Численное дифференцирование

Симаков Сергей Сергеевич simakov.ss@phystech.edu

Оглавление

Численное дифференцирование

Определение

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

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

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

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O\left(h^2\right).$$

Численное дифференцирование

Численное дифференцирование — нахождение приближенного значения производной в точке x по значениям функции $\{f_j = f(x_j)\}_{j=0}^{N}$ заданным в некотором дискретном множестве точек $\{x_j\}_{j=0}^{N}$ из окрестности точки x.

$$\frac{d^k f(x)}{dx^k} \approx \sum_{j=0}^{N} c_j f_j, \quad k = 1, 2, \ldots$$

$$\frac{d^k f(x)}{dx^k} = \sum_{j=0}^{N} c_j f_j + O\left(h^p + h^{-q}\right), p > 0, q > 0$$

Численное дифференцирование

Пусть $P_N(x)$ — интерполяционный многочлен, построенный по значениям функции $\{f_j = f(x_j)\}_{j=0}^N$ заданным в дискретном множестве точек (на сетке) $\{x_j\}_{j=0}^N$

Пусть $\tilde{R}_N\left(x\right)$ — ошибка интерполяции.

Тогда $\dfrac{d^k f(x)}{dx^k} \approx \dfrac{d^k P_N(x)}{dx^k}$ с погрешностью $R_N^k = \dfrac{d^k \tilde{R}_N(x)}{dx^k}$.

Численное дифференцирование

Погрешность численного дифференцирования при $k = 1$

$$\left|R_N^1\right| \leqslant \left|\frac{M_{N+1}}{(N+1)!}\omega_N'(x)\right|, \quad \omega_N(x) = \prod_{j=0}^{N}(x - x_j), M_k = \max_{x\in[x_0,x_N]}\left|f^k(x)\right|$$

Если $x_{j+1} - x_j = h, j = 0, \ldots, N-1$, то

$$\left|R_N^1\right| \leqslant \left|\frac{M_{N+1}}{N+1}h^N\right|$$

Численное дифференцирование

Пусть $x_{j+1} - x_j = h, j = 0, \ldots, N-1$

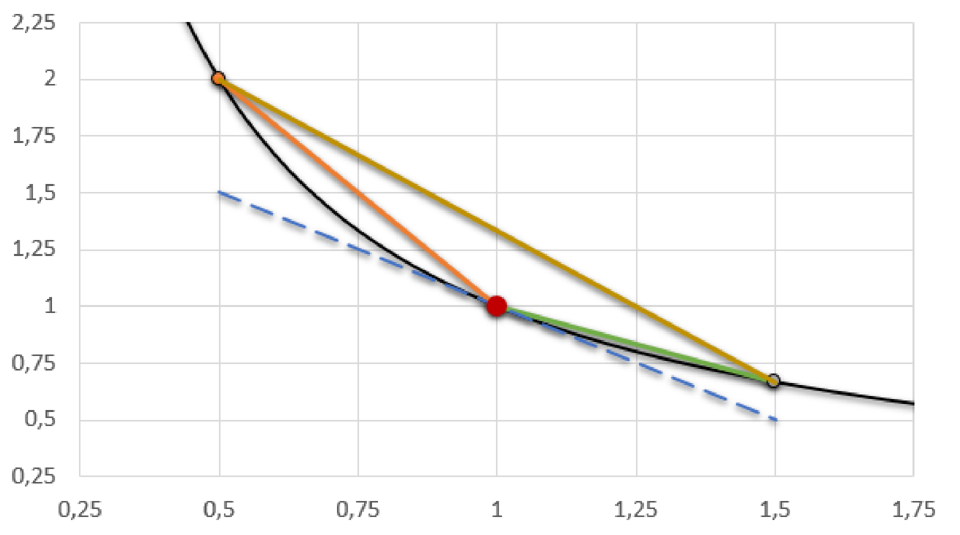
$$f'(x_j) = \frac{f_{j+1} - f_j}{h} + O(h),$$

$$f'(x_j) = \frac{f_j - f_{j-1}}{h} + O(h),$$

$$f'(x_j) = \frac{f_{j+1} - f_{j-1}}{2h} + O\left(h^2\right),$$

$$f''(x_j) = \frac{f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}}{h^2} + O\left(h^2\right).$$

