МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского

Н.Р. Стронгина

КУРС «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

Операторы численного дифференцирования и анализ погрешности

(Модуль 12.3)

Учебно-методическое пособие

Рекомендовано методической комиссией
Института информационных технологий, математики и механики
для студентов ННГУ, обучающихся по направлению
01.03.02 «Прикладная математика и информатика»

Нижний Новгород
2021

УДК 519.6
ББК 22.19
С-86

С-86 Стронгина Н.Р. Курс «Численные методы»: Операторы численного дифференцирования и анализ погрешности (Модуль 12.3): Учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2021. – 34 с.

Рецензент: к.ф.-м.н., доцент **А.А. Перов**

Пособие является компонентом учебно-методического комплекса по дисциплине «Численные методы». В нем представлен способ построения операторов численного дифференцирования на основе полиномиальной интерполяции (общий случай и примеры операторов). Проведен анализ погрешности с учетом погрешности дискретизации и погрешности данных. Показана необходимость оптимизации шага численного дифференцирования. Приведены примеры и пошаговый разбор решения задач.

Пособие предназначено для студентов университета, обучающихся по направлению 01.03.02 «Прикладная математика и информатика», а также для преподавателей.

Ответственный за выпуск:
председатель методической комиссии
Института информационных технологий, математики и механики ННГУ
к.ф.-м.н., доцент А.В. Грезина

УДК 519.6
ББК 22.19

© Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 2021

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ

Развитие вычислительной техники и последующее развитие высокопроизводительных вычислительных систем открывают качественно новые возможности изучения сложных реальных объектов методами вычислительного эксперимента [9, 10].

Машинный вычислительный эксперимент как новый метод научного исследования предполагает дискретизацию исходной задачи. Он требует специальной проработки численного алгоритма: корректность, устойчивость, точность, сходимость. Поэтому на современном этапе подготовки выпускников по направлению «Прикладная математика и информатика» основной целью освоения дисциплины «Численные методы» является изучение фундаментальных принципов построения численных алгоритмов, подходов к анализу их свойств, подготовка студентов к разработке и применению эффективных вычислительных комплексов, необходимых для математического моделирования сложных систем.

В Институте информационных технологий, математики и механики ННГУ в системе подготовки бакалавров по указанному выше направлению дисциплина «Численные методы» изучается на 3-м курсе в течение двух семестров. Обучение включает лекции, практические и лабораторные занятия, самостоятельную работу, зачеты и экзамен. Содержание дисциплины соответствует требованиям федеральных государственных образовательных стандартов и обновляется с учетом проблематики научных исследований и технологий программирования. Фундаментальные основы курса соответствует требованиям типовой программы по направлению «Прикладная математика и информатика», разработанной под руководством академика РАН А.А. Самарского [11].

Курс содержит изучение основ машинной арифметики, анализ структуры погрешности, подходы и методы приближенного вычисления функций, численное дифференцирование и интегрирование, численное решение систем линейных алгебраических уравнений, задач на собственные значения, решение нелинейных алгебраических уравнений и систем. Особое внимание уделяется инструментам математического моделирования сложных систем: методам численного решения задачи Коши и краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), решению уравнений в частных производных, а также структуре соответствующих вычислительных комплексов.

В связи с успешным применением в ННГУ практико-ориентированного подхода и на основе принципа «образование как исследование», вытекающего из положения Гумбольдта «образование на основе исследований» [9], фундаментальный курс «Численные методы» имеет в ННГУ уровневую структуру. С одной стороны, в нем представлены все основные разделы численного анализа. С другой стороны, актуальные приложения требуют одновременного использования разных методов. Поэтому основой курса является системное изучение модельных задач, описывающих свойства реальных объектов различной природы. Освоение разделов дисциплины построено таким образом, чтобы в течение каждого семестра студенты могли самостоятельно подготовить программную реализацию численного алгоритма для решения модельной задачи, провести вычислительный эксперимент и подготовить отчет.

Нижегородский государственный университет является участником Суперкомпьютерного консорциума университетов России [10]. Студентов 3-го курса, изучающих дисциплину «Численные методы», знакомят с подходами к организации параллельных вычислений. Глубокое изучение этих подходов опирается на тот же комплект модельных задач, но проводится на старших курсах после освоения дисциплин, посвященных технологиям и методам параллельного программирования.

При освоении курса «Численные методы» у студентов 3-го курса должны быть сформированы компетенции разработки и применения программных средств разного уровня сложности. Поэтому требования к программам, подготовленным студентами, также реализуют практико-ориентированный подход. Программа должна быть написана на алгоритмическом языке высокого уровня. Код, реализующий алгоритм, должен быть подготовлен студентом самостоятельно. Объектно-ориентированный подход приветствуется. Программа и способ работы с ней должны быть пригодны не только для выполнения конкретного расчета, но также для проверки корректной реализации метода и результатов вычислительного эксперимента, и затем для изучения свойств метода и свойств моделируемого объекта. Ряд заданий выполняются с помощью специальной программы-тренажера, затем – с помощью программы, подготовленной студентом.

Требования самостоятельной программной реализации алгоритма и последующего самостоятельного проведения вычислительного эксперимента предполагают, что при рассмотрении теоретического материала, проведении практических занятий, выполнении заданий в рамках самостоятельной работы необходимо уделить больше внимания анализу понятийного аппарата дисциплины, доказательной базе, рассмотрению «простых» примеров и разбору по шагам решений специально подобранных задач. Решение именно этой учебной задачи поддерживает предлагаемое пособие.

Изучение тематического модуля, представленного в пособии, опирается на дисциплины «Дифференциальные уравнения», «Математический анализ», «Геометрия и алгебра» и «Программирование на ЭВМ» и осуществляется одновременно с изучением дисциплин «Уравнения математической физики» и «Функциональный анализ».

Нумерация разделов пособия соответствует установленной в настоящее время нумерации тематических модулей электронного учебного курса «Численные методы», представленного в системе электронного обучения ННГУ (СЭО ННГУ) на базе платформы Moodle. В период весеннего семестра 2019-20 учебного года и осеннего семестра 2020-21 учебного года дистанционная организация учебного процесса по дисциплине «Численные методы» выстраивалась на базе этого электронного курса [12].

Пособие предназначено для студентов университета, обучающихся по направлению подготовки 01.03.02 «Прикладная математика и информатика», изучающих курс «Численные методы», и преподавателей.

Материал пособия может быть полезен студентам, изучающим в вузе численные методы на различных направлениях подготовки, а также студентам магистратуры ИИТММ, изучающим параллельные численные методы на основе технологий параллельного программирования.

Модуль 12.3. Операторы численного дифференцирования и анализ погрешности

Способ построения разностных операторов, погрешность оператора, порядок, точность и порядок погрешности оператора, сходимость оператора к значению производной, вычислительная и общая погрешность дифференцирования, вычислительная неустойчивость и оптимальный шаг численного дифференцирования. Примеры разностных операторов и их свойства

12.3.1. Построение и анализ операторов – общий подход

Рассмотрим задачу о вычислении производной

для функции, значения которой известны только в узлах сетки.

Пусть нужно вычислить производную порядка s в точке $x = x^*$ для функции $f(x)$:

$$f^{(s)}(x^*) \tag{12.1}$$

Для этого используем значения $f(x)$ в узлах сетки $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ и полином $P_n(x)$, интерполирующий $f(x)$ в указанных узлах: $P_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0,\ldots n.$

Сетка, образованная узлами интерполяции $x_i, i = 0,\ldots n$, может быть равномерной или неравномерной.

Точка $x = x^*$ может быть узлом сетки или может им не быть.

Точка $x = x^*$ может попадать в отрезок интерполяции или не попадать: $x^* \in [x_0, x_n]$ или $x^* \notin [x_0, x_n]$.

