Вычисление производных сеточных функций

Пусть сеточная функция задана на сетке x_i, при $i = 0, \ldots, n$ своими значениями f_i. Интерполяционный полином

$$L_n(x) = f_0 + \sum_{k=0}^{n-1} f_{0,k+1}\,\omega_k(x)$$

позволяет оценить значения производных сеточной функции. Продифференцируем $L_n(x)$:

$$L_n'(x) = f_{0,1} + \sum_{k=1}^{n-1} f_{0,k+1}\,\omega_k'(x),$$

$$L_n''(x) = 2f_{0,2} + \sum_{k=2}^{n-1} f_{0,k+1}\,\omega_k''(x).$$

Производные базисных полиномов можно вычислять следующим образом:

$$\omega_k'(x) = \sum_{j=0}^{k} \prod_{\substack{l=0\\ l\neq j}}^{k} (x - x_l) = \sum_{j=0}^{k} \frac{\omega_k(x)}{x - x_j} = \omega_k(x)\varepsilon_k(x), \qquad \varepsilon_k(x) = \sum_{j=0}^{k} \frac{1}{x - x_j};$$

$$\omega_k''(x) = \omega_k'(x)\varepsilon_k(x) + \omega_k(x)\varepsilon_k'(x) = \omega_k(x)\varepsilon_k^2(x) + \omega_k(x)\varepsilon_k'(x) = \omega_k(x)\theta_k(x),$$

$$\theta_k(x) = \varepsilon_k^2(x) + \varepsilon_k'(x) = \sum_{i,j=0}^{k} \frac{1}{(x - x_i)(x - x_j)} - \sum_{j=0}^{k} \frac{1}{(x - x_j)^2} = $$

$$= \sum_{\substack{i,j=0\\ i\neq j}}^{k} \frac{1}{(x - x_i)(x - x_j)}\,.$$

Формулы

$$L_n'(x) = f_{0,1} + \sum_{k=1}^{n-1} f_{0,k+1}\,\omega_k(x)\varepsilon_k(x),$$

$$L_n''(x) = 2f_{0,2} + \sum_{k=2}^{n-1} f_{0,k+1}\,\omega_k(x)\theta_k(x)$$

позволяют вычислять значение первой и второй производной интерполяционного многочлена в точках отличных от узлов x_i, которые могут служить оценками производных сеточной функции.

Вычисление производных в узлах сетки осложняется появлением неопределенностей типа $\frac{0}{0}$ в ряде слагаемых. Устранив неопределенности, получим следующие формулы для вычисления производных в узле x_p:

$$L_n'(x_p) = f_{0,1} + \sum_{k=1}^{p-1} f_{0,k+1}\,\omega_k(x_p)\varepsilon_k(x_p) + \sum_{k=\max(p,1)}^{n-1} f_{0,k+1}\,\omega_k'(x_p), \qquad \omega_k'(x_p) = \prod_{\substack{l=0\\ l\neq p}}^{k} (x_p - x_l),$$

$$L_n''(x_p) = 2f_{0,2} + \sum_{k=2}^{p-1} f_{0,k+1}\,\omega_k(x_p)\theta_k(x_p) + \sum_{k=\max(p,2)}^{n-1} f_{0,k+1}\,\omega_k''(x_p),$$

$$\omega_k''(x_p)=\sum_{\substack{i,j=0\\ i\neq j}}^{k}\frac{\omega_k(x_p)}{(x_p-x_i)(x_p-x_j)}=\sum_{\substack{i=0\\ i\neq p}}^{k}\frac{\omega_k(x_p)}{(x_p-x_i)(x_p-x_p)}+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq p}}^{k}\frac{\omega_k(x_p)}{(x_p-x_p)(x_p-x_j)}=$$
$$=\sum_{\substack{i=0\\ i\neq p}}^{k}\frac{\omega_k'(x_p)}{x_p-x_i}+\sum_{\substack{j=0\\ j\neq p}}^{k}\frac{\omega_k'(x_p)}{x_p-x_j}=2\sum_{\substack{j=0\\ j\neq p}}^{k}\prod_{\substack{l=0\\ l\neq j,p}}^{k}(x_p-x_l).$$

В случае равномерной сетки формулы для вычисления производных в узлах можно упростить. Будем искать производные в узле x_p по известным значениям функции в следующем виде:

$$f'(x_p)=\frac{1}{h}\sum_{k=0}^{n}C_{pk}f_k+O(h^n),$$
$$f''(x_p)=\frac{1}{h^2}\sum_{k=0}^{n}D_{pk}f_k+O(h^{n-1}),$$

h — шаг сетки. Все значения функции f_k можно представить по формуле Тейлора через значение f_p:

$$f_k=f_p+\sum_{j=1}^{n}\frac{f^{(j)}(x_p)}{j!}\,h^j(k-p)^j+O(h^{n+1}).$$

Подставив их в формулы для производных, получим

$$f'(x_p)=\frac{1}{h}\sum_{k=0}^{n}C_{pk}f_p+\sum_{k=0}^{n}C_{pk}f'(x_p)(k-p)+\frac{1}{h}\sum_{k=0}^{n}C_{pk}\sum_{j=2}^{n}\frac{f^{(j)}(x_p)}{j!}\,h^j(k-p)^j+O(h^n),$$

