1 Обратное интерполирование

Пусть дана таблица значений функции. В задаче интерполирования мы по значению аргумента находили значение функции. Теперь рассмотрим обратную задачу: пусть дано число F, требуется найти значение аргумента $\bar{x} : f(\bar{x}) = F$.

x_k	$f(x_k)$
x_0	f_0
x_1	f_1
x_2	f_2
$\vdots$	$\vdots$
x_m	f_m

Первый способ решения

Предположим, что на рассматриваемом участке таблицы функция $f(x)$ строго монотонна и непрерывна, а значит имеет однозначную обратную функцию $f^{-1}(y)$, которая также строго монотонна и непрерывна. В этом случае обратное интерполирование сводится к обычной интерполяции для функции f^{-1}. В этом случае ответом в задаче обратного интерполирования будет значение в точке F интерполяционного полинома для f^{-1}, $\bar{x} \approx \tilde{x} = Q_n(F)$. При этом степень многочлена $Q_n(y)$ не должна превосходить максимально возможной (в нашем случае это m). Просто поменяем местами столбцы в исходной таблице:

$f(x_k)$	$x_k = f^{-1}(f(x_k))$
f_0	x_0
f_1	x_1
f_2	x_2
$\vdots$	$\vdots$
f_m	x_m

Получили таблицу значений функции f^{-1}. При нахождении $Q_n(F)$ можно воспользоваться представлением в форме Лагранжа или в форме Ньютона.

Замечание
Первый способ решения (теоретически) позволяет найти точное решение задачи $\bar{x}$, если параметр задачи F совпадает со значением из таблицы или обратная функция f^{-1} – это многочлен, степени ℓ, и $\ell \leq n$.

Замечание
Если нет строгой монотонности, переворачивать таблицу нельзя! Проиллюстрируем ошибку на примере.

Рассмотрим такую таблицу:

x_k	$f(x_k)$
1	49
2	9
3	1
4	25

Это таблица значений функции $f(x) = 16(x - 2.75)^2$. Здесь нет строгой монотонности, но попробуем воспользоваться способом 1 решения задачи обратного интерполирования. Зададим параметр $F = 34$. Мы ожидаем, что решение задачи $\bar{x} \in (1, 4)$. Поменяем местами столбцы таблицы и будем строить интерполяционный многочлен максимально возможной степени (в нашем случае это 3).

Построение $Q_3(y)$ приводит к следующему выражению для него:

$$Q_3(y) = 3 + \frac{y-1}{8} + \frac{(y-1)(y-9)}{96} + \frac{(1-y)(y-9)(y-25)}{2880}.$$

Подстановка в эту формулу значения $y = 34$ приводит к значению $\tilde{x} = Q_3(34) \approx 4.89$

Второй способ решения

Если нет взаимно однозначной обратной или результат решения первым способом дал недостаточно точный результат (например, обратная функция плохо приближается полиномом), можно предложить следующее очевидное решение.

По исходной таблице построить интерполяционный многочлен заданной степени $P_n(x)$ и далее решать алгебраическое уравнение вида $P_n(x) = F$ численно при помощи какого-либо метода решения нелинейных уравнений. На этом пути можно использовать простейшие методы решения: метод бисекции, метод секущих или метод простой итерации.

Так как в этом случае может отсутствовать монотонность, то уравнение будет/может иметь несколько корней на промежутке интерполирования. И тогда из полученного набора останется выбрать лишь отвечающий поставленной задаче.

2 О некорректности задачи численного дифференцирования

Задача численного дифференцирования возникает когда требуется найти производную таблично-заданной функции, или в случае, когда аналитическое представление функции f и/или ее производных является громоздким и трудно вычислимым. А также если функция задана неявно. Тогда также приходится опираться на таблицу ее значений.

Идея *численного дифференцирования* непосредственно вытекает из самого определения производной, когда разность двух значений функции делится на разность соответствующих аргументов (Δx). Теоретически, при уменьшении Δx результат должен приближаться к истинному значению производной. Однако при этом будет уменьшаться модуль разности значений функции и соответственно возрастать влияние ошибок в определении этих значений. В частности это относится и к ограниченности разрядной сетки.