Полагая, что в окрестности точки $x = x^*$ и на отрезке интерполяции $[x_0, x_n]$

функция $f(x)$ примерно «равна»

своему интерполяционному полиному $P_n(x)$ степени не выше n

$$f(x) \sim P_n(x) \tag{12.2}$$

«заменяем» производную от функции порядка s, взятую в точке $x = x^*$

производной интерполяционного полинома того же порядка s,

взятой в той же точке $x = x^*$:

$$f^{(s)}(x^*) \sim \left. \left(\frac{d^s}{dx^s} P_n(x) \right) \right|_{x=x^*} \tag{12.3}$$

Чтобы решить задачу

1) Запишем полином $P_n(x)$ в форме Лагранжа:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_{ni}(x) f_i \tag{12.4}$$

где $L_{ni}(x), i=0,...n$ – полиномы Лагранжа и $f_i = f(x_i), i=0,...n$ - значения функции в узлах интерполяции.

2) Дифференцируем $P_n(x)$ нужное количество раз (s раз):

$$\frac{d^s}{dx^s}\left(P_n(x)\right) = \frac{d^s}{dx^s}\left(\sum_{i=0}^{n} L_{ni}(x)\cdot f_i\right) = \sum_{i=0}^{n}\left(\frac{d^s}{dx^s}L_{ni}(x)\right)\cdot f_i \qquad (12.5)$$

Дифференцировать по x нужно только полиномы Лагранжа, потому что множители $f_i = f(x_i), i=0,...n$ есть числа.

3) Вычисляем производную порядка s полинома $P_n(x)$ в точке $x = x^*$:

$$\left.\left(\frac{d^s}{dx^s}P_n(x)\right)\right|_{x=x^*} = \sum_{i=0}^{n}\left.\left(\frac{d^s}{dx^s}L_{ni}(x)\right)\right|_{x=x^*}\cdot f_i \qquad (12.6)$$

(для этого нужно вычислить производные порядка s для полиномов Лагранжа в точке $x = x^*$).

4) Введем обозначения

$$d_i = \left.\left(\frac{d^s}{dx^s}L_{ni}(x)\right)\right|_{x=x^*}, \; i=0,...n \qquad (12.7)$$

Это коэффициенты, значения которых зависят от точки $x = x^*$ и расположения узлов сетки $x_0 < x_1 < ... < x_n$, и не зависят от функции $f(x)$.

5) Запишем производную полинома в точке $x = x^*$ через коэффициенты (12.7):

$$\left.\left(\frac{d^s}{dx^s}P_n(x)\right)\right|_{x=x^*} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i \qquad (12.8)$$

6) Производную полинома в точке $x = x^*$ обозначим символом $D_{n,\,s}$

$$D_{n,\,s} = \left.\left(\frac{d^s}{dx^s}P_n(x)\right)\right|_{x=x^*} \qquad (12.9)$$

В обозначении $D_{n,\,s}$ индекс n указывает на происхождение полинома: при его построении был использован $n+1$ узел интерполяции и сам полином $P_n(x)$ имеет степень не выше n. Индекс s указывает на то, что полином $P_n(x)$ продифференцирован s раз.

Оператором численного дифференцирования интерполяционного типа
(кратко – **разностным оператором**)
на сетке $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$
для вычисления производной функции $f(x)$ порядка s в точке $x = x^*$
называют формулу вида

$$D_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i \tag{12.10}$$

где коэффициенты $d_i,\, i = 0,\ldots n$ определены по формулам (12.7),
а значения $f_i = f(x_i),\, i = 0,\ldots n$ есть значения функции $f(x)$
в узлах интерполяции.

Оператор $D_{n,\,s}$ служит для приближенного вычисления производной $f^{(s)}(x^*)$:

$$f^{(s)}(x^*) \sim D_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i \tag{12.11}$$

Оператор $D_{n,\,s}$ заменяет вычисление производной $f^{(s)}(x^*)$ в точке $x = x^*$ вычислением некоторой линейной комбинации значений функции в узлах сетки.

Все приведенные ниже примеры знакомы с Декабря:

Пример 1

$$f'(x_i) \sim [f_x]_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}, \qquad h = x_{i+1} - x_i$$

Название: **правый разностный оператор** $[f_x]_i$
для вычисления $f'(x_i)$ **на двухточечном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_1(x)$,
интерполирующего $f(x)$ в двух узлах:

$$\begin{aligned} P_1(x_i) &= f(x_i) \\ P_1(x_{i+1}) &= f(x_{i+1}) \end{aligned}.$$

Здесь $s = 1$, $x^* = x_i$, $n = 1$, узлы интерполяции $x = x_i$, $x = x_{i+1}$.

Пример 2

$$f'(x_i) \sim [f_{\bar{x}}]_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}, \qquad h = x_i - x_{i-1}$$

Название: **левый разностный оператор** $[f_{\bar{x}}]_i$

для вычисления $f'(x_i)$ **на двухточечном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_1(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в двух узлах:

$$\begin{aligned} P_1(x_{i-1}) &= f(x_{i-1}) \\ P_1(x_i) &= f(x_i) \end{aligned}.$$

Здесь $s = 1$, $x^* = x_i$, $n = 1$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}, x = x_i$.

Пример 3

$$f'(x_i) \sim [f_{\hat{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}, \qquad h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{\hat{x}}]_i$

для вычисления $f'(x_i)$ **на трехточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в трех узлах равномерной сетки:

$$\begin{aligned} P_2(x_{i-1}) &= f(x_{i-1}) \\ P_2(x_i) &= f(x_i) \\ P_2(x_{i+1}) &= f(x_{i+1}) \end{aligned}.$$

Здесь $s = 1$, $x^* = x_i$, $n = 2$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}, x = x_i, x = x_{i+1}$.

Пример 4

$$f''(x_i) \sim [f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}, \qquad h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{x\bar{x}}]_i$

для вычисления $f''(x_i)$ **на трехточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в трех узлах **равномерной сетки**:

$$
\begin{aligned}
&P_2(x_{i-1}) = f(x_{i-1}) \\
&P_2(x_i) = f(x_i) \qquad . \\
&P_2(x_{i+1}) = f(x_{i+1})
\end{aligned}
$$

Здесь $s = 2$, $x^* = x_i$, $n = 2$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}, x = x_i, x = x_{i+1}$.

Пример 5

Этот пример изучали в Феврале

$$f''(x_i) \sim [f_{xx}^{\alpha\beta}]_i = \frac{1}{h^2} \cdot \left(\frac{f_{i-1}}{(\alpha+\beta)\beta} - \frac{f_i}{\alpha\beta} + \frac{f_{i+1}}{(\alpha+\beta)\alpha} \right)$$

$$x_{i+1} = x_i + \alpha h, \quad x_{i-1} = x_i - \beta h, \quad h, \alpha, \beta > 0$$

Название: **разностный оператор** $[f_{xx}^{\alpha\beta}]_i$

для вычисления $f''(x_i)$ **на трехточечном (в том числе неравномерном) шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$,

интерполирующего $f(x)$ в трех узлах **произвольной сетки**:

$$
\begin{aligned}
&P_2(x_{i-1}) = f(x_{i-1}) \\
&P_2(x_i) = f(x_i) \qquad . \\
&P_2(x_{i+1}) = f(x_{i+1})
\end{aligned}
$$

Здесь $s = 2$, $x^* = x_i$, $n = 2$, узлы интерполяции $x = x_{i-1}, x = x_i, x = x_{i+1}$.

Приведем пару примеров из контрольных работ Декабря:

Пример 6

$$f'''(x_i) \sim [f_{xxx}]_i = \frac{f_{i+2} - 2f_{i+1} + 2f_{i-1} - f_{i-2}}{2h^3}$$

$$h = x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = x_{i-1} - x_{i-2}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{xxx}]_i$

для вычисления $f'''(x_i)$ **на пятиточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_4(x)$, интерполирующего $f(x)$ в пяти узлах равномерной сетки:

$$P_4(x_{i-2}) = f(x_{i-2}) \qquad P_4(x_{i-1}) = f(x_{i-1})$$
$$P_4(x_i) = f(x_i) \qquad .$$
$$P_4(x_{i+1}) = f(x_{i+1}) \qquad P_4(x_{i+2}) = f(x_{i+2})$$

Здесь $s = 3$, $x^* = x_i$, $n = 4$, узлы интерполяции $x = x_{i\pm1}$, $x = x_i$, $x = x_{i\pm2}$.

