Чисельні методи

Нікіта Скибицький

23 січня 2019 р.

Зміст

1 Чисельне диференціювання

Ми розглянемо постановку задачі і ідеологію розв'язання задачі.

Нехай задані точки $x_i \in [a, b]$, $i = \overline{0, n}$. У цих точках задані значення, які ми будемо позначити одним з трьох способів: $y_i = f_i = f(x_i)$.

Задача полягає у тому, що **необхідно** знайти значення k-ої похідної $f^{(k)}(x)$.

Задачу будемо розв'язувати базуючись на інтерполяційному підході: подами функцію $f(x)$ у вигляді інтерполяційного поліному

$$f(x) = P_n(x) + r_n(x) \tag{1.1}$$

Тут P_n – інтерполяційний поліном Ньютона, а r_n – залишковий член. Подамо залишковмий член у вигляді

$$r_n(x) = f(x, x_0, \ldots, x_n) \cdot \omega_n(x), \tag{1.2}$$

де

$$\omega_n(x) = (x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_n). \tag{1.3}$$

Тоді, виходячи з (1.1), будемо мати

$$f^{(k)}(x) = P_n^{(k)}(x) + r_n^{(k)}(x), \quad k \leq n. \tag{1.4}$$

Зрозуміло, що $k \leq n$, бо інакше у нас недостатньо даних для проведення інтерполяції.

Таким чином ми за наближене значення k-ої похідної будемо брати k-у похідну від інтерполяційного поліному:

$$f^{(n)}(x) \approx P_n^{(k)}(x). \tag{1.5}$$

Оцінимо похибку $r_n^{(k)}(x)$: виходячи з (1.2) можемо записати

$$r_n^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{k} C_k^i \cdot f^{(j)}(x, x_0, \ldots, x_n) \cdot \omega^{(k-j)}(x). \tag{1.6}$$

Тоді, за формулою зв'язку розділеної різниці і похідної (нагадаємо її для тих, хто не пам'ятає):

$$f(x_0, \ldots, x_n) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}$$

з (1.6) маємо

$$f^{(j)}(x, x_0, \ldots, x_n) = j! \cdot f\left(\underbrace{x, \ldots, x}_{j}, x_0, \ldots, x_n\right) = \frac{j! \cdot f^{(n+j+1)}(\xi)}{(n+j+1!)} \tag{1.7}$$

Підставимо це в (1.6):

$$r_n^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{k} \frac{k!}{(k-j)! \cdot (n+j+1)!} \cdot f^{(n+j+1)}(\xi_j) \cdot \omega^{k-j}(x). \tag{1.8}$$

Формула (1.8) дасть нам оцінку похибки:

$$|r_n^{(k)}(x)| \leq M \cdot \sum_{j=0}^{k} \frac{k!}{(k-j)! \cdot (n+j+1)!} \cdot \omega^{(k-j)}(x), \tag{1.9}$$

де

$$M = \max_{[a,b]} \max_{j=\overline{0,k}} |f^{(n+j+1)}(x)|$$

Давайте тепер з цієї оцінки отримаємо щось хороше, а то зараз на неї неприємно дивитися. Нехай точки x_i рівновіддалені: $x_i = x_0 + ih$. З'ясуємо який порядок по h матиме похибка. Тоді

$$x - x_i \approx O(h),$$

тому
$$\omega_n(x) = O(h^{n+1}),$$
а також
$$\omega_n'(x) = O(h^n).$$
Звідси, за індукцією,
$$\omega_n^{(k)}(x) = O(h^{n+1-k}).$$
Повернемося до формули (1.8). Виходячи з останніх зауважень з'ясуємо який же порядок по h матиме $r_n^{(k)}$. Зрозуміло що найнижчий (тобто найгірший) порядок буде у доданку суми де $j = 0$, а саме:
$$r_n^{(k)}(x) \approx O(h^{n+1-k}). \tag{1.10}$$
Розгялнемо ще одну особливість, таку як точки підвищеної точності.

1.1 Точки підвищеної точності

Давайте тепер формулу (1.8) запишемо у двох частинах, окремо для $j = 0$:

$$r_n^{(k)}(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_0)}{(n+1)!} \cdot \omega_n^{(k)}(x) + \\ + \sum_{j=1}^{k} \frac{k!}{(k-j)! \cdot (n+j+1)!} \cdot f^{(n+j+1)}(\xi_j) \cdot \omega^{k-j}(x) \tag{1.1.1}$$

З формули (1.1.1) бачимо наступне: перший доданок має порядок $O(h^{n+1-k})$, а для другого додатку "найгіршим" випадком буде $j = 1$, причому його порядком буде $O(h^{n+2-k})$, звідки випливає таке спостержеення.

Нехай $\bar{x} : \omega_n^{(k)}(\bar{x}) = 0$, тоді
$$r_n^{(k)}(\bar{x}) \approx O(h^{n+k-2}). \tag{1.1.2}$$
Такі точки називаються *точками підвищеної точності.*

Приклад 1. Побудувати формулу чисельного диференціювання для $n = 1$, $k = 1$ і знайти точки підвищеної точності.

