Модуль 12.3. Операторы численного дифференцирования

Способ построения разностных операторов, погрешность оператора, порядок, точность и порядок погрешности оператора, сходимость оператора к значению производной, вычислительная и общая погрешность дифференцирования, вычислительная неустойчивость и оптимальный шаг численного дифференцирования. Примеры разностных операторов и их свойства

Построение операторов – общий подход

Рассмотрим задачу о вычислении производной

для функции, значения которой известны только в узлах сетки.

Пусть нужно вычислить производную порядка s в точке $x = x^*$ для функции $f(x)$:

$$f^{(s)}(x^*) \qquad (12.1)$$

Для этого используем значения $f(x)$ в узлах сетки $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ и полином $P_n(x)$, интерполирующий $f(x)$ в указанных узлах: $P_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0,\ldots n.$

Сетка, образованная узлами интерполяции $x_i, i = 0,\ldots n$, может быть равномерной или неравномерной.

Точка $x = x^*$ может быть узлом сетки или может им не быть.

Точка $x = x^*$ может попадать в отрезок интерполяции или не попадать: $x^* \in [x_0, x_n]$ или $x^* \notin [x_0, x_n]$.

Полагая, что в окрестности точки $x = x^*$ и на отрезке интерполяции $[x_0, x_n]$

функция $f(x)$ примерно «равна»

своему интерполяционному полиному $P_n(x)$ степени не выше n

$$f(x) \sim P_n(x) \qquad (12.2)$$

«заменяем» производную от функции порядка s, взятую в точке $x = x^*$

производной интерполяционного полинома того же порядка s,

взятой в той же точке $x = x^*$:

$$f^{(s)}(x^*) \sim \left.\left(\frac{d^s}{dx^s} P_n(x)\right)\right|_{x=x^*} \qquad (12.3)$$

Чтобы решить задачу

1) Запишем полином $P_n(x)$ в форме Лагранжа:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_{ni}(x) f_i \qquad (12.4)$$

где $L_{ni}(x), i=0,...n$ – полиномы Лагранжа и $f_i = f(x_i), i=0,...n$ - значения функции в узлах интерполяции.

2) Дифференцируем $P_n(x)$ нужное количество раз (s раз):

$$\frac{d^s}{dx^s}\left(P_n(x)\right) = \frac{d^s}{dx^s}\left(\sum_{i=0}^{n} L_{ni}(x)\cdot f_i\right) = \sum_{i=0}^{n}\left(\frac{d^s}{dx^s}L_{ni}(x)\right)\cdot f_i \tag{12.5}$$

Дифференцировать по x нужно только полиномы Лагранжа, потому что множители $f_i = f(x_i), i=0,...n$ есть числа.

3) Вычисляем производную порядка s полинома $P_n(x)$ в точке $x = x^*$:

$$\left.\left(\frac{d^s}{dx^s}P_n(x)\right)\right|_{x=x^*} = \sum_{i=0}^{n}\left.\left(\frac{d^s}{dx^s}L_{ni}(x)\right)\right|_{x=x^*}\cdot f_i \tag{12.6}$$

(для этого нужно вычислить производные порядка s для полиномов Лагранжа в точке $x = x^*$).

4) Введем обозначения

$$d_i = \left.\left(\frac{d^s}{dx^s}L_{ni}(x)\right)\right|_{x=x^*}, i=0,...n \tag{12.7}$$

Это коэффициенты, значения которых зависят от точки $x = x^*$ и расположения узлов сетки $x_0 < x_1 < ... < x_n$, и не зависят от функции $f(x)$.

5) Запишем производную полинома в точке $x = x^*$ через коэффициенты (12.7):

$$\left.\left(\frac{d^s}{dx^s}P_n(x)\right)\right|_{x=x^*} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i \tag{12.8}$$

6) Производную полинома в точке $x = x^*$ обозначим символом $D_{n,\,s}$

$$D_{n,\,s} = \left.\left(\frac{d^s}{dx^s}P_n(x)\right)\right|_{x=x^*} \tag{12.9}$$

В обозначении $D_{n,\,s}$ индекс n указывает на происхождение полинома: при его построении был использован $n+1$ узел интерполяции и сам полином $P_n(x)$ имеет степень не выше n. Индекс s указывает на то, что полином $P_n(x)$ продифференцирован s раз.

Оператором численного дифференцирования интерполяционного типа (кратко – **разностным оператором**)

на сетке $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$

для вычисления производной функции $f(x)$ порядка s в точке $x = x^*$

называют формулу вида

$$D_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i \qquad (12.10)$$

где коэффициенты d_i, $i = 0,\ldots n$ определены по формулам (12.7),

а значения $f_i = f(x_i), i = 0,\ldots n$ есть значения функции $f(x)$

в узлах интерполяции.

Оператор $D_{n,\,s}$ служит для приближенного вычисления производной $f^{(s)}(x^*)$:

$$f^{(s)}(x^*) \sim D_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i \qquad (12.11)$$

Оператор $D_{n,\,s}$ заменяет вычисление производной $f^{(s)}(x^*)$ в точке $x = x^*$ вычислением некоторой линейной комбинации значений функции в узлах сетки.