Пример 7

$$f''(x_i) \sim \quad [f_{xx}]_i = \frac{-f_{i+2} + 16 f_{i+1} - 30 f_i + 16 f_{i-1} - f_{i-2}}{12h^2}$$

$$h = x_{i+2} - x_{i+1} = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = x_{i-1} - x_{i-2}$$

Название: **центральный разностный оператор** $[f_{xx}]_i$

для вычисления $f''(x_i)$ **на пятиточечном равномерном шаблоне**.

Оператор получен на базе полинома $P_4(x)$, интерполирующего $f(x)$ в пяти узлах равномерной сетки:

$$P_4(x_{i-2}) = f(x_{i-2}) \qquad P_4(x_{i-1}) = f(x_{i-1})$$
$$P_4(x_i) = f(x_i) \qquad .$$
$$P_4(x_{i+1}) = f(x_{i+1}) \qquad P_4(x_{i+2}) = f(x_{i+2})$$

Здесь $s = 2$, $x^* = x_i$, $n = 4$, узлы интерполяции $x = x_{i\pm1}$, $x = x_i$, $x = x_{i\pm2}$.

Запишем некоторые операторы в каноническом виде

Оператор $[f_x]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{1,1} = d_i \cdot f_i + d_{i+1} \cdot f_{i+1}$$

где $d_i = -\dfrac{1}{h}$, $d_{i+1} = \dfrac{1}{h}$, $\qquad f_i = f(x_i)$, $\qquad f_{i+1} = f(x_{i+1})$.

(использован сдвиг индексов: x_i, x_{i+1} вместо x_0, x_1)

Оператор $[f_x]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{1,1} = d_{i-1} \cdot f_{i-1} + d_i \cdot f_i$$

где $d_{i-1} = -\dfrac{1}{h}$, $d_i = \dfrac{1}{h}$, $\qquad f_{i-1} = f(x_{i-1})$, $\qquad f_i = f(x_i)$.

(использован сдвиг индексов: x_{i-1}, x_i вместо x_0, x_1)

Оператор $[f_{\hat{x}}]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{2,1} = d_{i-1} \cdot f_{i-1} + d_i \cdot f_i + d_{i+1} \cdot f_{i+1}$$

где $d_{i-1} = -\dfrac{1}{2h}, \quad d_i = 0, \quad d_{i+1} = \dfrac{1}{2h}$,

$f_{i-1} = f(x_{i-1})$, $\qquad f_i = f(x_i)$, $\qquad f_{i+1} = f(x_{i+1})$

(использован сдвиг индексов: x_{i-1}, x_i, x_{i+1} вместо x_0, x_1, x_2)

Оператор $[f_{x\bar{x}}]_i$ как частный случай формулы (12.10) имеет вид

$$x^* = x_i$$

$$D_{2,2} = d_{i-1} \cdot f_{i-1} + d_i \cdot f_i + d_{i+1} \cdot f_{i+1}$$

где $d_{i-1} = \dfrac{1}{h^2}, \quad d_i = -\dfrac{2}{h^2}, \quad d_{i+1} = \dfrac{1}{h^2}$,

$f_{i-1} = f(x_{i-1})$, $\qquad f_i = f(x_i)$, $\qquad f_{i+1} = f(x_{i+1})$

(использован сдвиг индексов: x_{i-1}, x_i, x_{i+1} вместо x_0, x_1, x_2)

Все примеры подтверждают, что в формулах $D_{n,s}$ коэффициенты $d_i, i = 0,\ldots n$ обратно пропорциональны шагу сетки h или его положительным степеням.
Чем меньше h (шаг сетки), тем больше модуль коэффициентов $d_i, i = 0,\ldots n$.

Это обстоятельство играет решающую роль: далее будет показано,
что операторы численного дифференцирования
(в отличие от квадратурных формул)
вычислительно неустойчивы.

Как следствие, шаг численного дифференцирования (шаг сетки)
не должен быть слишком велик

(чтобы оператор $D_{n,s}$ был все-таки похож на производную $f^{(s)}(x^*)$)

и не должен быть слишком мал

(чтобы $d_i, i = 0,\ldots n$ не успели «раскачать» погрешность исходных данных)

В каждой конкретной ситуации есть <u>оптимальный шаг</u> численного дифференцирования

Погрешность оператора $D_{n,\,s}$

Определение 1. Погрешностью оператора $D_{n,\,s}$ называют разность истинного значения производной $f^{(s)}(x^*)$ и оператора $D_{n,\,s}$:

$$\psi_{n,s} = f^{(s)}(x^*) - D_{n,\,s} \qquad (12.12)$$

Для погрешности оператора справедливо следующее представление. Нужно знать, что такое представление есть, а для решения задач применяем формулу Тейлора.

Утверждение 1. **Погрешность оператора представляет собой производную порядка s от погрешности интерполяции $r_n(x)$, взятую в точке $x = x^*$, в которой оператор призван заменить производную порядка s функции $f(x)$.**

Если на отрезке «задания и применения интерполяционного полинома» функция $f(x)$ является достаточно гладкой, для погрешности оператора $D_{n,\,s}$ верно

$$\psi_{n,\,s} = \frac{1}{(n+1)!}\left(\frac{d^s}{dx^s}\left(f^{(n+1)}(\,\xi(x))\cdot\omega(x)\right)\right)\Bigg|_{x=x^*}$$

где $\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)\ldots(x-x_n)$,

$\xi(x) \in [\min[x^*, x_0], \max[x^*, x_n]]$.

Доказательство

Так как оператор $D_{n,\,s}$ построен на базе полинома $P_n(x)$, интерполирующего функцию $f(x)$ в узлах $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$, рассмотрим погрешность интерполяции $r_n(x)$ как функцию аргумента x. По определению, для каждого x

$r_n(x) = f(x) - P_n(x)$.

Поскольку для $f(x)$ рассматривается вопрос об отыскании производной порядка s в точке $x = x^*$, функция $r_n(x)$ также может рассматриваться как s раз дифференцируемая в данной точке. Дифференцируем $r_n(x)$ s раз:

$$\frac{d^s}{dx^s} r_n(x) = \frac{d^s}{dx^s}\left(f(x) - P_n(x)\right) = f^{(s)}(x) - \frac{d^s}{dx^s} P_n(x)$$

Запишем производную порядка s функции $r_n(x)$ в точке $x = x^*$

$$\left(\frac{d^s}{dx^s} r_n(x)\right)\Bigg|_{x=x^*} = f^{(s)}(x^*) - \left(\frac{d^s}{dx^s} P_n(x)\right)\Bigg|_{x=x^*}$$

В правой части равенства оказалась погрешность оператора:

$$\left(\frac{d^s}{dx^s} r_n(x)\right)\Bigg|_{x=x^*} = \psi_{n,\ s}$$

Если на отрезке «задания и применения интерполяционного полинома»

$$x \in [\min[x^*, x_0], \max[x^*, x_n]]$$

функция $f(x)$ является достаточно гладкой, по Теореме о погрешности интерполяции (модуль 12.2) $r_n(x)$ можно представить в виде

$$r_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi(x))\, \omega(x)$$

где $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$ и неизвестная средняя точка, располагаясь на отрезке $[\min[x^*, x_0], \max[x^*, x_n]]$, зависит от аргумента x.

В предположении достаточной гладкости $f(x)$ не только в точке $x = x^*$, но на всем участке «задания и применения интерполяционного полинома», дифференцируем выражение для погрешности интерполяции s раз и записываем значение производной в точке $x = x^*$:

$$\left(\frac{d^s}{dx^s} r_n(x)\right)\Bigg|_{x=x^*} = \frac{1}{(n+1)!} \cdot \left(\frac{d^s}{dx^s}\left(f^{(n+1)}(\xi(x))\, \omega(x)\right)\right)\Bigg|_{x=x^*}$$

Утверждение доказано.

