ЛЕКЦИЯ 7.2 ОБУСЛОВЛЕННОСТЬ РАЗНОСТНЫХ ФОРМУЛ. РАЗНОСТНЫЕ ВЫСШИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ

1. Обусловленность разностных формул

Численное дифференцирование относится к таким задачам, в которых влияние погрешностей исходных (табличных) данных чувствительно сказывается на общей вычислительной погрешности даже при умеренных погрешностях метода, т.е. разностных формул. Рассмотрим этот эффект на простейшем примере формулы правой разностной производной. Она использует два табличных значения y_n, y_{n+1}. Пусть они даны с погрешностями, т.е. известны y_n^*, y_{n+1}^* и верхняя оценка $\overline{\Delta}= \max\left\{\overline{\Delta}(y_n^*);\ \overline{\Delta}(y_{n+1}^*)\right\}$. Общая погрешность вычисления y_n': $\Delta((y_n')_+^*) = |y_n' - (y_n')_+^*|$, где $(y_n')_+^*$ вычисляется по формуле правой разностной производной ((1), лекция 7.1) по приближённым значениям:

$$(y_n')_+^* = \frac{y_{n+1}^* - y_n^*}{h}.$$

Тогда

$$\Delta((y_n')_+^*) = |y_n' - (y_n')_+^*| = \left|y_n' - \frac{y_{n+1}^* - y_n^*}{h}\right| =$$

$$= \left|y_n' - \frac{y_{n+1} - y_n}{h} + \frac{y_{n+1} - y_{n+1}^* - (y_n - y_n^*)}{h}\right| \le$$

$$\le \left|y_n' - \frac{y_{n+1} - y_n}{h}\right| + \left|\frac{y_{n+1} - y_{n+1}^* - (y_n - y_n^*)}{h}\right| \le$$

$$\le \Delta((y_n')_+) + \frac{1}{h}(|y_{n+1} - y_{n+1}^*| + |y_n - y_n^*|) =$$

$$= \Delta((y_n')_+) + \frac{1}{h}\left(\Delta(y_{n+1}^*) + \Delta(y_n^*)\right) \le \Delta((y_n')_+) + \frac{1}{h}\left(\overline{\Delta}(y_{n+1}^*) + \overline{\Delta}(y_n^*)\right).$$

Применяя теорему 1 лекции 7.1 и заменяя $\overline{\Delta}(y_{n+1}^*)$, $\overline{\Delta}(y_n^*)$ их максимальным значением $\overline{\Delta}$, приходим к окончательной оценке общей вычислительной погрешности:

$$\Delta((y_n')_+^*) \le \overline{\Delta}((y_n')_+^*) = \frac{M_2^+}{2} h + \frac{2\overline{\Delta}}{h}. \tag{1}$$

Для снижения погрешности формулы необходимо уменьшать h, но тогда согласно (1) общая погрешность будет неограниченно возрастать. Рассматривая $\bar{\Delta}((y_n')_+^*)$ как функцию h, можно найти значение шага h_0, при котором оценка будет минимальной:

$$h_0 = 2\sqrt{\frac{\bar{\Delta}}{M_2^+}}.$$

При этом $\bar{\Delta}((y_n')_+^*)_{\min} = 2\sqrt{M_2^+\bar{\Delta}} = \mathrm{O}\left(\sqrt{\bar{\Delta}}\right)$. Таким образом, ни при каком значении шага таблицы нельзя обеспечить оценку погрешности лучшую, чем $\mathrm{O}\left(\sqrt{\bar{\Delta}}\right)$.

Из этого примера можно сделать вывод о плохой обусловленности разностных формул численного дифференцирования по отношению к погрешностям табличных данных. Поэтому к их применению надо подходить с осторожностью. Если требуется обеспечить малые погрешности дифференцирования, то рекомендуется прибегать к формулам высоких порядков точности (у них ситуация с обусловленностью несколько лучше) или предварительно сглаживать исследуемую функцию.