Все приведенные ниже примеры знакомы с Декабря:

Пример 1

$$f'(x_i) \sim [f_x]_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \qquad h = x_{i+1} - x_i$$

Название: **правый разностный оператор** $[f_x]_i$

для вычисления $f'(x_i)$ **на двухточечном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_1(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в двух узлах:

$$\begin{aligned} P_1(x_i) &= f(x_i) \\ P_1(x_{i+1}) &= f(x_{i+1}) \end{aligned}.$$

Здесь $s = 1$, $x^* = x_i$, $n = 1$, узлы интерполяции $x = x_i$, $x = x_{i+1}$.

Пример 2

$$f'(x_i) \sim [f_{\bar{x}}]_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}, \qquad h = x_i - x_{i-1}$$

Название: **левый разностный оператор** $[f_{\bar{x}}]_i$

для вычисления $f'(x_i)$ **на двухточечном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_1(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в двух узлах:

$$\begin{aligned} P_1(x_{i-1}) &= f(x_{i-1}) \\ P_1(x_i) &= f(x_i) \end{aligned}.$$

Здесь $s = 1$, $x^* = x_i$, $n = 1$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}$, $x = x_i$.

Пример 3

$$f'(x_i) \sim [f_{\hat{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \qquad h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{\hat{x}}]_i$

для вычисления $f'(x_i)$ **на трехточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в трех узлах равномерной сетки:

$$\begin{aligned} P_2(x_{i-1}) &= f(x_{i-1}) \\ P_2(x_i) &= f(x_i) \\ P_2(x_{i+1}) &= f(x_{i+1}) \end{aligned}.$$

Здесь $s = 1$, $x^* = x_i$, $n = 2$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}$, $x = x_i$, $x = x_{i+1}$.

Пример 4

$$f''(x_i) \sim [f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}, \qquad h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{x\bar{x}}]_i$

для вычисления $f''(x_i)$ **на трехточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в трех узлах **равномерной сетки**:

$$P_2(x_{i-1}) = f(x_{i-1})$$
$$P_2(x_i) = f(x_i) \quad .$$
$$P_2(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$$

Здесь $s = 2$, $x^* = x_i$, $n = 2$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}$, $x = x_i$, $x = x_{i+1}$.

Пример 5

Этот пример изучали в Феврале

$$f''(x_i) \sim [f_{xx}^{\alpha\beta}]_i = \frac{1}{h^2} \cdot \left(\frac{f_{i-1}}{(\alpha+\beta)\beta} - \frac{f_i}{\alpha\beta} + \frac{f_{i+1}}{(\alpha+\beta)\alpha} \right)$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha h, \quad x_{i-1} = x_i - \beta h, \quad h, \alpha, \beta > 0$$

Название: **разностный оператор** $[f_{xx}^{\alpha\beta}]_i$

для вычисления $f''(x_i)$ **на трехточечном (в том числе неравномерном) шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в трех узлах **произвольной сетки**:

$$P_2(x_{i-1}) = f(x_{i-1})$$
$$P_2(x_i) = f(x_i) \quad .$$
$$P_2(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$$

Здесь $s = 2$, $x^* = x_i$, $n = 2$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}$, $x = x_i$, $x = x_{i+1}$.

Приведем пару примеров из контрольных работ Декабря:

Пример 6

$$f'''(x_i) \sim [f_{xxx}]_i = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}}{2h^3}$$

$$h = x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = x_{i-1} - x_{i-2}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{xxx}]_i$

для вычисления $f'''(x_i)$ **на пятиточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_4(x)$, интерполирующего $f(x)$ в пяти узлах равномерной сетки:

$$P_4(x_{i-2}) = f(x_{i-2}) \quad P_4(x_{i-1}) = f(x_{i-1})$$
$$P_4(x_i) = f(x_i) \qquad .$$
$$P_4(x_{i+1}) = f(x_{i+1}) \quad P_4(x_{i+2}) = f(x_{i+2})$$

Здесь $s = 3$, $x^* = x_i$, $n = 4$, узлы интерполяции $x = x_{i\pm1}$, $x = x_i$, $x = x_{i\pm2}$.

Пример 7

$$f''(x_i) \sim \quad [f_{xx}]_i = \frac{-f_{i+2} + 16f_{i+1} - 30f_i + 16f_{i-1} - f_{i-2}}{12h^2}$$

$$h = x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = x_{i-1} - x_{i-2}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{xx}]_i$

для вычисления $f''(x_i)$ **на пятиточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_4(x)$, интерполирующего $f(x)$ в пяти узлах равномерной сетки:

$$P_4(x_{i-2}) = f(x_{i-2}) \quad P_4(x_{i-1}) = f(x_{i-1})$$
$$P_4(x_i) = f(x_i) \qquad .$$
$$P_4(x_{i+1}) = f(x_{i+1}) \quad P_4(x_{i+2}) = f(x_{i+2})$$

Здесь $s = 2$, $x^* = x_i$, $n = 4$, узлы интерполяции $x = x_{i\pm1}$, $x = x_i$, $x = x_{i\pm2}$.

