

#### 4. Численное дифференцирование.

При решении практических задач часто возникает необходимость найти производные нужного порядка от табличной функции  $f(x_i)$  или от какой-либо сложной трудновычисляемой аналитической функции (в этом случае, её удобно представить в виде табличной функции)

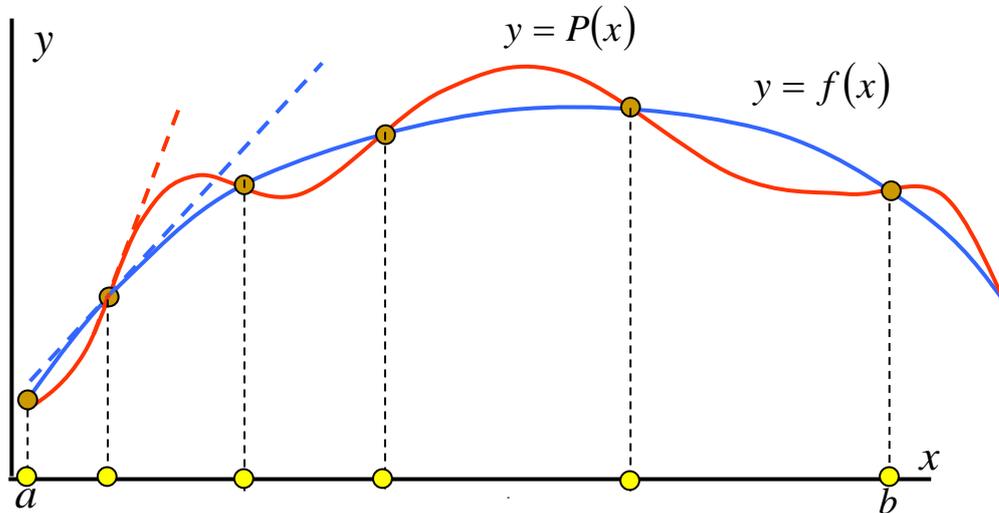


Рис.4.1. Графики функции  $f(x)$  и интерполирующего полинома  $P(x)$ .

Пунктирные линии – производные  $f'(x_i)$  и  $P'(x)$  в одном из узлов.

Как видно из рисунка первые производные функции  $f'(x_i)$  и полинома  $P'(x)$  (графическое представление – касательные к соответствующим кривым) имеют разные числовые значения. Даже близость узлов не гарантирует совпадения значений.

Для численного определения значений производных можно использовать представление их через конечные разности

$$y' \approx \Delta y / \Delta x \quad (4.1)$$

Это представление является *аппроксимацией производной с помощью конечных разностей*.

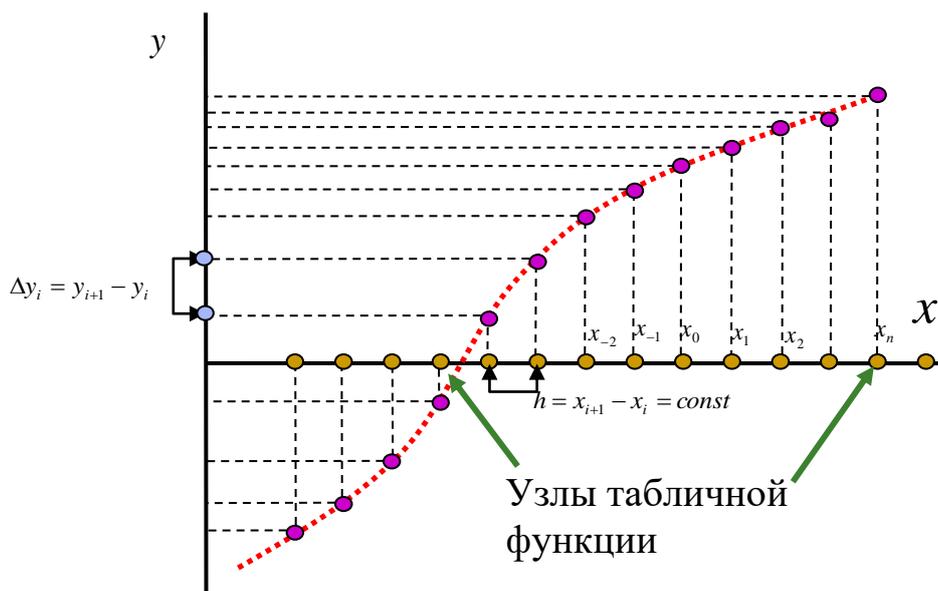


Рис.4.2. Графическое представление табличной функции.