Порядок оператора, точность оператора, порядок погрешности оператора, виды погрешности

Разностный оператор характеризуют:

n	**порядок оператора**, то есть степень соответствующего ему интерполяционного полинома;
p	**точность оператора**, то есть максимально возможная степень полиномов, для которых оператор дает точный результат (нулевую погрешность $\psi_{n,\ s}$); очевидно, что $p \geq n$.
k	**порядок малости погрешности**, см. примеры далее.

При изучении погрешности различают

$\psi_{n,s}$	погрешность оператора (погрешность дифференцирования)
$В\Pi_{n,\ s}$	вычислительную погрешность дифференцирования
$О\Pi_{n,\ s}$	общую погрешность дифференцирования (общую погрешность оператора)

Форма представления погрешности оператора $D_{n,\,s}$, порядок погрешности и главный член погрешности

(здесь о том, как зимой решали эти задачи)

Пусть разностный оператор $D_{n,\,s}$, предназначенный для вычисления производной порядка s функции $f(x)$ в заданной точке $x = x^*$

$f^{(s)}(x^*)$

построен на равномерной сетке $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$ с шагом h.

Пусть точка $x = x^*$ принадлежит отрезку интерполяции: $x^* \in [x_0, x_n]$.

Пусть при $h \to 0$ отрезок интерполяции стягивается к точке $x = x^*$.

Если погрешность оператора $D_{n,\,s}$ можно представить в виде

$$\psi_{n,s} = M \cdot h^k + o\,(h^k) \qquad (12.13)$$

где $k > 0, M \neq 0$ и M не зависит от h, говорят, что погрешность оператора имеет порядок k и слагаемое $M \cdot h^k$ называют главным членом погрешности (при $h \to 0$).

Если для конкретного оператора $D_{n,\,s}$ доказано, что его погрешность $\psi_{n,\,s}$ можно представить в виде (12.13), тогда доказана сходимость оператора к значению производной $f^{(s)}(x^*)$ при $h \to 0$:

$$\lim_{h\to 0} D_{n,\,s} = f^{(s)}(x^*) \qquad (12.14)$$

потому что

$$\lim_{h\to 0} \psi_{n,s} = \lim_{h\to 0} \left(M \cdot h^k + o\,(h^k)\right) = 0 \qquad (12.15)$$

Анализ с целью выявления порядка погрешности и главного члена погрешности проводят на основе формулы Тейлора с остаточным слагаемым в форме Пеано.

Результаты анализа нужны для проверки сходимости оператора к значению производной, сравнения скорости сходимости различных операторов и анализа порядка погрешности аппроксимации разностных схем.

Если нужно оценить величину

$$\left| f^{(s)}(x^*) - D_{n,s} \right|$$

используют согласованные с (12.13) оценки вида

$$\left| \psi_{n,s} \right| \le \hat{M} \cdot h^k \qquad (12.16)$$

где $k > 0$ есть порядок погрешности и $\hat{M}$ не зависит от h.

Такие оценки проводят на основе формулы Тейлора с остаточным слагаемым в форме Лагранжа.

При изучении погрешности оператора формулу Тейлора записывают в точке, в которой приближенно вычисляется производная, то есть в точке $x = x^*$

Примеры

Оператор $[f_x]_i$ для вычисления $f'(x_i)$ **на двухточечном шаблоне,** $x^* = x_i$

$$\psi = f'(x_i) - [f_x]_i = f'(x_i) - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} = -\frac{h}{2} f''(x_i) + o(h)$$

Порядок погрешности $k = 1$, $M = -\frac{1}{2} f''(x_i)$ (если $f''(x_i) \ne 0$).

Главный член погрешности равен $-\frac{h}{2} f''(x_i)$.

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0,\, h < \tilde{h}$):

$$|\psi| \le \hat{M} \cdot h, \text{ где } \hat{M} = \frac{1}{2} \max_{x \in [x_i,\, x_i + \tilde{h}]} |f''(x)|$$

Оператор $[f_{\bar{x}}]_i$ для вычисления $f'(x_i)$ **на двухточечном шаблоне,** $x^* = x_i$

$$\psi = f'(x_i) - [f_{\bar{x}}]_i = f'(x_i) - \frac{f_i - f_{i-1}}{h} = \frac{h}{2} f''(x_i) + o(h)$$

Порядок погрешности $k = 1$, $M = \frac{1}{2} f''(x_i)$ (если $f''(x_i) \ne 0$).

Главный член погрешности равен $\frac{h}{2} f''(x_i)$.

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0,\, h < \tilde{h}$):

$$|\psi| \le \hat{M} \cdot h, \text{ где } \hat{M} = \frac{1}{2} \max_{x \in [x_i - \tilde{h},\, x_i]} |f''(x)|$$

Оператор $[f_{\hat{x}}]_i$ для вычисления $f'(x_i)$ **на трехточечном шаблоне,** $x^* = x_i$

$$\psi = f'(x_i) - [f_{\hat{x}}]_i = f'(x_i) - \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = -\frac{h^2}{6} f'''(x_i) + o(h^2)$$

Порядок погрешности $k = 2$, $M = -\frac{1}{6} f'''(x_i)$ (если $f'''(x_i) \neq 0$).

Главный член погрешности равен $-\frac{h^2}{6} f'''(x_i)$.

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0, h < \tilde{h}$):

$|\psi| \le \hat{M} \cdot h^2$, где $\hat{M} = \frac{1}{6} \max\limits_{x \in [x_i - \tilde{h},\, x_i + \tilde{h}]} |f'''(x)|$

Оператор $[f_{x\bar{x}}]_i$ для вычисления $f''(x_i)$ **на трехточечном шаблоне,** $x^* = x_i$

$$\psi = f''(x_i) - [f_{x\bar{x}}]_i = f''(x_i) - \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} = -\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i) + o(h^2)$$

Порядок погрешности $k = 2$, $M = -\frac{1}{12} f^{IV}(x_i)$ (если $f^{IV}(x_i) \neq 0$).

Главный член погрешности равен $-\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i)$

Оценка погрешности (верна для $\forall h > 0, h < \tilde{h}$):

$|\psi| \le \hat{M} \cdot h^2$, где $\hat{M} = \frac{1}{12} \max\limits_{x \in [x_i - \tilde{h},\, x_i + \tilde{h}]} \left| f^{IV}(x) \right|$

Все перечисленные выше операторы сходятся к значению соответствующей производной

$$\lim_{h \to 0} \psi = \lim_{h \to 0} \left(M \cdot h^k + o(h^k) \right) = 0$$

если точка $x^* = x_i$ **задана и зафиксирована, и сетка стягивается к точке** $x^* = x_i$:

$$x_{i+1} = x_i + h, \qquad x_{i-1} = x_i - h, \qquad h \to 0.$$

Вычислительная погрешность оператора $D_{n,\,s}$

Определение 2. Вычислительной погрешностью дифференцирования называют разность значения оператора $D_{n,\,s}$, **соответствующего** формуле (12.10), и значения оператора $\tilde{D}_{n,\,s}$, **полученного** по формуле (12.10)**:**

$$ВП_{n,\,s} = D_{n,\,s} - \tilde{D}_{n,\,s} \qquad (12.17)$$

Источниками вычислительной погрешности дифференцирования могут быть:

1) неточное задание узлов интерполяции $x_i, i = 0,\ldots n$, используемых при вычислении коэффициентов (12.7), и неточное задание точки $x = x^*$;

2) неточный подсчет коэффициентов (12.7); погрешности арифметических операций при вычислении выражения (12.10);

3) неточное задание функции $f(x)$ в узлах интерполяции.

В связи преобладающим влиянием неточности задания функции рассмотрим «модельную ситуацию», аналогичную рассмотренной в модуле п. 12.2.