Запишем некоторые операторы в каноническом виде

Оператор $[f_x]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{1,1} = d_i \cdot f_i + d_{i+1} \cdot f_{i+1}$$

где $d_i = -\frac{1}{h}$, $d_{i+1} = \frac{1}{h}$, $\qquad f_i = f(x_i)$, $\qquad f_{i+1} = f(x_{i+1})$.

(использован сдвиг индексов: x_i, x_{i+1} вместо x_0, x_1)

Оператор $[f_x]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{1,1} = d_{i-1} \cdot f_{i-1} + d_i \cdot f_i$$

где $d_{i-1} = -\frac{1}{h}$, $d_i = \frac{1}{h}$, $\qquad f_{i-1} = f(x_{i-1})$, $\qquad f_i = f(x_i)$.

(использован сдвиг индексов: x_{i-1}, x_i вместо x_0, x_1)

Оператор $[f_{\hat{x}}]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{2,1} = d_{i-1} \cdot f_{i-1} + d_i \cdot f_i + d_{i+1} \cdot f_{i+1}$$

где $d_{i-1} = -\frac{1}{2h}$, $d_i = 0$, $d_{i+1} = \frac{1}{2h}$,

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

(использован сдвиг индексов: x_{i-1}, x_i, x_{i+1} вместо x_0, x_1, x_2)

Оператор $[f_{x\bar{x}}]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{2,2} = d_{i-1} \cdot f_{i-1} + d_i \cdot f_i + d_{i+1} \cdot f_{i+1}$$

где $d_{i-1} = \frac{1}{h^2}$, $d_i = -\frac{2}{h^2}$, $d_{i+1} = \frac{1}{h^2}$,

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

(использован сдвиг индексов: x_{i-1}, x_i, x_{i+1} вместо x_0, x_1, x_2)

Все примеры подтверждают, что в формулах $D_{n,s}$ коэффициенты $d_i, i = 0,\ldots n$ обратно пропорциональны шагу сетки h или его положительным степеням.
Чем меньше h (шаг сетки), тем больше модуль коэффициентов $d_i, i = 0,\ldots n$.

Это обстоятельство играет решающую роль: далее будет показано,
что операторы численного дифференцирования
(в отличие от квадратурных формул)
вычислительно неустойчивы.

Как следствие, шаг численного дифференцирования (шаг сетки)
не должен быть слишком велик

(чтобы оператор $D_{n,s}$ был все-таки похож на производную $f^{(s)}(x^*)$)

и не должен быть слишком мал

(чтобы $d_i, i = 0,\ldots n$ не успели «раскачать» погрешность исходных данных)

В каждой конкретной ситуации есть <u>оптимальный шаг</u> численного дифференцирования

Погрешность оператора $D_{n,\,s}$

Определение 1. Погрешностью оператора $D_{n,\,s}$ называют разность истинного значения производной $f^{(s)}(x^*)$ и оператора $D_{n,\,s}$:

$$\psi_{n,s} = f^{(s)}(x^*) - D_{n,\,s} \qquad (12.12)$$

Для погрешности оператора справедливо следующее представление. Нужно знать, что такое представление есть, а для решения задач применяем формулу Тейлора.

Утверждение 1. **Погрешность оператора представляет собой производную порядка s от погрешности интерполяции $r_n(x)$, взятую в точке $x = x^*$, в которой оператор призван заменить производную порядка s функции $f(x)$.**

Если на отрезке «задания и применения интерполяционного полинома» функция $f(x)$ является достаточно гладкой, для погрешности оператора $D_{n,\,s}$ верно

$$\psi_{n,\,s} = \frac{1}{(n+1)!}\left.\left(\frac{d^s}{dx^s}\left(f^{(n+1)}(\,\xi(x))\cdot\omega(x)\right)\right)\right|_{x=x^*}$$

где $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$,

$\xi(x) \in [\min[x^*, x_0], \max[x^*, x_n]]$.

Доказательство

Так как оператор $D_{n,\,s}$ построен на базе полинома $P_n(x)$, интерполирующего функцию $f(x)$ в узлах $x_0 < x_1 < ... < x_n$, рассмотрим погрешность интерполяции $r_n(x)$ как функцию аргумента x. По определению, для каждого x

$r_n(x) = f(x) - P_n(x)$.

