Численные методы

«ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ»

ЧИГИРЕВА О.Ю.

Постановка задачи численного дифференцирования

Пусть известны значения функции $f(x)$ в узлах сетки x_j $j = \overline{0, n}$. Требуется вычислить значение производной в узле x_*: $f^{(k)}(x_*)$.

Способы построения формул численного дифференцирования

- дифференцирование интерполяционного многочлена [3]:

$$f^{(k)}(x_*) \approx L_n^{(k)}(x_*), \text{где } L_n(x) - \text{интерполяционный многочлен Лагранжа};$$

- метод неопределенных коэффициентов [1]:

$$f^{(k)}(x_*) \approx \sum_{j=0}^{n} \alpha_j f(x_j),$$

где коэффициенты α_j определяются из условия: формула дифференцирования должна быть точна для многочленов максимально высокой степени.

Построения формул численного дифференцирования: дифференцирование интерполяционного многочлена

Запишем интерполяционный многочлен Лагранжа (по трем узлам x_0, x_1 и x_2):

$$L_2(x) = f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

и найдем производную

$$L_2'(x) = f(x_0)\frac{(x-x_2)+(x-x_1)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_2)+(x-x_0)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2)\frac{(x-x_1)+(x-x_0)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.$$

Тогда формула для приближенного вычисления производной функции $f(x)$ в любой точке $x \in (x_0, x_2)$ примет вид

$$f'(x) \approx L_2'(x) = f(x_0)\frac{(x-x_2)+(x-x_1)}{h_1(h_1+h_2)} - f(x_1)\frac{(x-x_2)+(x-x_0)}{h_1 h_2} + f(x_2)\frac{(x-x_1)+(x-x_0)}{(h_1+h_2)h_2},$$

где $h_1 = x_1 - x_0, \quad h_2 = x_2 - x_1.$

Вычисление первой производной:
центральная разностная производная, правая и левая разностные производные.

Если узлы сетки равноудалены $(h_1 = h_2 = h)$, то приходим к следующей формуле для вычисления производной в «центральном» узле $x = x_1$:

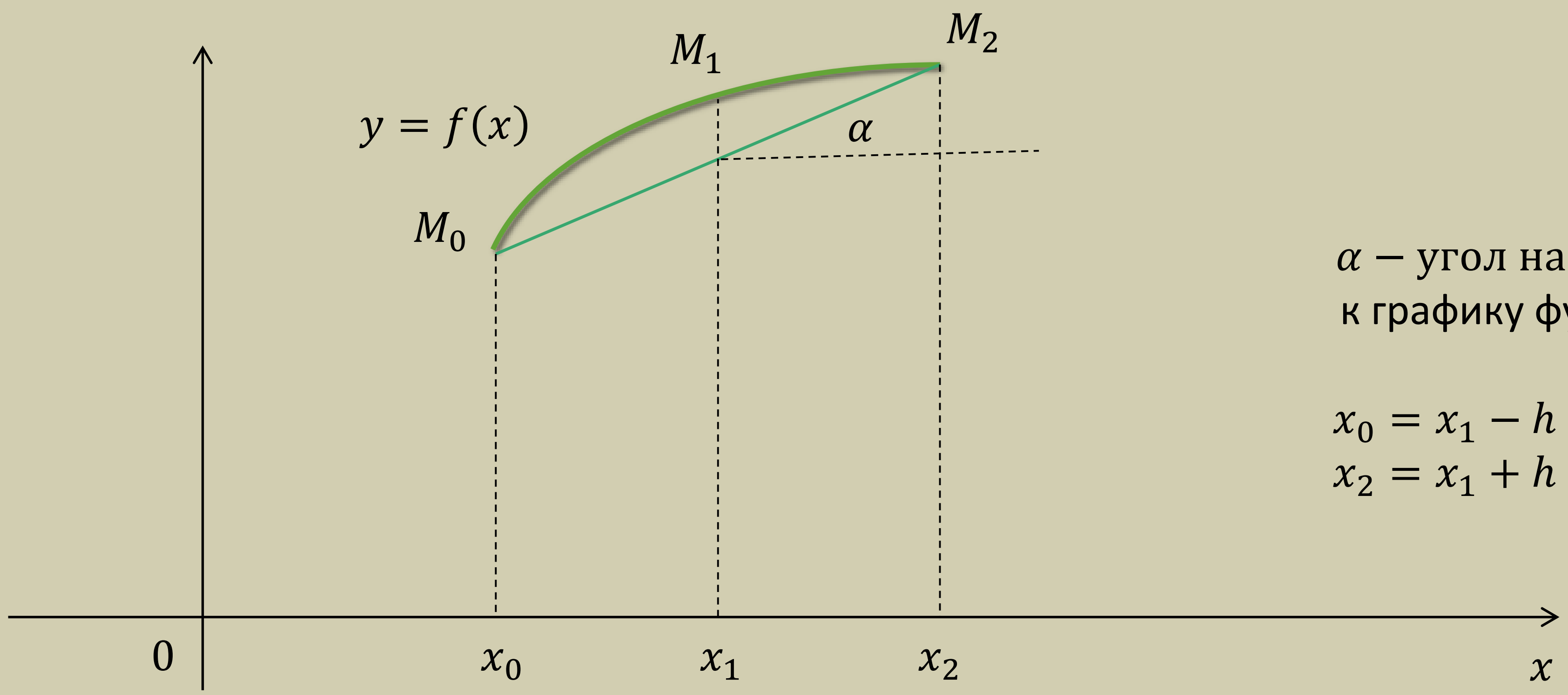
$$f'(x_1) \approx L_2'\,(x_1) = f(x_0)\frac{(x_1 - x_2) + 0}{2h^2} - f(x_1)\frac{(x_1 - x_2) + (x_1 - x_0)}{h^2} + f(x_2)\frac{0 + (x_1 - x_0)}{2h^2} =$$

$$= f(x_0)\frac{(-h)}{2h^2} - f(x_1)\frac{(-h) + h}{h^2} + f(x_2)\frac{h}{2h^2} = \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h}.$$

Таким образом,

$$f'(x_1) \approx \frac{f(x_1 + h) - f(x_1 - h)}{2h}.$$

Величину, стоящую в правой части полученной формулы, называют ***центральной разностной производной***.