Численное дифференцирование



Численное дифференцирование

Задача

Определить порядок точности формулы численного дифференцирования, приближающей первую производную $f'(x)$ в точке $x+h$ на равномерной сетке с шагом h

$$\big(f'(x+h)\big) \approx \frac{(-3f(x) - 10f(x+h) + 18f(x+2h) - 6f(x+3h) + f(x+4h))}{12h}$$

Решение

$$\begin{aligned}\left(f'\left(x+h\right)\right) \approx \frac{1}{12h}\Big[\\ &-3\left(f - hf' + \frac{h^2}{2}f'' - \frac{h^3}{6}f''' + \frac{h^4}{24}f^{IV} - \frac{h^5}{120}f^{V} + O\left(h^6\right)\right) - \\ &-10f + \\ &+18\left(f + hf' + \frac{h^2}{2}f'' + \frac{h^3}{6}f''' + \frac{h^4}{24}f^{IV} + \frac{h^5}{120}f^{V} + O\left(h^6\right)\right) - \\ &-6\left(f + 2hf' + \frac{4h^2}{2}f'' + \frac{8h^3}{6}f''' + \frac{16h^4}{24}f^{IV} + \frac{32h^5}{120}f^{V} + O\left(h^6\right)\right) + \\ &+\left(f + 3hf' + \frac{9h^2}{2}f'' + \frac{27h^3}{6}f''' + \frac{81h^4}{24}f^{IV} + \frac{243h^5}{120}f^{V} + O\left(h^6\right)\right)\Big]\end{aligned}$$

Решение

$$\begin{aligned}\left(f'\left(x+h\right)\right) \approx \frac{1}{12h}\Big[&(-3-10+18-6+1)f\\
&+(3+18-12+3)\,hf'+\\
&+(-3+18-24+9)\,\frac{h^2}{2}f''+\\
&+(3+18-48+27)\,\frac{h^3}{6}f'''+\\
&+(-3+18-96+81)\,\frac{h^4}{24}f^{IV}+\\
&+(3+18-192+243)\,\frac{h^5}{120}f^{V}+O\left(h^6\right)\Big]=\\
&=f'\left(x+h\right)+\frac{h^4}{20}f^{V}=f'\left(x+h\right)+\color{red}{O\left(h^4\right)}\end{aligned}$$

Оптимальный шаг ЧД

Задача

Определить оптимальный шаг h формулы численного дифференцирования

$$f'(x) \approx \frac{(-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h))}{2h}, \max_{x \in [x, x+2h]} \left| f'''(x) \right| \leqslant 100$$

если абсолютная погрешность при задании $f(x)$, $f(x+h)$, $f(x+2h)$ не превосходит $\Delta = 0.1$

Решение

$$\left(f'\left(x\right)\right) \approx \frac{1}{2h}\Big[-3f+$$
$$+4\left(f + hf' + \frac{h^2}{2}f'' + \frac{h^3}{6}f''' + O\left(h^4\right)\right) -$$
$$-\left(f + 2hf' + \frac{4h^2}{2}f'' + \frac{8h^3}{6}f''' + O\left(h^4\right)\right)\Big] =$$
$$= \frac{1}{2h}\Big[\left(-3+4-1\right)f + \left(4-2\right)hf' + \left(4-4\right)\frac{h^2}{2}f'' + \left(4-8\right)\frac{h^3}{6}f'''\Big] =$$
$$= f'\left(x\right) - \frac{h^2}{3}f'''$$

Оптимальный шаг ЧД

Решение

$$|a-a^\star|\leqslant\Delta, |b-b^\star|\leqslant\Delta\to|(\alpha a\pm\beta b)-(\alpha a^\star\pm\beta b^\star)|\leqslant(\alpha+\beta)\,\Delta,\quad \alpha,\beta>0$$

По сути выше мы получили результат

$$\left(f'\left(x\right)\right)^\star\approx\left[f'\left(x\right)-\frac{h^2}{3}f'''\right]^\star$$

По условию $|f\left(x+kh\right)-\left(f\left(x+kh\right)\right)^\star|<\Delta, k=0,1,2$

Поэтому

$$\left|\left(f'\left(x\right)\right)-\left(f'\left(x\right)\right)^\star\right|\leqslant\frac{\left(3+4+1\right)\Delta}{2h}=\frac{4\Delta}{h}$$