Поскольку для $f(x)$ рассматривается вопрос об отыскании производной порядка s в точке $x = x^*$, функция $r_n(x)$ также может рассматриваться как s раз дифференцируемая в данной точке. Дифференцируем $r_n(x)$ s раз:

$$\frac{d^s}{dx^s} r_n(x) = \frac{d^s}{dx^s}\left(f(x) - P_n(x)\right) = f^{(s)}(x) - \frac{d^s}{dx^s} P_n(x)$$

Запишем производную порядка s функции $r_n(x)$ в точке $x = x^*$

$$\left.\left(\frac{d^s}{dx^s} r_n(x)\right)\right|_{x=x^*} = f^{(s)}(x^*) - \left.\left(\frac{d^s}{dx^s} P_n(x)\right)\right|_{x=x^*}$$

В правой части равенства оказалась погрешность оператора:

$$\left(\frac{d^s}{dx^s} r_n(x)\right)\Bigg|_{x=x^*} = \psi_{n,\ s}$$

Если на отрезке «задания и применения интерполяционного полинома»

$$x \in [\min[x^*, x_0], \max[x^*, x_n]]$$

функция $f(x)$ является достаточно гладкой, по Теореме о погрешности интерполяции (модуль 12.2) $r_n(x)$ можно представить в виде

$$r_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))\, \omega(x)$$

где $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$ и неизвестная средняя точка, располагаясь на отрезке $[\min[x^*, x_0], \max[x^*, x_n]]$, зависит от аргумента x.

В предположении достаточной гладкости $f(x)$ не только в точке $x = x^*$, но на всем участке «задания и применения интерполяционного полинома», дифференцируем выражение для погрешности интерполяции s раз и записываем значение производной в точке $x = x^*$:

$$\left(\frac{d^s}{dx^s} r_n(x)\right)\Bigg|_{x=x^*} = \frac{1}{(n+1)!} \cdot \left(\frac{d^s}{dx^s}\left(f^{(n+1)}(\xi(x))\, \omega(x)\right)\right)\Bigg|_{x=x^*}$$

Утверждение доказано.

Порядок оператора, точность оператора, порядок погрешности оператора, виды погрешности

Разностный оператор характеризуют:

n	**порядок оператора**, то есть степень соответствующего ему интерполяционного полинома;
p	**точность оператора**, то есть максимально возможная степень полиномов, для которых оператор дает точный результат (нулевую погрешность $\psi_{n,\ s}$); очевидно, что $p \geq n$.
k	**порядок малости погрешности**, см. примеры далее.

При изучении погрешности различают

$\psi_{n,s}$	погрешность оператора (погрешность дифференцирования)
$ВП_{n,\ s}$	вычислительную погрешность дифференцирования
$ОП_{n,\ s}$	общую погрешность дифференцирования (общую погрешность оператора)

Форма представления погрешности оператора $D_{n,\,s}$,
порядок погрешности и главный член погрешности

(здесь о том, как зимой решали эти задачи)

Пусть разностный оператор $D_{n,\,s}$, предназначенный для вычисления производной порядка s функции $f(x)$ в заданной точке $x = x^*$

$$f^{(s)}(x^*)$$

построен на равномерной сетке $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ с шагом h.

Пусть точка $x = x^*$ принадлежит отрезку интерполяции: $x^* \in [x_0, x_n]$.

Пусть при $h \to 0$ отрезок интерполяции стягивается к точке $x = x^*$.

Если погрешность оператора $D_{n,\,s}$ можно представить в виде

$$\psi_{n,s} = M \cdot h^k + o\,(h^k) \tag{12.13}$$

где $k > 0, M \neq 0$ и M не зависит от h , говорят, что погрешность оператора имеет порядок k и слагаемое $M \cdot h^k$ называют главным членом погрешности (при $h \to 0$).

Если для конкретного оператора $D_{n,\,s}$ доказано, что его погрешность $\psi_{n,\,s}$ можно представить в виде (12.13), тогда доказана сходимость оператора к значению производной $f^{(s)}(x^*)$ при $h \to 0$:

$$\lim_{h \to 0} D_{n,\,s} = f^{(s)}(x^*) \tag{12.14}$$

потому что

$$\lim_{h \to 0} \psi_{n,s} = \lim_{h \to 0} \left(M \cdot h^k + o\,(h^k) \right) = 0 \tag{12.15}$$

Анализ с целью выявления порядка погрешности и главного члена погрешности проводят на основе формулы Тейлора с остаточным слагаемым в форме Пеано.

Результаты анализа нужны для проверки сходимости оператора к значению производной, сравнения скорости сходимости различных операторов и анализа порядка погрешности аппроксимации разностных схем.

Если нужно оценить величину

$$\left| f^{(s)}(x^*) - D_{n,s} \right|$$

используют согласованные с (12.13) оценки вида

$$\left| \psi_{n,s} \right| \le \hat{M} \cdot h^k \qquad (12.16)$$

где $k > 0$ есть порядок погрешности и $\hat{M}$ не зависит от h.

Такие оценки проводят на основе формулы Тейлора с остаточным слагаемым в форме Лагранжа.

При изучении погрешности оператора формулу Тейлора записывают в точке, в которой приближенно вычисляется производная, то есть в точке $x = x^*$

Примеры

Оператор $[f_x]_i$ для вычисления $f'(x_i)$ на двухточечном шаблоне, $x^* = x_i$

$$\psi = f'(x_i) - [f_x]_i = f'(x_i) - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} = -\frac{h}{2} f''(x_i) + o(h)$$

Порядок погрешности $k = 1$, $M = -\frac{1}{2} f''(x_i)$ (если $f''(x_i) \ne 0$).

Главный член погрешности равен $-\frac{h}{2} f''(x_i)$.

