Числено диференциране

Постановка на задачата

Нека функцията $y = f(x)$ е дефинирана в интервала $[a,b]$ и притежава производни от даден ред. Ако е известна таблица от стойностите $y_i = f(x_i)$ на функцията в точките (възлите) $x_0, x_1, x_2, ..., x_n \in [a,b]$, методите на численото диференциране позволяват да се намерят приближената стойност на производната $y'(x) = f'(x)$ в зададена точка x, стойността на втората производна и т.н. Особено важен момент при численото диференциране на някои функции е **възможната неустойчивост** на задачата, т.е. малки грешки в изходните данни да водят до големи грешки в резултата, а понякога и до т.н. "взрив на грешката". Такъв случай се получава когато производните силно растат, което се познава например по големите стойности на крайните разлики. В последния пример е илюстриран такъв тип функция и е показано как може да се реши проблемът с неустойчивостта.

По-надолу ще разглеждаме само случая на равноотстоящи възли в дадения интервал $[a,b]$, за които $x_{i+1} = x_i + h$, където h е стъпката между възлите. Таблицата ще има вида:

x_i	x_0	x_1	...	x_i	...	x_n
y_i	y_0	y_1	...	y_i	...	y_n

I) Формула за числено диференциране, основана на интерполационния полином на Нютон за интерполиране напред:

(1)

$$y'(t) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2-6t+2}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{4t^3-18t^2+22t-6}{4!}\Delta^4 y_0 + ... \right),$$

(2) $$y''(t) \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 + (t-1)\Delta^3 y_0 + \frac{6t^2-18t+11}{12}\Delta^4 y_0 + ... \right),$$

Тук $t = \frac{x-x_0}{h}$, а $\Delta^k y_0$ е крайната разлика от k-ти ред в точката x_0.

В частност при $x = x_0$ имаме $t = 0$, откъдето получаваме

(3) $$y_0' \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 - \frac{1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{1}{3}\Delta^3 y_0 - \frac{1}{4}\Delta^4 y_0 + \dots\right),$$

(4) $$y_0'' \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12}\Delta^4 y_0 + \dots\right).$$

II) Формула за числено диференциране, основана на интерполационния полином на Нютон за интерполиране назад:

(5) $$t = \frac{x - x_n}{h}, \quad y'(t) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_{n-1} + \frac{2t+1}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{3t^2 + 6t + 2}{3!}\Delta^3 y_{n-3} + \dots\right)$$

(6) $$y''(t) \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_{n-2} + (t+1)\Delta^3 y_{n-3} + \frac{6t^2 + 18t + 11}{12}\Delta^4 y_{n-4} + \dots\right)$$

В частност при $x = x_n$ имаме $t = 0$, откъдето получаваме

(7) $$y_n' \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_{n-1} + \frac{1}{2}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{1}{3}\Delta^3 y_{n-3} + \frac{1}{4}\Delta^4 y_{n-4} + \dots\right)$$

(8) $$y_n'' \approx \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_{n-2} + \Delta^3 y_{n-3} + \frac{11}{12}\Delta^4 y_{n-4} + \dots\right).$$

Забележка. Формулите (1) - (8) дават възможност за ефективно пресмятане на на производните, защото предлагат постериорна оценка на грешката. Последното означава, че добавянето на всяко следващо събираемо в дясната част на формулите води до уточняване на търсената стойност. Затова изчисленията се прекратяват, когато поредното събираемо стане по модул по-малко от точността на данните (т.н. неотстранима грешка).

III) Формули за числено диференциране по точкови шаблони при равноотстоящи възли:

(9)

