Модуль 1. Тема 2. Лекция 1.

Численное дифференцирование

План

- Численное дифференцирование функций, заданных аналитически
- Численное дифференцирование функций, заданных дискретным набором данных
- Метод Рунге уточнения формул численного дифференцирования

Литература

- Формалев В. Ф., Ревизников Д. Л., Численные методы. –М.: Физматлит, 2004. - 400 с.
- Поршнев С.В., Беленкова И.В., Численные методы на базе Mathcad. – СПб.: БХВ-Петербург, 2005. – 464 с.

Разностная схема первого порядка точности

Производная от функции

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

Простейшая приближенная формула (правосторонняя разностная схема)

$$\boxed{\tilde{f}'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}}$$

Ряд Тейлора

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \frac{f'(x)}{1!}\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}(\Delta x)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(\Delta x)^n \ldots$$

Ошибка приближенной формулы

$$\tilde{f}'(x) = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \approx f'(x) + \frac{f''(x)}{2!}\Delta x + \ldots = f'(x) + O(\Delta x)$$

Левосторонняя разностная схема первого порядка

$$\Delta x \to -\Delta x: \quad \boxed{\bar{f}'(x) = \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x}} \approx f'(x) - \frac{f''(x)}{2!}\Delta x + \ldots$$

Формулы точны для полиномов первой степени, т.к. для них $f''(x) \equiv 0$

Симметричная разностная схема второго порядка

$$\boxed{\hat{f}'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x}}$$

Ряд Тейлора

$$\hat{f}'(x) \approx \frac{1}{2\Delta x}\left(f(x) + f'(x)\frac{\Delta x}{1!} + f''(x)\frac{(\Delta x)^2}{2!} + f'''(x)\frac{(\Delta x)^3}{3!} + \dots \right) -$$
$$- \frac{1}{2\Delta x}\left(f(x) - f'(x)\frac{\Delta x}{1!} + f''(x)\frac{(\Delta x)^2}{2!} - f'''(x)\frac{(\Delta x)^3}{3!} + \dots \right)$$

Ошибка приближенной формулы

$$\hat{f}'(x) \approx f'(x) + \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^2 + \dots = f'(x) + O\left((\Delta x)^2\right)$$

Формула точна для полиномов второй степени, т.к. для них $f'''(x) \equiv 0$

Симметричная разностная схема для второй производной

$$\boxed{\hat{f}''(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2}}$$

Ряд Тейлора

$$\Delta x^2 \hat{f}''(x) \approx \left(f(x) + f'(x)\frac{\Delta x}{1!} + f''(x)\frac{(\Delta x)^2}{2!} + f'''(x)\frac{(\Delta x)^3}{3!} + f^{IV}(x)\frac{(\Delta x)^4}{4!} + \ldots \right) -$$

$$-2f(x) + \left(f(x) - f'(x)\frac{\Delta x}{1!} + f''(x)\frac{(\Delta x)^2}{2!} - f'''(x)\frac{(\Delta x)^3}{3!} + f^{IV}(x)\frac{(\Delta x)^4}{4!} - \ldots \right)$$

Ошибка приближенной формулы

$$\hat{f}''(x) \approx f''(x) + \frac{f^{IV}(x)}{12}(\Delta x)^2 + \ldots = f''(x) + O\left((\Delta x)^2\right)$$

Формула точна для полиномов третьей степени, т.к. для них $f^{IV}(x) \equiv 0$

Альтернативная идея вывода $\hat{f}''(x) \approx \dfrac{\dfrac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} - \dfrac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x}}{\Delta x} = \dfrac{\hat{f}'\left(x + \dfrac{\Delta x}{2}\right) - \hat{f}'\left(x - \dfrac{\Delta x}{2}\right)}{\Delta x}$

Схемы для производных более высоких порядков можно строить аналогично

Пример

Продифференцировать численно функцию

$$\sin\left(0.01x^2\right), \quad 0 \le x \le 10\sqrt{\pi}$$

с применением правосторонней и симметричной разностных формул для первой производной на равномерной сетке. Сопоставить ошибки приближенных формул численного дифференцирования.

Численное дифференцирование дискретно заданных функций

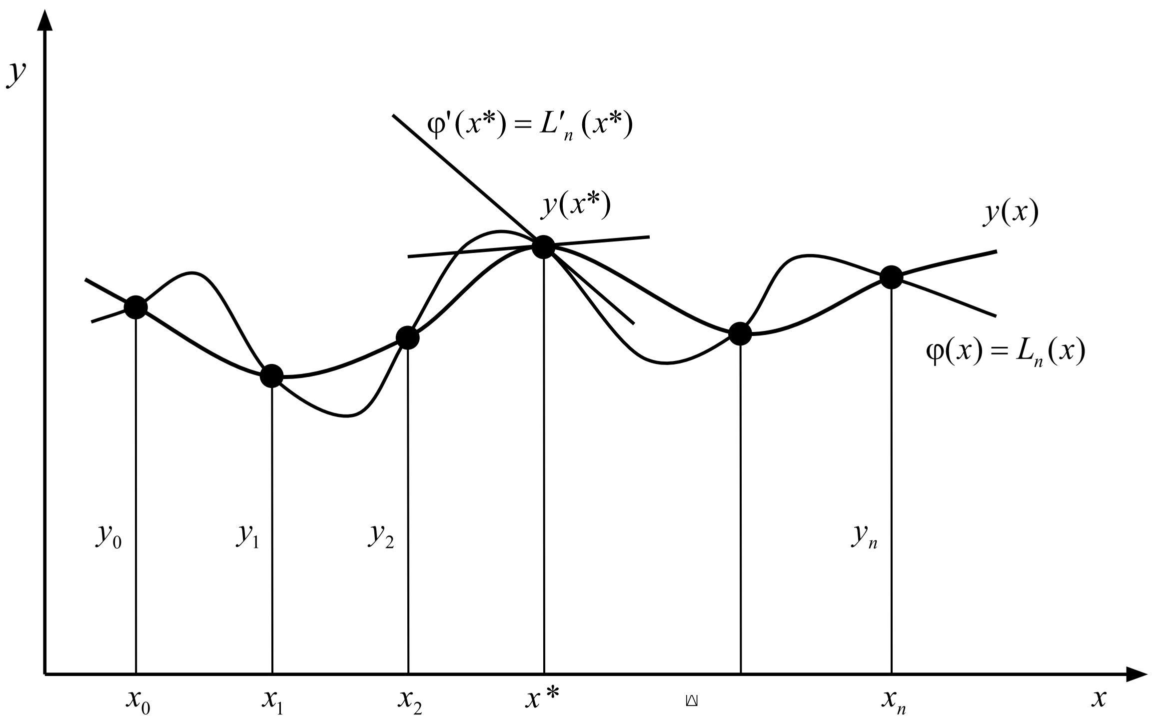
1. Точка лежит между узлами дискретизации: $x^* \in (x_{i-1}, x_i)$