Поскольку производные от многочленов вычисляются легко, естественно было бы пытаться дифференцировать интерполяционный многочлен, построенный по таблице значений. Однако, даже в случае, когда последний хорошо аппроксимирует табличную функцию, его производные могут не иметь ничего общего с производными аппроксимируемой функции.

Рассмотрим это на примере (смотри excel-файл с графиками).

Задача численного дифференцирования является некорректной (покажем ниже). И так как зачастую значения таблично-заданной функции являются неточными, это может весьма существенно сказаться на результате.

Покажем, что задача дифференцирования в пространстве C^1 является некорректной.

Определение

Задача называется *корректной*, если ее решение существует, единственно и непрерывно зависит от исходных данных.

Покажем, что нет непрерывной зависимости от начальных данных (малым изменениям в начальных данных соответствуют сильные изменения в решении).

Пример

Рассмотрим $f \in C^1$. Образуем функцию $\tilde{f}(x) = f(x) + \frac{1}{n}\sin(n^2 x)$, где $n \in N$.
Тогда $\rho = \max|f(x) - \tilde{f}(x)| = \frac{1}{n}\max|\sin(n^2 x)| = \frac{1}{n}$. То есть $\rho \to 0$ при $n \to \infty$.

В то же время $\rho_1 = \max|f'(x) - \tilde{f}'(x)| = n\max|\cos(n^2 x)| = n$, и, следовательно, $\rho_1 \to \infty$ при $n \to \infty$.

3 Численное дифференцирование

Рассмотрим применение интерполирования к задаче приближенного вычисления производных некоторой функции $f(x)$, заданной таблицей своих значений с аргументами, которые не обязательно являются равноотстоящими. Предполагается, конечно, что у функции $f(x)$ существуют вычисляемые производные.
Пусть требуется вычислить производную порядка m функции f в точке x. Выберем $n+1$ точку $x_0, x_1, \ldots, x_n$ — аргументы таблицы, ближайшие к точке x, и построим интерполяционный многочлен $P_n(x)$ степени не выше n функции f по этим точкам как узлам. Тогда получаем приближенное равенство $f(x) \approx P_n(x)$. Это равенство далее позволяет найти приближенное значение производной порядка $m \leq n$ от функции f в точке x:

$$f^{(m)}(x) \approx P_n^{(m)}(x). \tag{1}$$

Это общий вид формулы численного дифференцирования для производной порядка m.
Требование $m \leq n$ естественное, так как при $m > n$ производная $P_n^{(m)}(x)$ равна нулю тождественно.
Исследуем погрешность формулы (1). Нам известно представление погрешности алгебраического интерполирования в точке x:

$$R_n(f,x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x),\ \xi = \xi(x) \in (a,b), \tag{2}$$

где $\omega_{n+1}(x)$=$(x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_n)$, в предположении, что существует конечная производная $f^{(n+1)}(x)$ на $[a,b]$, при этом $a = \min\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x\}, b = \max\{x_0, x_1, \cdots, x_n, x\}$.
Очевидно, погрешность формулы численного дифференцирования (1) $R_n^{(m)}(f,x) = f^{(m)}(x) - P_n^{(m)}(x)$, и если бы точка ξ не зависела от x, то в результате дифференцирования равенства (2) мы получили бы выражение

$$R_n^{(m)}(f,x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}^{(m)}(x).$$

Но ξ зависит от x, и такая формула, вообще говоря, неверна. В некоторых случаях она верна, однако с другим значением ξ. А именно, справедлива следующая теорема:
Теорема 1

Пусть функция f имеет конечную производную порядка $n+1$ на $[a,b]$, где $a=\min\{x_0,x_1,\cdots,x_n,x\}$, $b=\max\{x_0,x_1,\cdots,x_n,x\}$. Тогда справедливо представление

$$R_n^{(m)}(f,x)=\frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!}\omega_{n+1}^{(m)}(x),\quad \xi_1\in(a,b), \tag{3}$$

если выполняется одно из условий:
1) $x\notin(\alpha,\beta)$, где $\alpha=\min\{x_0,x_1,\cdots,x_n\}$, $\beta=\max\{x_0,x_1,\cdots,x_n\}$,
2) $m=1$ и точка x совпадает с одним из узлов $x=x_k$.
При выполнении условий 1) и 2) $\omega_{n+1}^{(m)}(x)\neq 0$.
Доказательство: Без доказательства.
Доказательство проводится для каждого случая отдельно. Аналогичным образом, как в теоремах о погрешности алгебраического интерполирования и погрешности интерполирования Эрмита. Также можно найти доказательство в параграфе 13 учебного пособия И.П.Мысовских (стр.118, 119).

4 Простейшие формулы численного дифференцирования

Получим формулы численного дифференцирования для первой производной, применяя способ построения, описанный в разделе 2. Для получения погрешностей будем использовать результат Теоремы 1.

1. **Правая разностная производная**

   По таблице значений функции

a	$f(a)$
$a+h$	$f(a+h)$

   построим интерполяционный многочлен

$$\begin{aligned} P_1(x) &= f(a)+f(a,a+h)(x-a) \\ \text{тогда}\quad f'(a) &\approx P_1'(a)=f(a,a+h)=\frac{f(a+h)-f(a)}{h}. \end{aligned} \tag{4}$$

   Получили первую формулу (это правая разностная производная). Найдем ее погрешность. Выполняется условие 2) Теоремы 1: $m=1,\quad x=a$ – узел.

$$\omega_2(x)=(x-a)(x-a-h)$$

$$\omega_2'(a)=-h\implies f'(a)-P_1'(a)=f'(a)-\frac{f(a+h)-f(a)}{h}=\frac{f''(\xi_1)}{2}(-h)=\mathcal{O}(h),\quad a<\xi_1<a+h$$

2. **Левая разностная производная**

$a-h$	$f(a-h)$
a	$f(a)$

   Действуя аналогично первому случаю (или заменой h на $-h$) можно получить вторую формулу численного дифференцирования (левая разностная производная):

$$f'(a)\approx P_1'(a)=\frac{f(a)-f(a-h)}{h} \tag{5}$$

$$f'(a)-\frac{f(a)-f(a-h)}{h}=\frac{f''(\xi_2)}{2}h=\mathcal{O}(h),\quad a-h<\xi_2<a$$

3. **Центральная разностная производная**

$a-h$	$f(a-h)$
a	$f(a)$
$a+h$	$f(a+h)$

Следующая формула для первой производной:

$$\begin{aligned} P_2(x) &= f(a-h)+f(a-h,a)(x-a+h)+f(a-h,a,a+h)(x-a+h)(x-a) \\ f'(a) &\approx f(a-h,a)+hf(a-h,a,a+h)=\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}. \end{aligned} \tag{6}$$

Погрешность вновь найдем по Теореме 1:

$$\begin{aligned} f'(a)-\frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h} &= \frac{f'''(\xi_3)}{6}\omega_3'(a)=\frac{f'''(\xi_3)}{6}(-h^2)=\mathcal{O}(h^2), \quad a-h<\xi_3<a+h \\ \omega_3(x) &= (x-a+h)(x-a)(x-a-h) \end{aligned}$$

Таким образом, погрешность центральной производной порядка $\mathcal{O}(h^2)$. Однако, если, $f(a-h)$ или $f(a+h)$ неизвестны, использование этой, более точной формулы для первой производной становится невозможным. Можно указать формулы численного дифференцирования в этих ограничениях, имеющие порядок погрешности $\mathcal{O}(h^2)$.

4. **Точка в начале таблицы**

Предположим, что значение $f(a-h)$ неизвестно. Построим формулу по таблице:

a	$f(a)$
$a+h$	$f(a+h)$
$a+2h$	$f(a+2h)$

Рассуждениями, аналогичными приведенным в пункте 3, придем к следующему выражению для первой производной:

$$f'(a)\approx\frac{-3f(a)+4f(a+h)-f(a+2h)}{2h}. \tag{7}$$

Представление погрешности этой формулы мы приведем чуть позже.

5. **Точка в конце таблицы**

Предположим, что теперь неизвестно значение $f(a+h)$. Построим формулу по таблице:

$a-2h$	$f(a-2h)$
$a-h$	$f(a-h)$
a	$f(a)$

На этом пути придем к следующей формуле численного дифференцирования:

$$f'(a)\approx\frac{3f(a)-4f(a-h)+f(a-2h)}{2h}. \tag{8}$$

Заметим, что последнюю формулу также легко получить заменой h на $-h$ в формуле для начала таблицы.

6. **Представления погрешностей последних формул**

Мы снова в условиях Теоремы 1: $m = 1$, $x = a$ – узел. При этом $n + 1 = 3$ и многочлен имеет вид

$$\omega_3(x) = (x-a)(x-a-h)(x-a-2h) \implies$$

$$\omega_3'(a) = 2h^2 \implies f'(a) - \frac{-3f(a) + 4f(a+h) - f(a+2h)}{2h} = \frac{f'''(\xi_4)}{6}(2h^2) = \frac{f'''(\xi_4)}{3}(h^2) = \mathcal{O}(h^2),$$

где $a < \xi_4 < a + 2h$.

Аналогично получается погрешность второй формулы. Теперь многочлен

$$\omega_3(x) = (x-a)(x-a+h)(x-a+2h) \implies$$

$$\omega_3'(a) = 2h^2 \implies f'(a) - \frac{3f(a) - 4f(a-h) + f(a-2h)}{2h} = \frac{f'''(\xi_5)}{6}(2h^2) = \frac{f'''(\xi_5)}{3}(h^2) = \mathcal{O}(h^2),$$

где $a - 2h < \xi_5 < a$.

Задача:

$a-h$	$f(a-h)$
a	$f(a)$
$a+h$	$f(a+h)$

Хотим вычислить $f''(a)$ и получить представление погрешности. Однако, так как a – узел и $m \neq 1$, применять Теорему 1 мы не можем. Существует метод построения формул численного дифференцирования, позволяющий получать представление погрешности вместе с собственно построением формулы.

5 Метод неопределенных коэффициентов построения формул численного дифференцирования.

$x-h$	$f(x-h)$
x	$f(x)$
$x+h$	$f(x+h)$

Запишем разложения в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + \frac{f'(x)}{1}h + \frac{f''(x)}{2}h^2 + \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \cdots \\ f(x-h) &= f(x) - \frac{f'(x)}{1}h + \frac{f''(x)}{2}h^2 - \frac{f'''(x)}{3!}h^3 + \cdots \\ f(x) &= f(x) \end{aligned}$$

Хотим получить приближенное значение второй производной в точке x, как линейную комбинацию значений из таблички с коэффициентами α, β, γ. Домножим на α, β, γ и сложим все.

$$\alpha f(x+h) + \beta f(x-h) + \gamma f(x) =$$
$$= (\alpha+\beta+\gamma)f(x) + h(\alpha-\beta)f'(x) + \frac{h^2}{2}(\alpha+\beta)f''(x) + \frac{h^3}{6}(\alpha-\beta)f'''(x) + \cdots$$

Подберем α, β, γ так, чтобы получалось значение второй производной и остаток:

$$\begin{aligned} \alpha + \beta + \gamma &= 0 \\ \alpha - \beta &= 0 \\ \frac{h^2}{2}(\alpha + \beta) &= 1 \end{aligned}$$

Тогда искомые коэффициенты равны

$$\begin{aligned} \alpha &= \beta \\ \gamma &= -2\alpha \\ \alpha = \beta &= \frac{1}{h^2} \\ \gamma &= -\frac{2}{h^2} \end{aligned}$$

Получим

$$\begin{aligned} \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} &= f''(x) + \frac{h^2}{12} f^{(4)}(x) + \cdots \\ \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} &= f''(x) + \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi) \end{aligned}$$

и в итоге погрешность формулы для второй производной равна

$$f''(x) - \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \quad x - h \le \xi \le x + h.$$

Так можно строить аппроксимацию производной любого порядка любого порядка точности.

