Лекция 14

Тема 7. Численное дифференцирование

Численное дифференцирование применяется тогда, когда функцию трудно или невозможно продифференцировать аналитически. Например, необходимость в численном дифференцировании возникает в том случае, когда функция задана таблицей. Кроме того, формулы численного дифференцирования широко используются при разработке вычислительных методов решения многих задач (решение дифференциальных уравнений, поиск решений нелинейных уравнений, поиск точек экстремума функций и др.).

§ 7.1. Простейшие формулы численного дифференцирования

1. Вычисление первой производной. Предположим, что в окрестности точки x функция f дифференцируема достаточное число раз. Исходя из определения производной

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x},$$

естественно попытаться использовать для ее вычисления простейшие приближенные формулы:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}, \qquad (7.1)$$

$$f'(x) \approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h}, \qquad (7.2)$$

соответствующие выбору фиксированных значений $\Delta x = h$ и $\Delta x = -h$. Здесь $h > 0$ – малый параметр (шаг). Разностные отношения в правых частях формул (7.1) и (7.2) часто называют *правой* и *левой разностными производными*.

Для оценки погрешностей

$$r_+(x,h) = f'(x) - \frac{f(x+h)-f(x)}{h}, \quad r_-(x,h) = f'(x) - \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$

введенных формул численного дифференцирования (*погрешностей аппроксимации*) воспользуемся формулами Тейлора:

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(\xi_\pm)}{2}h^2. \qquad (7.3)$$

Здесь и ниже ξ_+ и ξ_- - некоторые точки, расположенные на интервалах $(x,\ x+h)$ и $(x-h,\ x)$ соответственно. Подставляя разложения (7.3) в выражения для $r_\pm$, получаем $r_+(x,h) = -\frac{1}{2}f''(\xi_+)h$, $r_-(x,h) = \frac{1}{2}f''(\xi_-)h$. Следовательно,

$$|\,r_+(x,h)\,| \le \frac{1}{2}M_2h,\quad M_2 = \max_{[x,x+h]}|f''(\xi)|, \qquad (7.4)$$

$$|\,r_-(x,h)\,| \le \frac{1}{2}M_2h,\quad M_2 = \max_{[x-h,x]}|f''(\xi)| \qquad (7.5)$$

Таким образом, формулы (7.1) и (7.2) имеют первый порядок точности по h. Иначе говоря, правая и левая разностные производные аппроксимируют производную $f'(x)$ с первым порядком точности.

Приведенные формулы численного дифференцирования имеют простую геометрическую интерпретацию (рис. 7.1):

