9. Чисельне диференціювання

Постановка задачі

Нехай $f(t) \in C^n[a,b]$. Постановка задачі: за заданими значеннями функції $f(t)$ в точках $x_i \in [a,b],\ i = \overline{0,n}$ та за заданими $x,\ k$ знайти $f^{(k)}(x),\ k \geqslant 1$ та оцінити похибку.

Одна із ідей побудови формул така: якщо функція $\varphi(x)$ наближує функцію $f(x)$ в певному розумінні (це може бути інтерполяційний поліном, сплайн), то при диференціюванні покладають $f^{(k)}(x) \approx \varphi^{(k)}(x)$ у заданій точці x. Формули чисельного диференціювання шукають у вигляді:

$$f^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{n} c_j f(x_j),$$

де $x_j \in [a;b]$, $j = \overline{0,n}$.

Для побудови формул наближеного диференціювання можна використовувати різні підходи:
1) застосування інтерполяції;
2) метод невизначених коефіцієнтів.
3) Побудова формул за допомогою розвинення заданої функції в ряди Тейлора.

Для визначення точності формул чисельного диференціювання можна використати:
1) інтерполяцію;
2) ряди Тейлора.

Застосування інтерполяції

Найпростіші формули можна дістати за допомогою інтерполяційних формул. Якщо

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) l_{i,n}(x)$$

інтерполяційний поліном Лагранжа для функції $f(x)$, де $l_{i,n}(x) = \dfrac{\omega_{n+1}}{(x - x_i)\omega'_{n+1}(x_i)}$ – фундаментальний многочлен Лагранжа, то з рівності

$$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x),$$

для визначення невідомих $c_i, i = \overline{0,n}$ у формулі чисельного диференціювання дістанемо, що $c_i = l_{i,n}^{(k)}(x)$.

Зауважимо, що задача чисельного диференціювання не є коректною в $C[a,b]$, оскільки немає неперервної залежності норми похідної від норми функції. Проілюструємо це на прикладі.

Нехай $f(x) \in C^1[a,b]$ та $\tilde{f}(x) \in C^1[a,b]$ пов'язані між собою співвідношенням

$$\tilde{f}(x) = f(x) + n^{-1} sin(n^2(x-a)),$$

тоді

$$\|f(x) - \tilde{f}(x)\|_{C[a,b]} = \max_{x \in [a,b]} |\frac{1}{n} sin(n^2(x-a))| \leqslant \frac{1}{n} \to 0,\ n \to \infty,$$

але

$$\|f'(x) - \tilde{f}'(x)\|_{C[a,b]} = \max_{x \in [a,b]} |ncos(n^2(x-a))| \leqslant n \to \infty,\ n \to \infty.$$

Похибка формул чисельного диференціювання

Нехай $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$, де

$$P_n(x) = f(x_0) + (x - x_0) f(x_0; x_1) + \cdots +$$

$$+(x - x_0) \cdots (x - x_{n-1}) f(x_0; x_1; \ldots; x_n),$$

$$R_n(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_{n-1})(x - x_n) f(x; x_0; x_1; \ldots; x_n),$$

$$f^k(x) = P_n^k(x) + R_n^k(x).$$

Похідна від $R_n(x)$ за допомогою формули Лейбніца зображується так:

$$R_n^{(k)} = \sum_{i=0}^{k} C_k^i f^{(i)}(x; x_0; \ldots; x_n) \omega_{n+1}^{(k-i)}(x),$$

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n).$$

Нехай функція $g(x) \in C^k[a,b]$. Тоді

$$g(x; x + \varepsilon, \ldots, x + q\varepsilon) = \frac{g^{(q)}(x_\varepsilon)}{q!},$$

де $x \leqslant x_\varepsilon \leqslant x + q\varepsilon$. Одержимо
$$g^{(q)} = q! \lim_{\varepsilon \to 0} g(x; x+\varepsilon, \ldots, x+q\varepsilon).$$

