§ 4. Численное дифференцирование

1. Некорректность операции численного дифференцирования. Задача численного дифференцирования состоит в приближенном вычислении производных функции $u(x)$ по заданным в конечном числе точек значениям этой функции. Простейшие примеры формул численного дифференцирования рассматривались в п. 1 § 4 ч. I. Напомним эти примеры. Пусть на $[a, b]$ введена сетка

$$\omega_h=\{x_i=a+ih,\ i=0, 1, \ldots, N,\ hN=b-a\}$$

и определены значения $u_i=u(x_i)$ функции $u(x)$ в точках сетки. В качестве приближенного значения $u'(x_i)$ можно взять, например, любое из следующих разностных отношений:

$$u_{\bar{x},i}=\frac{u_i-u_{i-1}}{h},\quad u_{x,i}=\frac{u_{i+1}-u_i}{h},\ u_{\overset{\circ}{x},i}=\frac{u_{i+1}-u_{i-1}}{2h}.$$

Возникающая в результате такой замены погрешность характеризуется разложениями

$$u_{\bar{x},i}=u'(x_i)-\frac{h}{2}u''(\zeta_i^{(1)}),\tag{1}$$

$$u_{x,i}=u'(x_i)+\frac{h}{2}u''(\zeta_i^{(2)}),\tag{2}$$

$$u_{\overset{\circ}{x},i}=u'(x_i)+\frac{h^2}{6}u'''(\zeta_i^{(3)}),\tag{3}$$

где $\zeta_i^{(j)}$, $j=1, 2, 3$,— точки из интервала (x_{i-1}, x_{i+1}).

Вторую производную в точке x_i можно заменить отношением

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

при этом

$$u_{\bar{x}x,i}=u''(x_i)+\frac{h^2}{12}u^{\mathrm{IV}}(x_i)+O(h^4).\tag{4}$$

Четвертая производная $u^{\mathrm{IV}}(x_i)$ 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 ω_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 h к нулю. Поэтому операцию вычисления разностных отношений называют некорректной. Поясним причину некорректности на примере вычисления разностного отношения $u_{\bar{x},i}=(u_i-u_{i-1})/h$.

Разностное отношение $u_{\bar{x},i}$ хорошо приближает $u'(x_i)$ 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 u_i, u_{i-1} вычислены приближенные значения $\tilde{u}_i=u_i+\delta_i$, $\tilde{u}_{i-1}=u_{i-1}+\delta_{i-1}$. Тогда вместо $u_{\bar{x},i}$ будет вычислена величина $u_{\bar{x},i}+(\delta_i-\delta_{i-1})/h$. Следовательно, погрешность в вычислении первой разностной производной окажется равной $\delta_{\bar{x},i}=(\delta_i-\delta_{i-1})/h$.

В дальнейшем погрешности такого рода будем называть погрешностями округления (хотя их реальная природа может быть иной).

Пусть известна граница δ погрешностей δ_i, δ_{i-1}, т. е. $|\delta_i|\leqslant\delta$, $|\delta_{i-1}|\leqslant\delta$. Тогда

$$|\delta_{\bar{x},i}|\leqslant 2\delta/h, \tag{5}$$

причем эта оценка достигается при $\delta_i=-\delta_{i-1}=\delta$. Из оценки (5) видно, что вследствие малости h погрешность, возникающая при вычислении первой разностной производной, значительно превосходит погрешность вычисления самой функции $u(x)$. Если δ не зависит от h, то погрешность $\delta_{\bar{x},i}$ неограниченно возрастает при $h\to 0$.

Сказанное не означает, что нельзя пользоваться формулами численного дифференцирования. Чтобы не происходило существенного понижения точности, надо следить за тем, чтобы погрешность округления имела тот же порядок, что и погрешность аппроксимации. Например, из (1) следует, что погрешность аппроксимации при замене $u'(x)$ отношением $u_{\bar{x},i}$ не превосходит величины $0{,}5hM_2$, где $M_2=\max\limits_{x\in[a,b]}|u''(x)|$. Естественно потребовать, чтобы и погрешность округления $\delta_{\bar{x},i}$ была бы сравнима с погрешностью аппроксимации, например

$$2\delta/h\leqslant M_2h/2, \tag{6}$$

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 (6) 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 $h\geqslant h_0$, где $h_0=2\sqrt{\delta/M_2}$.