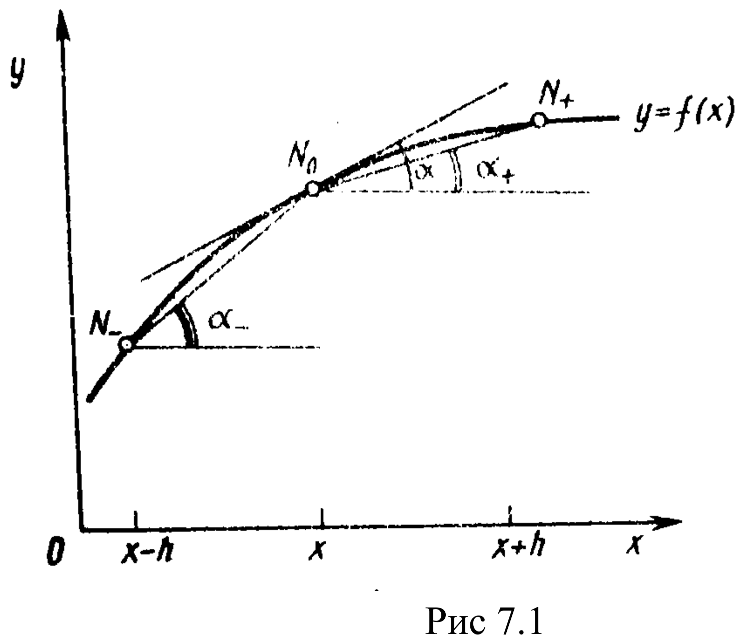

Рис 7.1

Пусть N_0, N_- и N_+ – расположенные на графике функции $y = f(x)$ точки с координатами *(x, f(x)), (x – h, f(x – h))* и *(x + h, f(x + h)).* Напомним, что производная $f'(x)$ равна тангенсу угла α наклона к оси Ox касательной, проведенной к графику функции в точке N_0. Формула (7.1) соответствует приближенной замене производной $f'(x)$ = tg α правой разностной производной $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$, равной тангенсу угла α_+ наклона секущей, проведенной через точки N_0 и N_+. Формула (7.2) соответствует аналогичной замене производной $f'(x)$ левой разностной производной $\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$, равной тангенсу угла α_- наклона секущей, проведенной через точки N_0 и N_-.

Естественно предположить (рис.7.2), что лучшим по сравнению с tgα_+ и tgα_- приближением к $f'(x)$ = tg α является тангенс угла наклона α_0 секущей, проведенной через точки N_- и N_+.

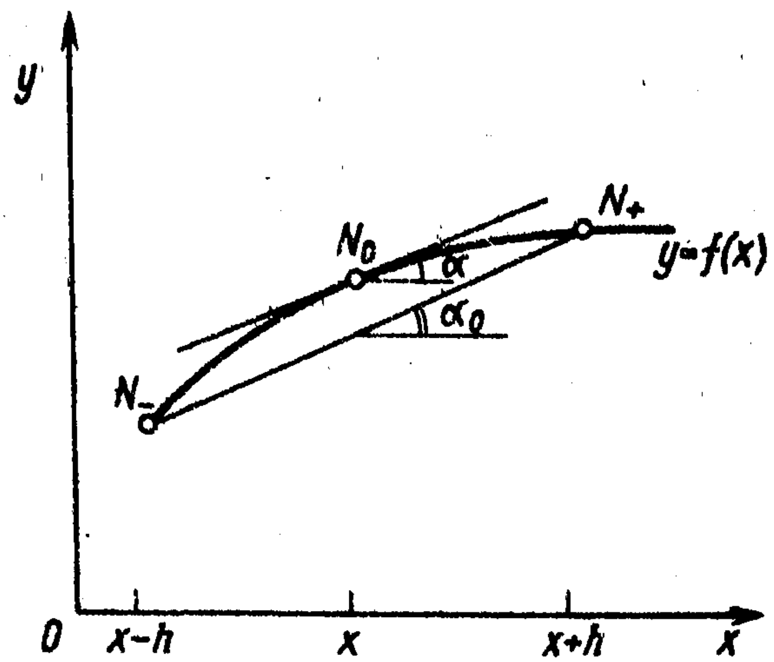

Рис. 7.2

Соответствующая приближенная формула имеет вид

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}. \qquad (7.6)$$

Величину в правой части этой формулы часто называют *центральной разностной производной*.

Подставляя в выражение для погрешности

$$r_0(x,h) = f'(x) - \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

соответствующие разложения по формуле Тейлора

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 \pm \frac{f^{(3)}(\xi_\pm)}{6}h^3,$$

получим $r_0(x,h) = -\frac{f^{(3)}(\xi_+)+f^{(3)}(\xi_-)}{12}h^2$. Следовательно, справедлива оценка погрешности

$$|\, r_0(x,h)\,| \le \frac{1}{6}M_3h^2, \quad M_3 = \max_{[x-h,\ x+h]}|f^{(3)}(\xi)|. \qquad (7.7)$$

Таким образом, центральная разностная производная аппроксимирует производную $f'(x)$ со вторым порядком точности относительно h.