Отже за означенням розділеної різниці за кратними вузлами:
$$(f(x; x_0, \ldots; x_n))^{(q)} = q! \lim_{\varepsilon \to 0} f(x; x+\varepsilon, \ldots, x+q\varepsilon; x_0; \ldots; x_n) =$$
$$= q! f(\underbrace{x; \ldots; x}_{q+1}; x_0; \ldots; x_n);$$
$$R^{(k)}(x) = f^{(k)}(x) - P_n^{(k)}(x) =$$
$$= \sum_{i=0}^{k} \frac{k!}{(k-i)!i!} i! f(x; \ldots; x; x_0; \ldots; x_n) \omega_{n+1}^{(k-i)}(x).$$

Виражаючи розділену різницю за допомогою похідної дістанемо
$$|R^{(k)}(x)| = |f^{(k)}(x) - P_n^{(k)}(x)| \leqslant$$
$$\leqslant \sum_{i=0}^{k} \frac{k!}{(k-i)!(n+i+1)!} \max_{\xi \in [y_1, y_2]} |f^{(n+i+1)}(\xi)||\omega_{n+1}^{(k-i)}(x)|,$$
де $y_1 = \min(x, x_0, \ldots, x_n)$, $y_2 = \max(x, x_0, \ldots, x_n)$.

Точки підвищеної точності

Розглянемо розміщення вузлів, при якому $x_i - x_{i-1} = O(h)$, $i = \overline{1, n}$. Сітка вузлів згущається, якщо $h \to 0$. При фіксованому n величина $\omega_{n+1}^{(j)}(x)$ є сумою добутків, у кожному з яких $n+1-j$ множників порядку $O(h)$ кожен, а тому $\omega_{n+1}^{(j)}(x) = O(h^{n+1-j})$. Отже, дістанемо, що
$$R_n^{(k)}(x) = f(x; x_0; \ldots; x_n)\omega_{n+1}^{(k)}(x) + O(h^{n+2-k}) = O(h^{n+1-k}).$$

Якщо точка x така, що $\omega_{n+1}^{(k)}(x) = 0$, то порядок точності формули чисельного диференціювання збільшується на одиницю. Тому точки, в яких $\omega_{n+1}^{(k)}(x) = 0$, називають точками підвищеної точності.

Запишемо найпростіші формули чисельного диференціювання, що знайдені за допомогою інтерполяціного полінома

Ньютона:
$f'(x) \approx f(x_0; x_1) = \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$,

$f''(x) \quad \approx \quad 2f(x_0; x_1; x_2) \quad = \quad 2\dfrac{f(x_1; x_2) - f(x_0; x_1)}{x_2 - x_0} \quad =$
$= \dfrac{2}{x_2 - x_0}\Big(\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}\Big)$

$\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots$

$f^{(k)}(x) \approx k! f(x_0; x_1; \dots; x_k) = k! \sum_{i=0}^{k} f(x_i) \prod_{j=0 j\neq i}^{k} (x_i - x_j)^{-1}$.

Неважко помітити, що мінімальна кількість вузлів, необхідна для обчислення k похідної, є $k+1$. Оскільки залишковий член $R_n^{(k)}(x)$ – це многочлен виду $\sum\prod(x - x_i)$ степеня $n+k-1$ відносно x, то кількість точок підвищення точності дорівнює $n + k - 1$. В одночленній формулі для k похідної точка підвищеної точності визначається із умови

$$\sum_{i=0}^{k} (x - x_i) = 0,$$

звідки

$$x_i^{(1,k)} = \frac{x_0 + \dots + x_k}{k+1}.$$

У цій точці на рівномірній сітці з кроком h або на нерівномірній сітці такій, що $x_i - x_{i-1} = O(h)$ одночленна формула має похібку порядку $O(h^2)$ замість $O(h)$.

Якщо $p = n+1-k > 2$, то знайти точки підвищеної точності складно, за винятком окремого випадку, про який йдеться у теоремі.

Теорема. Нехай $p = n + 1 - k$ – парне, а вузли в формулі чисельного диференціювання обрано так, що вони розміщені симетрично відносно точки x. Тоді x є однією із точок підвищеної точності.