Утверждение 2. Если коэффициенты $d_i, i = 0,\ldots n$ оператора $D_{n,\,s}$ вычислены точно и при вычислении значения оператора $D_{n,\,s}$ погрешность арифметических операций отсутствует, тогда вычислительная погрешность дифференцирования $ВП_{n,\,s}$ зависит от ошибок задания функции в узлах интерполяции

$$ВП_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \delta_i \qquad (12.18)$$

и оценивается величиной

$$\left| ВП_{n,\,s} \right| \le \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left| d_i \right| \qquad (12.19)$$

Здесь $\delta_i = f_i - \tilde{f}_i, i = 0, \ldots n$ – ошибки (погрешности) задания функции в узлах интерполяции и число $\delta > 0$ есть оценка этих ошибок:

$$\left| \delta_i \right| \le \delta, i = 0, 1, 2. \qquad (12.20)$$

Доказательство

Значение, соответствующее формуле оператора, составит

$$D_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i f_i$$

Значение, полученное по формуле оператора, составит

$$\tilde{D}_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i \tilde{f}_i$$

Вычислительная погрешность дифференцирования в соответствии с определением (12.17) составит

$$ВП_{n,\,s} = \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot f_i - \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \tilde{f}_i = \sum_{i=0}^{n} d_i (f_i - \tilde{f}_i) = \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \delta_i$$

Для модуля вычислительной погрешности с учетом действующих ограничений на погрешность задания функции записываем оценку

$$\left| ВП_{n,\,s} \right| = \left| \sum_{i=0}^{n} d_i \cdot \delta_i \right| \le \sum_{i=0}^{n} \left| d_i \cdot \delta_i \right| \le \sum_{i=0}^{n} \left| d_i \right| \cdot \delta = \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left| d_i \right|$$

что и требовалось доказать.

Комментарий

Поскольку в формулах операторов $D_{n,\,s}$ коэффициенты $d_i, i = 0,\ldots n$ обратно пропорциональны шагу сетки h или его положительным степеням, из (12.19) следует **вычислительная неустойчивость численного дифференцирования как такового: при сгущении сетки, то есть при $h \to 0$, вычислительная погрешность растет неограниченно:**

$ВП_{n,\,s} \to \infty$.

Общая погрешность оператора $D_{n,\,s}$

Определение 3. Общей погрешностью дифференцирования называют разность истинного значения производной $f^{(s)}(x^*)$ и значения $\tilde{D}_{n,\,s}$, **полученного** по формуле (12.10)**:**

$$ОП_{n,s} = f^{(s)}(x^*) - \tilde{D}_{n,\,s} \tag{12.21}$$

Прибавляя и вычитая «истинное» значение оператора $D_{n,\,s}$, получим

$$ОП_{n,\,s} = \underbrace{f^{(s)}(x^*) - \tilde{D}_{n,\,s}}_{\substack{\textit{общая}\\ \textit{погрешность}\\ \textit{дифференцирования}}} = \underbrace{f^{(s)}(x^*) - D_{n,\,s}}_{\substack{\textit{погрешность}\\ \textit{оператора}}} + \underbrace{D_{n,\,s} - \tilde{D}_{n,\,s}}_{\substack{\textit{вычислительная}\\ \textit{погрешность}\\ \textit{дифференцирования}}}$$

Вытекает результат:

Утверждение 3. Общая погрешность дифференцирования равна сумме погрешности дифференцирования (погрешность оператора) и вычислительной погрешности дифференцирования

$$ОП_{n,\,s} = \psi_{n,\,s} + ВП_{n,\,s} \tag{12.22}$$

Для нее справедлива оценка

$$\left| ОП_{n,\,s} \right| \le \left| \psi_{n,\,s} \right| + \left| ВП_{n,\,s} \right| \tag{12.23}$$

Оптимальный шаг численного дифференцирования

Пусть для погрешности оператора $D_{n,\,s}$ верна оценка (12.16)

$$\left|\,\psi_{n,s}\,\right| \le \hat{M} \cdot h^k$$

где $k > 0$ есть порядок погрешности и $\hat{M}$ не зависит от h.

Пусть для вычислительной погрешности дифференцирования верна оценка (12.19)

$$\left|\,В\Pi_{n,\,s}\,\right| \le \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left|\,d_i\,\right|$$

(потому что ошибки задания функции в узлах ограничены величиной $\delta > 0$).

Из (12.23) следует неравенство для общей погрешности дифференцирования:

$$\left|\,О\Pi_{n,\,s}\,\right| \le \hat{M}h^k + \delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left|\,d_i\,\right| \tag{12.24}$$

Если $h \to 0$, первое слагаемое (12.24) стремится к нулю, а второе – неограниченно растет (так как коэффициенты $d_i,\, i = 0,\ldots n$ обратно пропорциональны шагу сетки h или его положительным степеням).

Как следствие, шаг численного дифференцирования (шаг сетки)
не должен быть слишком велик

(чтобы оценка $\hat{M}h^k$ погрешности оператора была достаточно мала)

и не должен быть слишком мал

(чтобы оценка вычислительной погрешности $\delta \cdot \sum_{i=0}^{n} \left|\,d_i\,\right|$ не успела стать слишком большой)

В каждой конкретной ситуации на базе (12.24) подбирают оптимальный шаг численного дифференцирования

12.3.2. Построение и анализ центрального разностного оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ *для вычисления* $f''(x_i)$

$$f''(x_i) \sim [f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

Оператор получен на базе полинома $P_2(x)$, интерполирующего $f(x)$ в трех узлах **равномерной сетки**:

$$\begin{aligned} P_2(x_{i-1}) &= f(x_{i-1}) \\ P_2(x_i) &= f(x_i) \qquad . \\ P_2(x_{i+1}) &= f(x_{i+1}) \end{aligned}$$

Узлы интерполяции $x = x_{i-1}$, $x = x_i$, $x = x_{i+1}$,

значение $h = x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ есть шаг равномерной сетки

Обоснование $[f_{x\bar{x}}]_i$

Полагая $f(x)$ на отрезке $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ примерно «равной» своему интерполяционному полиному $P_2(x)$ степени не выше 2

$$f(x) \sim P_2(x)$$

«заменим» вторую производную функции второй производной от полинома:

$$f''(x_i) \sim \left(\frac{d^2}{dx^2} P_2(x) \right) \Bigg|_{x=x_i}$$

Для этого записываем $P_2(x)$ в форме Лагранжа:

$$\begin{aligned} P_2(x) = {} & \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})} \cdot f(x_{i-1}) + \\ & + \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})} \cdot f(x_i) + \\ & + \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} \cdot f(x_{i+1}) \end{aligned}$$

Вычисляем вторую производную по аргументу x:

$$P_2''(x) = \frac{2}{(-h)(-2h)} \cdot f_{i-1} + \frac{2}{h(-h)} \cdot f_i + \frac{2}{2h \cdot h} \cdot f_{i+1}$$

Затем нужно взять значение второй производной в точке $x = x_i$.

В силу того, что $P_2(x)$ имеет степень не выше 2, его вторая производная является константой и от выбора точки x не зависит.

Вторую производную полинома $P_2(x)$, вычисленную в точке $x = x_i$, обозначим через $[f_{x\bar{x}}]_i$

$$[f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

Далее полагаем, что оператор дифференцирования (разностный оператор) задан указанной выше формулой.

Значение искомой производной полагаем «равным» значению оператора:

$$f''(x_i) \sim [f_{x\bar{x}}]_i$$

Погрешность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ и свойства, вытекающие из анализа погрешности

Погрешностью оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ называют разность **истинного значения производной** $f''(x_i)$ и **значения оператора** $[f_{x\bar{x}}]_i$:

$$\psi = f''(x_i) - [f_{x\bar{x}}]_i$$

Чтобы исследовать погрешность оператора, применим к выражению

$$\psi = f''(x_i) - \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

формулу Тейлора в точке $x = x_i$ с остаточным слагаемым в форме Пеано и в форме Лагранжа.

Используя форму Пеано (формула выписывается до $o(h^4)$), получим

$$\psi = -\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i) + o(h^2)$$

откуда следует: в случае $f^{IV}(x_i) \neq 0$ порядок погрешности оператора $k = 2$, главный член погрешности равен $-\frac{h^2}{12} f^{IV}(x_i)$, $M = -\frac{1}{12} f^{IV}(x_i)$.

Если точка $x = x_i$ задана и зафиксирована и сетка стягивается к точке $x = x_i$

$$x_{i+1} = x_i + h, \qquad x_{i-1} = x_i - h, \qquad h \to 0,$$

оператор $[f_{x\bar{x}}]_i$ сходится к значению $f''(x_i)$

$$\lim_{h\to 0} \psi = \lim_{h\to 0} \left(M \cdot h^2 + o(h^2)\right) = 0.$$

Порядок погрешности $k = 2$ означает, что при уменьшении шага сетки в 10 раз погрешность оператора уменьшается в 100 раз.