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0, h < \tilde{h}$):

$$\left| \psi \right| \le \hat{M} \cdot h, \text{ где } \hat{M} = \frac{1}{2} \max_{x \in [x_i,\, x_i + \tilde{h}]} \left| f''(x) \right|$$

Оператор $[f_{\bar{x}}]_i$ для вычисления $f'(x_i)$ на двухточечном шаблоне, $x^* = x_i$

$$\psi = f'(x_i) - [f_{\bar{x}}]_i = f'(x_i) - \frac{f_i - f_{i-1}}{h} = \frac{h}{2} f''(x_i) + o(h)$$

Порядок погрешности $k = 1$, $M = \frac{1}{2} f''(x_i)$ (если $f''(x_i) \ne 0$).

Главный член погрешности равен $\frac{h}{2} f''(x_i)$.

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0, h < \tilde{h}$):

$$\left| \psi \right| \le \hat{M} \cdot h, \text{ где } \hat{M} = \frac{1}{2} \max_{x \in [x_i - \tilde{h},\, x_i]} \left| f''(x) \right|$$

Оператор $[f_{\hat{x}}]_i$ для вычисления $f'(x_i)$ на трехточечном шаблоне, $x^* = x_i$

$$\psi = f'(x_i) - [f_{\hat{x}}]_i = f'(x_i) - \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = -\frac{h^2}{6} f'''(x_i) + o(h^2)$$

Порядок погрешности $k = 2$, $M = -\frac{1}{6} f'''(x_i)$ (если $f'''(x_i) \neq 0$).

Главный член погрешности равен $-\frac{h^2}{6} f'''(x_i)$.

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0, h < \tilde{h}$):

$|\psi| \leq \hat{M} \cdot h^2$, где $\hat{M} = \frac{1}{6} \max\limits_{x \in [x_i - \tilde{h},\, x_i + \tilde{h}]} |f'''(x)|$

Оператор $[f_{x\bar{x}}]_i$ для вычисления $f''(x_i)$ на трехточечном шаблоне, $x^* = x_i$

$$\psi = f''(x_i) - [f_{x\bar{x}}]_i = f''(x_i) - \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = -\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i) + o(h^2)$$

Порядок погрешности $k = 2$, $M = -\frac{1}{12} f^{IV}(x_i)$ (если $f^{IV}(x_i) \neq 0$).

Главный член погрешности равен $-\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i)$

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0, h < \tilde{h}$):

$|\psi| \leq \hat{M} \cdot h^2$, где $\hat{M} = \frac{1}{12} \max\limits_{x \in [x_i - \tilde{h},\, x_i + \tilde{h}]} \left| f^{IV}(x) \right|$

Все перечисленные выше операторы сходятся к значению соответствующей производной

$$\lim_{h \to 0} \psi = \lim_{h \to 0} \left(M \cdot h^k + o(h^k) \right) = 0$$

если точка $x^* = x_i$ задана и зафиксирована, и сетка стягивается к точке $x^* = x_i$:

$$x_{i+1} = x_i + h, \qquad x_{i-1} = x_i - h, \qquad h \to 0.$$

Вычислительная погрешность оператора $D_{n,\,s}$

Определение 2. Вычислительной погрешностью дифференцирования называют разность значения оператора $D_{n,\,s}$, **соответствующего** формуле (12.10), и значения оператора $\widetilde{D}_{n,\,s}$, **полученного** по формуле (12.10):

$$ВП_{n,\,s} = D_{n,\,s} - \widetilde{D}_{n,\,s} \tag{12.17}$$

Источниками вычислительной погрешности дифференцирования могут быть:

1) неточное задание узлов интерполяции $x_i, i = 0,...n$, используемых при вычислении коэффициентов (12.7), и неточное задание точки $x = x*$;

2) неточный подсчет коэффициентов (12.7); погрешности арифметических операций при вычислении выражения (12.10);

3) неточное задание функции $f(x)$ в узлах интерполяции.

В связи преобладающим влиянием неточности задания функции рассмотрим «модельную ситуацию», аналогичную рассмотренной в модуле п. 12.2.

Утверждение 2. Если коэффициенты $d_i, i = 0,...n$ оператора $D_{n,\,s}$ вычислены точно и при вычислении значения оператора $D_{n,\,s}$ погрешность арифметических операций отсутствует, тогда вычислительная погрешность дифференцирования $ВП_{n,\,s}$ зависит от ошибок задания функции в узлах интерполяции

$$ВП_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \delta_i \tag{12.18}$$

и оценивается величиной

$$\left|\, ВП_{n,\,s} \,\right| \le \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left|\, d_i \,\right| \tag{12.19}$$

Здесь $\delta_i = f_i - \widetilde{f}_i, i = 0, ...n$ – ошибки (погрешности) задания функции в узлах интерполяции и число $\delta > 0$ есть оценка этих ошибок:

$$\left|\, \delta_i \,\right| \le \delta, i = 0, 1, 2\,. \tag{12.20}$$

Доказательство

Значение, соответствующее формуле оператора, составит

$$D_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i$$

Значение, полученное по формуле оператора, составит

$$\widetilde{D}_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i \widetilde{f}_i$$