При вычислении производных более высокого порядка, когда в знаменатель разностного отношения входит h^k, $k>1$, влияние неточности в задании $u(x_i)$ сказывается еще сильнее. Например, при вычислении разностного отношения $u_{\bar{x}x\bar{x}x,i}$ погрешность округления является величиной $O(\delta h^{-4})$, где δ — граница погрешности округления функции $u(x)$. В этом случае для того чтобы погрешность округления $\delta_{\bar{x}x\bar{x}x,i}$ была сравнима с погрешностью аппроксимации, надо потребовать, чтобы $h \geqslant h_0$, где $h_0 = O(\delta^{1/3})$, либо проводить вычисление $u(x_i)$ с погрешностью $\delta = O(h^6)$. Например, если $\delta \approx 10^{-12}$, то шаг h надо брать примерно равным 0,01. При этом погрешность аппроксимации и погрешность округления будут примерно равными 10^{-4}.

Вычисление 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. Например, для $u(x) = \sin \omega x$ имеем $\max\limits_{x \in [a,b]} |u(x)| \leqslant 1$ и $\max\limits_{x \in [a,b]} |u'(x)| = |\omega| \to \infty$ при $\omega \to \infty$.

Строгие определения корректности математической задачи и способы решения некорректных задач изложены в книге [38].

2. Применение интерполирования. Многие формулы численного дифференцирования можно получить как следствие интерполяционных формул. Для этого достаточно заменить функцию $u(x)$ ее интерполяционным многочленом $L_n(x)$ и вычислить производные многочлена $L_n(x)$, используя его явное представление. В отличие от п. 1 рассмотрим неравномерную сетку

$$\omega_h = \{a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_N = b\}$$

и обозначим через $h_i = x_i - x_{i-1}$, $i = 1, 2, \ldots, N$, шаги этой сетки. В качестве примера получим формулы численного дифференцирования, основанные на использовании многочлена Лагранжа $L_{2,i}(x)$, построенного для функции $u(x)$ по трем точкам x_{i-1}, x_i, x_{i+1}. Многочлен $L_{2,i}(x)$ имеет вид

$$L_{2,i}(x) = \\ = \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{h_i(h_i + h_{i+1})} u_{i-1} - \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{h_i h_{i+1}} u_i + \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} u_{i+1}. \quad (7)$$

Отсюда получим

$$L'_{2,i}(x) = \\ = \frac{(2x - x_i - x_{i+1})}{h_i(h_i + h_{i+1})} u_{i-1} - \frac{(2x - x_{i-1} - x_{i+1})}{h_i h_{i+1}} u_i + \frac{(2x - x_{i-1} - x_i)}{h_{i+1}(h_i + h_{i+1})} u_{i+1}.$$

Это выражение можно принять за приближенное значение $u'(x)$ в любой точке $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$. Его удобнее записать в виде

$$L'_{2,i}(x) = \frac{1}{\hbar_i} \left[(x - x_{i-1/2}) \frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+1}} + (x_{i+1/2} - x) \frac{u_i - u_{i-1}}{h_i} \right], \quad (8)$$

где $\hbar_i = 0{,}5(h_i + h_{i+1})$, $x_{i-1/2} = x_i - 0{,}5h_i$. В частности, при $x = x_i$ получим

$$L'_{2,i}(x_i) = \frac{1}{2} \left(\frac{h_i}{\hbar_i} \frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+1}} + \frac{h_{i+1}}{\hbar_i} \frac{u_i - u_{i-1}}{h_i} \right), \quad (9)$$

и если сетка равномерна, $h_{i+1} = h_i = h$, то приходим к центральной разностной производной, $L'_{2,i}(x_i) = u_{\overset{\circ}{x},i}$.