1. Численное дифференцирование

Численное дифференцирование применяется тогда, когда функцию трудно или невозможно продифференцировать аналитически. Например, необходимость в численном дифференцировании возникает в том случае, когда функция задана не формулой, а таблицей или алгоритмом вычисления в произвольной точке.

Кроме того, формулы численного дифференцирования широко используются при разработке вычислительных методов решения многих задач, например, при решении дифференциальных уравнений, поиске решений систем нелинейных уравнений, поиске точек экстремума функций и т.д. Основной подход при построении формул численного дифференцирования — это аппроксимация функции. Предположим, что в окрестности точки x функция $f(x)$ аппроксимируется некоторой другой функцией $f_n(x)$, причем k-тая производная $f_n^{(k)}(x)$ легко вычисляется. Естественно в этом случае воспользоваться приближенной формулой

$$f^{(k)}(x) \approx f_n^{(k)}(x). \tag{1}$$

Приближение $f_n(x)$ может быть построено любым рассмотренным нами ранее методом. Например, в виде интерполяционного полинома или сплайна. Далее мы реализуем этот подход в случае, когда аппроксимация функции осуществляется с помощью лагранжевой интерполяции.

1.1 Простейшие формулы вычисления $f'(x)$ и $f''(x)$

Пусть задана скалярная функция $f(x)$ и мы хотим приближенно вычислить $f'(x)$, используя при этом лишь значения функции $f(x)$ в двух точках. По определению

$$f'(x) = \lim_{h\to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Следовательно, разностное отношение,

$$f_x(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \tag{2}$$

которое принято называть разностью вперед функции f в точке x (или просто *разностью вперед*) при малом h позволяет приближенно вычислить $f'(x)$. Сказанное остается справедливым и для разностного отношения (*разности назад*)

$$f_{\bar{x}}(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h}\,. \tag{3}$$

Эти отношения являются простейшими формулами численного дифференцирования. Пользуясь разложениями Тейлора

$$f(x \pm h) = f(x) \pm h\, f'(x) + h^2/2 f''(\xi_\pm(x)) \tag{4}$$

где $\xi_\pm(x) \in [a, b]$, получаем следующие представления для погрешности этих формул:

$$f'(x) - f_x(x) = -\frac{h}{2}\, f''(\xi_+(x)), \tag{5}$$

$$f'(x) - f_{\bar{x}}(x) = \frac{h}{2}\, f''(\xi_-(x)). \tag{6}$$

Введем обозначение

$$M_k = \max_{x\in[a,b]} |f^{(k)}(x)|. \tag{7}$$

Тогда из (11) и (6) получаются следующие оценки погрешностей:

$$|f'(x) - f_x(x)| \le \frac{M_2 h}{2}, \quad |f'(x) - f_{\bar{x}}(x)| \le \frac{M_2 h}{2}. \tag{8}$$

Следовательно, погрешности обеих формул имеют порядок малости $O(h)$, если $f(x)$ дважды дифференцируема на $[a, b]$.

Рассмотрим полусумму

$$f_{\overset{\circ}{x}}(x) = \frac{f_x(x) + f_{\bar{x}}(x)}{2} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \tag{9}$$

называемую *центральной разностью*. Используя разложения

$$f(x \pm h) = f(x) \pm h\, f'(x) + \frac{h^2}{2}\, f''(x) \pm \frac{h^3}{3!}\, f'''(\xi_\pm(x)) \tag{10}$$

получим представление ее погрешности:

$$f'(x) - f_{\overset{\circ}{x}}(x) = \frac{h^2}{6}\, f'''(\xi(x)), \tag{11}$$

поскольку по теореме о среднем для сумм найдется $\xi(x)$ между $\xi_\pm(x)$ такая, что

$$\frac{f'''(\xi_+(x)) + f'''(\xi_-(x))}{2} = f'''(\xi(x)). \tag{12}$$

Таким образом, при одном и том же h центральная разность на порядок по h точнее, чем разности вперед и назад. Отметим, что ее нельзя использовать при вычислении производной в точке $x = a$ или $x = b$.

