

ЛЕКЦІЯ 5. ЧИСЕЛЬНЕ ДИФЕРЕНЦІЮВАННЯ

- 5.1. Найпростіші формули
- 5.2. Застосування інтерполяційних многочленів Лагранжа
- 5.3. Застосування інтерполяційних многочленів Ньютона
- 5.4. Нестійкість процедур чисельного диференціювання

5.1. Найпростіші формули

1. Припустімо, що в деякій точці x у функції f існує похідна

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

яку точно обчислити не вдається, або складно. Тоді природно покласти

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}.$$

Дослідження похибки наближених формул чисельного диференціювання потребує наявності у функції деякої похідної вищого порядку, ніж шукана.

2. Побудуємо 3 найпростіші формули диференціювання. Нехай $x_i = x_0 + ih, i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, h — крок. Позначмо

$$f_i = f(x_i), f'_i = f'(x_i), \dots$$

Нехай $f \in C^2[x_0; x_1]$. Тоді існує така точка c , що

$$f'_0 = \frac{f_1 - f_0}{h} - \frac{h}{2} f''(c), \quad x_0 < c < x_1. \quad (5.1)$$

Якщо $f \in C^3[x_{-1}; x_1]$, то крім того,

$$f'_0 = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(c), \quad x_{-1} < c < x_1 \quad (5.2)$$

Якщо ж $f \in C^4[x_{-1}; x_1]$, то маємо

$$f''_0 = \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(c), \quad x_{-1} < c < x_1 \quad (5.3)$$

Формули (5.1)—(5.3) називають *формулами чисельного диференціювання із залишковими членами*, а формули

$$f'_0 \approx \frac{f_1 - f_0}{h}, \quad (5.4)$$

$$f'_0 \approx \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}, \quad (5.5)$$

$$f_0'' \approx \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2} \quad (5.6)$$

називають *формулами чисельного диференціювання*.

Вирази

$$\frac{f_1 - f_0}{h}, \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}, \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2}$$

називають відповідно *різницевою похідною*, *центральною різницевою похідною* і *другою різницевою похідною*.

Похибки формул (5.5)—(5.7) оцінюють виходячи з нерівностей:

$$\begin{aligned} \left| f_0' - \frac{f_1 - f_0}{h} \right| &\leq \frac{h}{2} \max_{x \in [x_0; x_1]} |f''(x)|, \\ \left| f_0' - \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} \right| &\leq \frac{h^2}{6} \max_{x \in [x_{-1}; x_1]} |f'''(x)| \\ \left| f_0'' - \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2} \right| &\leq \frac{h^2}{12} \max_{x \in [x_{-1}; x_1]} |f^{(4)}(x)|. \end{aligned}$$

Похибка формули (5.5) має перший порядок щодо h (або порядку h), а похибка формул (5.5) та (5.6) має другий порядок щодо h (або порядку h^2). Також говорять, формула чисельного диференціювання (5.5) першого порядку точності (щодо h), а формули (5.6) та (5.7) мають другий порядок точності.

5.2. Застосування інтерполяційних многочленів Лагранжа

1. Для знаходження похідних будь-якого порядку існують формули чисельного диференціювання будь-якого порядку точності. Один з універсальних способів побудови формул чисельного диференціювання полягає в тому, що за значенням функції f у деяких вузлах x_0, x_1, \dots, x_n будують інтерполяційний многочлен Лагранжа $L_n(x)$ і наближено покладають

$$f^{(m)}(x) \approx L_n^{(m)}(x), \quad 0 \leq m \leq n. \quad (5.8)$$

У низці випадків разом з наближеною рівністю (5.8) вдається одержати точну рівність, яка містить остаточний член, який виражається через похідну $f^{(n+1)}$.

2. Подаймо кілька формул для першої ($m = 1$) та другої ($m = 2$) похідних у вузлах, які розташовано зі сталим кроком $h > 0$.