Для табличной функции возможны представления производной с помощью левых разностей, правых разностей и центральных разностей.

Рассмотрим табличную функцию  $f(x_i)$ , определённую на сетке с постоянным шагом  $\Delta x = h$  (Рис.4.2), первая конечная разность  $\Delta y_i = y_i - y_{i-1}$ . Определим первую производную как

$$y'_i = \frac{(y_i - y_{i-1})}{h} \quad (4.2)$$

Таким образом, производную в точке  $x_i$  выразили через разность значений функции в этой точке  $y_i$  и в точке слева от нее  $y_{i-1}$ , т. е. через левые разности. Аналогично можно поступить, выразив производную с помощью правых разностей

$$y'_i = \frac{(y_{i+1} - y_i)}{h} \quad (4.3)$$

или с помощью центральных разностей

$$y'_i = \frac{(y_{i+1} - y_{i-1})}{2h} \quad (4.4)$$

По такому же принципу можно определить производные более высокого порядка:

$$y''_i = \frac{(y'_{i+1} - y'_{i-1})}{h} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \quad (4.5)$$

### Погрешность численного дифференцирования.

Аппроксимируем функцию  $f(x)$  некоторой функцией  $\varphi(x)$ , тогда

$$f(x) = \varphi(x) + R(x) \quad (4.6)$$

где  $\varphi(x)$  - частичная сумма ряда или интерполирующая функция.

Погрешность аппроксимации  $R(x)$  определяется остаточным членом ряда или интерполяционной формулы. Дифференцируя (4.6) можно найти значения производных нужного порядка

$$\begin{aligned} f'(x) &= \varphi'(x) + R'(x) \\ f''(x) &= \varphi''(x) + R''(x) \end{aligned} \quad (4.7)$$

.....

В качестве приближённого значения производной функции  $f(x_i)$  можно принять значение соответствующей производной функции  $\varphi(x)$ , т.е.  $f^{(k)}(x) \approx \varphi^{(k)}(x)$ .

Тогда

$$R^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - \varphi^{(k)}(x) \quad (4.8)$$

является погрешностью аппроксимации производной, т.е. характеризует величину отклонения приближённого значения производной от её истинного значения.

Для табличной функции с шагом таблицы  $h$  эта погрешность записывается как

$$R^{(k)} = O(h^{(r)}) \quad (4.9)$$

Показатель степени  $r$  называется *порядком погрешности*. (Полагается, что  $|h| < 1$ ).

Оценим погрешность с помощью ряда Тейлора

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2!} f''(x)(\Delta x)^2 + \frac{1}{3!} f'''(x)(\Delta x)^3 + \dots \quad (4.10)$$

Пусть функция  $f(x)$  записана в виде таблицы

$$f(x_i) = y_i \quad (i = 1, 2, 3, \dots, n)$$

При  $x = x_1$ ,  $\Delta x = -h$  ряд Тейлора с точностью до членов порядка  $h^2$  запишется как

$$f(x + \Delta x) = f(x_1 - h) = y_0$$

$$y_0 = y_1 - y_1' h + O(h^2) \quad (4.11)$$

Отсюда производная в точке  $x = x_1$  определяется как

$$y_1' = \frac{y_1 - y_0}{h} + O(h) \quad (4.12)$$

Это выражение совпадает с ранее полученным выражением аппроксимации первой левосторонней производной первого порядка ( $r = 1$ ). Также можно получить выражение для правосторонней производной.

