Глава 1

Численное дифференцирование

Данный семинар знакомит с методами численного дифференцирования для вычисления первой и второй производной. Обсуждаются погрешности приведенных численных методов и рассматривается влияние точности машинной арифметики на результаты вычислений.

1.1 Вычисление первой производной

По определению, первая производная гладкой функции $f(x)$ в точке x вычисляется как

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

При вычислении первой производной функции $f(x)$ на компьютере мы заменяем бесконечно малое $h \to \infty$ на малое, но *конечное* значение h:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathrm{O}(h), \tag{1.1}$$

где $\mathrm{O}(h)$ — ошибка вычисления производной, естественно зависящая от h. Формула (1.1) называется разностной схемой для вычисления первой производной (более точно — правой разностной схемой или просто правой разностью). Аналогично, может быть записана левая разностная схема.

Как определить $\mathrm{O}(h)$? Разложим функцию $f(x)$ в ряд Тейлора в точке $x + h$:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \frac{h^3}{6} f'''(x) + \dots,$$

откуда следует, что в первом порядке разложения

$$\mathrm{O}(h) = -\frac{h}{2} f''(x) + \dots\,. \tag{1.2}$$

При выборе очень малого h ошибки округления при вычислении на компьютере могут быть сравнимы или больше h. Следовательно мы заинтересованы в алгоритме, дающим меньшую величину ошибки при той же величине h.

Такой улучшенный алгоритм легко получить разлагая функцию $f(x)$ в ряд Тэйлора в точках $x + h$ и $x - h$, вычитая затем один результат из другого, что дает

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathrm{O}(h^2), \tag{1.3}$$

где погрешность вычисления первой прозводной

$$\mathrm{O}(h^2) = -\frac{h^2}{6} f'''(x) + \ldots . \tag{1.4}$$

Это — центральная разностная схема (центральная разность).

В принципе, можно пойти по пути улучшения точности метода вычисления первой производной и дальше. Например, рассматривая разложение функции $f(x)$ в ряд Тэйлора в точках $x+h$, $x+2h$, $x-h$ и $x-2h$, можно получить четырехточечную схему и т.д.

1.2 Вычисление второй производной

По аналогии с получением разностных схем для вычисления первой производной могут быть получены разностные схемы для второй производной функции $f(x)$. Мы не будем приводить здесь вывод этих схем, а запишем лишь одну из наиболее часто используемых схем:

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathrm{O}(h^2) \tag{1.5}$$

с погрешностью

$$\mathrm{O}(h^2) = -\frac{h^2}{12} f''''(x) + \ldots . \tag{1.6}$$

1.3 О погрешности вычислений

При вычислении функции $f(x)$ на компьютере, мы имеем дело с ее машинным представлением

$$f^c(x) = f(x)(1 + \epsilon(x)),$$

где $\epsilon(x)$ — относительная погрешность вычисления $f(x)$. Мы будем полагать, что во всей области интересующих нас значений x эта погрешность может быть оценена как $|\epsilon(x)| \le \epsilon \ll 1$. Величина ϵ связана с конечным числом значащих цифр при представлении $f(x)$ в памяти компьютера. Например, при вычислении функции $f(x)$ с одинарной точностью (single) на языке Turbo Pascal $\epsilon \approx 10^{7\div 8}$, а с двойной точностью (double) — $\epsilon \approx 10^{15\div 16}$.

Выполняя численное дифференцирование функции $f^c(x)$ по формуле (1.1) получаем

$$\frac{f^c(x+h) - f^c(x)}{h} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + f\frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{h}.$$

Используя разложение функции $f(x)$ в точке $x+h$ в ряд Тейлора

$$f(x+h) = f + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(x) + \mathrm{O}(h^3),$$

получаем

$$\frac{f^c(x+h) - f^c(x)}{h} = f'(x) + \mathrm{O}(f''(x)h) + \mathrm{O}\left(\frac{\epsilon f(x)}{h}\right).$$

Отсюда видно, что погрешность численного дифференцирования определяется двумя вкладами. Первый вклад называется погрешностью аппроксимации и связан с заменой оператора дифференцирования оператором конечной разности. Этот вклад в погрешность имеет величину

$$\mathrm{O}(f''(x)h) = \frac{h}{2} f''(x)$$

и стремится к нулю при $h \to 0$. Степень h в погрешности аппроксимации называют *порядком аппроксимации*.

