

ЛЕКЦИЯ 7.1 ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ. ПЕРВАЯ И ВТОРАЯ РАЗНОСТНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ

1. Постановка задачи численного дифференцирования

Пусть дана функция $y = f(x)$. Задача её численного дифференцирования в точке x заключается в приближённом вычислении производной данного порядка в этой точке (предполагается, что f имеет нужную производную в x). Такая задача возникает в тех случаях, когда непосредственный расчёт производной затруднителен (функцию теоретически можно продифференцировать, но производная вычисляется сложно, с большими погрешностями) или невозможен (функция задана таблично, вычисляется экспериментально). Тогда применяются методы численного дифференцирования.

Рассмотрим задачу для таблично заданной функции. Формулы численного дифференцирования по табличным значениям называются *разностными*. Простейшие из них получаются в результате дифференцирования интерполяционных полиномов. Здесь для вывода разностных формул первой и второй производных применяются более простые соображения.

2. Разностные формулы первой производной

Пусть функция $y = f(x)$ задана таблицей и требуется вычислить её первую производную в некоторой точке таблицы x_n . Предположим, что шаг таблицы постоянный (обозначим его h), $x_{n+1} = x_n + h$, $x_{n-1} = x_n - h$ — соседние с x_n значения, $y_i = f(x_i)$, $i = n, n \pm 1$. Вычислим по этим данным приближённо $y'_n = f'(x_n)$. Применим для этого геометрический подход. Как известно, значение производной в точке равно угловому коэффициенту касательной к кривой $y = f(x)$. На рис. 1 угол наклона касательной обозначен α , поэтому $y'_n = f'(x_n) = \operatorname{tg} \alpha$. Через точки $A(x_n; y_n)$, $B(x_{n+1}; y_{n+1})$ проведём секущую и заменим приближённо $\operatorname{tg} \alpha$ её угловым коэффициентом: $y'_n = \operatorname{tg} \alpha \approx \operatorname{tg} \alpha_+$. А последний вычислим из прямоугольного треугольника ACB :