№	Шаблон	Формула за числено диференциране	Локална грешка
1.	x_i, x_{i+1}	$y_i' \approx \dfrac{y_{i+1} - y_i}{h}$	$\dfrac{h}{2!}M_2 = O(h)$, $\quad M_2 = \max\limits_{x_i \le \xi \le x_{i+1}} \lvert f''(\xi)\rvert$
2.	x_{i-1}, x_i	$y_i' \approx \dfrac{y_i - y_{i-1}}{h}$	$\dfrac{h}{2!}M_2 = O(h)$, $\quad M_2 = \max\limits_{x_{i-1} \le \xi \le x_i} \lvert f''(\xi)\rvert$
3.	x_i, x_{i+1}, x_{i+2}	$y_i' \approx \dfrac{-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}}{2h}$	$\dfrac{2h^2}{3}M_3 = O(h^2)$, $\quad M_3 = \max\limits_{x_{i-1} \le \xi \le x_i + 1} \lvert f'''(\xi)\rvert$
4.	x_{i-2}, x_{i-1}, x_i	$y_i' \approx \dfrac{y_{i-2} - 4y_{i-1} + 3y_i}{2h}$	$\dfrac{2h^2}{3}M_3 = O(h^2)$, $\quad M_3 = \max\limits_{x_{i-1} \le \xi \le x_i + 1} \lvert f'''(\xi)\rvert$

5.	x_{i-1}, x_i, x_{i+1}	$y_i' \approx \dfrac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$	$\dfrac{h^2}{3} M_3 = O(h^2)\,, \quad M_3 = \max\limits_{x_{i-1} \le \xi \le x_i + 1} \left\lvert f'''(\xi) \right\rvert$
6.	x_{i-1}, x_i, x_{i+1}	$y_i'' \approx \dfrac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}$	$\dfrac{h^2}{12} M_4 = O(h^2)\,, \quad M_4 = \max\limits_{x_{i-1} \le \xi \le x_i + 1} \left\lvert f^{IV}(\xi) \right\rvert$

Пример 1. Стойностите на функцията $y = f(x) = \ln(x^2)$ в интервала $[2,3]$ са зададени в първите две колонки на таблица 1. Да се пресметнат приближените стойности на първите производни в точките $x_0 = 2$, $x_1 = 2{,}1$, $\xi = 2{,}04$, $x_{10} = 3$.

Решение:

Пресмятаме последователно крайните разлики Δy_i, $\Delta^2 y_i$, ... , които нанасяме към таблица 1. За стъпката h по x имаме $h = x_{i+1} - x_i = 0{,}1$.

Таблица 1

i	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$	$\Delta^5 y_i$
0	2,0	1,38629	0,09758	-0,00454	0,00040	-0,00005	0,00001
1	2,1	1,48387	0,09304	-0,00414	0,00035	-0,00004	0,00000
2	2,2	1,57691	0,08890	-0,00378	0,00031	-0,00004	0,00001
3	2,3	1,66582	0,08512	-0,00348	0,00027	-0,00003	0,00000
4	2,4	1,75094	0,08164	-0,00320	0,00024	-0,00003	0,00001
5	2,5	1,83258	0,07844	-0,00296	0,00022	-0,00002	0,00000
6	2,6	1,91102	0,07548	-0,00275	0,00019	-0,00002	
7	2,7	1,98650	0,07274	-0,00255	0,00017		
8	2,8	2,05924	0,07018	-0,00238			
9	2,9	2,12942	0,06780				
10	3,0	2,19722					

При $x_0 = 2$ като заместим във формула (3) получаваме

$$y_0' \approx \frac{1}{0{,}1}\left(0{,}09758 - \frac{1}{2}(-0{,}00454) + \frac{1}{3}0{,}00040 - \frac{1}{4}(-0{,}00005) + \ldots \right) \approx 0{,}99998 \,.$$

Тук очевидно членът, съдържащ $\Delta^5 y_i$ (и следващите го) е много малък и може да се пренебрегне. Точната стойност в този пример е известна, тя е $y'(x) = (\ln(x^2))' = \dfrac{2x}{x^2} = \dfrac{2}{x}$, т.е. $f'(2) = \dfrac{2}{2} = 1$. Следователно получената приближена стойност $y_0' \approx 0{,}99998$ има абсолютна грешка 0,00002.