Второй вклад в погрешность вычислений

$$\mathrm{O}\left(\frac{\epsilon f(x)}{h}\right) = \frac{2\epsilon f(x)}{h}$$

связан с неточностью вычисления на компьютере и при $h \to 0$ стремится к бесконечности.

Полная погрешность вычислений есть сумма погрешности аппроксимации и неточности вычислений:

$$\frac{h}{2} f''(x) + \frac{2\epsilon f(x)}{h}. \tag{1.7}$$

Легко грубо вычислить оптимальный шаг h_0, при котором полная погрешность минимальна:

$$h_0 \approx \sqrt{4\left|\frac{\epsilon f(x)}{f''(x)}\right|}. \tag{1.8}$$

Оценим полную погрешность для формулы (1.3) центральных разностей:

$$f'(x) \approx \frac{f^c(x+h) - f^c(x-h)}{2h} = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathrm{O}\left(\frac{\epsilon}{h} f(x)\right).$$

Разлагая в ряд Тейлора функцию $f(x)$ в точках $x + h$ и $x - h$, получаем

$$\frac{f^c(x+h) - f^c(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{3} f'''(x) + \mathrm{O}(h^3) + \mathrm{O}\left(\frac{\epsilon}{h} f(x)\right).$$

Здесь погрешность аппроксимации имеет второй по h порядок, а оптимальный шаг

$$h_0 \approx \left(\left|\frac{3\epsilon f}{2} f'''(x)\right|\right)^{1/3}. \tag{1.9}$$

В заключение, оценим погрешность вычисления второй производной по формуле (1.5). Погрешность аппроксимации можно вычислить с использованием разложений функции $f(x)$ в точках $x+h$ и $x-h$, в то время как погрешность округления равна $(4\epsilon/h^2)f(x)$. Полная погрешность равна

$$\frac{h^2}{12} f''''(x) + \frac{4\epsilon}{h^2}|f(x)| \tag{1.10}$$

и оптимальный шаг:

$$h_0 \approx \left(\left|\frac{48\epsilon f}{f''''(x)}\right|\right)^{1/4}. \tag{1.11}$$

Надо отметить, что оптимальный шаг для всех приведенных выше формул достигается, когда погрешности аппроксимации и округления близки.

