ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

ЛЕКЦИЯ №6

«Теория численного дифференцирования»

Отделение ядерно-топливного цикла

Лектор:
Зав. каф. - руководитель ОЯТЦ ИЯТШ
Горюнов А.Г.

2020

План лекции

6.1 Теория численного дифференцирования: разностные схемы, сеточная функция, аппроксимация и сходимость.

6.2 Вывод формул численного дифференцирования.

6.3 Остаточные члены простейших формул численного дифференцирования.

6.4 Оптимизация шага численного дифференцирования при ограниченной точности значений функций.

6.5 Применение пакета Matlab для решения задач численного дифференцирования сеточных функций

Информация по курсу:

https://portal.tpu.ru/SHARED/a/ALEX1479/study/Matmod/Tab

6.1 Теория численного дифференцирования

В вычислительной практике формулы численного дифференцирования наиболее часто применяются в следующих случаях:

1) Для определения производных функций, заданных таблично (сеточные функции);

2) Для аппроксимации производных при решении дифференциальных уравнений конечно-разностными методами.

6.1.1 Сеточные функции. Равномерная сетка.

Пусть на отрезке $[a, b]$ на равномерной сетке $\Omega_n(h_{i+1} = h = \text{const})$ заданы:

- сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = 0,1,\ldots, n$ своими значениями $f_i = f(x_i)$;
- точки x_j сетки Ω_n, в которых требуется найти значения производных;
- желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно h.

Требуется с заданным порядком точности (аппроксимации) вычислить значения производных:

$f^{(p)}(x)\big|_{x=x_j}$ в точках x_j сетки, где p - порядок производной, удовлетворяющих условию:

$$\left|f^{(p)}(x_j) - f^{(p)}(x_j)\right| \le C \cdot h^t,$$ где C = const, не зависящая от h

6.1.2 Сеточные функции. Неравномерная сетка.

Пусть на отрезке $[a, b]$ в общем случае на неравномерной сетке $\Omega_n(x_0, x_1, \ldots, x_n)$, $x_{i+1} = x_i + h_{i+1}$, $i = 0,1,2, \ldots, n\text{-}1$, $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ ($h_{i+1} = \mathrm{var}$) заданы:

- сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = 0,1,\ldots, n$ своими значениями $f_i = f(x_i)$ и(или) значениями интегралов

  $$I_i^{i+1} = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$$ на частичных отрезках $[x_i, x_{i+1}]$;

- точки x_j сетки Ω_n, в которых требуется найти значения производных;
- желательный порядок t точности (аппроксимации) относительно величины шага.

Требуется с заданным порядком точности (аппроксимации) вычислить значения производных

$$f^{(p)}(x)\Big|_{x=x_j}$$ в точках x_j сетки, где p - порядок производной.

6.1.3 Аппроксимация производных

Рассмотрим равномерную сетку:
$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b$, $x_i = x_0 + i \cdot h$, $0 \le i \le n$, $h = (b - a)/n$.

Допускаем, что функция $y = y(x)$ является дважды непрерывно дифференцируемой на интервале $[a, b]$. Тогда основываясь на определении производной

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

для первой производной справедлива формула дифференцирования вперёд:

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + O(h), \quad 0 \le i \le n - 1. \tag{6.1}$$

Обычно под формулой численного дифференцирования понимают приближенное равенство (**правая разностная производная**):

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h}. \tag{6.2}$$

6.1.3 Аппроксимация производных

Разность

$$R = y'(x_i) - \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} \qquad (6.3)$$

называется **погрешностью аппроксимации производной**. Если $y(x) \in C^2\,[a, b]$, то $R = O(h)$, то есть $|R| \le c \cdot h$, где c – константа, большая нуля, не зависящая от h. Таким образом, формула дифференцирования вперёд аппроксимирует первую производную с первым порядком точности по h.