Для вычисления $f'(x)$ можно получить формулы любого порядка точности. Однако в таких формулах с ростом порядка точности возрастает и число используемых значений функции. В качестве примера приведем формулу

$$f'(x) \approx \frac{f(x-2h)-8f(x-h)+8f(x+h)-f(x+2h)}{12h}, \qquad (7.8)$$

имеющую четвертый порядок точности.

2. Вычисление второй производной. Наиболее простой и широко применяемой для приближенного вычисления второй производной является следующая формула:

$$f''(x) \approx \frac{f(x-h)-2f(x)+f(x+h)}{h^2}. \qquad (7.9)$$

Величину в правой части этого приближенного равенства часто называют *второй разностной производной.*

Подставляя в выражение для погрешности

$$r(x,h) = f''(x) - \frac{f(x-h)-2f(x)+f(x+h)}{h^2}$$

соответствующие разложения по формуле Тейлора

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(x)}{2}h^2 \pm \frac{f^{(3)}(x)}{6}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_\pm)}{24}h^4,$$

получим $r(x,h) = -\frac{f^{(4)}(\xi_+)+f^{(4)}(\xi_-)}{24}h^2$. Следовательно,

$$|r(x,h)| \le \frac{M_4}{12}h^2, \quad M_4 = \max_{[x-h,\ x+h]}|f^{(4)}(\xi)|. \qquad (7.10)$$

Таким образом, формула (7.9) имеет второй порядок точности.

Для вычисления $f''(x)$ можно получить формулы любого порядка точности. Например, формула

$$f''(x) \approx \frac{-f(x-2h)+16f(x-h)-30f(x)+16f(x+h)-f(x+2h)}{12h^2} \qquad (7.11)$$

имеет четвертый порядок точности.

§ 7.2. Об общем подходе к выводу формул численного дифференцирования

Хотя простейшие формулы численного дифференцирования можно получить сравнительно элементарно, для вывода и анализа таких формул в более сложных случаях необходимо использовать значительно более серьезный математический аппарат. Основой для построения различных приближенных формул численного дифференцирования являются методы теории приближения функций, элементы которой были изложены в предыдущей главе.

Предположим, что в окрестности точки x функция f аппроксимируется некоторой другой функцией g, причем производная $g^{(k)}$ в точке x легко вычисляется.

Естественно в такой ситуации воспользоваться приближенной формулой

$$f^{(k)}(x) \approx g^{(k)}(x). \qquad (7.12)$$

Наиболее просто этот подход реализуется в случае, когда приближение осуществляется с помощью интерполяции.

1. Формулы численного дифференцирования, основанные на интерполяции алгебраическими многочленами. Пусть $P_n(x)$ - интерполяционный многочлен степени n с узлами интерполяции $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$ и $x \in [x_0, x_n]$. В этом случае формула (7.12) принимает вид

$$f^{(k)}(x) \approx P_n^{(k)}(x), \quad 0 \le k \le n. \qquad (7.13)$$

При этом справедлива следующая оценка погрешности формулы (7.13):

$$| f^{(k)}(x) - P_n^{(k)}(x)| \le C_{n,k} M_{n+1} h_{max}^{n+1-k}, \; 0 \le k \le n. \qquad (7.14)$$

Здесь $C_{n,k}$ – положительные числа, а $M_{n+1}=\max_{[x_0,x_n]} |f^{(n+1)}(x)|$.

З а м е ч а н и е 1. Порядок точности формулы (7.13) относительно h_{max} равен разности между числом узлов интерполяции и порядком вычисляемой производной.

З а м е ч а н и е 2. Если формула (7.13) применяется для вычисления производной в точке, относительно которой узлы таблицы расположены симметрично, и число $n-k$ четно, то порядок точности формулы повышается на единицу по сравнению с порядком $n+1-k$, гарантируемым оценкой (7.14). Таковы, например, формулы (7.6), (7,8), (7.9), (7.11).

