9 ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

Задача численного дифференцирования состоит в приближенном вычислении производных функции $u(x)$ по заданным в конечном числе точек значениям этой функции.

Введем на $[a,b]$ сетку: $w_h = \{x_i = a + ih; i = 0,1,...,N; hn = b - a\}$ и определены значения $u_i = u(x_i)$ функции $u(x)$ в точках сетки.

В качестве приближенного значения $u'(x_i)$ можно взять, например, любые из следующих разностных отношений:

$$u_{\overline{x},i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{h}, u_{x,i} = \frac{u_{i+1} - u_i}{h}, u_{\overline{\underline{x}},i} = \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2h} \tag{66}$$

Выписанные здесь разностные отношения называются, соответственно, левой, правой и центральной разностными производными функции $u(x)$ в точках $x = x_i$.

Если точка x_i фиксированная, а шаг $h \to 0$ (при этом $N \to \infty$), то каждое из упомянутых разностных отношений стремится к значению производной функции $u(x)$ в точке x_i. Поэтому в качестве приближенного значения $u'(x)$ можно взять любое из этих разностных отношений.

Получим выражение для погрешности. Например, левой разностной производной в точках $x = x_i$

$$u_{\overline{x},i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{h} = \frac{u(x) - u\{x - h)}{h}$$

По формуле Тейлора получим:

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(\xi), \xi \in (x-h, x) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u_{\overline{x},i} = u'(x) - \frac{h^2}{2}u''(\xi) \tag{67}$$

Погрешность $-\frac{h^2}{2}u''(\xi)$ называют погрешностью аппроксимации ($O(h)$).

Для других формул:

$$u_{x,i} = u'(x) + \frac{h^2}{2}u''(\xi^{(1)}), \xi^{(1)} \in (x_i, x_{i+1}) \tag{68}$$

$$u_{\overline{\underline{x}},i} = u'(x) + \frac{h^2}{6}u'''(\xi^{(2)}), \xi^{(2)} \in (x_{-1i}, x_{i+1}) \tag{69}$$

Из формулы (69) видно, что центральная разностная производная аппроксимирует $u'(x)$ со вторым порядком и следовательно является более точным приближением к $u'(x)$.

Вторую производную $u''(x)$ можно приближенно заменить в точке $x_i \in w_h$ второй разностной производной:

$$u_{\bar{x}x,i} = \frac{1}{h}(u_{x,i} - u_{\bar{x},i}) = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i+1}}{h^2} \qquad (70)$$

Разложение по формуле Тейлора приводит к следующему выражению для погрешности:

$$u_{\bar{x}x,i} - u''(x_i) = \frac{h^2}{12}u^{(IV)}(\xi_i) \qquad (71)$$

т.е. имеет место аппроксимация второго порядка.

Четвертая производная $u^{(IV)}(x_i)$ с точностью до величины $O(h^2)$ аппроксимируется разностным отношением:

$$u_{\bar{x}x\bar{x}x,i} = \frac{1}{h^2}(u_{\bar{x}x,i+1} - 2u_{\bar{x}x,i} + u_{\bar{x}x,i-1}) = \frac{1}{h^4}(u_{i+2} - 4u_{i+1} + 6u_i - 4u_{i-1} + u_{i-2)}$$

Как правило, значения функции $u(x)$ в точках сетки w_h вычисляются не точно, а с каким-то приближением.

Например, элементарные трансцендентные функции вычисляются с помощью рядов, причем ряды заменяются конечными суммами. Другим источником погрешностей являются погрешности округления.

Оказывается, что погрешность, возникающая при вычислении разностных отношений, намного превосходит погрешность в задании значений функции $u(x)$ и даже может неограниченно возрастать при стремлении шага сетки к нулю. Поэтому операцию вычисления разностных отношений называют некорректной. Поясним это на примере: $u_{\bar{x},i} = \frac{u_i - u_{i-1}}{h}$.

Данное соотношение хорошо приближает $u'(x_i)$ только в том случае, когда шаг hдостаточно мал. Требование малости величины h, находящейся в знаменатели разностного отношения как раз и является причиной некорректности операции численного дифференцирования. Действительно, пусть вместо точного значения u_i, u_{i-1} вычислены приближенные значения $\hat{u} = u_i + \delta_i, \breve{u}_{i-1} = u_{i-1} + \delta_{i-1}$. Тогда величина $u_{\bar{x},i}$ будет равна величине $u_{\bar{x},i} + \frac{(\delta_i - \delta_{i-1})}{h}$. Следовательно, погрешность I разностной производной окажется равной: $\delta_{\bar{x},i} = \frac{\delta_i - \delta_{i-1}}{h}$.

Пусть $|\delta_i| \le \delta, |\delta_{i-1}| \le \delta$, тогда

$$\left|\delta_{\bar{x},i}\right| \le \frac{2\delta}{h} \qquad (72)$$

Из оценки (72) видно, что в следствии малости h погрешность, возникающая при вычислении первой разностной производной, значительно превосходит погрешность вычисления самой функции $u(x)$. Если δ не зависит отh, то погрешность $\delta_{\bar{x},i}$ неограниченно возрастает при $h \to 0$.

Чтобы не происходило существенного понижения точности, надо следить за тем, чтобы погрешность округления имела тот же порядок, что и погрешность аппроксимации. Например, из формулы (67) следует, что погрешность аппроксимации $\le 0.5h * M_2$, где $M_2 = \max\limits_{x\in[a,b]} |u''(x)|$. Естественно потребовать, чтобы и погрешность округления была бы сравнима с погрешностью аппроксимации, например,

$$\frac{2\delta}{h} \le \frac{M_2 h}{2} \qquad (73)$$

где M_2 не зависит от h. Это означает, что погрешность δ при вычислении значений функции $u(x_i)$ должна быть величиной $O(h^2)$.

С другой стороны, неравенство (73) показывает, что если величина δ задана и мы не можем ее менять, то вычисления надо проводить не с произвольно малым шагом h, а с шагом, удовлетворяющим условию: $h \ge h_0$, где $h_0 2\sqrt{\frac{\delta}{M^2}}$.

При вычислении производных более высокого порядка, когда в знаменатель разностного соотношения входит $h_k, k > 1$, влияние неточности в здании $u(x_i)$ сказывается еще сильнее. Например, при вычислении разностного отношения $u_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i}$ погрешность округления является $O(\delta h^{-u})$, где δ - граница погрешности округления функции $u(x)$. В этом случае для того, чтобы погрешность определения $\delta_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x},i}$ была сравнима с погрешностью аппроксимации, надо потребовать, чтобы $h \ge h_0$, где $h_0 = O(\delta^{-\frac{1}{6}})$, либо проводить вычисления $u(x_i)$ с погрешностью $\delta = O(h^6)$. Например, если $\delta \approx 10^{-12}$, то шаг hнадо брать примерно равным 0,01.

При этом погрешность аппроксимации и погрешность округления будут примерно равными 10^{-4}.

Вычисления производной $u'(x)$ по заданной функции $u(x)$ также является некорректной операцией в том смысле, что для ограниченной функции $u(x)$ производная $u'(x)$ может быть сколь угодно большой.