Повторно примененяя разделенные разности, получим формулы вычисления второй и более высокой производной. Возможны комбинации

$$f_{xx}(x) = (f_x)_x(x), \quad f_{x\bar{x}}(x) = (f_x)_{\bar{x}}(x), \ldots \tag{13}$$

Рссмотрим симметричную формулу

$$f_{x\bar{x}}(x) = \frac{f_x(x) - f_x(x-h)}{h} = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}. \tag{14}$$

Удерживая в разложения Тейлора $f(x \pm h)$ величины до порядка h^4, аналогично предыдущему получим (проведите выкладки!)

$$f''(x) - f_{x\bar{x}}(x) = -\frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi(x)). \tag{15}$$

Все рассмотренные выше формулы применимы для функций, заданных либо формулой, либо алгоритмом вычисления в произвольной точке, либо таблично.

1.2 Некорректность операции численного дифференцирования.

Как правило, значения функции известны не точно, а с какой-то погрешностью. Например, если трансцендентные функции вычисляются с помощью рядов, то ряды заменяются конечными суммами. Другими источниками погрешностей являются погрешности округления при вычислении функции или порешность алгоритма его вычисления.

Оказывается, что погрешность, возникающая при вычислении разностных отношений, намного превосходит погрешность в задании значений функции и даже может неограниченно возрастать при стремлении шага h к нулю. Поэтому операцию вычисления разностных отношений называют *некорректной*. Поясним причину некорректности на примере вычисления разностного отношения $f_x(x)$.

Разностное отношение $f_x(x)$ хорошо приближает $f'(x)$ только в том случае, когда шаг h достаточно мал. Требование малости величины h, находящейся в знаменателе разностного отношения, как раз и является причиной некорректности операции численного дифференцирования. Действительно, пусть вместо точного значения $f_x(x)$ нам известны приближенные значения $\widetilde{f}(x) = f(x) + \epsilon(x)$, причем известно, что $|\epsilon(x)| \le \varepsilon$ для любого $x \in [a, b]$. Тогда вместо $f_x(x)$, будет вычислена величина

$$\widetilde{f}_x(x) = f_x(x) + \epsilon_x(x) \tag{16}$$

Следовательно, погрешность в вычислении первой разностной производной окажется равной $\epsilon_x(x)$. Имеем

$$|\epsilon_x(x)| = \left|\frac{\epsilon(x+h) - \epsilon(x)}{h}\right| \le \frac{2\varepsilon}{h}, \tag{17}$$

причем эта оценка достигается при $\epsilon(x+h) = -\epsilon(x) = \varepsilon$. Как видим, погрешность в вычислении первой разностной производной неограниченно возрастает с уменьшением h.

Окончательно получим следующую оценку вычисления первой производной при наличии погрешностей (с использованием оценки (8)):

$$|f'(x) - \widetilde{f}_x(x)| = |(f'(x) - f_x(x)) + (f_x(x) - \widetilde{f}_x(x))| \le \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\varepsilon}{h}. \tag{18}$$

Оценка погрешности $\varphi(h) = \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\varepsilon}{h}$ не стремится к нулю при $h \to 0$. Напротив, $\varphi(h) \to \infty$. Минимальное ее значение достигается при

$$\frac{M_2 h}{2} = \frac{2\varepsilon}{h} \quad \Rightarrow \quad h = h_0 = \sqrt{\frac{4\varepsilon}{M_2}} \tag{19}$$

и равно $\varphi(h_0) = 2\sqrt{M_2\varepsilon}$. Отсюда следует практическая рекомендация: при вычислении первой производной функции заданной с погрешностью ε разностью вперед (или назад), шаг h должен иметь порядок $\sqrt{\varepsilon}$. Меньшие порядки h лишь ухудшат результат.

Сказанное остается справедливым для всех формул численного дифференцирования. Для каждой формулы существует свое оптимальное значение h. При вычислении вторых и более высоких производных некорректность операции численного дифференцирования сказывается еще сильнее.

1.3 Применение интерполирования.

Многие формулы численного дифференцирования можно получить как следствие интерполяционных формул. Для этого достаточно заменить функцию $f(x)$ ее интерполяционным многочленом $L_n(x)$ и вычислить производные многочлена $L_n(x)$, используя его явное представление.