$$\operatorname{tg} \alpha_+ = \frac{BC}{AC} = \frac{y_{n+1} - y_n}{h};$$

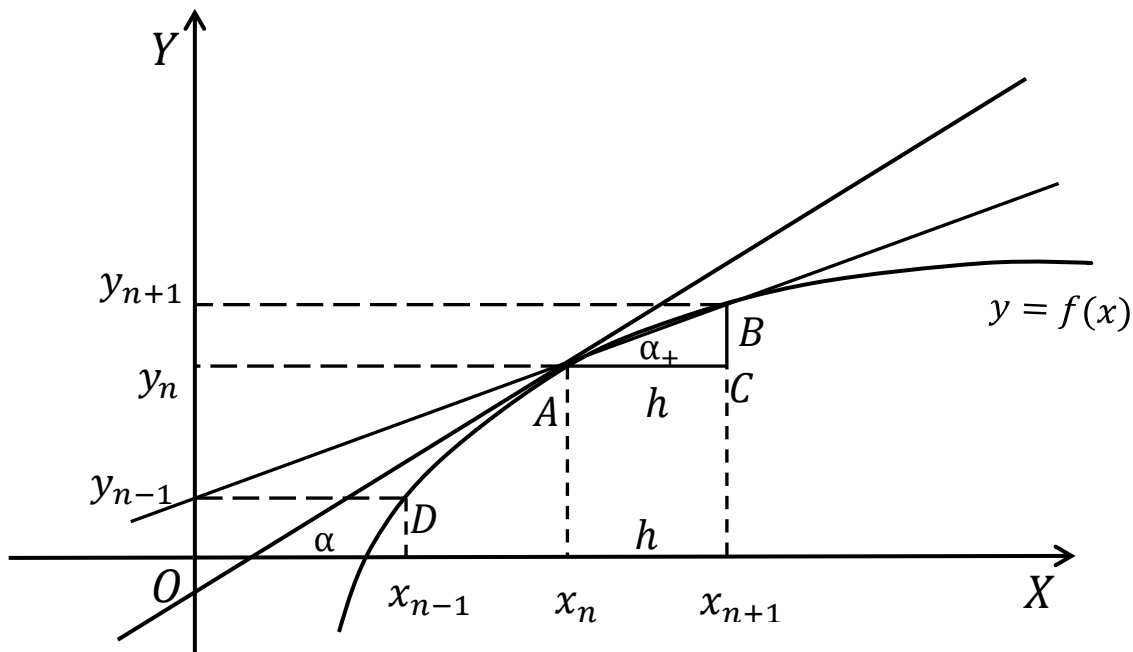


Рис. 1. Геометрический вывод правой разностной производной

отсюда получаем *формулу первой правой разностной производной*:

$$y'_n \approx (y'_n)_+ = \frac{y_{n+1} - y_n}{h}. \quad (1)$$

Аналогично, заменяя $\operatorname{tg} \alpha$ угловым коэффициентом секущей, проходящей через точки $A(x_n; y_n)$ и $D(x_{n-1}; y_{n-1})$, приходим к *формуле первой левой разностной производной*:

$$y'_n \approx (y'_n)_- = \frac{y_n - y_{n-1}}{h}. \quad (2)$$

Теперь заменим $\operatorname{tg} \alpha$ угловым коэффициентом секущей, проходящей через крайние точки $D(x_{n-1}; y_{n-1})$ и $B(x_{n+1}; y_{n+1})$ (рис. 2). Тогда получим *формулу первой центральной разностной производной*:

$$y'_n \approx (y'_n)_0 = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h}. \quad (3)$$

Важнейшим вопросом, связанным с применением разностных формул, является оценка их погрешностей. Ответ на него дают следующие теоремы.

Теорема 1.

1) Пусть функция f дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[x_n; x_{n+1}]$. Тогда

для формулы правой разностной производной справедлива оценка погрешности:

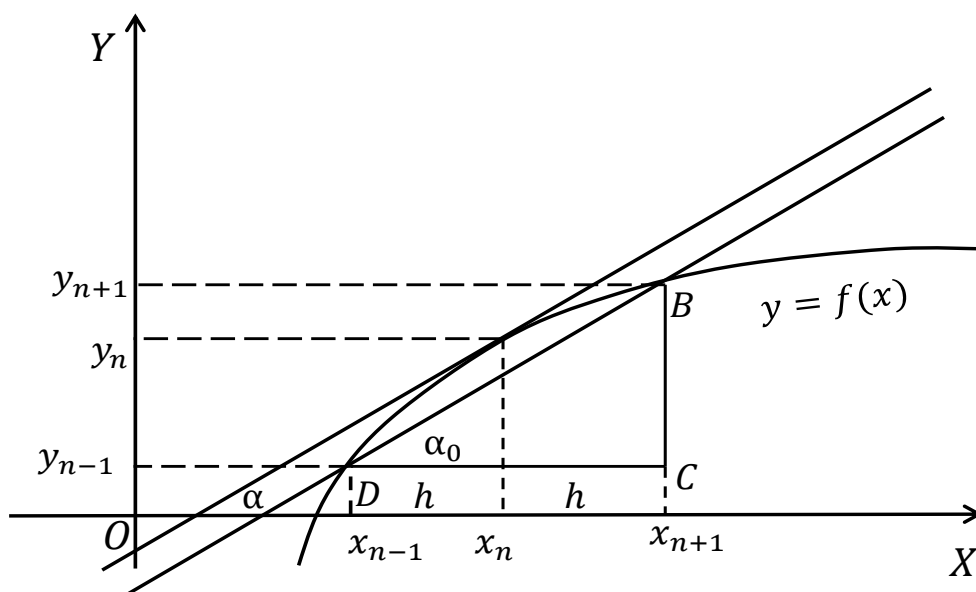


Рис. 2. Геометрический вывод центральной разностной производной

$$\Delta((y'_n)_+) = |y'_n - (y'_n)_+| \leq \bar{\Delta}((y'_n)_+) = \frac{M_2^+}{2} h,$$