Для задачи Коши:

$$\begin{cases} F(x, y, y') = 0 \\ y(x_0) = y_0 \end{cases} \qquad (6.4)$$

используя формулу дифференцирования вперёд, запишем разностную задачу (разностную схему)

$$\begin{cases} \dfrac{u_{i-1} - u_i}{h} = f(x_i, u_i), \quad 0 \le i \le n-1 \\ u_0 = y_0 \end{cases} \qquad (6.5)$$

Эта разностная задача называется **явной схемой Эйлера**

6.1.3 Аппроксимация производных

Термин «явная» и «неявная» схемы связаны с тем, что явная схема, например явная схема Эйлера, даёт возможность найти u_{i+1} по явной формуле:

$$u_{i+1} = u_i + h \cdot f\left(x_i, u_i\right), \tag{6.6}$$

где u_i – известная величина. В случае неявной схемы получается уравнение, в котором неизвестное u_{i+1} входит и в левую, и в правую часть:

$$u_{i+1} = u_i + h \cdot f\left(x_{i+1}, u_{i+1}\right). \tag{6.7}$$

Формулу дифференцирования вперёд называют **правой разностью**, формулу дифференцирования назад – **левой разностью**.

Для $y(x) \in C^2\,[a, b]$ справедлива формула численного дифференцирования, называемая **центральной разностью**:

$$y'\left(x_i\right) \approx \frac{y\left(x_{i+1}\right) - y\left(x_{i-1}\right)}{2h}. \tag{6.8}$$

Центральная разность аппроксимирует первую производную со вторым порядком по h.

6.1.3 Аппроксимация производных

Для вычисления производной $y'(x)$ можно получить формулы любого порядка точности, но в таких формулах с ростом порядка точности возрастает и число используемых значений функции. Например, формула, имеющая четвертый порядок точности, будет иметь вид:

$$y'(x_i) \approx \frac{y(x_{i-2}) - 8y(x_{i-1}) + 8y(x_{i+1}) - y(x_{i+2})}{12h}. \tag{6.9}$$

Вычисление второй производной. Наиболее простая и часто используемая для приближенного вычисления второй производной формула имеет вид:

$$y''(x_i) \approx \frac{y(x_{i-1}) - 2y(x_i) + y(x_{i+1})}{h^2}. \tag{6.10}$$

6.1.4 Сходимость разностных схем

Разностная схема (6.5) называется **сходящейся**, если при сгущении узлов сетки значение погрешности ***R*** стремится к нулю.

6.2 Вывод формул численного дифференцирования

Распространенным способом вывода формул численного дифференцирования является метод неопределенных коэффициентов. Источниками формул могут служить различные формы интерполяционных полиномов и разложения функций в ряды Тейлора.

6.2.1 Метод неопределенных коэффициентов

Производную $y^{(k)} = f^{(k)}(x)$ функции $y = f(x)$ представим в виде линейной комбинации ее значений в узлах сетки аргумента x: $x_0, x_1, x_2, \dots, x_N$:

$$f^{(k)}(\xi) \approx \sum_{n=0}^{N} C_n f(x_n). \qquad (6.11)$$

Здесь точка ξ принадлежит отрезку $[x_0, x_N]$. При этом коэффициенты C_n формулы (6.11) определяются, исходя из дополнительных условий. Например, таким условием может являться требование чтобы формула имела точность для полинома максимально высокой степени M:

$$P_M(x) = \sum_{m=0}^{M} a_m x^m \qquad (6.12)$$

В этом случае (6.11) обратиться в точное равенство.

6.2.1 Метод неопределенных коэффициентов

Подставим (6.12) в (6.11) и получим:

$$\sum_{m=0}^{M} a_m \left(\xi^m\right)^{(k)} = \sum_{n=0}^{N} C_n \sum_{m=0}^{M} a_m x_n^m. \qquad (6.13)$$

Для выполнения равенства (6.13) при любом полиноме степени *M* необходимо и достаточно, чтобы множители всех коэффициентов am в правой и левой частях были равны. Это дает систему из *M*+1 линейных уравнений:

$$\sum_{n=0}^{N} C_n x_n^m = \left(\xi^m\right)^{(k)}, \quad m = 0,1,\ldots,M. \qquad (6.14)$$

Если *M* = *N*, то в системе (6.14) число уравнений равно числу неизвестных и определитель системы отличен от 0, и эта система всегда имеет единственное решение, что означает возможность всегда построить формулу численного дифференцирования вида (6.11) с *N*+1 узлом, точную для полинома степени *N*.