Приклад. Побудувати формулу чисельного диференціювання для першої похідної в середній точці за трьома рівновіддаленими вузлами. Оцінити точність. Визначити точки підвищеної точності для цієї формули.

Розв'язок. Позначимо точки x_0, x_1, x_2; оскільки крок сталий, то $x_2 - x_1 = x_1 - x_0 = h$. Необхідно знайти $f'(x_1)$.
Для побудови використаємо інтерполяцію: $f'(x_1) \approx P_2'(x_1)$. За 3 вузлами можна побудувати поліном максимум 2 степеня. Побудуємо інтерполяційний поліном у формі Ньютона, знайдемо розділені різниці:
$f(x_0, x_1) = \dfrac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = \dfrac{f_1 - f_0}{h}$;
$f(x_0, x_1, x_2) = \dfrac{f(x_1, x_2) - f(x_0, x_1)}{x_2 - x_0} = \left(\dfrac{f_2 - f_1}{h} - \dfrac{f_1 - f_0}{h}\right) \div$
$\div 2h = \dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}$;
$P_2(x) = f_0 + f(x_0, x_1)(x - x_0) + f(x_0, x_1, x_2)(x - x_0)(x - x_1) =$
$= f_0 + \dfrac{f_1 - f_0}{h}(x - x_0) + \dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}(x - x_0)(x - x_1)$;
$P_2'(x) = \dfrac{f_1 - f_0}{h} + \dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}\,((x - x_1) + (x - x_0))$;
$P_2'(x_1) = \dfrac{f_1 - f_0}{h} + \dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}\,((x_1 - x_1) + (x_1 - x_0)) =$
$= \dfrac{f_1 - f_0}{h} + \dfrac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h} = \dfrac{f_2 - f_0}{2h}$.

Знайдемо точність побудованої формули. Для цього знайдемо похідну від похибки інтерполяції:
$|f'(x) - L_2'(x)| = |f(x_0, x_1, x_2, x)(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)|' \leqslant$
$\leqslant \dfrac{M_4}{4!}|(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)| + \dfrac{M_3}{3!}|(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)|' =$
$= \dfrac{M_4}{4!}|(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)| + \dfrac{M_3}{3!}|(x - x_1)(x - x_2) +$
$+(x - x_0)(x - x_2) + (x - x_0)(x - x_1)| = r_1 + r_2$.
r_1 має точність $O(h^3)$, а r_2 – $O(h^2)$, загальна точність – $O(h^2)$.
Для оцінки похибки в x_1 використаємо більший доданок r_2:
$|f'(x_1) - L_2'(x_1)| \leqslant \dfrac{M_3}{3!}|(x_1 - x_1)(x_1 - x_2) + (x_1 - x_0)(x_1 - x_2) +$
$+(x_1 - x_0)(x_1 - x_1)| = \dfrac{M_3}{3!}|0 + h(-h) + 0| = \dfrac{M_3}{6}h^2$.

Точки підвищеної точності це точки, в яких похибка буде менша за знайдену, це можливо лише коли другий доданок похибки дорівнює нулю (тоді похибка буде $O(h^3)$):
$\frac{M_3}{3!}|(x-x_1)(x-x_2)+(x-x_0)(x-x_2)+(x-x_0)(x-x_1)|=0.$
Для зручності скористаємося заміною:
$x-x_1=sh;$
$x-x_0=x-(x_1-h)=sh+h=h(s+1);$
$x-x_2=x-(x_1+h)=sh-h=h(s-1);$
Зробимо заміни в r_2:
$\frac{M_3}{3!}|shh(s-1)+h(s+1)h(s-1)+h(s+1)sh|=\frac{M_3}{6}h^2|3s^2-1|=0;$
$s=\pm\frac{1}{\sqrt{3}};\quad x-x_1=sh;\quad \overline{x}=x_1\pm\frac{h}{\sqrt{3}}.$

Отже, $f'(x_1)=\frac{f_2-f_0}{2h}\pm\frac{M_3}{6}h^2;\ \overline{x}=x_1\pm\frac{h}{\sqrt{3}}.$

Побудова формул чисельного диференціювання за допомогою розвинення в ряди Тейлора

Проілюструємо даний метод на конкретному прикладі.