Оскільки $n = 1$, то
$$P_1(x) = f_0 + (x - x_0) \cdot \frac{f_1 - f_0}{h} \tag{1.1.3}$$

де $h = x_1 - x_0$.

Тоді
$$P_1'(x) = \frac{f_1 - f_0}{h}. \tag{1.1.4}$$
Таким чином для $x \in [x_0, x_1]$ похідну можна знаходити за формулою (1.1.4).

Знайдемо тепер похибку. За формулою (1.8) маємо

$$\begin{aligned} r_1'(x) = \frac{f''(\xi_0)}{2!} \cdot \omega_1'(x) + \frac{f'''(\xi_1)}{3!} \cdot \omega_1(x) = \\ = \frac{f''(\xi_0)}{2} \cdot (2x - x_0 - x_1) + \frac{f'''(\xi_1)}{6} \cdot (x - x_0) \cdot (x - x_1). \end{aligned} \tag{1.1.5}$$

Отже порядок формули буде $O(h)$, тобто $r_1'(x) \approx O(h)$, $f \in C^{(2)}$.

Знайдемо точки підвищеної точності. Нехай $\omega_1'(x) = 0$, тоді

$$\bar{x} = \frac{x_0 + x_1}{2}, \tag{1.1.6}$$

і похибка має порядок $O(h^2)$,

$$r_1'(\bar{x}) = -\frac{h^2}{24} \cdot f'''(\xi_1), \tag{1.1.7}$$

або ж
$$|r_1'(\bar{x})| \le \frac{M_3 \cdot h^2}{24}, \tag{1.1.8}$$
де $M_3 = \max\limits_{[x_0, x_1]} |f'''(x)|$.

Таким чином, похідну на проміжку $x \in [x_0, x_1]$ можна знаходити ща формулою (1.1.4). Переведемо тепер цю формулу на проміжок $x \in [x_{i-1}, x_i]$, отримаємо
$$f'(x) \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{h} \triangleq f_{\bar{x},i}. \tag{1.1.9}$$
Її називають *різницевою похідною назад в точці* x_i, або ще *лівою різницевою похідною.*

Якщо ж $x \in [x_i, x_{i+1}]$, то

$$f'(x) \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \triangleq f_{x,i}. \tag{1.1.10}$$

Її називають *різницевою похідною вперед в точці* x_i, або ще *правою різницевою похідною.*

Задача 1.1. Побудувати формулу чисельного диференціювання для $n = 2$, $k = 1$ для випадку рівновіддалених вузлів. Знайти точки підвищенної точності.

Зауваження. *Для формул* (1.1.9) *та* (1.1.10) *похибка має порядок* $O(h)$, $r_1'(x) \approx O(h)$.

Задача 1.2. Нехай тепер

а)

$$f'(x_i) \approx f_{\bar{x},i} \tag{1.1.11}$$

б)

$$f'(x_i) \approx f_{x,i} \tag{1.1.12}$$

в)

$$f'(x_i) \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \quad x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]. \tag{1.1.13}$$

Визначити похибку чисельного диференціювання для формул (1.1.11)-(1.1.13).

Вказівка. Розв'язок можна безпосередньо отримати з формули (1.1.5) якщо підставити замість x потрібну точку (x_0, x_1, або $\frac{x_0+x_1}{2}$ відповідно).

Розгялнемо ще один підхід як можна знайти похибку чисельного диференціювання.

1.2 Похибка через ряд Тейлора

Приклад 2. Для рівновіддалених точок побудувати формулу чисельного диференціювання для $n = 2$, $k = 2$ та визначити похибку цієї формули за допомогоб розвинення в ряд Тейлора:

$$P_2(x) = f_0 + (x - x_0) \cdot \frac{f_1 - f_0}{2} + (x - x_0) \cdot (x - x_1) \cdot \frac{f_2 - 2f_1 + f_2}{2h^2}.$$

Тоді будемо мати, що

$$P_2''(x) = \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2}. \tag{1.2.1}$$

Перепишемо тепер формулу (1.2.1) для довільного вузла x:

$$P_2''(x) = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}, \quad x \in [x_{i-1}, x_{i+1}] \triangleq f_{\bar{x}x,i}. \tag{1.2.2}$$

Тоді, для формули (1.2.2) матимемо

$$\begin{aligned}
r_2''(x) = f''(x) - \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = \\
= f''(x) - \frac{1}{h^2}\Bigg(f_i + hf_i' + \frac{h^2}{2}f_i'' + \frac{h^3 f_i'''}{6} + \frac{h^4}{24}f_i^{(4)} - 2f_i + \\
+ f_i - hf_i' + \frac{h^2}{2}f_i'' - \frac{h^3}{6}f_i'' + \frac{h^4}{24}f_i^{(4)}\Bigg) + O(h^4) = \\
= f''(x) - f''(x_i) - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(x_i) + O(h^4).
\end{aligned}$$

Таким чином,

$$r_2''(x_i) = -\frac{h^2}{12}f^{(4)} + O(h^4) \approx O(h^2).$$

Також зауважимо, що (1.2.2) визначає *другу різницеву похідну за трьома точками* і позначається $f_{\bar{x}x,i}$.