$m = 1, n = 2$ (три вузли):

$$f'_0 = \frac{1}{2h}(-3f_0 + 4f_1 - f_2) + \frac{h^2}{3}f'''(c), \quad (5.9)$$

$$f'_1 = \frac{1}{2h}(f_2 - f_0) - \frac{h^2}{6}f'''(c),$$

$$f'_2 = \frac{1}{2h}(f_0 - 4f_1 + 3f_2) + \frac{h^2}{3}f'''(c). \quad (5.10)$$

$m = 2, n = 2$ (три вузли):

$$f''_0 = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) - hf'''(c), \quad (5.11)$$

$$f''_1 = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) - \frac{h^2}{12}f^{(4)}(c),$$

$$f''_2 = \frac{1}{h^2}(f_0 - 2f_1 + f_2) + hf'''(c).$$

У поданих формулах c є деяка невідома точка з інтервалу $(x_0; x_n)$. Залишкові члени цих формул знаходять за допомогою формули Тейлора із залишковим членом в інтегральній формі. При цьому припускають, що на відрізку $[x_0; x_n]$ у функції f неперервна похідна, через яку виражається залишковий член.

3. Список формул можна було б продовжувати для зростаючих значень n, m . Зі зростанням n і відповідної гладкості функції f порядок точності формул збільшується, а зі зростанням m , тобто номера похідної, порядок точності щодо h спадає. Вирази похідних у вузлах, розташованих ближче до середини відрізка $[x_0; x_n]$, простіші, ніж у його кінців.

При парному n у середньому вузлі для парної похідної порядок точності формули на одиницю більше, ніж у решті вузлів. Тому рекомендовано за можливістю використовувати формули чисельного диференціювання з вузлами, розташованими симетрично відносно тієї точки, у якій шукають похідну.

4. Вибір оптимального кроку. У формулах чисельного диференціювання зі сталим кроком h значення функції f ділять на h^m , де m — це порядок похідної, яку треба обчислити. Тому при малому h неусувні похибки у значеннях функції f сильно впливають на результат чисельного диференціювання. Отже, виникає задача вибору оптима-

льного кроку h , оскільки похибка методу прямує до нуля, коли $h \rightarrow 0$, а неусувна похибка зростає.

Припустімо, що абсолютна похибка $\Delta(f_i)$ в кожному значенні функції f_i справджує нерівність

$$\Delta(f_i) \leq \bar{\Delta},$$

тобто $\bar{\Delta}$ — гранична абсолютна похибка значень функції. Спробуємо знайти оптимальний крок h у формулах (5.6) та (5.7.)

Нехай у деякому околі точки x_0 , похідні через які виражаються залишкові члени формул (5.2) та (5.3), неперервні і справджують нерівності:

$$|f'''(x)| \leq M_3, \quad |f^{(4)}(x)| \leq M_4, \quad (5.12)$$

де M_3 та M_4 — деякі числа. Тоді повна похибка формул (5.6) та (5.7), не враховуючи помилки округлення, не перевищує

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \frac{\bar{\Delta} + \bar{\Delta}}{2h} + \frac{h^2}{6} M_3, \\ \varepsilon_2 &= \frac{\bar{\Delta} + 2\bar{\Delta} + \bar{\Delta}}{h^2} + \frac{h^2}{12} M_4. \end{aligned}$$

Мінімізація за h цих величин приводить до наступних значень кроку:

$$h = h_1 = \left(\frac{3\bar{\Delta}}{M_3} \right)^{1/3}, \quad h = h_2 = 2 \left(\frac{3\bar{\Delta}}{M_4} \right)^{1/4},$$

при цьому

$$\varepsilon_1 = \frac{3}{2} \left(\frac{M_3 \bar{\Delta}^2}{3} \right)^{1/3}, \quad \varepsilon_2 = 2 \left(\frac{M_4 \bar{\Delta}}{3} \right)^{1/2}.$$

Якщо при вибраному для будь-якої з формул (5.6) або (5.7) значення h відрізок $[x_{-1}; x_1]$, де $x_{\pm 1} = x_0 \pm h$, не виходить за межі околу точки x_0 , у якому виконано нерівність (5.12), то знайдене значення h є оптимальним. Інакше остаточно вибираємо h так, щоб відрізок $[x_{-1}; x_1]$ не виходив з указанного околу точки x_0 .

