еще больше. Можно показать, что

$$h_o \approx O(\delta^{1/2k}) \;,$$

и это справедливо для $k = 2, 3, 4$

Пример влияния вычислительной погрешности

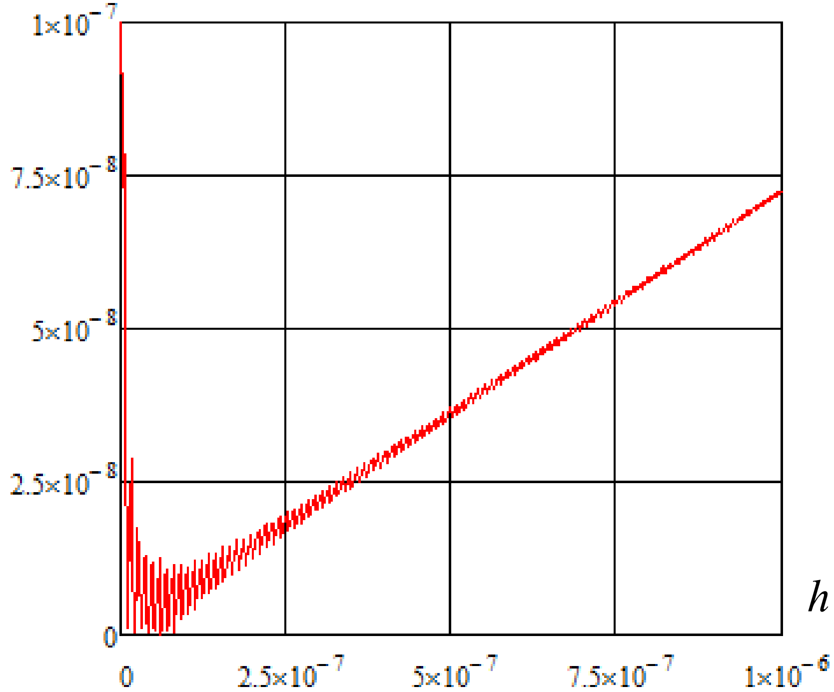

Рисунок 1. Полная погрешность для первой производной

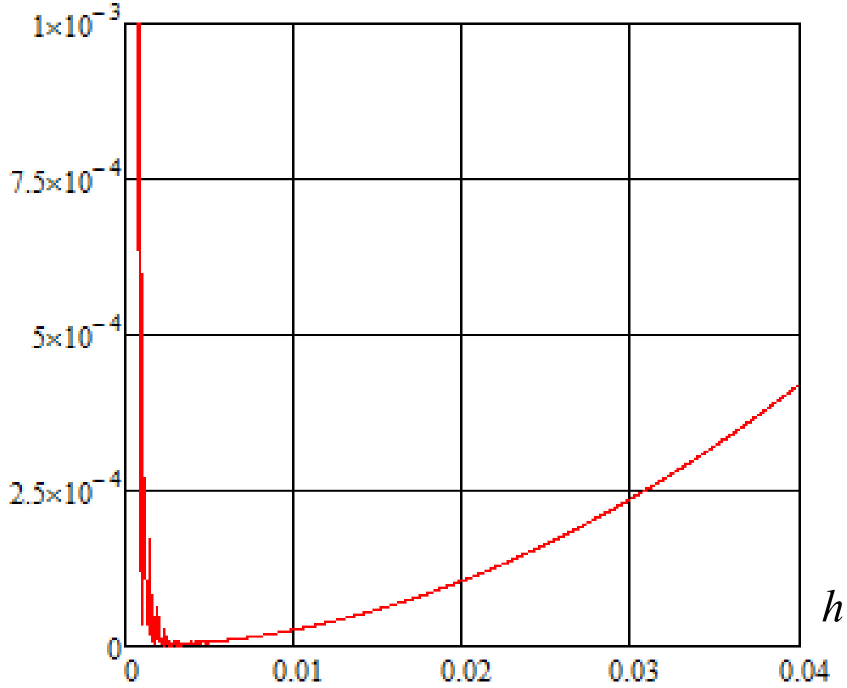

Рисунок 2. Полная погрешность для четвертой производной

Порядок точности определяет скорость изменения методической погрешности при уменьшении параметра h **!**

Различают:

1. **Прямой анализ погрешностей** (теоретический, априорный).

Анализ проводится до проведения расчетов и служит, как правило, для определения порядка точности p используемой формулы.

2. Обратный анализ погрешности (практический способ, апостериорный, по результатам проведенных численных экспериментов). Это анализ использует информация о порядке точности p.

Правило Рунге.

На основании (16) можно записать

$$\delta(h) = f^{(k)}(x) - \tilde{f}^{(k)}(h) \approx C_p h^p \qquad \textbf{(17)}$$

где C_p - некоторая константа, $f^{(k)}(x)$ - «точное» значение производной, $\tilde{f}^{(k)}(h)$ - приближенное значение при шаге h.

Проводя два расчета с параметрами h и $h/2$, получим

$$\begin{aligned} f^{(k)}(x) - \tilde{f}^{(k)}(h) &\approx C_p h^p \\ f^{(k)}(x) - \tilde{f}^{(k)}(h/2) &\approx C_p (h/2)^p \end{aligned} \qquad \textbf{(18)}$$

Отсюда определяем C_p, а значит оценку погрешности

$$|\delta(h)| \approx \left|\tilde{f}^{(k)}(h) - \tilde{f}^{(k)}(h/2)\right| \cdot \frac{2^p}{2^p - 1} \qquad \textbf{(19)}$$

ул. Московское шоссе, д.34, г.Самара, 443086, тел.: +7 (846) 335-18-26, факс: +7 (846) 335-18-36, сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru

Спасибо
за внимание

e-mail: yumz@yandex.ru

ул. Московское шоссе, д. 34, г. Самара, 443086
Тел.: +7 (846) 335-18-26 , факс: +7 (846) 335-18-36
Сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru