Численное дифференцирование

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Математико-механический факультет

2021

Содержание I

Основные формулы численного дифференцирования для функции, заданной аналитически I

Предполагается, что функция $f(x)$ достаточно гладкая. Справедливы соотношения (формулы, равенства).

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi), \quad \xi \in (x, x+h), \qquad (1)$$

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$ — разность вперед.

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi), \quad \xi \in (x-h, x), \qquad (2)$$

Основные формулы численного дифференцирования для функции, заданной аналитически II

$$\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$ — разность назад.

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(\xi),\quad \xi\in(x-h,x+h), \tag{3}$$

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$ — симметричная разность.

Основные формулы численного дифференцирования для функции, заданной аналитически III

$$f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi), \quad \xi \in (x, x+2h). \tag{4}$$

$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi), \quad \xi \in (x-2h, x). \tag{5}$$

Основные формулы численного дифференцирования для функции, заданной аналитически IV

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h))}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi),$$
$$\xi \in (x-h, x+h). \quad (6)$$

Формулы численного дифференцирования для функции, заданной таблично в равноотстоящих узлах I

Пусть узлы $x_0,\ x_1,\ x_2, \dots, x_n$ — равноотстоящие, т. е. $x_{i+1} - x_i = h$ $(i = 0,\ 1,\ 2, \dots, n-1)$, и пусть для функции $y = f(x)$ известны значения $y_i = f(x_i)$ $(i = 0, 1, \dots, n)$. Формулы (1) - (6) перепишем в следующем виде:

$$f'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + O(h), \quad i = 0, 1, \dots, n-1. \tag{7}$$

$$f'(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + O(h), \quad i = 1, 2, \dots, n. \tag{8}$$

$$f'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2), \quad i = 1, 2, \dots, n-1. \tag{9}$$

Формулы численного дифференцирования для функции, заданной таблично в равноотстоящих узлах II

$$f'(x_i) = \frac{-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}}{2h} + O(h^2), \quad i = 0, \ldots, n-2. \tag{10}$$

$$f'(x_i) = \frac{3y_i - 4y_{i-1} + y_{i-2}}{2h} + O(h^2), \quad i = 2, \ldots, n. \tag{11}$$

$$f''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^2), \quad i = 1, \ldots, n-1. \tag{12}$$

Теорема о погрешности численного дифференцирования

Теорема 1

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

$$R_n^{(m)} = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\omega_{n+1}^{(m)}(\overline{x}),\ \ \eta \in (a,b),$$

если выполняется одно из условий:

1. $\overline{x} \notin (\alpha, \beta)$, где $\alpha = min\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$, $\beta = max\{x_0, x_1, \dots, x_n\}$,
2. $m = 1$ *и точка* $\overline{x}$ *совпадает с одним из узлов* $\overline{x} = x_k$.

При выполнении условий 1 и 2 $\omega_{n+1}^{(m)}(\overline{x}) \neq 0$.

Построение формул численного дифференцирования I

Пусть дана таблица значений функции $f(x)$ на $[a, b]$ с шагом h точка $\overline{x}$, которая находится в начале таблицы. Получим некоторые формулы для приближенного вычисления производной функции дифференцированием интерполяционного многочлена в форме Ньютона.
Так как точка $\overline{x}$ находится в начале таблицы, используем интерполяционный многочлен вида:

$$P_n(a+th) = y_0+t\,\Delta y_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0+\frac{t(t-1)(t-2)}{3!}\Delta^3 y_0+ \\ +\ldots+\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n y_0, \quad (13)$$

где $t = (\overline{x} - a)/h$.

Построение формул численного дифференцирования II

Обозначим $\alpha_k = t - k$. Дифференцируем интерполяционный многочлен (13), (ограничиваясь для краткости тремя слагаемыми)

$$h\,P_n'(a+th) = \Delta y_0 + \frac{(\alpha_1+\alpha_0)}{2}\cdot\Delta^2 y_0 + \frac{(\alpha_1\cdot\alpha_2+\alpha_0\cdot\alpha_2+\alpha_0\cdot\alpha_1)}{6}\cdot\Delta^3 y_0 + \dots$$

Представим $P_n'(a+th)$ в виде: $P_n'(a+th) = \sum\limits_{k=1}^{n} \frac{N_k'}{h}\cdot\Delta^k y_0$, где

$$N_1' = 1,\ N_2' = \frac{(\alpha_1+\alpha_0)}{2},\ N_3' = \frac{(\alpha_1\cdot\alpha_2+\alpha_0\cdot\alpha_2+\alpha_0\cdot\alpha_1)}{6}, \dots$$

Построение формул численного дифференцирования III

При выполнении условий теоремы 1 о погрешности численного дифференцирования

$$R_n'(\overline{x}) = \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(\overline{x}), \;\; \eta \in (a,b). \tag{14}$$

Заметим, что в нашем случае

$$\omega_{n+1}'(\overline{x}) = [t(t-1)\cdots(t-n)]'\, h^n = \left(\prod_{k=0}^{n} \alpha_k\right)' h^n.$$

Построим несколько формул численного дифференцирования.

Пусть требуется построить формулу численного дифференцирования для приближенного вычисления производной m-ого порядка с порядком аппроксимации p.

Построение формул численного дифференцирования IV

Понятно, что степень интерполяционного полинома следует вычислять исходя из того, что $p = n + 1 - m$, т. е. $n = p + m - 1$.

1. Пусть требуется построить формулу численного дифференцирования для приближенного вычисления первой производной с первым порядком аппроксимации в точке $\overline{x} = a$.
   Получаем $n = p + m - 1 = 1$.
   Согласно обозначениям $t = 0,\ \alpha_0 = 0,\ \alpha_1 = -1$.
   Тогда $h\, P_1'(a) = \Delta y_0$ и

$$f'(a) \approx P_1'(a) = \frac{y_1 - y_0}{h}. \tag{15}$$

Построение формул численного дифференцирования V

Выражение (15) для численной производной функции $f(x)$ в точке $x = a$ называется разностью „вперед“.
Определим выражение для погрешности формулы (15).
Согласно теореме 1

$$R_1'(a) = \frac{f''(\eta)}{2!}\omega_2'(a) = \frac{f''(\eta)}{2!}(\alpha_0+\alpha_1)\,h = -\frac{1}{2}hf''(\eta),$$
$$\eta \in (a, a+h). \quad (16)$$

Что совпадает с формулой (1).

Построение формул численного дифференцирования VI

2. Пусть требуется построить формулу численного дифференцирования для приближенного вычисления первой производной со вторым порядком аппроксимации в точке $\overline{x} = a$.
   Получаем $n = p + m - 1 = 2$.
   $t = 0, \ \alpha_0 = 0, \ \alpha_1 = -1, \alpha_2 = -2$.

$$h\, P_2'(a) = \Delta y_0 + \frac{(\alpha_1 + \alpha_0)}{2} \cdot \Delta^2 y_0 = = y_1 - y_0 - \frac{y_2 - 2\, y_1 + y_0}{2}, \qquad (17)$$

$$f'(a) \approx P_2'(a) = \frac{-\,3\, y_0 + 4\, y_1 - y_2}{2h}. \qquad (18)$$

Построение формул численного дифференцирования VII

Определим выражение для погрешности формулы (18).

$$R_2'(a) = \frac{f'''(\eta)}{3!}\omega_3'(a) = \frac{f'''(\eta)}{3!}\left(\alpha_1\alpha_2+\alpha_0\alpha_2+\alpha_1\alpha_2\right)h^2 = \\ = -\frac{1}{3}h^2 f'''(\eta), \;\; \eta \in (a, a+2h). \quad (19)$$

Что совпадает с формулой (4).

Построение формул численного дифференцирования VIII

3. Пусть требуется построить формулу численного дифференцирования для приближенного вычисления первой производной со вторым порядком аппроксимации в точке $\overline{x} = a + h$.
Получаем $n = p + m - 1 = 2$.
Используемые узлы $a,\ a+h,\ a+2h$, так что
$t = 1,\ \ \alpha_0 = 1,\ \ \alpha_1 = 0, \alpha_2 = -1.$

$$h\,P_2'(a) = \Delta y_0 + \frac{(\alpha_1 + \alpha_0)}{2} \cdot \Delta^2 y_0 = \\ = y_1 - y_0 + \frac{y_2 - 2\,y_1 + y_0}{2}, \qquad (20)$$

$$f'(a) \approx P_2'(a+h) = \frac{y_2 - y_0}{2h}. \qquad (21)$$

Построение формул численного дифференцирования IX

Определим выражение для погрешности формулы (21).

$$R_2'(a) = \frac{f'''(\eta)}{3!}\,\omega_3'(a+h) = \frac{f'''(\eta)}{3!}\,(\alpha_1\alpha_2+\alpha_0\alpha_2+\alpha_1\alpha_2)\,h^2 =$$

$$= -\frac{1}{6}h^2 f'''(\eta), \;\; \eta \in (a, a+2h). \quad (22)$$

Что совпадает с формулой (3).

Построение формул численного дифференцирования X

4. Пусть требуется построить формулу численного дифференцирования для приближенного вычисления первой производной с первым порядком аппроксимации в точке $\overline{x} = a - h/2$.
   Получаем $n = p + m - 1 = 1$.
   Используемые узлы a, $a + h$.
   Согласно обозначениям $t = -\dfrac{1}{2}$, $\alpha_0 = -\dfrac{1}{2}$, , $\alpha_1 = -\dfrac{3}{2}$.
   Тогда $h\,P_1'(a) = \Delta y_0$ и

$$f'(a - h/2) \approx P_1'(a - h/2) = \frac{y_1 - y_0}{h}. \qquad (23)$$

Построение формул численного дифференцирования XI

Определим выражение для погрешности формулы (23). Согласно теореме 1

$$R_1'(a-h/2) = \frac{f''(\eta)}{2!}\omega_2'(a-h/2) = \frac{f''(\eta)}{2!}(\alpha_0+\alpha_1)\,h = \\ = -hf''(\eta),\;\; \eta \in (a, a+h). \quad (24)$$

5. Формулу (21), а также численное значение $f''(a+h)$ через значения функции в точках a, $a+h$, $a+2h$ и их погрешности легко получить, используя разложение в ряд Тейлора $f(a+h)$, $f(a-h)$ в окрестности точки $x=a$ с остаточными членами, содержащими h^3 и h^4 соответственно, и комбинируя эти выражения должным образом.

Вычислить приближенно значения

а) первой производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности
$O(h)$ (обозначим $\widetilde{f'}$) и
$O(h^2)$ (обозначим $\widetilde{\widetilde{f'}}$) при $i = 0,\ 1, \ldots, n.$

б) второй производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h^2)$ (обозначим $\widetilde{f''}$) при
$i = 1, \ldots, n-1.$

Напечатать (см. образец)

- таблицу значений узлов;
- значений функции в узлах;
- “точных” значений производных в узлах;
- приближенных значений производных;
- их разностей (фактические погрешности).

Проверить результаты на многочленах соответствующих степеней.
Объяснить полученные результаты.
Образец выполнения задания для функции $f(x) = x + 3$ представлен в таблице 1.

Таблица 1

x	$f(x)$	$f'(x)$	$\widetilde{f}'$ $O(h)$	погр. $O(h)$	$\tilde{\tilde{f}}'$ $O(h^2)$	погр. $O(h^2)$	$f''(x)$	$\widetilde{f''}$ $O(h^2)$	погр. $O(h^2)$
0	3	1	1	0	1	0	0		
0,1	3,1	1	1	0	1	0	0	0	0
0,2	3,2	1	1	0	1	0	0	0	0
0,3	3,3	1	1	0	1	0	0	0	0
0,4	3,4	1	1	0	1	0	0	0	0
0,5	3,5	1	1	0	1	0	0	0	0
0,6	3,6	1	1	0	1	0	0	0	0
0,7	3,7	1	1	0	1	0	0	0	0
0,8	3,8	1	1	0	1	0	0	0	0
0,9	3,9	1	1	0	1	0	0	0	0
1	4	1	1	0	1	0	0		

Задание 2

Пользуясь одной из формул (1) - (6) в заданной точке x вычислить разностную производную первого или второго порядка, последовательно уменьшая шаг h (например, вдвое) до тех пор, пока фактическая погрешность не начнет возрастать. Определить h оптимальное экспериментально и теоретически, объяснить полученные результаты.

Пример

При использовании формулы (4) в результате ошибок, допускаемых в каждом значении функции и не превосходящих по модулю ε, оценка для суммарной погрешности будет выглядеть следующим образом:

$$|R_\varepsilon(x,h,f)| \leqslant \frac{8\varepsilon}{2h} + \frac{h^2}{3} M_3, \quad M_3 = \max |f'''(\xi)|, \quad \xi \in (x, x+2h).$$

Оптимальный шаг, т. е. такой, при котором обеспечивается минимальная суммарная погрешность, находится обычным образом, как решение задачи на экстремум.

Напечатать

- таблицу значений h;
- "точных" значений производной в точке x;
- приближенных значений производной;
- их разностей (фактические погрешности).

Образец выполнения задания для функции $f(x) = e^{2x}$ представлен в таблице 2.

Здесь $x = 1$, начальный шаг $h = 0.1$, "точное" значение производной $f'(1) = 14.778112$.

Значения функции округляются до пятого знака после запятой, т. е. $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-6}$.

Таблица 2

h	0.1	0.05	0.025	0.0125	0.00625	0.003125
$\widetilde{f}'$ пор. $O(h^2)$	14.5484	14.7249	14.765	14.774	14.7768	14.7744
погр.	0.22971	0.05321	0.01311	0.0037	0.0013122	0.003712

Из таблицы видно, что оптимальным экспериментально является шаг 0.00625, теоретически $h_{opt} \approx 0.0069$.

Задание 3

Предполагается заданной таблица значений функции в равноотстоящих узлах $x_i, i = 0, \ldots, n$.
Требуется дифференцированием интерполяционного многочлена в форме Ньютона получить формулу численного дифференцирования для вычисления приближенного значения указанной производной с указанным порядком аппроксимации в заданном узле x.
Получить выражение для погрешности.
Применить формулу для вычисления производной, сравнить с точным значением.