$$f''(x_p)=\frac{1}{h^2}\sum_{k=0}^{n}D_{pk}\big(f_p+f'(x_p)h(k-p)\big)+\sum_{k=0}^{n}D_{pk}\frac{f''(x_p)}{2}(k-p)^2+$$
$$+\frac{1}{h^2}\sum_{k=0}^{n}D_{pk}\sum_{j=3}^{n}\frac{f^{(j)}(x_p)}{j!}\,h^j(k-p)^j+O(h^{n-1}).$$

Отсюда сразу видно, что коэффициенты C_{pk} и D_{pk} должны удовлетворять ряду условий, чтобы формулы представляли соответствующую производную: первая и третья суммы в каждой формуле должны равняться нулю, для достижения нужной точности, а вторые суммы равняться самой производной. В итоге в обоих случаях получаем систему $n+1$ линейного уравнения для $n+1$ неизвестного

$$\begin{cases}\sum\limits_{k=0}^{n}C_{pk}(k-p)=1,\\ \sum\limits_{k=0}^{n}C_{pk}(k-p)^j=0,\quad j=0,2,\dots,n,\end{cases}\qquad\qquad \begin{cases}\sum\limits_{k=0}^{n}D_{pk}(k-p)^2=2,\\ \sum\limits_{k=0}^{n}D_{pk}(k-p)^j=0,\quad j=0,1,3,\dots,n,\end{cases}$$

которые разрешаются однозначно.

Приведем несколько примеров.

n	первая производная	вторая производная
1	$L'_1(x_0) = \dfrac{f_1 - f_0}{h}$	
	$L'_1(x_1) = \dfrac{f_1 - f_0}{h}$	
2	$L'_2(x_0) = \dfrac{-3f_0 + 4f_1 - f_2}{2h}$	$L''_2(x_0) = \dfrac{f_0 - 2f_1 + f_2}{h^2}$
	$L'_2(x_1) = \dfrac{f_2 - f_0}{2h}$	$L''_2(x_1) = \dfrac{f_0 - 2f_1 + f_2}{h^2}$
	$L'_2(x_2) = \dfrac{f_0 - 4f_1 + 3f_2}{2h}$	$L''_2(x_2) = \dfrac{f_0 - 2f_1 + f_2}{h^2}$
3	$L'_3(x_0) = \dfrac{-11f_0 + 18f_1 - 9f_2 + 2f_3}{6h}$	$L''_3(x_0) = \dfrac{2f_0 - 5f_1 + 4f_2 - f_3}{h^2}$
	$L'_3(x_1) = \dfrac{-2f_0 - 3f_1 + 6f_2 - f_3}{6h}$	$L''_3(x_1) = \dfrac{f_0 - 2f_1 + f_2}{h^2}$
	$L'_3(x_2) = \dfrac{f_0 - 6f_1 + 3f_2 + 2f_3}{6h}$	$L''_3(x_2) = \dfrac{f_1 - 2f_2 + f_3}{h^2}$
	$L'_3(x_3) = \dfrac{-2f_0 + 9f_1 - 18f_2 + 11f_3}{6h}$	$L''_3(x_3) = \dfrac{-f_0 + 4f_1 - 5f_2 + 2f_3}{h^2}$
4	$L'_4(x_0) = \dfrac{-25f_0 + 48f_1 - 36f_2 + 16f_3 - 3f_4}{12h}$	$L''_4(x_0) = \dfrac{35f_0 - 104f_1 + 114f_2 - 56f_3 + 11}{12h^2}$
	$L'_4(x_1) = \dfrac{-3f_0 - 10f_1 + 18f_2 - 6f_3 + f_4}{12h}$	$L''_3(x_1) = \dfrac{11f_0 - 20f_1 + 6f_2 + 4f_3 - f_4}{12h^2}$
	$L'_4(x_2) = \dfrac{f_0 - 8f_1 + 8f_3 - f_4}{12h}$	$L''_4(x_2) = \dfrac{-f_0 + 16f_1 - 30f_2 + 16f_3 - f_4}{12h^2}$
	$L'_4(x_3) = \dfrac{-f_0 + 6f_1 - 18f_2 + 10f_3 + 3f_4}{12h}$	$L''_3(x_3) = \dfrac{-f_0 + 4f_1 + 6f_2 - 20f_3 + 11f_4}{12h^2}$
	$L'_4(x_4) = \dfrac{3f_0 - 16f_1 + 36f_2 - 48f_3 + 25f_4}{12h}$	$L''_3(x_3) = \dfrac{11f_0 - 56f_1 + 114f_2 - 104f_3 + 35f_4}{12h^2}$

Другие примеры можно получить с помощью приложенного скрипта для системы компьютерной алгебры *Maxima* (открывается с помощью *wxMaxima*).