ЛЕКЦИИ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКЕ

Е. С. Тверская

МГТУ им. Н.Э. Баумана
Москва

Численное дифференцирование

Трудности и задачи, приводящие к применению численного дифференцирования.

1. Функция $f(x)$ задана таблицей.
2. Функцию трудно продифференцировать аналитически.
3. Численное решение дифференциальных уравнений.

Вывод разностных формул с помощью дифференцирования интерполяционного многочлена.

Рассмотрим неравномерную сетку

$$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b,$$

где $h_i = x_i - x_{i-1}$.

Формулы численного дифференцирования можно получить с использованием интерполяционного многочлена Лагранжа

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{\prod\limits_{i\neq k}(x - x_i)}{\prod\limits_{i\neq k}(x_k - x_i)} f(x_k).$$

При этом полагают, что $f'(x) \simeq L_n(x)$.

Простейшие формулы численного дифференцирования.

1. Построим интерполяционный многочлен Лагранжа по двум точкам: x_{i-1} и x_i.

$$L_1(x) = \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} f(x_i) + \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} f(x_{i-1}).$$

Воспользовавшись тем, что $f'(x_i) \simeq L_1'(x_i)$ получаем

$$f'(x_i) = \frac{f(x_i)}{x_i - x_{i-1}} + \frac{f(x_{i-1})}{x_{i-1} - x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}.$$

Если предположить, что сетка равномерная, т. е. $h = h_i = x_i - x_{i-1}$, то

$$f'(x_i) \simeq \frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}. \tag{1}$$

Аналогично, можно получить

$$f'(x_i) \simeq \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}. \tag{2}$$

Приближенные равенства (1) и (2) называются **левой и правой разностными производными** соответственно.

Найдем порядок погрешности аппроксимации полученных разностных производных. Для этого рассмотрим выражение (2).

С использованием разложения по формуле Тейлора получим:

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(\xi_+)}{2!}h^2, \quad \xi_+ \in (x_i, x_{i+1}).$$

Тогда

$$\begin{aligned} r_1 =& f'(x_i) - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} = \\ &= f'(x_i) - \frac{1}{h}\left(f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(\xi_+)}{2!}h^2 - f(x_i)\right) = -\frac{f''(\xi_+)}{2!}h = \mathrm{O}(h). \end{aligned}$$

Следовательно, если $M_2 = \max\limits_{x\in[x_i, x_{i+1}]} |f''(x)|$, то

$$|r_1| \leqslant \frac{1}{2}M_2 h.$$

Аналогичные рассуждения можно провести и для первого приближенного равенства.Таким образом, приближенные равенства аппроксимируют $f'(x)$ с первым порядком.

2. Построим интерполяционный многочлен Лагранжа по трем точкам: x_{i-1}, x_i и x_{i+1}.

$$L_2(x) = \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f(x_{i-1}) + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f(x_i) + \\ + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} f(x_{i+1}).$$

Тогда

$$L_2'(x) = \frac{(2x-x_i-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f(x_{i-1}) + \frac{(2x-x_{i-1}-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f(x_i) + \\ + \frac{(2x-x_{i-1}-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} f(x_{i+1}).$$

Воспользовавшись тем, что $f'(x_i) \simeq L_2'(x_i)$ и предположив, что сетка равномерная, т. е. $h = h_i = x_i - x_{i-1}$, получаем

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}. \qquad (3)$$

Приближенные равенства (3) называют **центральной разностной производной**.

Найдем порядок погрешности аппроксимации полученной разностной производной. Представим $f(x)$ первыми 3-мя членами разложения и остаточным членом в форме Лагранжа

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_+)}{3!}h^3, \quad \xi_+ \in (x_i, x_{i+1}),$$
$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \frac{f'''(\xi_-)}{3!}h^3, \quad \xi_- \in (x_{i-1}, x_i).$$

Тогда

$$r_2 = f'(x_i) - \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} =$$
$$= f'(x_i) - \frac{1}{2h}\left(f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_+)}{3!}h^3 - \right.$$
$$\left. - f(x_i) + f'(x_i)h - \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(\xi_-)}{3!}h^3\right) = -\frac{f'''(\xi_-) + f'''(\xi_+)}{12}h^2 = \mathrm{O}(h^2).$$

Следовательно, если $M_3 = \max\limits_{x\in[x_{i+1}, x_{i-1}]} |f'''(x)|$, то

$$|r_2| \leqslant \frac{1}{6}M_3h^2.$$

Таким образом, приближенное равенство (3) аппроксимирует $f'(x)$ со вторым порядком.