Аналогично за другата точка $x_1 = 2{,}1$ по същата формула, но като използваме втория ред на таблицата, намираме:

$$y_1' \approx \frac{1}{0{,}1}\left(0{,}09304 - \frac{1}{2}(-0{,}00414) + \frac{1}{3}0{,}00035 - \frac{1}{4}(-0{,}00004) + \ldots \right) \approx 0{,}95236 \,.$$

Нека сега вземем точката $\xi = 2{,}04$. Тя се намира в началото на интервала, близо до $x_0 = 2$ и е най-естествено да приложим общата формула (1). Изчисляваме отклонението от началото $t = (\xi - x_0)/h = (2{,}04 - 2)/0{,}1 = 0{,}4$. Тогава

$$y'(\xi) = y'(t) = y'(0,4) \approx \frac{1}{0,1}\left(0,09758 + \frac{2.0,4-1}{2}(-0,00454) + \ldots\right) \approx 0,98040 .$$

За първата производна в точката $x_{10} = 3$ прилагаме формула (7):

$$y'_{10} \approx \frac{1}{0{,}1}\left(0{,}06780 + \frac{1}{2}(-0{,}00238) + \frac{1}{3}0{,}00017 + \frac{1}{4}(-0{,}00002) + \ldots\right) \approx 0{,}66667 .$$

Забележка. Точните стойности на производната $y'(x) = \ln(x^2)' = \dfrac{2}{x}$ в дадените точки, взети с пет знака точност са съответно: $y'(2,1) = 0,95238$, $y'(3) = 0,66667$, $y'(2,04) = 0,98039$.

Пример 2. С помощта на данните от таблица 1 да се пресметне приближената стойност на втората производна в точката $x_0 = 2$.

Решение:

От формулата (4) имаме:

$$y''_0 \approx \frac{1}{0{,}01}\left(-0{,}00454 - 0{,}00040 + \frac{11}{12}\left(-0{,}00005\right) + \ldots\right) \approx 0{,}4986 .$$

Пример 3. В първите две колонки на таблица 2 са дадени стойностите на функция, получени по експериментален път. Да се пресметнат приближените стойности на производните в точките x_i.

Решение:

Имаме интервал [1; 1,4] и стъпка $h = 0{,}05$. В точката $x_0 = 1$ изчисляваме производната по формулата за ляв триточков шаблон – (9.3), а в точката $x_8 = 1{,}4$ - по формулата за десен триточков шаблон – (9.4). Във вътрешните точки на интервала е удобно да се използва централната разлика от формула (9.5). Резултатите са дадени в последната колонка на таблицата. Тъй като данните са с точност 0,0001, а $h = 0{,}05$, то използваните от нас формули с локална грешка $O(h^2)$ в случая дават грешка от порядъка на 0,0025. Това означава, че последният знак в стойностите на производната може да се очаква, че не е значещ. Тъй като не знаем точната формула на функцията, а следователно не можем да преценим доколко теоретичната грешка е реална, единственият признак за достоверност на резултата е плавната промяна на стойностите за y_i', $i = 0,\ldots,8$, разбира се, ако допускаме непрекъснатост на производната.

Таблица 2

i	x_i	y_i	Приближения за y_i'
0	1,00	-0,2475	-0,0353
1	1,05	-0,2490	-0,0229
2	1,10	-0,2498	-0,0104
3	1,15	-0,2500	0,0021
4	1,20	-0,2496	0,0146
5	1,25	-0,2485	0,0270
6	1,30	-0,2469	0,0394
7	1,35	-0,2446	0,0517
8	1,40	-0,2417	0,0639

Пример 4. Да се пресметнат приближените стойности на производната на функцията $y = \cos(8x)$ в точките $x_0 = 0$ и $x_1 = 0{,}1$.

Решение:

В този пример се срещаме със случай, показващ неустойчивостта на численото диференциране. Функцията има безброй много производни и изглежда не би трябвало да има проблеми. Нека изберем например интервала $[0;\ 0{,}5]$ и го разделим на пет подинтервала със стъпка $h = 0{,}1$. Пресмятаме таблицата на крайните разлики – таблица 3. Забелязваме, че стойностите на $\Delta^k y_i$ не намаляват както в предишните примери (сравнете!).