2. Построение формул численного дифференцирования высших порядков

Построим формулы для разностных производных для функции f, заданной таблицей 1 со значениями $x_{n+1} = x_n + h$, $x_{n-1} = x_n - h$, $x_{n+2} = x_n + 2h$, $x_{n-2} = x_n - 2h$, $y_i = f(x_i)$, $i = n, n \pm 1, n \pm 2$.

Табл. 1. Функция $y = f(x)$

x_{n-2}	x_{n-1}	x_n	x_{n+1}	x_{n+2}
y_{n-2}	y_{n-1}	y_n	y_{n+1}	y_{n+2}

По этим данным найдём приближённые значения производных от первого до четвёртого порядка в точке x_n: $y_n' = f'(x_n)$, $y_n'' = f''(x_n)$, $y_n''' = f'''(x_n)$, $y_n^{(4)} = f^{(4)}(x_n)$.

Запишем формулы Тейлора для $f(x \pm 2h)$, $f(x \pm h)$ в окрестности точки x с остаточными членами пятого порядка:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{y_n' h}{1!} + \frac{y_n'' h^2}{2!} + \frac{y_n''' h^3}{3!} + \frac{y_n^{(4)} h^4}{4!} + R_5^1(h^5),$$

$$y_{n-1} = y_n - \frac{y_n' h}{1!} + \frac{y_n'' h^2}{2!} - \frac{y_n''' h^3}{3!} + \frac{y_n^{(4)} h^4}{4!} + R_5^2(h^5),$$

$$y_{n+2} = y_n + \frac{y_n' \cdot 2h}{1!} + \frac{y_n'' \cdot 4h^2}{2!} + \frac{y_n''' \cdot 8h^3}{3!} + \frac{y_n^{(4)} \cdot 16h^4}{4!} + R_5^3(h^5),$$

$$y_{n-2} = y_n - \frac{y_n' \cdot 2h}{1!} + \frac{y_n'' \cdot 4h^2}{2!} - \frac{y_n''' \cdot 8h^3}{3!} + \frac{y_n^{(4)} \cdot 16h^4}{4!} + R_5^4(h^5),$$

$$\left|R_5^i(h^5)\right| \le \frac{M_5}{5!} h^5,$$

где

$$M_5 = \max_{t \in [x-2h, x+2h]} \left|f^{(5)}(t)\right|,$$

$i = 1, 2, 3, 4$. Предполагаем, что выполняются все условия для этих формул; $R_5^i(h^5)$ – остаточные члены. Все они имеют одну и ту же оценку.

Если отбросить в формулах остаточные члены, то получим

$$y_{n+1} = y_n + \frac{y_n' h}{1!} + \frac{y_n'' h^2}{2!} + \frac{y_n''' h^3}{3!} + \frac{y_n^{(4)} h^4}{4!},$$

$$y_{n-1} = y_n - \frac{y_n' h}{1!} + \frac{y_n'' h^2}{2!} - \frac{y_n''' h^3}{3!} + \frac{y_n^{(4)} h^4}{4!},$$

$$y_{n+2} = y_n + \frac{2y_n' h}{1!} + \frac{4y_n'' h^2}{2!} + \frac{8y_n''' h^3}{3!} + \frac{16y_n^{(4)} h^4}{4!},$$

$$y_{n-2} = y_n - \frac{2y_n' h}{1!} + \frac{4y_n'' h^2}{2!} - \frac{8y_n''' h^3}{3!} + \frac{16y_n^{(4)} h^4}{4!}.$$

Поскольку значения y_{n+1}, y_{n-1}, y_n, y_{n+2}, y_{n-2} известны, эти равенства в совокупности можно рассматривать как систему уравнений для нахождения первых четырех производных. Введём для краткости неизвестные

$$\begin{cases} w_1 = \dfrac{y_n' h}{1!}, \\ w_2 = \dfrac{y_n'' h^2}{2!}, \\ w_3 = \dfrac{y_n''' h^3}{3!}, \\ w_4 = \dfrac{y_n^{(4)} h^4}{4!}. \end{cases}$$

Тогда имеем систему

$$\begin{cases} w_1 + w_2 + w_3 + w_4 = a, \\ -w_1 + w_2 - w_3 + w_4 = b, \\ 2w_1 + 4w_2 + 8w_3 + 16w_4 = c, \\ -2w_1 + 4w_2 - 8w_3 + 16w_4 = d, \end{cases}$$