Рассмотрим выражения для первой и второй производных второго порядка погрешности.

$$y_2 = y_1 + y_1' h + \frac{1}{2!} y_1'' h^2 + \frac{1}{3!} y_1''' h^3 + O(h^4)$$

$$y_0 = y_1 - y_1' h + \frac{1}{2!} y_1'' h^2 - \frac{1}{3!} y_1''' h^3 + O(h^4) \quad (4.13)$$

Вычитая из первого уравнения второе, получим

$$y_1' = \frac{y_2 - y_0}{2h} + O(h^2) \quad (4.14)$$

что совпадает с аппроксимацией центральными разностями. Погрешность имеет второй порядок.

Складывая уравнения, оценим погрешность аппроксимации производной второго порядка

$$y_1'' = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{h^2} + O(h^2) \quad (4.15)$$

Данное выражение также совпадает с аппроксимацией центральными разностями.

Для численного определения производных можно использовать различные интерполяционные полиномы с различным количеством членов. На практике более удобным оказывается использование полиномов Лагранжа, т.к. в них в явном виде присутствуют значения табличной функции в узлах. В зависимости от количества используемых узлов получаем выражения для производных функции  $f(x)$  с различной погрешностью вычислений.

Рассмотренный источник погрешностей – погрешность аппроксимации, которая определяется величиной остаточного члена. При уменьшении шага таблиц  $h$  эта погрешность, как правило, уменьшается.

Другие погрешности – неточность значений функции  $y = f(x)$  в узлах и погрешность округления вычислений. Эти погрешности возрастают при уменьшении шага  $h$ .

Рассмотрим, например, выражения (4.2) и (4.3). При сохранении абсолютной погрешности значений функции  $d$  погрешность вычисления значений производных составит  $2d/h$  (погрешности суммы или разности складываются), следовательно, уменьшение  $h$  приводит к увеличению относительной погрешности вычислений.

Чтобы избежать роста погрешности, нужно регуляризовать процедуру вычисления производных за счёт выбора шага  $h$ , который должен удовлетворять условию

$$|f(x+h) - f(x)| > \varepsilon \quad (4.16)$$

где  $\varepsilon$  - некоторое малое число.

Выполнение этого условия исключает при вычислении производной вычитания близких по величине чисел, что может привести к возрастанию погрешности. Кроме того, полученный результат вычитания при делении на малое число  $h$  также увеличивает погрешность.

Полином Лагранжа имеет вид (2.25)

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)(x_i-x_2)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}$$

Рассмотрим случай трёх узлов интерполирования ( $n = 2$ ).

$$\begin{aligned} L(x) &= \frac{1}{2h^2} \left[ (x-x_1)(x-x_2)y_0 - 2(x-x_0)(x-x_2)y_1 + (x-x_0)(x-x_1)y_2 \right] \\ R_L(x) &= \frac{y'''(x_*)}{3!} (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2) \\ L'(x) &= \frac{1}{2h^2} \left[ (2x-x_1-x_2)y_0 - 2(2x-x_0-x_2)y_1 + (2x-x_0-x_1)y_2 \right] \\ R'_L(x) &= \frac{y'''(x_*)}{3!} \cdot [(x-x_1)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_2) + (x-x_0)(x-x_1)] \end{aligned} \quad (4.17)$$

где  $y'''(x_*)$  - значение производной третьего порядка в некоторой внутренней точке

$$x_* \in [x_0, x_n]$$

Запишем значения производных в точках  $x_0, x_1, x_2$

$$\begin{aligned} y'_0 &= \frac{1}{2h} (-3y_0 + 4y_1 - y_2) + \frac{h^2}{3} y'''(x_*) \\ y'_1 &= \frac{1}{2h} (y_2 - y_0) - \frac{h^2}{6} y'''(x_*) \\ y'_2 &= \frac{1}{2h} (y_0 - 4y_1 + 3y_2) + \frac{h^2}{3} y'''(x_*) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Подобным образом можно вычислить производные для любого количества узлов аппроксимации. При четных значениях  $n$  наиболее простые выражения получаются для центральных точек. Вариант с чётным значением  $n$  - *аппроксимация с помощью центральных разностей*. Он более удобен и при вычислении вторых производных.