3. Получим разностную формулу для $f'(x_{i-1}) \simeq L_2'(x_{i-1})$ и вычислим ее порядок аппроксимациии. Тогда

$$f'(x_{i-1}) \simeq L_2'(x_{i-1}) = \frac{(2x_{i-1} - x_i - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} f(x_{i-1}) +$$
$$+ \frac{(2x_{i-1} - x_{i-1} - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} f(x_i) + \frac{(2x_{i-1} - x_{i-1} - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} f(x_{i+1}) =$$
$$= \frac{-3f(x_{i-1}) + 4f(x_i) - f(x_{i+1})}{2h}.$$

Аналогично

$$f'(x_{i+1}) \simeq L_2'(x_{i+1}) = \frac{f(x_{i-1}) - 4f(x_i) + 3f(x_{i+1})}{2h}.$$

Выясним порядок аппроксимации второй из этих формул (для первой порядок аппроксимации можно найти аналогично).

Представим $f(x)$ первыми 3-мя членами разложения и остаточным членом в форму Лагранжа

$$f(x_i) = f(x_{i+1}) - f'(x_{i+1})h + \frac{f''(x_{i+1})}{2!}h^2 - \frac{f'''(\xi_1)}{3!}h^3, \quad \xi_1 \in (x_i, x_{i+1}),$$
$$f(x_{i-1}) = f(x_{i+1}) - 2hf'(x_{i+1}) + 2h^2 f''(x_{i+1}) - \frac{f'''(\xi_2)}{3!}8h^3, \quad \xi_2 \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

Тогда

$$r_2 = f'(x_{i+1}) - \frac{f(x_{i-1}) - 4f(x_i) + 3f(x_{i+1})}{2h} =$$
$$= f'(x_{i+1}) - \frac{1}{2h}\left(f(x_{i+1}) - 2hf'(x_{i+1}) + 2h^2 f''(x_{i+1}) - \frac{f'''(\xi_2)}{3!}8h^3 - \right.$$
$$\left. -4f(x_{i+1}) + 4f'(x_{i+1})h - 2h^2 f''(x_{i+1}) + 4\frac{f'''(\xi_1)}{3!}h^3 + 3f(x_{i+1}) \right) =$$
$$= \frac{2f'''(\xi_2) - f'''(\xi_1)}{3}h^2 = \mathrm{O}(h^2).$$

Таким образом, данные приближенные равенства имеют второй порядок аппроксимации.

4. Вычислим вторую производную с использование многочлена Лагранжа второго порядка.

Предполагая, что сетка равномерная и $f''(x_i) \simeq L_2''(x_i)$ получаем:

$$L_2'(x) = \frac{2}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} f(x_{i-1}) + \frac{2}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} f(x_i) +$$
$$+ \frac{2}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} f(x_{i+1}) = \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2}.$$

Выясним погрешность аппроксимациии. Представим $f(x)$ первыми 4-мя членами разложения и остаточным членом в форму Лагранжа

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_+)}{4!}h^4,$$
$$\xi_+ \in (x_i, x_{i+1}),$$
$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4,$$
$$\xi_- \in (x_{i-1}, x_i).$$

Тогда

$$r_3(f) = f''(x_i) - \frac{f(x_{i-1}) - 2f(x_i) + f(x_{i+1})}{h^2} =$$

$$= f''(x_i) - \frac{1}{h^2}\left(f(x_i) - f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 - \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_-)}{4!}h^4 - \right.$$

$$\left. -2f(x_i) + f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{f''(x_i)}{2!}h^2 + \frac{f'''(x_i)}{3!}h^3 + \frac{f^{(4)}(\xi_+)}{4!}h^4 \right) =$$

$$= -\frac{f^{(4)}(\xi_-) + f^{(4)}(\xi_+)}{24}h^2 = \mathrm{O}(h^2).$$

Следовательно,

$$|r_3(f)| \leqslant \frac{1}{12}M_4 h^2, \quad M_4 = \max_{x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]} \left| f^{(4)}(x) \right|.$$

Таким образом, данное приближенное равенство имеют второй порядок аппроксимации.