6.3 Остаточные члены простейших формул численного дифференцирования

Правую и левую разностные производные можно представить в виде:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \tag{6.15}$$

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h}, \tag{6.16}$$

соответствующие выбору фиксированных значений $\Delta x = h$ и $\Delta x = -h$, $h > 0$ – малый параметр (шаг). Оценку погрешностей

$$r_+(x,h) = f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

$$r_-(x,h) = f'(x) - \frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$

можно получить, воспользовавшись формулой Тейлора:

6.3 Остаточные члены простейших формул численного дифференцирования

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(\varepsilon_{\pm})}{2}h^2. \tag{6.17}$$

Здесь ε_+ и ε_- некоторые точки, расположенные на интервалах (x, $x + h$) и ($x - h$, x) соответственно. Подставляя разложения (6.17) для $r_{\pm}$ получим следующие оценки погрешностей:

$$\left|r_+(x,h)\right| \le \frac{1}{2}M_2 h, \quad M_2 = \max_{[x,x+h]}\left|f''(\varepsilon)\right| \tag{6.18}$$

$$\left|r_-(x,h)\right| \le \frac{1}{2}M_2 h, \quad M_2 = \max_{[x-h,x]}\left|f''(\varepsilon)\right| \tag{6.19}$$

Таким образом, формулы (6.15), (6.16) имеют первый порядок точности по h.

6.3 Остаточные члены простейших формул численного дифференцирования

Формула центральной разностной производной имеет вид:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}. \tag{6.20}$$

Подставляя в выражение для погрешности

$$r_0(x,h) = f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$

соответствующие разложение по формуле Тейлора получим следующую оценку погрешности

$$\left| r_0(x,h) \right| \le \frac{M_3}{6} h^2, \quad M_3 = \max_{[x-h,x+h]} \left| f^{(3)}(\varepsilon) \right| \tag{6.21}$$

Таким образом, центральная разностная производная аппроксимирует производную $f'(x)$ со вторым порядком точности относительно h.

6.4 Оптимизация шага численного дифференцирования при ограниченной точности значений функций

Оптимизацию шага рассмотрим на примере правой разности. Из оценки (6.18) видно, что погрешность метода стремиться к 0 при $h \to 0$. Учтем, что заданные величины y_{i+1}, y_i приближают соответствующие значения функции с абсолютной погрешностью ε :

$$\left|y\left(x_{i+1}\right)-y_{i+1}\right| \le \varepsilon; \; \left|y\left(x_i\right)-y_i\right| \le \varepsilon \qquad (6.22)$$

Тогда приходим к равенству ,

$$\frac{y\left(x_{i+1}\right)-y\left(x_i\right)}{h}=\frac{y_{i+1}-y_i}{h}+R_i\left(h\right)$$

где величину $R_i(h)$ называют неустранимой погрешностью.

6.4 Оптимизация шага численного дифференцирования при ограниченной точности значений функций

Оценим неустранимую погрешность. Из последнего равенства имеем

$$R_i\left(h\right)=\frac{y\left(x_{i+1}\right)-y\left(x_i\right)}{h}-\frac{y_{i+1}-y_i}{h}=\frac{\left[y\left(x_{i+1}\right)-y_{i+1}\right]-\left[y\left(x_i\right)-y_i\right]}{h}$$

Из этого выражения с учетом (6.22) получаем оценку

$$\left|R_i\left(h\right)\right|\leq\frac{\left|y\left(x_{i+1}\right)-y_{i+1}\right|-\left|y\left(x_i\right)-y_i\right|}{h}\leq\frac{2\varepsilon}{p}=R\left(h\right) \qquad (6.23)$$

Из оценки (6.23) видно, что неустранимая погрешность стремится к бесконечности при $h\to0$. Пренебрегая вычислительной погрешностью, для общей погрешности получаем оценку:

6.4 Оптимизация шага численного дифференцирования при ограниченной точности значений функций

$$\left|E_i(h)\right| = \left|y(x_i) - \frac{y_{i+1} - y_i}{h}\right| =$$

$$= \left|y(x_i) - \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} - \frac{y_{i+1} - y_i}{h}\right| \leq$$

$$\leq r(h) + R(h) = E(h)$$

Найдем теперь оптимальную величину шага, при которой общая оценка погрешности

$$E(h) = r(h) + R(h) = \frac{h}{2}M_2 + \frac{2\varepsilon}{h} \qquad (6.24)$$

будет минимальной. Из уравнения $E(h) = \frac{1}{2}M_2 - \frac{2\varepsilon}{h^2} = 0$

находим искомую величину шага $h_{\text{опт}} = 2\sqrt{\dfrac{\varepsilon}{M_2}}$

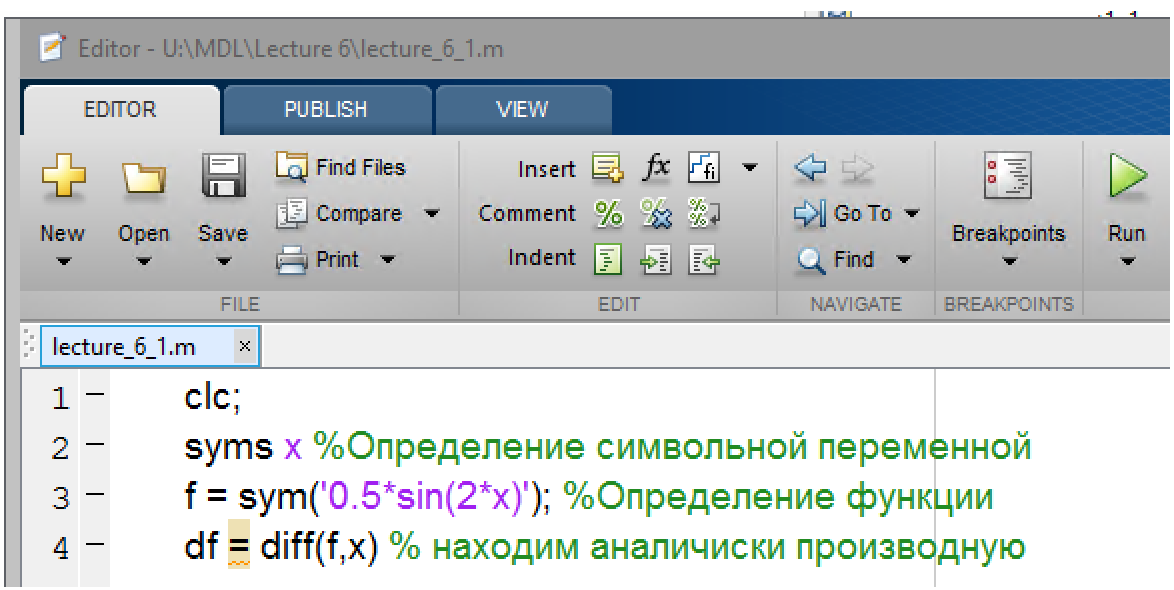
При этом для общей погрешности получается минимальная оценка $E_{\min} = 2\sqrt{\varepsilon M_2}$

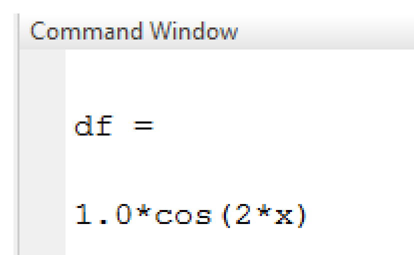
6.5 Применение пакета Matlab для решения задач численного дифференцирования сеточных функций

6.5.1 Символьное дифференцирование в Matlab

Рассмотрим символьное дифференцирование на примере функции:

$$y = 0.5 \cdot \sin(2x), \quad \{x \text{ от } 1 \text{ до } 6, \text{ шаг } 0.2\}$$