Приклад. Нехай функція $f(x)\in C^5[a,b]$ задана своїми значеннями в точках x_{i-1},x_{i+1}, т. т. задано $f(x_{i-1})=f_{i-1}$, $f(x_{i+1})=f_{i+1}$. Побудувати формулу чисельного диференціювання для знаходження $f'(x_i)=f_i$ та знайти порядок апроксимації.

Розв'язок. Для побудови формули чисельного диференціювання розкладемо задані значення функції в околі точки, в якій потрібно знайти похідну. Нехай $x_{i+1}-x_i=x_i-x_{i+1}=h=cost$. Маємо

$$f(x_{i+1})=f_i+hf_i'+\frac{h^2}{2!}f_i''+\frac{h^3}{3!}f_i^{(3)}+\frac{h^4}{4!}f_i^{(4)}+O(h^5);$$

$$f(x_{i-1})=f_i-hf_)'+\frac{h^2}{2!}f_i''-\frac{h^3}{3!}f_i^{(3)}+\frac{h^4}{4!}f^{(4)}i)+O(h^5).$$

Складаємо лінійну комбінацію останніх виразів таким чином, щоб одержати $f'(x_i)$ за допомогою заданих значень. Маємо

$$f(x_{i+1}) - f(x_{i-1}) = 2hf'(x_i) + 2\frac{h^3}{3!}f^{(3)}(x_i) + O(h^5);$$

$$f'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h} - \frac{h^2}{3!}f^{(3)}(x_i) + O(h^4).$$

Отже $f'(x_i) \approx \dfrac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2h}$. Порядок апроксимації $p = 2$.

Приклад. Знайти оцінку точності за допомогою формули Тейлора для формули чисельного диференціювання, побудованої за вузлами x_0, x_1, x_2:

$$f'(x_1) \approx \frac{f_2 - f_0}{2h}.$$

Розв'язок. Для знаходження похибки віднімемо наближене значення від точного, але спочатку розкладемо в ряди Тейлора значення f_0 та f_2 в околі x_1:

$$f(x) = f_1 + \frac{(x - x_1)}{1!}f_1' + \frac{(x - x_1)^2}{2!}f_1'' + \frac{(x - x_1)^3}{3!}f'''(\xi);$$

$$f(x_0) = f_1 + (x_0 - x_1)f_1' + \frac{(x_0 - x_1)^2}{2}f_1'' + \frac{(x_0 - x_1)^3}{6}f'''(\xi_1) =$$

$$= f_1 - hf_1' + \frac{h^2}{2}f_1'' - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1), \quad \xi_1 \in [x_0; x_1];$$

$$f(x_2) = f_1 + (x_2 - x_1)f_1' + \frac{(x_2 - x_1)^2}{2}f_1'' + \frac{(x_2 - x_1)^3}{6}f'''(\xi_2) = f_1 +$$

$$+ hf_1' + \frac{h^2}{2}f_1'' + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2), \quad \xi_2 \in [x_1; x_2];$$

$$f'(x_1) - \frac{f_2 - f_0}{2h} = f_1' - \frac{1}{2h}\Big(f_1 + hf_1' + \frac{h^2}{2}f_1'' + \frac{h^3}{6}f'''(\xi_2) - \big(f_1 -$$

$$- hf_1' + \frac{h^2}{2}f_1'' - \frac{h^3}{6}f'''(\xi_1)\big)\Big) = -\frac{h^2}{6}\Big(\frac{f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)}{2}\Big) =$$

$$= -\frac{h^2}{6}f'''(\xi), \quad \xi \in (x_0; x_2).$$

Позначимо $M_3 = \max\limits_{x \in [x_0; x_2]} |f'''(x)| \leqslant f'''(\xi), \quad \xi \in (x_0; x_2)$.