Вычислительная погрешность дифференцирования в соответствии с определением (12.17) составит

$$B\Pi_{n,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot f_i - \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \tilde{f}_i = \sum_{i=0}^{n} d_i (f_i - \tilde{f}_i) = \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \delta_i$$

Для модуля вычислительной погрешности с учетом действующих ограничений на погрешность задания функции записываем оценку

$$\left| B\Pi_{n,s} \right| = \left| \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \delta_i \right| \le \sum_{i=0}^{n} \left| d_i \cdot \delta_i \right| \le \sum_{i=0}^{n} \left| d_i \right| \cdot \delta = \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left| d_i \right|$$

что и требовалось доказать.

Комментарий

Поскольку в формулах операторов $D_{n,s}$ коэффициенты $d_i, i = 0,...n$ обратно пропорциональны шагу сетки h или его положительным степеням, из (12.19) следует **вычислительная неустойчивость численного дифференцирования как такового: при сгущении сетки, то есть при $h \to 0$, вычислительная погрешность растет неограниченно:**

$$B\Pi_{n,s} \to \infty .$$

Общая погрешность оператора $D_{n,s}$

Определение 3. Общей погрешностью дифференцирования называют разность истинного значения производной $f^{(s)}(x^*)$ и значения $\tilde{D}_{n,s}$, **полученного** по формуле (12.10)**:**

$$O\Pi_{n,s} = f^{(s)}(x^*) - \tilde{D}_{n,s} \qquad (12.21)$$

Прибавляя и вычитая «истинное» значение оператора $D_{n,s}$, получим

$$O\Pi_{n,s} = \underbrace{f^{(s)}(x^*) - \tilde{D}_{n,s}}_{\substack{\text{общая} \\ \text{погрешность} \\ \text{дифференцирования}}} = \underbrace{f^{(s)}(x^*) - D_{n,s}}_{\substack{\text{погрешность} \\ \text{оператора}}} + \underbrace{D_{n,s} - \tilde{D}_{n,s}}_{\substack{\text{вычислительная} \\ \text{погрешность} \\ \text{дифференцирования}}}$$

Вытекает результат:

Утверждение 3. Общая погрешность дифференцирования равна сумме погрешности дифференцирования (погрешность оператора) и вычислительной погрешности дифференцирования

$$O\Pi_{n,s} = \psi_{n,s} + B\Pi_{n,s} \qquad (12.22)$$

Для нее справедлива оценка

$$\left| O\Pi_{n,s} \right| \le \left| \psi_{n,s} \right| + \left| B\Pi_{n,s} \right| \qquad (12.23)$$

Оптимальный шаг численного дифференцирования

Пусть для погрешности оператора $D_{n,\,s}$ верна оценка (12.16)

$$\left|\ \psi_{n,s}\ \right| \le \hat{M} \cdot h^k$$

где $k > 0$ есть порядок погрешности и $\hat{M}$ не зависит от h.

Пусть для вычислительной погрешности дифференцирования верна оценка (12.19)

$$\left|\ ВП_{n,\,s}\ \right| \le \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left|\ d_i\ \right|$$

(потому что ошибки задания функции в узлах ограничены величиной $\delta > 0$).

Из (12.23) следует неравенство для общей погрешности дифференцирования:

$$\left|\ ОП_{n,\,s}\ \right| \le \hat{M}h^k + \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left|\ d_i\ \right| \qquad (12.24)$$

Если $h \to 0$, первое слагаемое (12.24) стремится к нулю, а второе – неограниченно растет (так как коэффициенты $d_i,\, i = 0,\ldots n$ обратно пропорциональны шагу сетки h или его положительным степеням).

Как следствие, шаг численного дифференцирования (шаг сетки)
не должен быть слишком велик

(чтобы оценка $\hat{M}h^k$ погрешности оператора была достаточно мала)

и не должен быть слишком мал

(чтобы оценка вычислительной погрешности $\delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left|\ d_i\ \right|$ не успела стать слишком большой)

В каждой конкретной ситуации на базе (12.24) подбирают оптимальный шаг численного дифференцирования

П р и м е р

Центральный разностный оператор $[f_{x\bar{x}}]_i$ используется

для приближенного вычисления $f''(x_i)$

$$f''(x_i) \sim [f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$, интерполирующего $f(x)$ в трех узлах **равномерной сетки**:

$$\begin{aligned} &P_2(x_{i-1}) = f(x_{i-1}) \\ &P_2(x_i) = f(x_i) \\ &P_2(x_{i+1}) = f(x_{i+1}) \end{aligned}.$$

Узлы интерполяции $x = x_{i-1}$, $x = x_i$, $x = x_{i+1}$,

значение $h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ есть шаг равномерной сетки