2. Подход, основанный на использовании сплайнов. Применение формулы (7.13) для вычисления производной $f^{(k)}$ фактически основано на кусочно-полиномиальной интерполяции. Полученная таким образом производная в точке стыка двух соседних многочленов может иметь разрыв. Поэтому, если требуется глобально на отрезке $[a, b]$ аппроксимировать производную гладкой функцией, то целесообразно использовать сплайны. Производная $S_m^{(k)}(x)$ сплайна $S_m(x)$ при $k \leq m - r$ (где r – дефект сплайна) дает гладкую глобальную аппроксимацию для $f^{(k)}(x)$.

§7.3. Обусловленность формул численного дифференцирования

Несмотря на внешнюю простоту формул численного дифференцирования, их применение требует особой осторожности. Отметим, что используемые при численном дифференцировании значения $f^*(x)$ функции $f(x)$ непременно содержат ошибки. Поэтому к погрешности аппроксимации формул численного дифференцирования добавляется неустранимая погрешность, вызванная погрешностями вычисления функции f. Для того, чтобы погрешность аппроксимации была достаточно малой, требуется использование таблиц с малыми шагами h. Однако, к сожалению, при малых шагах формулы численного дифференцирования становятся плохо обусловленными и результат их применения может быть полностью искажен неустранимой ошибкой. Важно понимать, что действительная причина этого явления лежит не в несовершенстве используемых методов вычисления производных, а в заданной функции (см. пример 3.5).

Поясним сказанное на примере формулы (7.1). Полная погрешность $r^*(x,h) = f'(x) - \frac{f^*(x+h) - f^*(x)}{h}$ реально вычисляемого значения правой разностной производной представляет собой сумму погрешности аппроксимации $r_+(x,h) = f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$ и неустранимой погрешности

$$r_{\text{н}}(x,h) = \frac{1}{h}((f(x+h) - f^*(x+h)) - (f(x) - f^*(x))).$$

Пусть $\overline{\Delta}$ – верхняя граница абсолютной погрешности $\Delta\big(f^*(x)\big) =$

$= |f(x) - f^*(x)|$ используемых значений функции. Тогда погрешность оценивается следующим образом:

$$|r_{\text{н}}| \leq \frac{2\bar{\Delta}}{h}. \qquad (7.15)$$

Оценка (7.15) означает, что чувствительность формулы (7.1) к погрешностям входных данных характеризуется абсолютным числом обусловленности $\nu_{\Delta} = \frac{2}{h}$.

Так как $\nu_{\Delta} \to \infty$ при $h \to 0,$ то формула(7.1) при малых h становится очень плохо обусловленной. Поэтому, несмотря на то, что погрешность аппроксимации стремится к нулю при $h \to 0$ (см. оценку (7.4)), следует ожидать, что полная погрешность будет неограниченно возрастать при $h \to 0$. Во всяком случае так ведет себя верхняя граница полной погрешности $\bar{r}(h) = \frac{1}{2} M_2 h + \frac{2\bar{\Delta}}{h}$.

Выберем оптимальное значение шага h, при котором величина $\bar{r}(h)$ достигает минимального значения.

Приравнивая производную $\bar{r}'(h) = \frac{1}{2} M_2 - \frac{2\bar{\Delta}}{h^2}$ к нулю, получаем значение $h_{\text{опт}} = 2\sqrt{\frac{\bar{\Delta}}{M_2}}$, которому отвечает величина

$$\bar{r}_{min} = \bar{r}(h_{\text{опт}}) = 2\sqrt{\bar{\Delta}\, M_2}\ .$$

Таким образом, при использовании формулы (7.1) для производной функции f, заданной с погрешностью, следует обратить внимание на выбор шага h. Однако даже при оптимальном выборе шага полная погрешность окажется величиной, пропорциональной лишь $\sqrt{\bar{\Delta}}$.

Формулы для вычисления производных порядка $k > 1$ обладают еще большей чувствительностью к ошибкам задания функций. Поэтому значения производных высокого порядка, найденные с помощью таких формул, могут быть очень неточными.