Отже, $\left|f'(x_1) - \dfrac{f_2 - f_0}{2h}\right| \leqslant \dfrac{M_3}{6}h^2.$

Метод невизначених коефіцієнтів

Найчастіше цей метод застосовують в багатовимірних випадках, коли інтерполяційний поліном не завжди можна записати.

Функція $f(x)$ задана своїми значеннями $f(x_i)$, $i = \overline{0,n}$. Похідну $f^{(k)}(x)$ шукаємо у вигляді

$$f^{(k)}(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i),$$

де c_i – невідомі сталі і вони обираються таким чином, щоб побудована формула була точною для багаточлена максимально високого степеня.

Нехай

$$f(x) = \sum_{j=0}^{m} a_i x^j.$$

Будемо вимагати, щоб формула чисельного диференціювання була точною для даного багаточлена. Отже,

$$f^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j (x^j)^{(k)} = \sum_{i=0}^{n} c_i \left(\sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j \right).$$

Для того, щоб рівність виконувалась для будь-якого багаточлена степеня m, необхідно і достатньо, щоб коефіцієнти в правій та лівій частині при a_j були рівними. Оскільки

$$(x^j)^{(k)} = j(j-1)\cdots(j-k-1)x^{j-k},$$

то одержимо систему лінійних рівнянь відносно невідомих c_i

$$j(j-1)\cdots(j-k-1)x^{j-k} = \sum_{i=0}^{m} c_i x_i^j$$

x – точка, в якій обчислюємо k похідну. Якщо $m = n$, то число рівнянь дорівнює числу невідомих, визначник системи – визначник Вандермонда, тому він не дорівнює нулю. Таким чином, завжди можна побудувати формулу чисельного диференціювання з $n + 1$ вузлом, що є точною для багаточлена степеня n.

Відмітимо, що при симетричному відносно x розташуванні вузлів, k парному, n – непарному та k непарному, n – парному формула чисельного диференціювання буде точною для поліномів на одиницю більшого степеня.

Приклад Нехай функція $f(x)$ задана своїми значеннями $f(-h),\ f(0),\ f(h)$. Побудувати формулу чисельного диференціювання для обчислення $f'(0)$, що є точною для багаточленів другого степеня.

Розв'язок. Формулу чисельного диференціювання шукаємо у вигляді

$$f'(0) \approx c_1 f(-h) + c_2 f(0) + c_3 f(h)$$

Складемо систему рівнянь. Нехай $f(x) = 1$ – поліномі нульового степеня. Підставимо дану функцію у шукану формулу. Одержимо

$$0 = c_1 + c_2 + c_3.$$

Нехай $f(x) = x$ - поліномі першого степеня. Підставимо дану функцію у шукану формулу. Одержимо

$$1 = c_1(-h) + c_2 \cdot 0 + c_3(h).$$

Нехай $f(x) = x^2$ – поліномі другого степеня. Підставимо дану функцію у шукану формулу. Одержимо

$$0 = c_1(-h)^2 + c_2 \cdot 0^2 + c_3(h)^{\cdot}$$

Маємо систему:

$$0 = c_1 + c_2 + c_3,$$

$$1 = c_1(-h) + c_2 \cdot 0 + c_3(h),$$

$$0 = c_1(-h)^2 + c_2 \cdot 0^2 + c_3(h)^{\cdot}$$

Розв'язавши її, дістанемо

$$c_1 = -\frac{1}{2h},\ c_2 = 0,\ c_3 = \frac{1}{2h}$$

Підставимо знайдені коефіцієнти у шукану формулу та отримаємо

$$f'(0) \approx \frac{f(h) - f(-h)}{2h}$$

Приклад. Нехай функція $f(x)$ задана своїми значеннями $f(-h),\ f(0),\ f(h)$. Побудувати формулу для обчислення $f''(0)$, що є точною для багаточленів другого степеня.
Розв'язок. Формулу чисельного диференціювання шукаємо у вигляді

$$f''(0) \approx c_1 f(-h) + c_2 f(0) + c_3 f(h)$$

Складемо систему рівнянь. Нехай $f(x) = 1$ - поліномі нульового степеня. Підставимо дану функцію у шукану формулу. Одержимо