О б о с н о в а н и е $[f_{x\bar{x}}]_i$

Полагая $f(x)$ на отрезке $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ примерно «равной» своему интерполяционному полиному $P_2(x)$ степени не выше 2

$$f(x) \sim P_2(x)$$

«заменим» вторую производную функции второй производной от полинома:

$$f''(x_i) \sim \left. \left(\frac{d^2}{dx^2} P_2(x) \right) \right|_{x=x_i}$$

Для этого записываем $P_2(x)$ в форме Лагранжа:

$$\begin{aligned} P_2(x) = &\frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} \cdot f(x_{i-1}) + \\ &+ \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} \cdot f(x_i) + \\ &+ \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} \cdot f(x_{i+1}) \end{aligned}$$

Вычисляем вторую производную по аргументу x:

$$P_2''(x) = \frac{2}{(-h)(-2h)} \cdot f_{i-1} + \frac{2}{h(-h)} \cdot f_i + \frac{2}{2h \cdot h} \cdot f_{i+1}$$

Затем нужно взять значение второй производной в точке $x = x_i$.

В силу того, что $P_2(x)$ имеет степень не выше 2, его вторая производная является константой и от выбора точки x не зависит.

Вторую производную полинома $P_2(x)$, вычисленную в точке $x = x_i$, обозначим через $[f_{x\bar{x}}]_i$

$$[f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

Далее полагаем, что оператор дифференцирования (разностный оператор) задан указанной выше формулой.

Значение искомой производной полагаем «равным» значению оператора:

$$f''(x_i) \sim [f_{x\bar{x}}]_i$$

Погрешность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ и свойства, вытекающие из анализа погрешности

Погрешностью оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ называют разность **истинного значения производной** $f''(x_i)$ и **значения оператора** $[f_{x\bar{x}}]_i$:

$$\psi = f''(x_i) - [f_{x\bar{x}}]_i$$

Чтобы исследовать погрешность оператора, применим к выражению

$$\psi = f''(x_i) - \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

формулу Тейлора в точке $x = x_i$ с остаточным слагаемым в форме Пеано и в форме Лагранжа.

Используя форму Пеано (формула выписывается до $o(h^4)$), получим

$$\psi = -\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i) + o(h^2)$$

откуда следует: в случае $f^{IV}(x_i) \neq 0$ порядок погрешности оператора $k = 2$, главный член погрешности равен $-\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i)$, $M = -\frac{1}{12} f^{IV}(x_i)$.

Если точка $x = x_i$ задана и зафиксирована и сетка стягивается к точке $x = x_i$

$$x_{i+1} = x_i + h, \qquad x_{i-1} = x_i - h, \qquad h \to 0,$$

оператор $[f_{x\bar{x}}]_i$ сходится к значению $f''(x_i)$

$$\lim_{h\to 0} \psi = \lim_{h\to 0} \left(M \cdot h^2 + o(h^2)\right) = 0.$$

Порядок погрешности $k = 2$ означает, что при уменьшении шага сетки в 10 раз погрешность оператора уменьшается в 100 раз.

Используя форму Лагранжа (формула выписывается до слагаемых степени 4), получим представление

$$\psi = -\frac{h^2}{24}\{ f^{IV}(\xi_i) + f^{IV}(\eta_i) \}$$

где неизвестные средние точки ξ_i, η_i находятся на отрезках $[x_{i-1}, x_i]$ и $[x_i, x_{i+1}]$ соответственно.

Чтобы построить **оценку погрешности оператора**, нужно выбрать некоторое (небольшое) положительное число $\widetilde{h}$, которое определит диапазон таких значений шага h, для которых будет верна построенная оценка.

Предположим, что такое $\widetilde{h} > 0$ выбрано. Тогда $\forall h > 0,\ h < \widetilde{h}$ верно

$$|\psi| \le \hat{M} \cdot h^2,$$

где $\hat{M} = \dfrac{1}{12} \max\limits_{x \in [x_i - \widetilde{h},\ x_i + \widetilde{h}]} \left| f^{IV}(x) \right|$

Оценка погрешности оператора нужна для анализа общей погрешности дифференцирования.

Порядок оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Оператор имеет порядок 2, так как построен на основе интерполяционного полинома степени не выше 2 по трем узлам интерполяции.

Точность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Так как погрешность ψ определяется четвертой производной функции $f(x)$, результат численного дифференцирования будет точным для всех $f(x)$, которые являются полиномами от нулевой до третьей степени включительно (для таких полиномов четвертая производная и соответственно погрешность ψ обращаются в ноль).

Точность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ равна 3.

Вычислительная погрешность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Вычислительной погрешностью оператора

(вычислительной погрешностью дифференцирования) называют разность значения, **соответствующего** оператору $[f_{x\bar{x}}]_i$, и значения $[\widetilde{f}_{x\bar{x}}]_i$, **полученного** при попытке его вычислить:

$$ВП = [f_{x\bar{x}}]_i - [\widetilde{f}_{x\bar{x}}]_i$$

Ошибки (погрешности) задания функции в узлах интерполяции

обозначим через

$$\delta_j = f_j - \tilde{f}_j,\ j = i-1, i, i+1$$

Пусть число $\delta > 0$ есть оценка этих ошибок:

$$\left| \delta_j \right| \le \delta,\ j = i-1, i, i+1.$$

Предположим, что коэффициенты оператора, а именно, числа

$$\frac{1}{h^2},\ \frac{2}{h^2}$$

заданы точно и при вычислении оператора по формуле (12.10) погрешность выполнения арифметических операций отсутствует.