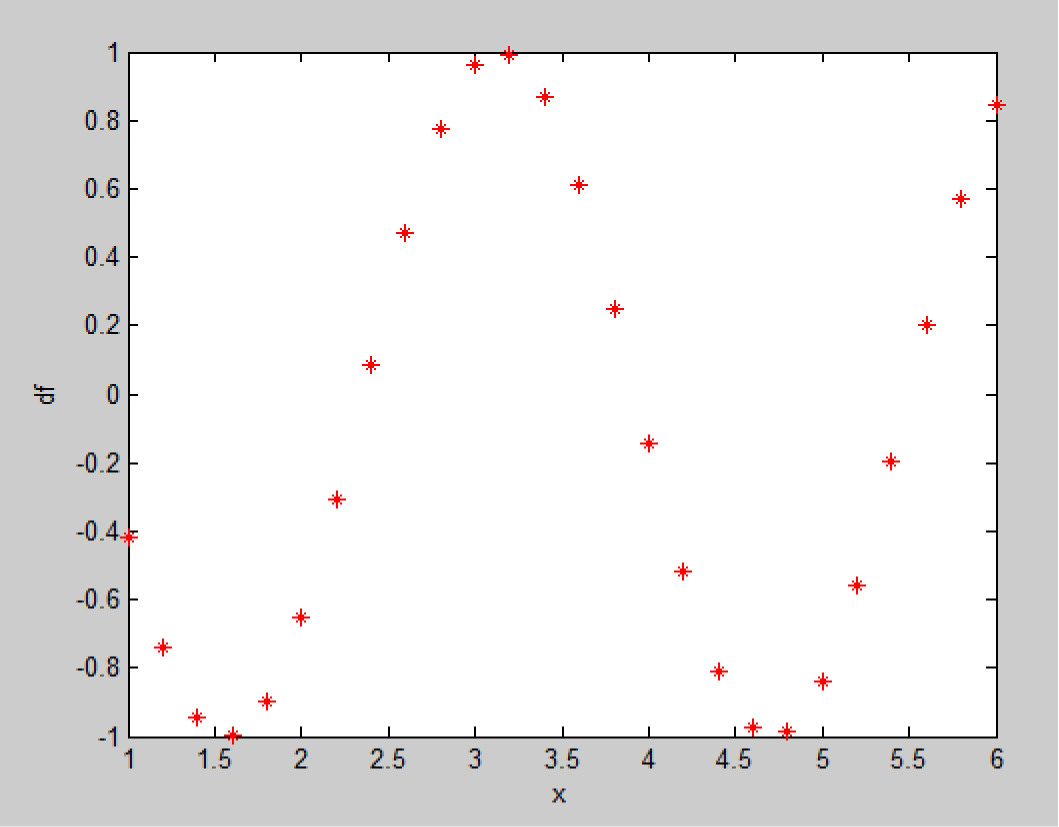


6.5.2 Создаем сеточную функцию

```
clc;
syms x %Определение символьной переменной
f = sym('0.5*sin(2*x)'); %Определение функции
df = diff(f,x) % находим аналички производную

v = symvar(f); % получаем список переменых
dFa = @(X) double( subs(df,v,X)); % создаем функцию


x = 1:0.2:6; % создаем заданный массив узловых точек x [1,6] с шагом 0.2
y = 0.5*sin(2*x);
dFa_x = dFa(x);
plot(x,dFa_x,'r*');
```



6.5.3 Численное дифференцирование правой разностью

```
n = length(x);

% Численное определение производной с помощью правой разности
h = x(2) - x(1);
dFp = [];
for i=1:n-1
    dFp(i) = (y(i+1) - y(i))/h;
end
dFp(n) = dFa_x(n);
delta = [];
sko = 0;
for i=1:n
    delta(i) = dFa_x(i) - dFp(i);
    sko = sko + (delta(i))^2;
end
sko = sqrt(sko/(n));
sko_p = 100*sko/(max(dFa_x) - min(dFa_x)
plot(x,dFa_x,'r*',x,dFp,'k*');
```