где

$$M_2^+ = \max_{x \in [x_n; x_{n+1}]} |f''(x)|;$$

- 2) Пусть функция f дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[x_{n-1}; x_n]$. Тогда для формулы левой разностной производной справедлива оценка погрешности:

$$\Delta((y'_n)_-) = |y'_n - (y'_n)_-| \leq \bar{\Delta}((y'_n)_-) = \frac{M_2^-}{2} h,$$

где

$$M_2^- = \max_{x \in [x_{n-1}; x_n]} |f''(x)|.$$

Доказательство. Докажем первое утверждение, второе доказывается аналогично. Запишем для функции f разложение по формуле Тейлора в точке $x_{n+1} = x_n + h$ с остаточным членом в форме Лагранжа второго порядка:

$$y_{n+1} = f(x_n + h) = y_n + h y'_n + \frac{f''(\xi)}{2!} h^2,$$

где $\xi \in (x_n; x_n + h)$ (по условиям теоремы функция удовлетворяет требованиям формулы Тейлора). Отсюда следует

$$(y'_n)_+ = \frac{y_{n+1} - y_n}{h} = y'_n + \frac{f''(\xi)}{2!} h.$$

Теперь найдём абсолютную погрешность приближённого равенства (1):

$$\Delta((y'_n)_+) = |y'_n - (y'_n)_+| = \left| -\frac{f''(\xi)}{2} h \right| = \frac{h}{2} |f''(\xi)|. \quad (4)$$

Поскольку f'' непрерывна на $[x_n; x_{n+1}]$ и $\xi \in (x_n; x_{n+1})$, то $|f''(\xi)| \leq M_2^+$, поэтому из (4) следует доказываемая оценка. ■

Теорема 2. Пусть функция f трижды непрерывно дифференцируема на отрезке $[x_{n-1}; x_{n+1}]$. Тогда для формулы центральной разностной производной имеет место оценка погрешности:

$$\Delta((y'_n)_0) = |y'_n - (y'_n)_0| \leq \bar{\Delta}((y'_n)_0) = \frac{M_3^0}{6} h^2,$$

где

$$M_3^0 = \max_{x \in [x_{n-1}; x_{n+1}]} |f'''(x)|.$$

Доказательство. Запишем для функции f разложение по формуле Тейлора в точке $x_{n+1} = x_n + h$ с остаточным членом в форме Лагранжа третьего порядка:

$$y_{n+1} = f(x_n + h) = y_n + hy'_n + \frac{f''(x_n)}{2!} h^2 + \frac{f'''(\xi_+)}{3!} h^3,$$

где $\xi_+ \in (x_n; x_n + h)$. То же для точки $x_{n-1} = x_n - h$:

$$y_{n-1} = f(x_n - h) = y_n - hy'_n + \frac{f''(x_n)}{2!} h^2 - \frac{f'''(\xi_-)}{3!} h^3,$$

где $\xi_- \in (x_n - h; x_n)$. Вычтя из первого равенства второе, получаем

$$y_{n+1} - y_{n-1} = 2hy'_n + \frac{h^3}{6} (f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)),$$

откуда следует

$$(y'_n)_0 = \frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} = y'_n + \frac{h^2}{12} (f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)).$$

Теперь можно выписать и оценить сверху абсолютную погрешность приближённого равенства (3):

$$\begin{aligned} \Delta((y'_n)_0) &= |y'_n - (y'_n)_0| = \left| -\frac{h^2}{12} (f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)) \right| = \\ &= \frac{h^2}{12} |f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)| \leq \frac{h^2}{12} (|f'''(\xi_+)| + |f'''(\xi_-)|). \end{aligned} \quad (5)$$

Помкольку f''' непрерывна на $[x_{n-1}; x_{n+1}]$ и ξ_+ , ξ_- принадлежат этому отрезку, то $|f'''(\xi_+)| \leq M_3^0$, $|f'''(\xi_-)| \leq M_3^0$. Применяя эти оценки к (5), получаем доказываемое утверждение. ■

Из теорем следует, что для левой и правой разностных производных $\bar{\Delta}((y'_n)_\pm) = O(h)$, т.е. они имеют первый порядок точности по h , центральная разностная производная на порядок точнее, так как у неё $\bar{\Delta}((y'_n)_0) = O(h^2)$.