Тогда вычислительная погрешность оператора зависит от ошибок задания функции в узлах интерполяции

$$ВП = \frac{1}{h^2}(\delta_{i-1} - 2\delta_i + \delta_{i+1})$$

и оценивается следующим образом:

$$\left| ВП \right| \le \frac{4 \cdot \delta}{h^2}$$

Обоснование

Оценки вычислительной погрешности можно выписать на основе **Утверждения 2** или получить их непосредственно по формулам оператора.

Проведем выкладки самостоятельно.

Значение, соответствующее оператору, составит

$$[f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

С учетом источников вычислительной погрешности значение, полученное по формуле оператора, составит

$$[\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i = \frac{\tilde{f}_{i+1} - 2\tilde{f}_i + \tilde{f}_{i-1}}{h^2}$$

Вычислительная погрешность дифференцирования в соответствии с определением записывается следующим образом:

$$ВП = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) - \frac{1}{h^2}\left(\tilde{f}_{i-1} - 2\tilde{f}_i + \tilde{f}_{i+1}\right)$$

что означает

$$ВП = \frac{1}{h^2}\left(\delta_{i-1} - 2\delta_i + \delta_{i+1}\right).$$

Оценим модуль вычислительной погрешности:

$$|\,ВП\,| = \left|\frac{1}{h^2}\left(\delta_{i-1} - 2\delta_i + \delta_{i+1}\right)\right| \le \frac{1}{h^2}\left(|\,\delta_{i-1}\,| + 2\,|\,\delta_i\,| + |\,\delta_{i+1}\,|\right)$$

С учетом ограничений на погрешность задания функции в узлах сетки записываем оценку

$$|\,ВП\,| \le \frac{1}{h^2}(\,1 + 2 + 1\,)\cdot\delta = \frac{4\cdot\delta}{h^2}$$

Полученная оценка не является завышенной, потому что ошибки задания функции в соседних узлах сетки могут принимать максимальные по модулю и противоположные по знаку значения, например

$$\delta_{i-1} = \delta_{i+1} = \delta, \quad \delta_i = -\delta$$

В данном случае оценка вычислительной погрешности дифференцирования выполняется как равенство:

$$|\,ВП\,| = \frac{4\cdot\delta}{h^2}$$

Общая погрешность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Общей погрешностью оператора (общей погрешностью дифференцирования) называют разность **истинного значения производной** $f''(x_i)$ и значения $[\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i$, **полученного** при попытке вычислить оператор:

$$ОП = f''(x_i) - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i$$

Прибавляя и вычитая «истинное» значение оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$, получим

$$ОП = \underbrace{f''(x_i) - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i}_{\substack{\text{общая}\\ \text{погрешность}\\ \text{дифференцирования}}} = \underbrace{f''(x_i) - [f_{x\bar{x}}]_i}_{\substack{\text{погрешность}\\ \text{оператора}}} + \underbrace{[f_{x\bar{x}}]_i - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i}_{\substack{\text{вычислительная}\\ \text{погрешность}\\ \text{дифференцирования}}}$$

В соответствии с приведенным рассуждением (или по **Утверждению 3**)

$$ОП = \psi + ВП$$

$$|\,ОП\,| \le |\,\psi\,| + |\,ВП\,|$$

Если функция $f(x)$ на отрезке интерполяции $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ достаточно гладкая и предположения об источниках вычислительной погрешности выполнены, **оценка общей погрешности дифференцирования** такова:

$$\forall h > 0, h < \widetilde{h}$$

$$|\,ОП\,| \le \hat{M}h^2 + \frac{4 \cdot \delta}{h^2}$$

где $\hat{M} = \dfrac{1}{12} \max\limits_{x \in [x_i - \widetilde{h},\, x_i + \widetilde{h}]} \left| f^{IV}(x) \right|$;

число $\delta > 0$ есть оценка ошибок задания функции в узлах сетки:

$$|\,\delta_j\,| \le \delta,\ j = i-1, i, i+1.$$

Через $\delta_j = f_j - \widetilde{f}_j,\ j = i-1, i, i+1$ обозначены эти ошибки.

Комментарий

Если $h \to 0$, первое слагаемое оценки общей погрешности стремится к нулю, а второе – неограниченно растет.

Как следствие, шаг численного дифференцирования (шаг сетки)

не должен быть слишком велик

(чтобы оценка $\hat{M}h^2$ погрешности оператора была достаточно мала)

и не должен быть слишком мал

(чтобы оценка вычислительной погрешности $\dfrac{4 \cdot \delta}{h^2}$ не успела стать слишком большой)

В данном примере видим функционал, на базе которого нужно подбирать оптимальный шаг численного дифференцирования:

$$\Phi(h) = \hat{M}h^2 + \frac{4 \cdot \delta}{h^2} \to \min$$