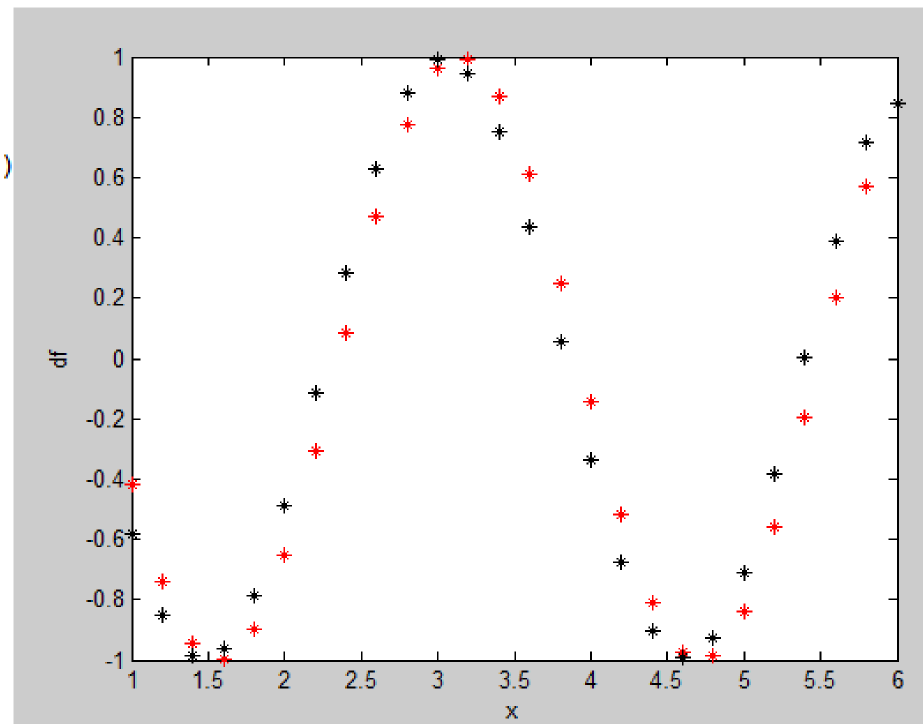
Command Window

```
df =

1.0*cos(2*x)


sko_p =

    6.9841
```



6.5.4 Численное дифференцирование левой разностью

```
% % Численное определение производной с помощью левой разности
h = x(2) - x(1);
dFl = [];
for i=2:n
    dFl(i) = (y(i) - y(i-1))/h;
end
dFp(1) = dFa_x(1);
delta = [];
sko = 0;
for i=1:n
    delta(i) = dFa_x(i) - dFl(i);
    sko = sko + (delta(i))^2;
end
sko = sqrt(sko/(n));
sko_l = 100*sko/(max(dFa_x) - min(dFa_x)
plot(x,dFa_x,'r*',x,dFl,'k*');
```

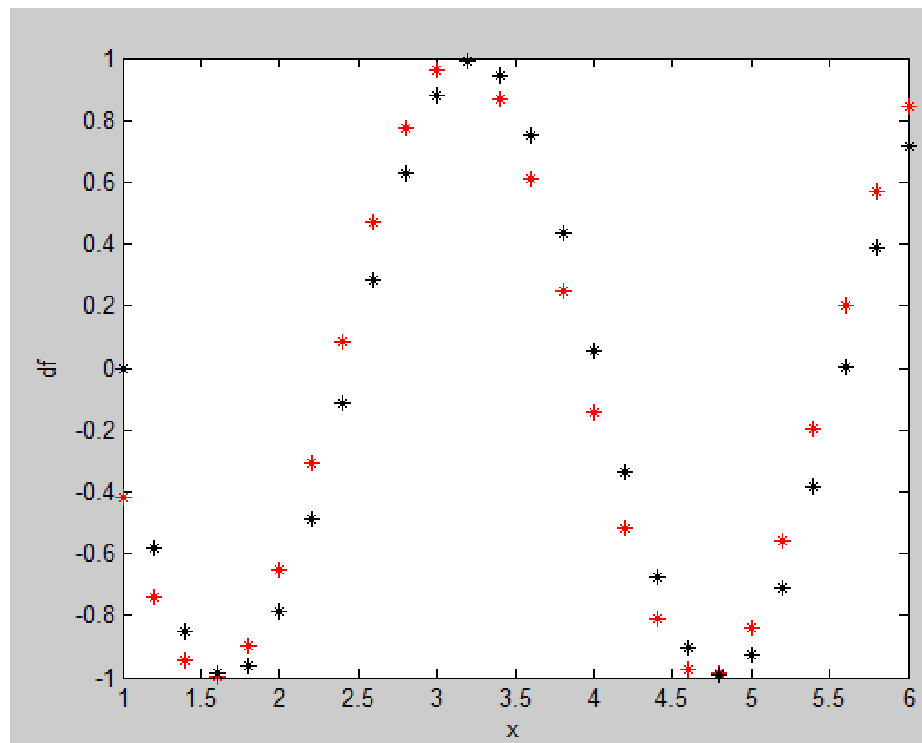
Command Window

```
df =

1.0*cos(2*x)


sko_l =

    8.0538
```