$$0 = c_1 + c_2 + c_3.$$

Нехай $f(x) = x$ - поліномі першого степеня. Підставимо дану функцію у шукану формулу. Одержимо

$$0 = c_1(-h) + c_2 \cdot 0 + c_3(h).$$

Нехай $f(x) = x^2$ - поліномі другого степеня. Підставимо дану функцію у шукану формулу. Одержимо

$$2 = c_1(-h)^2 + c_2 \cdot 0^2 + c_3(h)^\cdot$$

Маємо систему:

$$0 = c_1 + c_2 + c_3,$$

$$0 = c_1(-h) + c_2 \cdot 0 + c_3(h),$$

$$2 = c_1(-h)^2 + c_2 \cdot 0^2 + c_3(h)^\cdot$$

Розв'язавши її, дістанемо

$$c_1 = \frac{1}{h^2},\ c_2 = -\frac{2}{h^2},\ c_3 = \frac{1}{h^2}$$

Підставимо знайдені коефіцієнти у шукану формулу та отримаємо

$$f''(0) \approx \frac{f(h) - 2f(0) + f(-h)}{h^2}$$

Приклад. За допомогою методу невизначених коефіцієнтів побудувати формулу чисельного диференціювання для першої похідної в середній точці за трьома вузлами 0, h, $2h$.
Розв'язок. Позначимо $x_0 = 0$, $x_1 = h$, $x_2 = 2h$, тоді формулу шукаємо у вигляді: $f'(h) = c_0 f(0) + c_1 f(h) + c_2 f(2h)$.

З іншого боку знайдемо $f'(h) \approx P_2'(h)$, де $P_2(x)$ – інтерполяційний поліном, побудований за вузлами $0; h; 2h$:
$P_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2$; $P_2'(x) = a_1 + 2a_2 x$; $P_2'(h) = a_1 + 2a_2 h$.
Прирівняємо $f'(h)$ до $P_2'(h)$:
$c_0 f(0) + c_1 f(h) + c_2 f(2h) = a_1 + 2a_2 h$.
Врахуємо також, що $f(x) \approx P_2(x)$, тому
$f(0) \approx P_2(0) = a_0 + a_1 \cdot 0 + a_2 \cdot 0^2 = a_0$;
$f(h) \approx P_2(h) = a_0 + a_1 h + a_2 h^2$;
$f(2h) \approx P_2(2h) = a_0 + a_1 2h + a_2 (2h)^2$;
$c_0 a_0 + c_1(a_0 + a_1 h + a_2 h^2) + c_2(a_0 + a_1 2h + a_2(2h)^2) = a_1 + 2a_2 h$.
Збираємо коефіцієнти при a_0, a_1, a_2:
a_0: $c_0 + c_1 + c_2 = 0$;
a_1: $c_1 h + c_2 2h = 1$;
a_2: $c_1 h^2 + c_2 (2h)^2 = 2h$.
Розв'язавши систему нелінійних рівнянь, знаходимо:
$c_0 = -1/2h, \quad c_1 = 0, \quad c_2 = 1/2h$.
$$f'(h) = -\frac{1}{2h} f(0) + 0 \cdot f(h) + \frac{1}{2h} f(2h) = \frac{f(2h) - f(0)}{2h}.$$
Отже, $f'(h) = \dfrac{f(2h) - f(0)}{2h}$.

Апостеріорні оцінки похибки. Метод Рунге-Ромберга

Загальна ідея методу: нехай маємо деяку наближену формулу $\zeta(x, h)$ для обчислення величини $z(x)$ за її значеннями на рівномірній сітці з кроком h. Залишковий член цієї формули визначається за формулою:
$$z(x) - \zeta(x, h) = \psi(x) h^p + O(h^{p+1}),$$
де $\psi(x) h^p$ – головний член похибки.

Наприклад, $z(x) = f'(x)$, $f(x)$ задана своїми значеннями функція.