Используя форму Лагранжа (формула выписывается до слагаемых степени 4), получим представление

$$\psi = -\frac{h^2}{24}\{ f^{IV}(\xi_i) + f^{IV}(\eta_i) \}$$

где неизвестные средние точки ξ_i, η_i находятся на отрезках $[x_{i-1}, x_i]$ и $[x_i, x_{i+1}]$ соответственно.

Чтобы построить **оценку погрешности оператора**, нужно выбрать некоторое (небольшое) положительное число $\tilde{h}$, которое определит диапазон таких значений шага h, для которых будет верна построенная оценка.

Предположим, что такое $\tilde{h} > 0$ выбрано. Тогда $\forall h > 0,\, h < \tilde{h}$ верно

$$|\,\psi\,| \le \hat{M} \cdot h^2,$$

где $\hat{M} = \dfrac{1}{12} \max\limits_{x \in [x_i - \tilde{h},\, x_i + \tilde{h}]} \left| f^{IV}(x) \right|$

Оценка погрешности оператора нужна для анализа общей погрешности дифференцирования.

Порядок оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Оператор имеет порядок 2, так как построен на основе интерполяционного полинома степени не выше 2 по трем узлам интерполяции.

Точность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Так как погрешность ψ определяется четвертой производной функции $f(x)$, результат численного дифференцирования будет точным для всех $f(x)$, которые являются полиномами от нулевой до третьей степени включительно (для таких полиномов четвертая производная и соответственно погрешность ψ обращаются в ноль).

Точность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ равна 3.

Вычислительная погрешность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Вычислительной погрешностью оператора

(вычислительной погрешностью дифференцирования) называют разность значения, **соответствующего** оператору $[f_{x\bar{x}}]_i$, и значения $[\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i$, **полученного** при попытке его вычислить:

$$ВП = [f_{x\bar{x}}]_i - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i$$

Ошибки (погрешности) задания функции в узлах интерполяции

обозначим через

$$\delta_j = f_j - \tilde{f}_j,\ j = i-1, i, i+1$$

Пусть число $\delta > 0$ есть оценка этих ошибок:

$$\left| \delta_j \right| \le \delta,\ j = i-1, i, i+1.$$

Предположим, что коэффициенты оператора, а именно, числа

$$\frac{1}{h^2},\ \frac{2}{h^2}$$

заданы точно и при вычислении оператора по формуле (12.10) погрешность выполнения арифметических операций отсутствует.

Тогда вычислительная погрешность оператора зависит от ошибок задания функции в узлах интерполяции

$$ВП = \frac{1}{h^2}(\delta_{i-1} - 2\delta_i + \delta_{i+1})$$

и оценивается следующим образом:

$$\left| ВП \right| \le \frac{4 \cdot \delta}{h^2}$$

Обоснование

Оценки вычислительной погрешности можно выписать на основе **Утверждения 2** или получить их непосредственно по формулам оператора.

Проведем выкладки самостоятельно.

Значение, соответствующее оператору, составит

$$[f_{x\bar{x}}]_i = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}$$

С учетом источников вычислительной погрешности значение, полученное по формуле оператора, составит

$$[\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i = \frac{\tilde{f}_{i+1} - 2\tilde{f}_i + \tilde{f}_{i-1}}{h^2}$$

Вычислительная погрешность дифференцирования в соответствии с определением записывается следующим образом:

$$ВП = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) - \frac{1}{h^2}\left(\tilde{f}_{i-1} - 2\tilde{f}_i + \tilde{f}_{i+1}\right)$$

что означает

$$ВП = \frac{1}{h^2}\left(\delta_{i-1} - 2\delta_i + \delta_{i+1}\right).$$

Оценим модуль вычислительной погрешности:

$$|\,ВП\,| = \left| \frac{1}{h^2}\left(\delta_{i-1} - 2\delta_i + \delta_{i+1}\right) \right| \le \frac{1}{h^2}\left(|\,\delta_{i-1}\,| + 2\,|\,\delta_i\,| + |\,\delta_{i+1}\,|\,\right)$$

С учетом ограничений на погрешность задания функции в узлах сетки записываем оценку

$$|\,ВП\,| \le \frac{1}{h^2}(1 + 2 + 1) \cdot \delta = \frac{4 \cdot \delta}{h^2}$$

Полученная оценка не является завышенной, потому что ошибки задания функции в соседних узлах сетки могут принимать максимальные по модулю и противоположные по знаку значения, например

$$\delta_{i-1} = \delta_{i+1} = \delta, \quad \delta_i = -\delta$$

В данном случае оценка вычислительной погрешности дифференцирования выполняется как равенство:

$$|\,ВП\,| = \frac{4 \cdot \delta}{h^2}$$

Общая погрешность оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$

Общей погрешностью оператора (общей погрешностью дифференцирования) называют разность **истинного значения производной** $f''(x_i)$ и значения $[\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i$, **полученного** при попытке вычислить оператор:

$$ОП = f''(x_i) - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i$$

Прибавляя и вычитая «истинное» значение оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$, получим

$$ОП = \underbrace{f''(x_i) - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i}_{\text{общая погрешность дифференцирования}} = \underbrace{f''(x_i) - [f_{x\bar{x}}]_i}_{\text{погрешность оператора}} + \underbrace{[f_{x\bar{x}}]_i - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_i}_{\text{вычислительная погрешность дифференцирования}}$$

В соответствии с приведенным рассуждением (или по **Утверждению 3**)

$$ОП = \psi + ВП$$

$$|\,ОП\,| \le |\,\psi\,| + |\,ВП\,|$$

Если функция $f(x)$ на отрезке интерполяции $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ достаточно гладкая и предположения об источниках вычислительной погрешности выполнены, **оценка общей погрешности дифференцирования** такова:

$$\forall h > 0,\, h < \tilde{h}$$

$$| \, O\Pi \, | \le \hat{M} h^2 + \frac{4 \cdot \delta}{h^2}$$

где $\hat{M} = \frac{1}{12} \max\limits_{x \in [x_i - \tilde{h}, \, x_i + \tilde{h}]} \left| f^{IV}(x) \right|$;

число $\delta > 0$ есть оценка ошибок задания функции в узлах сетки:

$$| \, \delta_j \, | \le \delta, \; j = i-1, i, i+1.$$

Через $\delta_j = f_j - \tilde{f}_j, \; j = i-1, i, i+1$ обозначены эти ошибки.

Комментарий

Если $h \to 0$, первое слагаемое оценки общей погрешности стремится к нулю, а второе – неограниченно растет.

Как следствие, шаг численного дифференцирования (шаг сетки)

не должен быть слишком велик

(чтобы оценка $\hat{M} h^2$ погрешности оператора была достаточно мала)

и не должен быть слишком мал

(чтобы оценка вычислительной погрешности $\frac{4 \cdot \delta}{h^2}$ не успела стать слишком большой)

В данном примере видим функционал, на базе которого нужно подбирать оптимальный шаг численного дифференцирования:

$$\Phi(h) = \hat{M} h^2 + \frac{4 \cdot \delta}{h^2} \to \min$$

Модуль 12.3 – Практикум по теме «Операторы численного дифференцирования и анализ погрешности»

Пример

Значения функции $f(x)=\dfrac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}x^2}$ представлены в таблице

с погрешностью не более половины единицы последнего разряда:

x_i	0.040	…	0.096	0.100	0.104	…	0.160
$\tilde{f}_i$	0.398623	…	0.397108	0.396953	0.396791	…	0.393868

Аргумент табулирован с шагом 0.004, но в этом фрагменте показан только аргумент $x=0.100$ и его ближние и дальние соседи.

В данной задаче нужно:

Вычислить приближенно $f''(0.100)$, используя центральный разностный оператор 2 порядка на симметричном шаблоне:

1) по ближним соседям;

2) по дальним соседям.