Оптимальный шаг ЧД

Решение

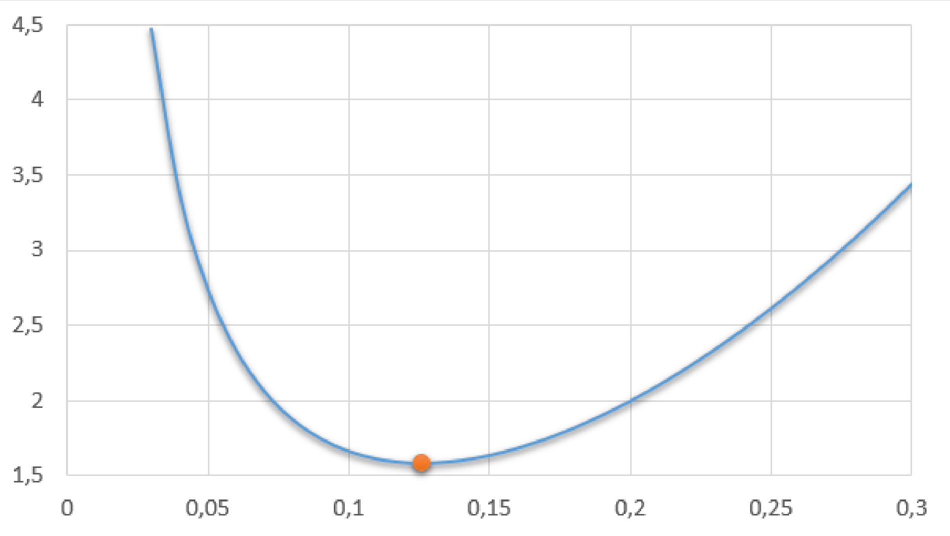
$$\left|\left(f'(x)\right)-\left(f'(x)\right)^{\star}\right| = \left|\left(f'(x)\right)-\left[f'(x)-\frac{h^2}{3}f'''\right]^{\star}\right| \leqslant \frac{4\Delta}{h}$$

И теперь

$$\left|\left(f'(x)\right)-\left[f'(x)\right]^{\star}\right| \leqslant \frac{h^2 M_3}{3}+\frac{4\Delta}{h} = \varepsilon(h)$$

$$\varepsilon'(h) = \frac{2hM_3}{3}-\frac{4\Delta}{h^2} = 0 \to h_{opt} = \sqrt[3]{\frac{6\Delta}{M_3}} = \sqrt[3]{6}\cdot 10^{-1} \approx 1.82\cdot 10^{-1}$$

Оптимальный шаг ЧД



Метод неопределенных коэффициентов

Задача

Найти a, b, c обеспечивающие максимально возможную точность для формулы численного дифференцирования

$$f'(x) \approx af(x) + bf(x+h) + cf(x+2h)$$

Решение

$$f'(x) \approx af + b\left(f + hf' + \frac{h^2}{2}f'' + \frac{h^3}{6}f''' + O\left(h^4\right)\right) + \\
+ c\left(f + 2hf' + \frac{4h^2}{2}f'' + \frac{8h^3}{6}f''' + O\left(h^4\right)\right)$$

Метод неопределенных коэффициентов

Решение

$$f'(x) = 0 \cdot f + 1 \cdot f' + 0 \cdot f'' \approx$$

$$\approx (a + b + c)\, f + (b + 2c)\, h f' + (b + 4c)\, \frac{h^2}{2} f'' + (b + 8c)\, \frac{h^3}{6} f''' + (b + 16c)\, O\left(h^4\right)$$

$$\begin{aligned} a + b + c &= 0 \\ (b + 2c)\, h &= 1 \\ b + 4c &= 0 \\ b + 8c &= ??? \end{aligned} \qquad \begin{aligned} a &= -\frac{3}{2h} \\ b &= \frac{4}{2h} \\ c &= -\frac{1}{2h} \end{aligned}$$

$$b + 8c \neq 0\, (!!!)\,, \quad b + 16c = -\frac{2}{h} \neq 0$$

Метод неопределенных коэффициентов

Ответ

$$f'(x) \approx \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} + O\left(h^2\right)$$

Метод неопределенных коэффициентов

Задача

Найти a, b, c обеспечивающие максимально возможную точность для формулы численного дифференцирования

$$f'(x) \approx af(x) + bf(x-h) + cf(x-2h)$$

$$???$$