Можно вывести и более точные формулы для первой производной, но они используют большее число табличных значений функции. Например, формула

$$y'_n \approx \frac{y_{n-2} - 8y_{n-1} + 8y_{n+1} - y_{n+2}}{12h}$$

имеет четвёртый порядок точности по h (её предельная абсолютная погрешность равна $O(h^4)$).

3. Вторая центральная разностная производная

В качестве примера формул высших производных рассмотрим вторую центральную разностную производную. Она выводится следующим образом. Вторая производная есть производная от первой производной. Внешнюю первую производную вычислим приближённо по формуле (2) (исходные данные и обозначения те же, что в п. 2.):

$$y''_n = (y'_n)' \approx \frac{y'_n - y'_{n-1}}{h}.$$

Теперь заменим первые внутренние производные по формуле (1):

$$\begin{aligned} y'_n &\approx \frac{y_{n+1} - y_n}{h}, y'_{n-1} \approx \frac{y_n - y_{n-1}}{h} \Rightarrow y''_n \approx \frac{y'_n - y'_{n-1}}{h} \approx \\ &\approx \frac{\frac{y_{n+1} - y_n}{h} - \frac{y_n - y_{n-1}}{h}}{h} = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2}. \end{aligned}$$

Получили *формулу второй центральной разностной производной*:

$$y''_n \approx (y''_n)_0 = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2}.$$

Оценку её погрешности даёт следующая теорема.

Теорема 3. Пусть функция f четырежды непрерывно дифференцируема на отрезке $[x_{n-1}; x_{n+1}]$. Тогда для формулы второй центральной разностной производной имеет место оценка погрешности:

$$\Delta((y_n'')_0) = |y_n'' - (y_n'')_0| \leq \bar{\Delta}((y_n'')_0) = \frac{M_4}{12} h^2,$$

где

$$M_4 = \max_{x \in [x_{n-1}; x_{n+1}]} |f^{(4)}(x)|.$$

Доказательство. Выписываем для функции f разложение по формуле Тейлора в точке $x_{n+1} = x_n + h$ с остаточным членом в форме Лагранжа четвёртого порядка:

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

где $\xi_+ \in (x_n; x_n + h)$. То же для $x_{n-1} = x_n - h$:

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

где $\xi_- \in (x_n - h; x_n)$. Сложив эти равенства, получаем

$$y_{n+1} + y_{n-1} = 2y_n + y_n'' h^2 + \frac{h^4}{24} (f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)),$$

откуда выводим

$$(y_n'')_0 = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y_n'' + \frac{h^2}{24} (f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)).$$

Теперь аналогично предыдущим доказательствам получаем нужную оценку:

$$\begin{aligned} \Delta((y_n'')_0) &= |y_n'' - (y_n'')_0| = \frac{h^2}{24} |f^{(4)}(\xi_+) + f^{(4)}(\xi_-)| \leq \\ &\leq \frac{h^2}{24} (|f^{(4)}(\xi_+)| + |f^{(4)}(\xi_-)|) \leq \frac{h^2}{24} 2M_4 = \frac{h^2}{12} M_4. \end{aligned}$$

■

Из теоремы следует, что выведенная формула имеет второй порядок точности по h : $\bar{\Delta}((y_n'')_0) = O(h^2)$.

Вообще, упомянутый в п. 1 метод дифференцирования интерполяционных многочленов позволяет получать формулы любого порядка точности, но они «захватывают» большее число табличных значений. Например, у формулы

$$y_n'' \approx \frac{-y_{n+2} + 16y_{n+1} - 30y_n + 16y_{n-1} - y_{n-2}}{12h^2}$$

оценка погрешности равна $O(h^4)$, но ей требуются пять значений функции.