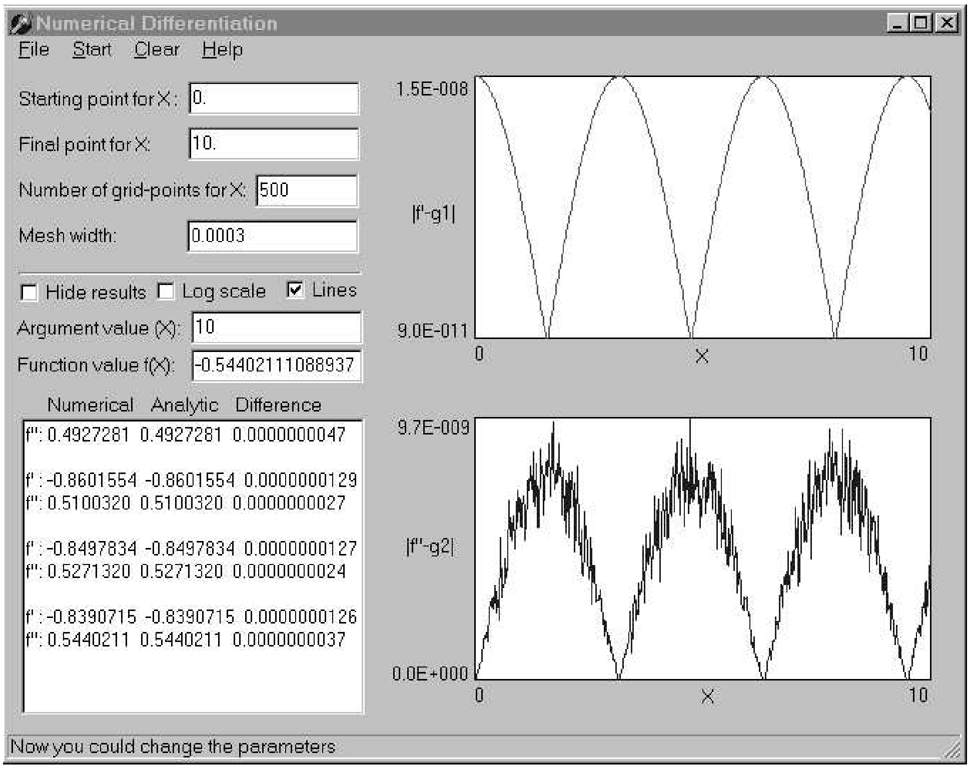

Рис. 1.1: Пример работы программы численного дифференцирования.

1.4 Задание для практической работы

Требуется написать программу, вычисляющую значения первой и второй производной заданной функции $f(x)$ в произвольных точках x по разностным схемам (1.3) и (1.5), соответственно. Наряду с вычислением производных программа должна определять погрешность вычислений производных. Результаты вычислений должны быть представлены графически (см., например, рис. 1.1).

Возьмем для исследования функцию $f(x) = \sin(x)$, первая и вторая производная которой равны $f'(x) = \cos(x)$ и $f''(x) = -\sin(x)$, соответственно. Численные значения первой и второй производной, рассчитанные по приведенным выше разностным схемам, будем обозначать как $g_1(x)$ и $g_2(x)$, соответственно. Погрешности вычислений составят:

$$d_1(x) = |f'(x) - g_1(x)| \quad \text{и} \quad d_1(x) = |f''(x) - g_2(x)|. \tag{1.12}$$

Упражнение 1

Вычислить с одинарной точностью производные $g_1(x)$, $g_2(x)$ и погрешности $d_1(x)$, $d_2(x)$ для различных значений x и шага h. Построить графики зависимостей $d_1(x)$, $d_2(x)$ при различных значениях h. Изменяя значение h, вы увидите, что сначала точность вычислений увеличивается, а затем начинает уменьшаться. В какой области значений должен лежать шаг h, чтобы обе производные вычислялись с точностью 3 или 2 значащие цифры после десятичной точки? По какой причине точность уменьшается с уменьшением шага h после определенного порога? Какая из производных более чувствительна к этому? Как изменится область изменения h для точности в 3 и 2 значащие цифры, если мы возьмем более быстро осциллирующую функцию, например $f(x) = \sin 100x$?

Упражнение 2

Что происходит с результатами вычислений в окрестности точек $x = 0$, $\pi/2$, $\pi, \ldots$? Как вы это объясните?

Упражнение 3

Исследуйте зависимости $d_1(x)$, $d_2(x)$ для различных значений h. Как зависит погрешность вычислений от величины шага h? Постройте эту зависимость экспериментально.

Упражнение 4

Упражнение 1 было выполнено с одинарной точностью вычислений. Измените программу для выполнения вычислений с двойной точностью и повторите Упражнение 1. Расширятся ли допустимые области изменения h для заданного числа рассчитываемых значащих цифр?

Упражнение 5

Выполните Упражнение 1 для $f(x) = \ln(x)$ и $f(x) = \exp(x)$.

Литература

[1] Р. П. Федоренко, *Введение в вычислительную физику*. — М.: Изд-во Моск. физ.-техн. ин-та, 1994.

[2] Х. Гулд, Я. Тоболчик, *Компьютерное моделирование в физике*. В 2-х частях. Пер. с англ. — М.: Мир, 1990.

[3] Д. В. Хеерман, *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*. Пер. с англ. — М.: Наука, 1990.

[4] К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*. Пер. с англ. — М.: Наука, 1995.

[5] Н. С. Бахвалов, *Численные методы*. — М.: Наука, 1975.

[6] Н. Н. Калиткин, *Численные методы*. — М.: Наука, 1978.

[7] Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*. — М.: Физматгиз, 1968.

[8] А. Н. Матвеев, *Механика и теория относительности*. — М.: Высш. шк. 1986.