Таблица 3

x_i	$y_i = \cos(8x_i)$	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
0,0	1,00000	-0,30329	-0,42261	0,44032	-0,01074
0,1	0,69671	-0,72591	0,01771	0,42958	-0,27132
0,2	-0,02920	-0,70819	0,44729	0,15826	
0,3	-0,73739	-0,26090	0,60555		
0,4	-0,99829	0,34465			
0,5	-0,65364				

Като използваме първия ред крайни разлики от таблица 3 и формула (3) при $x_0 = 0$ получаваме:

$$y'_0 \approx \frac{1}{0{,}1}\left(-0{,}30329 - \frac{1}{2}(-0{,}42261) + \frac{1}{3}0{,}44032 - \frac{1}{4}(-0{,}01074)\right) \approx$$

$$\approx \frac{1}{0{,}1}(-0{,}30329 + 0{,}21131 + 0{,}14678 + 0{,}00269) \approx \frac{1}{0{,}1}0{,}05748 \approx 0{,}5748.$$

Този резултат обаче **съществено се отличава от верния**. Наистина производната $y'(x) = -8\sin(8x)$ при $x = 0$ е $y'(0) = 0$. Така реалната грешка на численото диференциране $\varepsilon = |y'(0) - y'_0| = |0 - 0{,}5748| = 0{,}5748 \approx 0{,}6$ е много голяма и очевидно не се дължи на закръгляването, което е от порядъка на 10^{-5}.

Аналогичен е резултатът и в точката $x_1 = 0{,}1$. С данните за крайните разлики от втория ред на таблица 3 и формула (3) изчисляваме:

$$y'_1 \approx \frac{1}{0{,}1}\left(-0{,}72591 - \frac{1}{2}0{,}01771 + \frac{1}{3}0{,}42958 - \frac{1}{4}(-0{,}27132)\right) \approx -5{,}23738.$$

Точната стойност е: $y'(0{,}1) = -5{,}73885$. Грешката и в този случай е много голяма – 0,50147.

Забележка. За експериментални данни, за които не знаем формулата на функцията, един критерий за неустойчивост е наличието на големи и ненамаляващистойности на крайните разлики. За решаване на проблема и намиране на удовлетворителни приближени стойности на производните на неустойчиви задачи може **да се използва много малка стъпка *h*.** Опитайте да приложите това предписание като изберете h=0,0001 и изчислите y'_0. Съществуват някои специални методи за намаляване на грешките, като например, методът на Рунге-Ромберг, който ще бъде разгледан в следващия параграф.

Пример 5. Като се използват формули за числено диференциране с грешка $O(h^2)$ да се попълнят празните полета в таблицата:

x	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
y	-4		1	11	20
y'	35				
y''	✕				✕

Решение:

За да изчислим стойността $y(0,2)$ ще използваме формула (9-3.) за $y'(0,1)$:

$$y_i' \approx \frac{-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}}{2h} \Rightarrow \ y'(0,1) \approx \frac{-3y(0,1) + 4y(0,2) - y(0,3)}{2h} \Rightarrow$$

$$y(0,2) = \frac{2hy'(0,1) + 3y(0,1) + y(0,3)}{4} = \frac{2.0,1.35 + 3(-4) + 1}{4} = -1.$$

Тогава пак от формули (9) намираме:

$$y'(0,2) = \frac{y(0,3) - y(0,1)}{2h} = \frac{1+4}{2.0,1} = 25; \qquad y'(0,3) = \frac{y(0,4) - y(0,4)}{2h} = \frac{11+1}{2.0,1} = 60;$$

$$y'(0,4) = \frac{y(0,5) - y(0,3)}{2h} = \frac{20-1}{2.0,1} = 95;$$

$$y'(0,5) = \frac{y(0,3) - 4y(0,4) + y(0,5)}{2h} = \frac{1-44+60}{2.0,1} = 85;$$

За вторите производни съответно имаме:

$$y''(0,2) = \frac{y(0,3) - 2y(0,2) + y(0,1)}{h^2} = \frac{1-2(-1)-4}{0,01} = -100;$$

$$y''(0,3) = \frac{y(0,4) - 2y(0,3) + y(0,2)}{h^2} = \frac{11-2.1+(-1)}{0,01} = 800;$$

$$y''(0,4) = \frac{y(0,5) - 2y(0,4) + y(0,3)}{h^2} = \frac{20-2.11+1}{0,01} = -100.$$

Автор: Снежана Гочева-Илиева, snow@pu.acad.bg