5. Попробуем получить формулы для производных 1-го и 2-го порядков, аппроксимирующих $f'(x)$ и $f''(x)$ с более высоким порядком точности. Для этого увеличим степень интерполяционного многочлена.

Выпишем многочлен Лагранжа по 5-ти точкам: x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1} и x_{i+2}. Для более компактной записи переобозначим:

$$\begin{gathered}
f(x_{i-2}) = f_{i-2}, \quad f(x_{i-1}) = f_{i-1}, \\
f(x_i) = f_i, \quad f(x_{i+1}) = f_{i+1}, \quad f(x_{i+2}) = f_{i+2}.
\end{gathered}$$

$$\begin{aligned}
L_4(x) = &\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})(x-x_{i+2})}{(x_{i-2}-x_{i-1})(x_{i-2}-x_i)(x_{i-2}-x_{i+1})(x_{i-2}-x_{i+2})} f_{i-2} + \\
&+ \frac{(x-x_{i-2})(x-x_i)(x-x_{i+1})(x-x_{i+2})}{(x_{i-1}-x_{i-2})(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})(x_{i-1}-x_{i+2})} f_{i-1} + \\
&+ \frac{(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})(x-x_{i+2})}{(x_i-x_{i-2})(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})(x_i-x_{i+2})} f_i + \\
&+ \frac{(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+2})}{(x_{i+1}-x_{i-2})(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)(x_{i+1}-x_{i+2})} f_{i+1} + \\
&+ \frac{(x-x_{i-2})(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i+2}-x_{i-2})(x_{i+2}-x_{i-1})(x_{i+2}-x_i)(x_{i+2}-x_{i+1})} f_{i+2}.
\end{aligned}$$

Пусть шаг сетки постоянный, тогда можно получить следующую приближенную формулу для производной:

$$f'(x_i) \simeq L_4'(x_i) = \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12h}.$$

Определим точность аппроксимации первой производной с помощью данной формулы. Для этого, с помощью формулы Тейлора, представим функцию $f(x)$ первыми 5-ю членами разложения с остаточным членом в форме Лагранжа:

$$f(x_{i-2}) = f(x_i) - 2hf'(x_i) + 2h^2 f''(x_i) - \frac{4}{3}h^3 f'''(x_i) + \frac{2}{3}h^4 f^{IV}(x_i) - \\ - \frac{4}{15}h^5 f^V(\xi_-^2), \quad \xi_-^2 \in (x_{i-2}, x_i),$$

$$f(x_{i-1}) = f(x_i) - hf'(x_i) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_i) - \frac{1}{3!}h^3 f'''(x_i) + \frac{1}{4!}h^4 f^{IV}(x_i) - \\ - \frac{1}{5!}h^5 f^V(\xi_-^1), \quad \xi_-^1 \in (x_{i-1}, x_i),$$

$$f(x_{i+1}) = f(x_i) + hf'(x_i) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_i) + \frac{1}{3!}h^3 f'''(x_i) + \frac{1}{4!}h^4 f^{IV}(x_i) + \\ + \frac{1}{5!}h^5 f^V(\xi^1_+), \quad \xi^1_- \in (x_i, x_{i+1}),$$

$$f(x_{i+2}) = f(x_i) + 2hf'(x_i) + 2h^2 f''(x_i) + \frac{4}{3}h^3 f'''(x_i) + \frac{2}{3}h^4 f^{IV}(x_i) + \\ + \frac{4}{15}h^5 f^V(\xi^2_+), \quad \xi^2_+ \in (x_i, x_{i+2}).$$

Тогда

$$r_4 = f'(x_i) - \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12h} = \\ = -\frac{8h^4}{5!\,12}\left(-4f^V(\xi^2_-) + f^V(\xi^1_-) + f^V(\xi^1_+) - 4f^V(\xi^2_+)\right) = \mathrm{O}(h^4).$$

Следовательно,

$$|r_4| \leqslant \frac{1}{18} M_5 h^4, \quad \text{где} \quad M_5 = \max_{[x_{i-2}, x_{i+2}]} \left|f^V(x)\right|.$$

Аналогично можно получить и формулу для вычисления $f''(x_i)$:

$$f''(x_i) \simeq L''_4(x_i) = -\frac{f_{i-2} - 16f_{i-1} + 30f_i - 16f_{i+1} + f_{i+2}}{12h^2}.$$