Замечание

Из представлений для погрешностей всех упомянутых формул численного дифференцирования, можно заключить, что правая и левая разностные производные точны для всех полиномов степени не выше 1 и не точны для $f(x) = x^2$. Мы будем говорить, что *алгебраическая степень точности* (далее АСТ) этих формул равна 1.

Следующие три формулы численного дифференцирования для первой производной, имеющие погрешности порядка $\mathcal{O}(h^2)$ точны для всех полиномов степени не выше 2 и не точны для $f(x) = x^3$. Мы будем говорить, что АСТ этих формул равна 2.

Наконец, формула для второй производной точна для всех полиномов степени не выше 3 и даст погрешность, отличную от нуля для $f(x) = x^4$, значит ее АСТ равна 3.

6 Неустранимая погрешность формул численного дифференцирования

В пункте 1 мы говорили, что вычисление значений производной по значениям функции связано с потерей точности, что обусловлено некорректностью задачи численного дифференцирования и другими соображениями. Например, при нахождении значения $f'(a) \approx \frac{f(a+h)-f(a)}{h}$ при малом $h > 0$ будут вычитаться близкие значения $f(a+h)$ и $f(a)$, что приводит к пропаданию значащих цифр.
Представление погрешностей формул (смотри пункт 4) может ввести в заблуждение относительно

стратегии вычисления производных при помощи формул численного дифференцирования. А именно, представление о том, что наилучшим выходом здесь будет выбор h как можно малым.

Однако существует такое понятие как *неустранимая погрешность* формул численного дифференцирования.

Давайте посмотрим на примере правой разностной производной, до какого значения целесообразно уменьшать h.

Итак, вместо точных значений $f(a)$ и $f(a+h)$ в вычислениях используются

$$\tilde{f}(a) = f(a) + \varepsilon_0, \quad \tilde{f}(a+h) = f(a+h) + \varepsilon_1, \quad |\varepsilon_i| \le \varepsilon, \quad i = 0, 1.$$

Тогда фактическое значение, найденное по формуле $\frac{\tilde{f}(a+h)-\tilde{f}(a)}{h}$ и от точного значение оно отличается на величину

$$f'(a) - \frac{\tilde{f}(a+h) - \tilde{f}(a)}{h} = f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_0}{h}.$$

Пусть $f \in mC^2[a, a+h]$. То есть дважды непрерывно дифференцируема на $[a, a+h]$ и максимум второй производной по абсолютной величине не превосходит m.

Тогда, так как

$$f'(a) - \frac{f(a+h) - f(a)}{h} = -\frac{f''(\xi_1)}{2}h, \quad \xi_1 \in [a, a+h],$$

то можно оценить абсолютную фактическую погрешность

$$\left| f'(a) - \frac{\tilde{f}(a+h) - \tilde{f}(a)}{h} \right| \le \frac{mh}{2} + \frac{2\varepsilon}{h} = \varphi(h).$$

Функция $\varphi(h)$ непрерывна и неотрицательна для $h > 0$. Существует h_{opt}, которое доставляет минимум этой функции. $\varphi'(h) = 0 \implies h_{opt}$.

$$\varphi'(h) = \frac{m}{2} - \frac{2\varepsilon}{h^2} = 0 \implies mh^2 = 4\varepsilon \implies h_{opt} = 2\sqrt{\frac{\varepsilon}{m}}.$$

При этом правая часть оценки будет минимальна и равна $\varphi(h_{opt}) = 2\sqrt{m\varepsilon}$. Значение $\varphi(h_{opt})$ называется *неустранимой погрешностью* формулы. Сделать абсолютную фактическую погрешность меньше этого значения нельзя. Следовательно, выбирать шаг h существенно меньше h_{opt} нецелесообразно.

Дадим дополнительные пояснения о распространении ошибки. Пусть максимальная погрешность в значениях функции $\varepsilon = 10^{-s}$, то погрешность в значениях производной в лучшем случае не превосходит $2\sqrt{m}10^{-s/2}$. То есть число верных десятичных знаков в $f'(a)$ примерно в два раза меньше, чем в значениях функции.