5.3. Застосування інтерполяційних многочленів Ньютона

1. Усі подані вище формули чисельного диференціювання виражаються через табличні значення функції. Якщо продиференціювати

інтерполяційний многочлен Ньютона $N_n(x)$, то дістаємо формулу чисельного диференціювання, яка виражається через скінченні різниці функції.

Оскільки

$$\frac{d}{dx} = \frac{1}{h} \frac{d}{dt},$$

то

$$\begin{aligned} f'(x) &\approx \frac{1}{h} \frac{d}{dt} N_n(x_0 + th) = \\ &= \frac{1}{h} \left(\Delta f_0 + (2t - 1) \frac{\Delta^2 f_0}{2!} + (3t^2 - 6t + 2) \frac{\Delta^3 f_0}{3!} + \dots \right). \end{aligned}$$

2. Загальна оцінка похибки. Точні рівності із залишковим членом, що виражається через $f^{(n+1)}$, вдається знайти лише в окремих випадках.

Нехай $x_i = x_0 + ih, h > 0, i = \overline{0, n}, 0 \leq k \leq n, f \in C^{k+1}[x_0; x_n]$. Тоді існують такі сталі a_{nkm} , які не залежать від кроку h та функції f , що

$$\max_{[x_0; x_n]} |f^{(m)}(x) - L_n^m(x)| \leq h^{k+1-m} a_{nkm} \max_{x \in [x_0; x_n]} |f^{(k+1)}(x)|,$$

де $L_n(x)$ — інтерполяційний многочлен Лагранжа для функції $f, 0 \leq m \leq k \leq n$.

5.4. Нестійкість процедур чисельного диференціювання

Одержані вище формули чисельного диференціювання теоретично дають достатньо гарні результати. Однак при реалізації можуть виникати деякі ускладнення.

Якщо значення функції f на проміжку $[a; b]$ одержано з похибками $\Delta f(x)$, тобто

$$\bar{f}(x) = f(x) + \Delta f(x),$$

то для похідної $f'(x)$ одержуємо

$$\frac{d}{dx} \bar{f}(x) = \frac{d}{dx} f(x) + \frac{d}{dx} \Delta f(x).$$

Але навіть, якщо похибка $|\Delta f(x)|$ дуже мала, може трапитись, що її похідна достатньо велика:

$$\begin{aligned} f(x) &= x, \Delta f(x) = \varepsilon \sin Mx; \\ \bar{f}'(x) &= 1 + M\varepsilon \sin Mx \end{aligned}$$

і зрозуміло, що для як завгодно малого ε можна взяти настільки велике значення M , що справжнє значення похідної відрізнятиметься від знайденого досить сильно.

Якщо подібна високочастотна складова похибки відсутня, якщо функція поводить себе «досить добре», приміром, добре наближається многочленом невисокого степеня и обчислювальні похибки не дуже великі, то використання одержаних формул чисельного диференціювання дає практично прийнятні результати.

Інакше потрібні спеціальні обчислювальні процедури з нейтралізації впливу похибок на результат — алгоритми регуляризації. Основна ідея яких полягає у фільтрації високочастотної складової похибки $\Delta f(x)$, тобто заміні неточно вимірної функції $\bar{f}(x)$ деякою іншою функцією $g(x)$, яка, з одного боку, набуває значення, близькі до значень функції $\bar{f}(x)$, а з іншого боку, змінюється досить повільно. Якщо таку функцію побудовано, то можна покласти

$$f'(x) \approx g'(x),$$

використовуючи для обчислення $g'(x)$ одержані формули чисельного диференціювання.