где $a = y_{n+1} - y_n, b = y_{n-1} - y_n, c = y_{n+2} - y_n, d = y_{n-2} - y_n$. Решаем и получаем

$$
\begin{cases}
w_1 = \dfrac{-c + d + 8a - 8b}{12}, \\
w_2 = \dfrac{-c - d + 16a + 16b}{24}, \\
w_3 = \dfrac{c - d - 2a + 2b}{12}, \\
w_4 = \dfrac{c + d - 4a - 4b}{24}.
\end{cases}
$$

Откуда имеем

$$y_n' = \frac{y_{n-2} - y_{n+2} + 8y_{n+1} - 8y_{n-1}}{12h},$$
$$y_n'' = \frac{-y_{n-2} - y_{n+2} + 16y_{n+1} + 16y_{n-1} - 30y_n}{12h^2},$$
$$y_n''' = \frac{y_{n+2} - y_{n-2} + 2y_{n-1} - 2y_{n+1}}{2h^3},$$
$$y_n^{(4)} = \frac{y_{n-2} + y_{n+2} - 4y_{n+1} - 4y_{n-1} + 6y_n}{h^4}.$$

На этом примере показан способ получения разностных формул для приближения производных. Погрешности всех формул имеют порядок $O(h^4)$. Но такой порядок гарантирован при существовании и непрерывности производных высших порядков. Если исходная функция f имеет непрерывную пятую производную, то первая производная хорошо приближается полученной формулой для y_n', и погрешность при этом имеет порядок $O\big(|f^{(5)}(x_n)|h^4\big)$. Если исходная функция имеет непрерывную шестую производную, то вторая производная хорошо приближается полученной формулой для y_n'', и погрешность имеет порядок $O\big(|f^{(6)}(x_n)|h^4\big)$. Если исходная функция имеет непрерывную седьмую производную, то третья производная y_n''' хорошо приближается полученной формулой, и погрешность приближения будет порядка $O\big(|f^{(7)}(x_n)|h^4\big)$. Если исходная функция имеет непрерывную восьмую производную, то четвертая производная хорошо приближается полученной формулой $y_n^{(4)}$, и погрешность будет порядка $O\big(|f^{(8)}(x_n)|h^4\big)$. Как видите, все формулы можно назвать формулами четвёртого порядка.

Пример. Пусть дана функция $f(x) = (x + 3)e^{x-0,3}$. Вычислим оценки первых четырех производных по формулам четвертого порядка в точке $x = 0$ с шагом $h = 0{,}2$ и $h = 0{,}4$. В таблице 2 приведены точные значения производных в данной точке и приближённые, найденные по выведенным формулам с двумя указанными шагами. Исходная функция имеет производные любого порядка. Как оказалось, погрешности приближения производных для неё невысокие.

Табл. 2. Значения первой функции и её производных в примере на с. 4

$f(x) = (x+3)e^{x-0,3}$	$f'(0)$	$f''(0)$	$f'''(0)$	$f^{(4)}(0)$
Точное значение	2,9633	3,7041	4,4449	5,1857
Приближённое, $h = 0,2$	2,9630	3,7040	4,5045	5,2000
Приближённое, $h = 0,4$	2,9581	3,7022	4,6868	5,3656

Рассмотрим еще функцию $f(x) = e^x + \sqrt[3]{x^{16}}$. В таблице 3 приведены те же результаты для неё, что и для предыдущей.

Табл. 3. Значения второй функции и её производных в примере на с. 4

$f(x) = e^x + \sqrt[3]{x^{16}}$	$f'(0)$	$f''(0)$	$f'''(0)$	$f^{(4)}(0)$
Точное значение	1	1	1	1
Приближённое, $h = 0,2$	0,9999	0,9811	1,0106	9,4938
Приближённое, $h = 0,4$	0,9991	0,8086	1,0405	22,4348

Для второй функции не существует производных порядка 6 и выше в точке $x = 0$. Поэтому приближение производных даже более низкого порядка в этой точке имеет высокие погрешности.