Провести анализ погрешности.

Сравнить результаты.

Решение

Поскольку $f(x)$ представлена с ошибками, в таблице указан символ $\tilde{f}_i$. По условию задачи погрешность задания функции в узлах сетки не превышает $\delta=0.5\cdot 10^{-6}$ (половина единицы последнего разряда).

Для вычисления $f''(0.100)$ нужно использовать центральный разностный оператор 2 порядка, то есть оператор, построенный на основе интерполяционного полинома степени 2. Дополнительное указание на симметричный шаблон (равномерную сетку) однозначно определяет оператор для вычисления $f''(x_i)$

$$[f_{x\bar{x}}]_i=\frac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{h^2}$$

с узлами $x=x_{i-1}$, $x=x_i$, $x=x_{i+1}$ и шагом $h=x_{i+1}-x_i=x_i-x_{i-1}$.

В качестве x_i следует взять $x=0.100$.

Чтобы вычислить приближенно $f''(0.100)$, используем два способа.

1) узлы $x_0 = 0.096,\ x_1 = 0.100,\ x_2 = 0.104$ и оператор

$$[f_{x\bar{x}}]_1 = \frac{f_0 - 2f_1 + f_2}{(0.004)^2} = \frac{0.397108 - 2\cdot 0.396953 + 0.396791}{16\cdot 10^{-6}}$$

(малый шаг и ближние соседи)

2) узлы $x_0 = 0.040,\ x_1 = 0.100,\ x_2 = 0.160$ и оператор

$$[f_{x\bar{x}}]_1 = \frac{f_0 - 2f_1 + f_2}{(0.06)^2} = \frac{0.398623 - 2\cdot 0.396953 + 0.393868}{36\cdot 10^{-4}}$$

(крупный шаг и дальние соседи)

В первом случае (малый шаг и ближние соседи) получим

$f''(0.100) \approx -0.4374999999987020$

Во втором случае (крупный шаг и дальние соседи) получим

$f''(0.100) \approx -0.3930555555555550$

Проведем анализ погрешности.

Общая погрешность дифференцирования для оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$ при значениях шага $h > 0,\ h < \tilde{h}$ оценивается неравенством

$$|\ O\Pi\ | \le \hat{M}h^2 + \frac{4\cdot\delta}{h^2}$$

где число $\delta > 0$ есть оценка ошибок задания функции в узлах сетки и константа $\hat{M}$ взята из оценки погрешности дифференцирования:

$$\hat{M} = \frac{1}{12}\max_{x\in[x_i-\tilde{h},\ x_i+\tilde{h}]}\left|\ f^{IV}(x)\right|;$$

Таким образом, слагаемое $\dfrac{4\cdot\delta}{h^2}$ является оценкой вычислительной погрешности и слагаемое $\hat{M}h^2$ оценивает погрешность дифференцирования.

В первом случае (малый шаг и ближние соседи)

оценка вычислительной погрешности

$$\frac{4\cdot\delta}{h^2}=\frac{4\cdot 0.5\cdot 10^{-6}}{(0.004)^2}=\frac{2\cdot 10^{-6}}{16\cdot 10^{-6}}=0.125$$

оценка погрешности дифференцирования

$$\hat{M}h^2=\frac{1}{12}\cdot\max_{x\in[0.1-0.004;0.1+0.004]}\left|f^{IV}(x)\right|\cdot(0.004)^2=0.097055667\cdot 16\cdot 10^{-6}$$
$$=0.155289067\cdot 10^{-5}$$

Общая погрешность дифференцирования оценивается величиной

$$\hat{M}h^2+\frac{4\cdot\delta}{h^2}=0.125001553$$

Во втором случае (крупный шаг и дальние соседи)

оценка вычислительной погрешности

$$\frac{4\cdot\delta}{h^2}=\frac{4\cdot 0.5\cdot 10^{-6}}{(0.06)^2}=\frac{2\cdot 10^{-6}}{36\cdot 10^{-4}}=0.555555556\cdot 10^{-3}$$

оценка погрешности дифференцирования

$$\hat{M}h^2=\frac{1}{12}\cdot\max_{x\in[0.1-0.06;0.1+0.06]}\left|f^{IV}(x)\right|\cdot(0.06)^2=0.099337\cdot 36\cdot 10^{-4}$$
$$=0.3576132\cdot 10^{-3}$$

Общая погрешность дифференцирования оценивается величиной

$$\hat{M}h^2+\frac{4\cdot\delta}{h^2}=0.913168756\cdot 10^{-3}$$

Вычисление $f''(0.100)$ на шаблоне с крупным шагом имеет преимущество – **оценка общей погрешности оказалась лучше:**

$\underbrace{|\,ОП\,|\le 0.913168756\cdot 10^{-3}}_{\textit{крупный шаг и дальние соседи}}$ лучше, чем $\underbrace{|\,ОП\,|\le 0.125001553}_{\textit{малый шаг и ближние соседи}}$.

Сравним результат с истинным значением $f''(0.100)$ (оно приведено по справочному изданию с погрешностью не более половины единицы последнего разряда)

$$f''(0.100) = -0.392983$$

В первом случае (малый шаг и ближние соседи)

истинная общая погрешность равна

$$ОП = f''(0.100) - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_1 =$$

$$= -0.392983 + 0.437450 = 0.445170 \cdot 10^{-1}$$

Во втором случае (крупный шаг и дальние соседи)

истинная общая погрешность равна

$$ОП = f''(0.100) - [\tilde{f}_{x\bar{x}}]_1 =$$

$$= -0.392983 + 0.393055 = 0.725555 \cdot 10^{-3}$$

Таким образом, на шаблоне с крупным шагом (дальние соседи)

приближенное значение $f''(0.100)$ вычислено (на 2 порядка) точнее.

На Рисунке 1 показан график оценки общей погрешности вычисления $f''(0.100)$ в зависимости от шага h, используемого в шаблоне оператора $[f_{x\bar{x}}]_i$.

За эту оценку отвечает

$$\Phi(h) = \hat{M}h^2 + \frac{4 \cdot \delta}{h^2},$$

где $\delta = 0.5 \cdot 10^{-6}$ и в качестве $\hat{M}$ взято значение

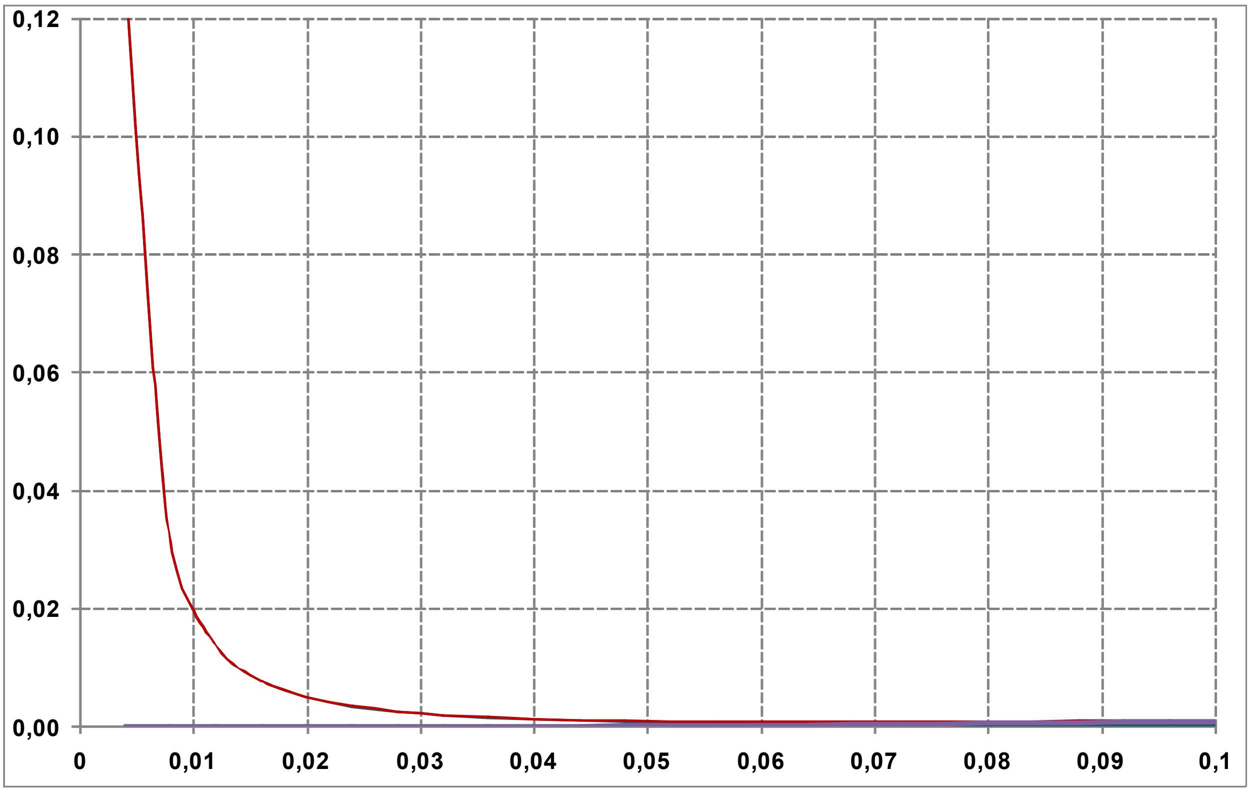
$$\hat{M} = \frac{1}{12} \max_{x \in [0.1-0.1,\, 0.1+0.1]} \left| f^{IV}(x) \right| = 0.099735583$$