α – угол наклона секущей M_0M_2 к графику функции $y = f(x)$

$x_0 = x_1 - h$
$x_2 = x_1 + h$

Геометрический смысл центральной разностной производной: $f'(x_1)$

Вычисление первой производной:
центральная разностная производная,
правая и левая разностные производные.

Покажем, что ***центральная разностная производная аппроксимирует производную $f'(x)$ со вторым порядком точности относительно h*** [1-3].

Оценим погрешность:

$$R(x,h) = f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Применим формулу Тейлора:

$$f(x \pm h) = f(x) \pm \frac{h}{1!} f'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) \pm \frac{h^3}{3!} f'''(\xi_\pm), \qquad x < \xi_+ < x + h, x - h < \xi_- < x.$$

В результате получим

$$R(x,h) = f'(x) - \frac{1}{2h}\left\{2\frac{h}{1!}f'(x) + \frac{h^3}{3!}[f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)]\right\} = -\frac{h^2}{2\cdot 3!}\{f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)\}$$

$$\Rightarrow \quad |R(x,h)| \le \frac{M_3}{6}h^2, \qquad M_3 = \max_{[x-h,x+h]}|f'''(\xi)|.$$

Вычисление первой производной:
центральная разностная производная,
правая и левая разностные производные.

Запишем интерполяционный многочлен Лагранжа (по двум узлам x_1 и x_2) и найдем производную

$$L_1(x) = f(x_1)\frac{(x - x_2)}{(x_1 - x_2)} + f(x_2)\frac{(x - x_1)}{(x_2 - x_1)} \qquad \Rightarrow \quad L_1'(x) = f(x_1)\frac{1}{(x_1 - x_2)} + f(x_2)\frac{1}{(x_2 - x_1)}.$$

Тогда формула для приближенного вычисления производной функции $f(x)$ примет вид

$$f'(x) \approx L_1'(x) = -f(x_1)\frac{1}{h} + f(x_2)\frac{1}{h} = \frac{f(x_2) - f(x_1)}{h}, \qquad \text{где} \quad h = x_2 - x_1.$$

В результате получены формулы для односторонних разностных производных:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \text{и} \quad f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}.$$

Разностные отношения, стоящие в правый частях записанных выше формул, называют ***правой и левой разностными производными***. Данные формулы имеют ***первый порядок точности*** относительно h [2].

Вычисление второй производной:
вторая разностная производная

Запишем интерполяционный многочлен Лагранжа (по трем узлам x_0, x_1 и x_2):

$$L_2(x) = f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

и вычислим вторую производную

$$L_2''(x) = f(x_0)\frac{2}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{2}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f(x_2)\frac{2}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$\Rightarrow \quad f''(x) \approx L_2''(x) = f(x_0)\frac{2}{h_1(h_1+h_2)} - f(x_1)\frac{2}{h_1 h_2} + f(x_2)\frac{2}{(h_1+h_2)h_2}, \text{где} \quad h_1 = x_1 - x_0, \quad h_2 = x_2 - x_1.$$

Если узлы сетки равноудалены $(h_1 = h_2 = h)$, то приходим к следующей формуле для вычисления второй производной в «центральном» узле $x = x_1$:

$$f''(x_1) \approx L_2''(x_1) = \frac{f(x_1-h) - 2f(x_1) + f(x_1+h)}{h^2}.$$

Данная формула имеет ***второй порядок точности*** относительно h [1-3].

Повышение порядка точности формул численного дифференцирования

Приведем формулы, имеющие 4-й порядок точности [2]:

$$f'(x) \approx \frac{f(x-2h) - 8f(x-h) + 8f(x+h) - f(x+2h)}{12h},$$

$$f''(x) \approx \frac{-f(x-2h) + 16f(x-h) - 30f(x) + 16f(x+h) - f(x+2h)}{12h^2}.$$

Таким образом, с ростом порядка точности увеличивается число узлов.

Правило Рунге. Пусть функция $f(x)$ задана таблицей значений с шагом h. Для вычисления значения производной в узле x_* дважды применим формулу дифференцирования (центральная разностная производная), проведя вычисления с шагом h и $2h$:

$$f'_h(x_*) \approx \frac{f(x_* + h) - f(x_* - h)}{2h}, \qquad f'_{2h}(x_*) \approx \frac{f(x_* + 2h) - f(x_* - 2h)}{4h},$$

а затем «уточним» полученное значение по формуле Рунге [4]:

$$f'(x_*) \approx f'_h(x_*) + \frac{f'_h(x_*) - f'_{2h}(x_*)}{2^p - 1}, \qquad \text{где } p = 2 - \text{порядок точности формулы дифференцирования.}$$

Список используемой литературы

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Бином. Лаборатория знаний, 2019.

2. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы для инженеров. М.: Высшая школа, 1994.

3. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. М.: Наука, 1989.

4. Калиткин Н.Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.