Нехай $f(x) \in C^5[a, b]$,
$$\zeta(x, h) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f_{\overset{0}{x}}(x),$$

тоді
$$z(x) - \zeta(x,h) = f'(x) - f_{\overset{0}{x}}(x) =$$
$$= f'(x) - \left(\frac{f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x)}{2h} - \right.$$
$$\left. - \frac{f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(x)}{2h} \right) +$$
$$+O(h^4) = -\frac{h^2}{6}f^{(3)}(x) - \frac{h^4}{60}f^{(5)}(\xi), \quad \xi \in [x-h, x+h].$$
Тут $p = 2$, $\psi(x) = -\frac{1}{6}f^{(3)}(x)$. Якщо скористатись тією ж самою наближеною формулою для обчислення $z(x)$, але використовуючи сітку з кроком rh, дістанемо
$$z(x) - \zeta(x,h) = \psi(x)(rh)^p + O((rh)^{p+1}).$$
Віднявши дві похибки одержимо:
$$\zeta(x,h) - \zeta(x,rh) = \psi(x)h^p(r^p - 1) + O(h^{p+1}),$$
$$\psi(x)h^p = \frac{\zeta(x,h) - \zeta(x,rh)}{r^p - 1} + O(h^{p+1}).$$
Отже розрахунок на другій сітці дає змогу оцінити похибки на першій сітці з точністю до членів вищого порядку. Із формули
$$z(x) - \zeta(x,h) = \psi(x)h^p + O(h^{p+1}),$$
отримаємо
$$z(x) = \zeta(x,h) + \psi(x)h^p + O(h^{p+1}).$$
Підставимо знайдене значення $\psi(x)h^p$ і одержимо формулу
$$z(x) = \zeta(x,h) + \frac{\zeta(x,h) - \zeta(x,rh)}{r^p - 1} + O(h^{p+1}),$$
за якою дає результат можна одержати з вищим порядком точності. Таке уточнення називають уточненням за Річардсо-

ном.

Приклад. Нехай функція $y(x) = \lg x$ задана таблицею

x_i	1.000	2.000	3.000	4.000	5.000
$y = \lg x_i$	0.000	0.301	0.478	0.602	0.699

Обчислити $y'(3.000)$.

Розв'язок. Нехай $h = 1$. Скориставшись формулою для центральної розділеної різниці $\dfrac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f_{\overset{0}{x}}(x)$ дістанемо

$$y'(3.000) = \frac{y(4.000) - y(2.000)}{2 \cdot 1} \approx 0.151.$$

Збільшемо крок вдвічі ($r = 2$), одержимо

$$y'(3.000) = \frac{y(5.000) - y(1.000)}{2 \cdot 2} \approx 0.175.$$

Використовуючи уточнення Річардсона при $p = 2$

$$y'(3.000) \approx 0.143,$$

що на 2 відсотка відрізняється від шуканого значення $y'(3.000) = 0.145$.

Вибір оптимального кроку чисельного диференціювання

Загальна похибка обчислення похідної може розглядатися як сума похибки методу та похибки обчислень. Оскільки із зменшенням кроку h похибка методу зменшується, а похибка обчислень збільшується, то існує оптимальний крок обчислень, при чому для кожної формули чисельного диференціювання він свій.

Приклад. Вибрати крок чотирьохзначної таблиці для функції $f(x) = \operatorname{arctg} x$, $x \in [0; 1]$, щоб формула

$$f'(x_1) \approx \frac{f_2 - f_0}{2h}$$

давала найменшу похибку. Оцінити цю похибку.

Розв'язок. Оскільки в умові зазначено використання чотирьохзначної таблиці, то похибки значень $\Delta \leqslant 10^{-4}$. Тобто крім