$$y(x) = \varphi(x) + R(x) \qquad y(x^*) = \varphi(x^*) + R_n(x^*)$$

$$y'(x) = \varphi'(x) + R'(x) \qquad y'(x^*) = \varphi'(x^*) + R'(x^*)$$

$$y^{(n)}(x^*) = \varphi^{(n)}(x^*) + R^{(n)}(x)$$

Таблица сглаживается непрерывной функцией φ(x) одним из методов интерполяции или аппроксимации



Процедура численного дифференцирования является *некорректной*: близость искомой и сглаживающей функций не гарантирует близости их производных. Производные даже могут иметь разные знаки.

Численное дифференцирование дискретно заданных функций

2. Точка совпадает с одним из узлов: $x^* = x_i, \quad i = \overline{1, n-1}$

$$y_{i-1} = y(x_i - h) = y_i - y_i' h + y_i'' \frac{h^2}{2} - y_i''' \frac{h^3}{6} + y^{IV}(\xi) \frac{h^4}{24}$$

$$y_{i+1} = y(x_i + h) = y_i + y_i' h + y_i'' \frac{h^2}{2} + y_i''' \frac{h^3}{6} + y^{IV}(\xi) \frac{h^4}{24}$$

Можно использовать аппарат разложения функций в ряд Тейлора

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + O(h) = \frac{\Delta y_i}{h} + O(h)$$

Отношение конечных разностей справа

$$\overline{y_i'} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + O(h) = \frac{\Delta \overline{y}_i}{h} + O(h)$$

Отношение конечных разностей слева

$$\hat{y}_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2) = \frac{\Delta \hat{y}_i}{2h} + O(h^2)$$

Отношение центральных разностей

Порядком точности метода численного дифференцирования называют показатель степени ***h*** в главном члене погрешности

Численное дифференцирование дискретно заданных функций

Вторая производная

$$\hat{y}_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^2) = \frac{\Delta^2 y_i}{h^2} + O(h^2)$$

Центральные разности

Третья производная

$$y_i''' \approx \frac{\Delta^3 y_i}{h^3} = \frac{y_{i+2} - 3y_{i+1} + 3y_i - y_{i-1}}{h^3} + O(h)$$

Правосторонние разности

$$\bar{y}_i''' \approx \frac{\Delta^3 \bar{y}_i}{h^3} = \frac{y_{i+1} - 3y_i + 3y_{i-1} - y_{i-2}}{h^3} + O(h)$$

Левосторонние разности

Используется 4 узла сетки

$$\hat{y}_i''' = \frac{1}{2}(\bar{y}_i''' + y_i''') = \frac{y_{i+2} - 2y_{i+1} + 2y_{i-1} - y_{i-2}}{2h^3} + O(h^2)$$

Центральные разности

Фактически, используется 5 узлов

$$y_i^{IV} = \frac{y_{i+2} - 4y_{i+1} + 6y_i - 4y_{i-1} + y_{i-2}}{h^4} + O(h^2)$$

Четвертая производная

Метод Рунге уточнения формул численного дифференцирования

$$f'(x) = \varphi'_h(x) + h^p \cdot \psi(x) + O(h^{p+1}) + O(h^{p+2}) + \ldots$$

Метод *p*-го порядка

$$R_p = h^p \cdot \psi(x) + O(h^{p+1}) + O(h^{p+2}) + \ldots$$

Остаточный член

$$f'(x) \approx \varphi'_h(x)$$

Вычисляем разностную производную на равномерной сетке с шагом *h*

Вводим более подробную сетку с шагом *kh* (*k* = 1/2;1/4;1/8; …)

$$f'(x) = \varphi'_{kh}(x) + (kh)^p \cdot \psi(x) + O(h^{p+1})$$

Производная на сетке с шагом *kh*

$$h^p \cdot \psi(x) = \frac{\varphi'_h(x) - \varphi'_{kh}(x)}{k^p - 1} + O(h^{p+1})$$

Главный член погрешности в узлах исходной сетки

$$f'(x) = \varphi'_{kh}(x) + k^p \frac{\varphi'_h(x) - \varphi'_{kh}(x)}{k^p - 1} + O(h^{p+1})$$

Метод (*p*+1)-го порядка в узлах исходной сетки

$$f'(x) \approx \varphi'_{kh}(x) + k^p \frac{\varphi'_h(x) - \varphi'_{kh}(x)}{k^p - 1}$$

Уточненная разностная аппроксимация