Значение шага h, при котором $\Phi(h)$ достигает своего минимального значения, является оптимальным для нахождения $f''(0.100)$ с помощью $[f_{x\bar{x}}]_i$.

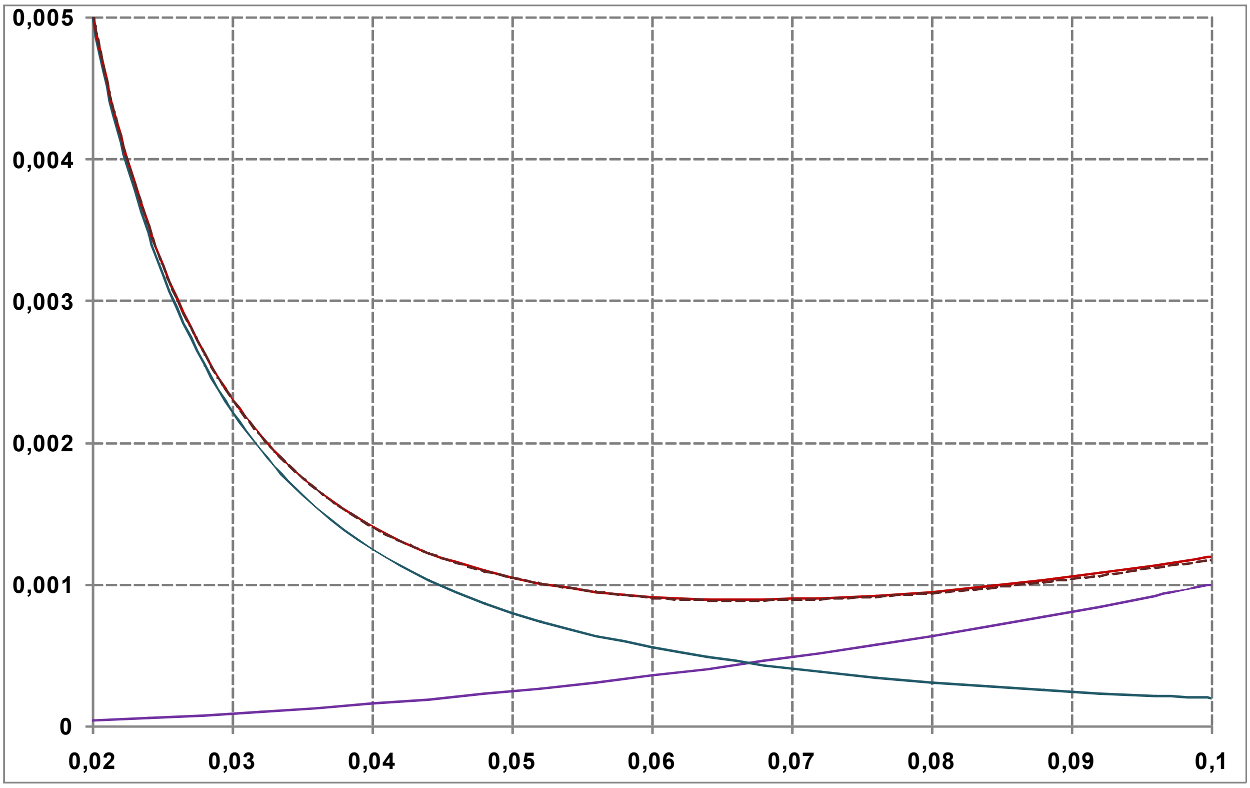
В данном случае минимум $\Phi(h)$ достигается при значениях шага, близких $h = 0.06$ (крупный шаг).

На рисунке показаны компоненты (слагаемые) $\Phi(h)$. Видно, что при $h \to 0$ оценка погрешности дифференцирования стремится к нулю, а оценка вычислительной погрешности уходит в бесконечность. **Малому шагу $h = 0.004$ соответствует большая оценка вычислительной и общей погрешности.**

Значения функции и ее производных приведены по справочному изданию: Таблицы математической статистики. Большев Л.Н., Смирнов Н.В. М.: Наука, 1983.



А)



Б)

Рисунок 1

График функции $\Phi(h) = \hat{M}h^2 + \dfrac{4 \cdot \delta}{h^2}$ (оценки общей погрешности численного дифференцирования) и ее компонент: А) при $h \in [0.004;\, 0.1]$; Б) при $h \in [0.02;\, 0.1]$.

ЛИТЕРАТУРА

а) литература по тематическому блоку

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – 7-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2011. – 636 с.
2. Вержбицкий В.М. Численные методы: математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Высшая школа, 2001. – 383 с.
3. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. М.: Физматгиз, 1963. – 660 с.
4. Хэмминг Р.В. Численные методы. М.: Наука, 1968. – 400 с.
5. Разностные схемы в задачах газовой динамики на неструктурированных сетках / Под ред. проф. В.Н. Емельянова, д.ф.-м.н. К.Н. Волкова. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2015. – 416 с.
6. Самарский А.А. Введение в численные методы: учеб. пособие для вузов. – Изд. 5-е, стер. – Сер. Классическая учебная литература по математике. – СПб: Лань, 2009. – 288 с.
7. Стронгина Н.Р., Баркалов К.А. Численные методы. Семестр 7. ЭУК, учебно-методический комплекс. Фонд электронных образовательных ресурсов ННГУ. Н. Новгород, 2014. Ид.н. 815Е.14.08.
8. Перов А.А., Протогенов А.П. Численные методы в физических исследованиях. – Н. Новгород: Нижегородский университет, 2019. – 69 с.

б) литература об организации учебного процесса по дисциплине

9. Садовничий В.А. Международный форум «Университеты, общество и будущее человечества». Доклад ректора МГУ имени М.В. Ломоносова академика В.А. Садовничего на Международном форуме «Университеты, общество и будущее человечества» 25 марта 2019 года. М.: Издательство Московского университета, 2019. – 36 с.
10. Высокопроизводительные параллельные вычисления. 100 заданий для расширенного лабораторного практикума. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2018. – 248 с.
11. Программы дисциплин по направлению «Прикладная математика и информатика». Учебно-методическое объединение Университетов. Учебно-методический совет по прикладной математике и информатике. М.: Изд-во факультета ВМиК МГУ, 2002. С. 59 – 62.
12. Стронгина Н.Р. Цифровизация и качество обучения на примере фундаментальной дисциплины «Численные методы» // Научные вести. 2021. №2 (31). – С. 85 – 103.

Наталья Романовна **Стронгина**

КУРС «ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»

Операторы численного дифференцирования и анализ погрешности

(Модуль 12.3)

Учебно-методическое пособие

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский
Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского».
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.