Рассмотрим сетку узлов в окрестности точки x:

$$a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b. \tag{20}$$

Положим $h_i = x_i - x_i - 1$, $i = 1 : n$. Величину $H = x_n - x_0$ будем считать достаточно малой. По значениям функции $f(x)$ в этих узлах построим интерполяционный многочлен $L_n(x)$. По формуле Лагранжа

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, l_i(x), \quad l_i(x) = \prod_{j=0, j\ne i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}\,, \tag{21}$$

где $\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)\ldots(x - x_n)$. Для $k \le n$ изучим аппроксимацию

$$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x), \quad x \in [x_0, x_n]. \tag{22}$$

Для погрешности нами была получена формула

$$f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\, \omega_{n+1}(x). \tag{23}$$

Для рассматриваемых $x \in [x_0, x_n]$, очевидно, $|\omega_{n+1}(x)| \le H^{n+1}$. Это грубая оценка. Для ее уточнения надо сделать предположение о законе распределения узлов сетки. Для узлов с равномерным шагом $h = H/n$ имеем $|\omega_{n+1}(x)| \le n!/4\, h^{n+1}$.

Из (23) следует оценка

$$|f(x) - L_n(x)| \le \frac{M_{n+1} H^{n+1}}{(n+1)!}\,. \tag{24}$$

Теорема 1. *Если $f \in C^{n+1}[a, b]$, то для любого $x \in [x_0, x_n]$*

$$|f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x)| \le \frac{M_{n+1} H^{n+1-k}}{(n+1-k)!}\,, \quad k = 0 : n. \tag{25}$$

Доказательство. Для $k = 0$ оценка совпадает с (23). Докажем для $k = 1$. Так как для разности $R_n(x) = f(x) - L_n(x)$ имеют место равенства $R_n(x_{i-1}) = R_n(x_i) = 0$, $i = 1 : n$, то по теореме Ролля найдутся точки $z_i \in (x_{i-1}, x_i)$ такие, что

$$R_n'(z_i) = f'(z_i) - L_n'(z_i) = 0, \quad i = 1 : n. \tag{26}$$

Это означает, что полином $L_n'(x)$ степени $n - 1$ является интерполяционным полиномом для производной $f'(x)$ с узлами интерполяции z_i, $i = 1 : n$. Применяя общую оценку (23) с заменой числа узлов интерполяции $n + 1$ на n и учитывая, что производная порядка n для интерполируемой функции $f'(x)$ совпадает с производной $f^{(n+1)}(x)$, получим

$$|f'(x) - L_n'(x)| \leq \frac{M_{n+1} H^n}{n!}\,. \tag{27}$$

Это доказывает оценку (25) для $k = 1$. Далее, повторяя теперь ровно те же рассуждения, но уже для разности $R_n'(x) = f'(x) - L_n'(x)$, получим оценку для $R_n''(x)$ с понижением порядка n до $n - 1$:

$$|f''(x) - L_n''(x)| \leq \frac{M_{n+1} H^{n-1}}{(n-1)!}\,, \tag{28}$$

что доказывает оценку (25) для $k = 2$, и т.д. $\square$

Как видим, точность вычисления производной падает на порядок по H при повышении порядка производной на единицу. Рассмотрим примеры.

Пример 1. $n = 1$**.** В этом случае

$$L_1(x) = \frac{x - x_1}{x_0 - x_1}\, f(x_0) + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}\, f(x_1). \tag{29}$$

и для любого $x \in [x_0, x_1]$ имеем

$$f'(x) \approx L_1'(x) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}. \tag{30}$$

Правая часть совпадает с разностью вперед в точке x, если точки x_0 и x_1 выбрать следующим образом: $x_0 = x$, $x_1 = x + h$. При $x_1 = x$, $x_0 = x - h$ получаем аппроксимацию $f'(x)$ разностью назад, при $x_0 = x - h$, $x_1 = x + h$ — центральную разность.

Пример 2. $n = 2$. В этом случае для любого $x \in [x_0, x_2]$ имеем:

$$f'(x) \approx L_2'(x) = \frac{2}{x_2 - x_0}\Big((x - x_{1/2})\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} + \\ + (x_{3/2} - x)\frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}\Big), \quad (31)$$

$$f''(x) \approx L_2''(x) = \frac{2}{x_2 - x_0}\Big(\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}\Big), \qquad (32)$$

где $x_{1/2} = (x_0 + x_1)/2$, $x_{3/2} = (x_1 + x_2)/2$. Если $x_0 = x - h$, $x_1 = x$, $x_2 = x + h$, то получаем аппроксимацию $f'(x)$ центральной разностью и аппроксимацию $f''(x)$ разностью $f_{x\bar{x}}(x)$.