6.5.5 Численное дифференцирование центральной разностью

```
% Численное определение производной с помощью центральной разности
h = x(2) - x(1);
dFc = [];
for i=2:n-1
    dFc(i) = (y(i+1) - y(i-1))/(2*h);
end
dFc(1) = dFa_x(1);
dFc(n) = dFa_x(n);
delta = [];
sko = 0;
for i=1:n
    delta(i) = dFa_x(i) - dFc(i);
    sko = sko + (delta(i))^2;
end
sko = sqrt(sko/(n));
sko_c = 100*sko/(max(dFa_x) - min(dFa_x))
plot(x,dFa_x,'r*',x,dFc,'k*');
```

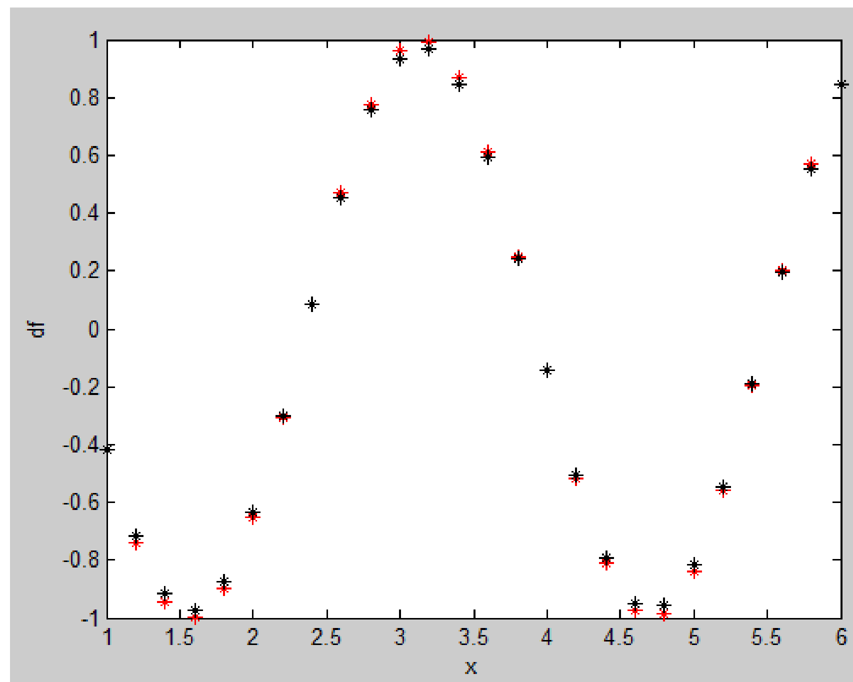
Command Window

```
df =

1.0*cos(2*x)


sko_c =

    0.9013
```



6.5.6 Численное дифференцирование 4 порядком

```
% Численное определение производной с помощью разностной формулы 4-го
% порядка точности
h = x(2) - x(1);
dF_4 = [];
for i=3:n-2
    dF_4(i) = (y(i-2) - 8*y(i-1) + 8*y(i+1) - y(i+2))/(12*h);
end
dF_4(1) = dFa_x(1);
dF_4(2) = dFa_x(2);
dF_4(n-1) = dFa_x(n-1);
dF_4(n) = dFa_x(n);
delta = [];
sko = 0;
for i=1:n
    delta(i) = dFa_x(i) - dF_4(i);
    sko = sko + (delta(i))^2;
end
sko = sqrt(sko/(n));
sko_4 = 100*sko/(max(dFa_x) - min(dFa_x)
plot(x,dFa_x,'r*',x,dF_4,'k*');
```

Command Window

```
df =

1.0*cos(2*x)


sko_4 =

    0.0275
```