УДК 519.6

Численный метод нахождения высших производных с помощью дискретного и быстрого преобразования Фурье

Кузьмичев Н.Д.[1]

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет[1]

Во многих прикладных вычислительных задачах необходимо иметь значения высших производных функции, например, для численного интегрирования дифференциальных уравнений как обыкновенных, так и в частных производных. Кроме того, при экспериментальном исследовании динамических процессов часто приходится регистрировать первую и высшие гармоники исследуемой зависимости, вместо непосредственного измерения самой зависимости. В настоящей работе получены формулы для первой – седьмой производных функции, в которых используются Фурье-гармоники функции, вычисление которых можно производить методами дискретного и быстрого преобразования Фурье [1].

Рассмотрим функцию $f(x)$, разложимую в ряд Тейлора в некоторой точке x_0, в интервале $\Delta = (x_0 - R, x_0 + R)$, где R — радиус сходимости ряда. Введем гармоническую параметра t функцию $z(t) = z_t = h \cdot \cos(t)$ амплитудой h. При $|z(t)| < R$ функции $f(x_0 + z_t)$ соответствует ряд Тейлора, которому в силу периодичности и четности f от параметра t, соответствует ряд Фурье [2–4]:

$$f\left(x_0 + h \cdot \cos t\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n \cdot \cos^n t}{n!} f^{(n)}\left(x_0\right) = \frac{A_0}{2} + \sum_{m=1}^{\infty} A_m \cdot \cos(mt), \tag{1}$$

где амплитуды гармоник (коэффициенты Фурье) A_m выражаются формулами:

$$A_m\left(x_0, h\right) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!(n+m)!} \cdot \left(\frac{h}{2}\right)^{2n+m} f^{(2n+m)}\left(x_0\right). \tag{2}$$

Здесь функции $f^{(k)}\left(x_0\right)$ являются производными k-го порядка от $f(x)$ в точке $x = x_0$. Кроме того, амплитуды гармоник (2) можно выразить через интегралы:

$$A_m\left(x_0, h\right) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f\left(x_0 + h \cdot \cos t\right) \cos(mt)\, dt, \quad m = 0,\, 1,\, 2, \ldots. \tag{3}$$

Вычислим производную по параметру t от $f(x) = f\left(x_0 + z_t\right)$:

$$\frac{df}{dx}\frac{dx}{dt} = h \sin t \left.\frac{df}{dx}\right|_{x = x_0 + h\cos t} = \sum_{m=1}^{\infty} m A_m \sin(mt). \tag{4}$$

Положим в (1) $t = \dfrac{\pi}{2}$ и в результате получим ряд для производной f [3]:

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x_0} = f^{(1)}\left(x_0\right) = \frac{1}{h} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^{m-1} (2m-1) A_{2m-1}\left(x_0, h\right). \tag{5}$$

Для функции $f(x)$ и ее второй производной имеем [3]:

$$f\left(x_0\right) = \frac{A_0\left(x_0, h\right)}{2} + \sum_{m=1}^{\infty}(-1)^m A_{2m}\left(x_0, h\right),$$

$$f^{(2)}\left(x_0\right) = \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x_0} = \frac{1}{h^2}\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1}(2m)^2 A_{2m}\left(x_0, h\right). \tag{6}$$

Для третьей, четвертой, пятой, шестой и седьмой производных, следуя алгоритму вычисления формулы (5), получим ряды:

$$f^{(3)}\left(x_0\right) = \left.\frac{d^3 f}{dx^3}\right|_{x_0} = \frac{1}{h^3}\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1}\left[(2m+1)^3 - (2m+1)\right] A_{2m+1}\left(x_0, h\right), \tag{7}$$

$$f^{(4)}\left(x_0\right) = \left.\frac{d^4 f}{dx^4}\right|_{x_0} = \frac{1}{h^4}\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1}\left[(2m+2)^4 - 4(2m+2)^2\right] A_{2m+2}\left(x_0, h\right), \tag{8}$$

$$f^{(5)}\left(x_0\right) = \left.\frac{d^5 f}{dx^5}\right|_{x_0} = \frac{1}{h^5}\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1}\left[(2m+3)^5 - 10(2m+3)^3 + \right.$$
$$\left. + 9(2m+3)\ \right] A_{2m+3}\left(x_0, h\right), \tag{9}$$

$$f^{(6)}\left(x_0\right) = \left.\frac{d^6 f}{dx^6}\right|_{x_0} = \frac{1}{h^6}\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1}\left[\ (2m+4)^6 - 20(2m+4)^4 + \right.$$
$$\left. + 64(2m+4)^2\ \right] A_{2m+4}\left(x_0, h\right), \tag{10}$$

$$f^{(7)}\left(x_0\right) = \left.\frac{d^7 f}{dx^7}\right|_{x_0} = \frac{1}{h^7}\sum_{m=1}^{\infty}(-1)^{m-1}\left[\ (2m+5)^7 - 35(2m+5)^5 + \right.$$
$$\left. + 259(2m+4)^3 - 225(2m+5)\ \right] A_{2m+5}\left(x_0, h\right). \tag{11}$$

В итоге мы имеем коэффициенты Фурье, выраженные через производные (2) и производные, выраженные через коэффициенты Фурье (амплитуды гармоник) (5)-(11). Формулы (5)-(11) не требуют таких жестких ограничений накладываемых на функцию $f(x)$, какие требуют формулы (2). Поэтому формулы (5)-(11) можно применять для функций, у которых производные имеют особенности, например, разрывы первого рода. Коэффициенты Фурье A_m, с использованием формулы (3) можно вычислять численно, применяя различные квадратурные формулы, например, трапеций, Симпсона, Гаусса, Филона и др., а также методами быстрого и дискретного преобразования Фурье [1].

В целях экспериментальной проверки была выбрана вольт-амперная характеристика (ВАХ) полупроводниковой структуры, которая использовалась в работе [5]:

$$f(x) = V_0 \cdot \ln\left[\frac{x}{I_0} + \sqrt{\left(\frac{x}{I_0}\right)^2 + 1}\right]. \tag{12}$$

Здесь $V_0 = 36.3$ и $I_0 = 0.9$. Величина $x(t) = x_0 + h \cdot \cos(t)$, где $h = 1.5$ и $0 \leqslant x_0 \leqslant 3$. Численное моделирование производных ВАХ (12) выполнялось в системе *MathCad*. Результаты математического моделирования производных ВАХ полупроводниковой структуры приведены на рис. 1, на котором изображен график 4-ой производной, вычисленной численно по формуле (8) и аналитически путем непосредственного дифференцирования функции (12). Вместо рядов использовались конечные суммы с различным числом членов.

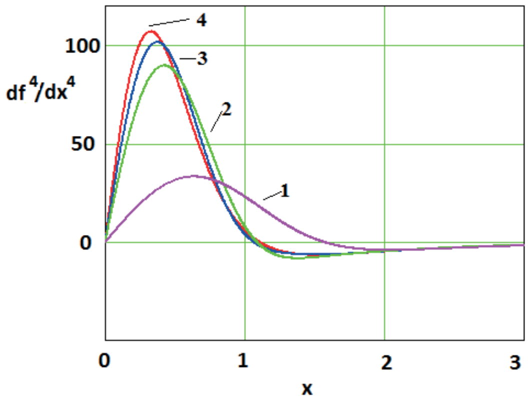

Рис. 1. Четвертая производная от $f(x)$; 1 – 4-ая производная, вычисленная по 4-ой гармонике; 2 – 4-ая производная, вычисленная по 4-ой, 6-ой, 8-ой гармоникам; 3 – 4-ая производная, вычисленная по 4-ей, 6-ой, 8-ой, 10-ой, 12-ой и 14-ой гармоникам; 4 – 4-ая производная, вычисленная аналитически.

Литература

1. Нуссбаумер Г. Быстрое преобразование Фурье и алгоритмы вычисления сверток. М.: Радио и связь, 1985. 248 с.

2. Кузьмичев Н. Д. Гистерезисная намагниченность и генерация гармоник магнитными материалами: Анализ спектра гармоник намагниченности на примере высокотемпературных сверхпроводников // ЖТФ. 1994. Т. 64, вып. 12. С. 63 – 74.

3. Кузьмичев Н. Д. Применение рядов Тейлора-Фурье для численного и экспериментального определения производных изучаемой зависимости // Журнал Средневолжского математического общества. 2011. Т. 13, №1. С. 70 – 80.

4. Кузьмичев Н. Д. Оценки ошибок модуляционного восстановления функции отклика и ее производных // ЖТФ. 1997. Т. 37, №7. С. 124 – 127.

5. Кузьмичев Н. Д. Экспериментальное определение вольт-амперной характеристики нелинейной полупроводниковой структуры с помощью модуляционного Фурье-анализа // ФТП. 2016. Т. 50, №6. С. 830 – 833.

MSC2010 47A13

Numerical methods for finding higher derivatives using discrete and fast Fourier transform

N.D. Kuzmichev[1]

National Research Mordovia State University[1]