похибки методу (використання формул чисельного диференціювання) необхідно врахувати неусувну похибку (неточні вхідні дані, які будемо позначати $\tilde{f}$). Похибка методу:
$\left|f'(x_1) - \dfrac{f_2 - f_0}{2h}\right| \leqslant \dfrac{M_3}{6}h^2,$
враховуємо неусувні похибки вхідних даних:
$$\left|f_1' - \frac{\tilde{f}_2 - \tilde{f}_0}{2h}\right| = \left|f_1' - \frac{(f_2 + \Delta_2) - (f_0 + \Delta_0)}{2h}\right| \leqslant \left|f_1' - \frac{f_2 - f_0}{2h}\right| +$$
$$+ \left|\frac{\Delta_2 - \Delta_0}{2h}\right| \leqslant \frac{M_3}{6}h^2 + \frac{2\Delta}{2h} = \varphi(h).$$
Для визначення кроку h, при якому похибка буде найменшою, знайдемо екстремуми $\varphi(h)$:
$$\varphi'(h) = 2h\frac{M_3}{6} - \frac{\Delta}{h^2} = 0; \qquad h^3 = \frac{3\Delta}{M_3}; \qquad h_o = \left(\frac{3\Delta}{M_3}\right)^{1/3}.$$
Знайдемо оптимальний крок для $f(x) = \operatorname{arctg} x$:
$$f'''(x) = -\frac{2(1 - 3x^2)}{(1 + x^2)^3};$$
$$M_3 = \max_{x \in [0;1]} |f'''(x)| = \left| - \frac{2(1 - 3 \cdot 0^2)}{(1 + 0^2)^3}\right| = 2;$$
$$h_o = \left(\frac{3\Delta}{M_3}\right)^{1/3} = \left(\frac{3 \cdot 10^{-4}}{2}\right)^{1/3} = 0,053.$$
Оцінимо похибку диференціювання, якщо буде використовуватися оптимальний крок:
$$\varphi(h_o) = \frac{M_3}{6}h_o^2 + \frac{\Delta}{h_o} = \frac{M_3}{6}\left(\frac{3\Delta}{M_3}\right)^{\frac{2}{3}} + \Delta\left(\frac{M_3}{3\Delta}\right)^{\frac{1}{3}} = \frac{3}{2}\left(\frac{\Delta^2 M_3}{3}\right)^{\frac{1}{3}};$$
$$\varphi(h_o) = \frac{3}{2}\left(\frac{\Delta^2 M_3}{3}\right)^{1/3} = \frac{3}{2}\left(\frac{(10^{-4})^2 2}{3}\right)^{1/3} = 0,0028.$$
Отже, $h_o = 0,053$, при цьому похибка буде 0,0028.

Задачі для самостійного розв'язання

1. Побудувати формулу чисельного диференціювання для першої похідної в лівій точці за трьома рівновіддаленими точками. Оцінити точність. Визначити точки підвищеної точності для цієї формули.

2. Побудувати формулу чисельного диференціювання для першої похідної в правій точці за двома рівновіддаленими точками. Оцінити точність. Визначити точки підвищеної точності для цієї формули.

3. Знайти $f'(2h)$ методом невизначених коефіцієнтів для функції, що задана такими значеннями $f(0)$, $f(h)$, $f(2h)$.

4. Знайти $f''(0)$ методом невизначених коефіцієнтів для функції, що задана такими значеннями $f(0)$, $f(2)$, $f(4)$.

5. Знайти $f'(h)$ методом невизначених коефіцієнтів для функції, що задана такими значеннями $f(0)$, $f(h)$.

6. Знайти оцінку точності за допомогою формули Тейлора для формули чисельного диференціювання $f'(x_2)$, побудованої за вузлами x_0, x_1, x_2.

7. Знайти оцінку точності за допомогою формули Тейлора для формули чисельного диференціювання $f''(x_0)$, побудованої за вузлами x_0, x_1, x_2.

8. Знайти оцінку точності за допомогою формули Тейлора для формули чисельного диференціювання $f'(x_0)$, побудованої за вузлами x_0, x_1.

9. Вибрати крок чотирьохзначної таблиці ($\delta = 10^{-4}$) для функції $f(x) = \ln x$, $x \in [1; 10]$, щоб формула чисельного диференціювання $f''(x_2) \approx \dfrac{f_0 - 2f_1 + f_2}{h^2}$ давала найменшу похибку. Оцінити цю похибку.

10. Вибрати крок чотирьохзначної таблиці ($\delta = 10^{-4}$) для функції $f(x) = \operatorname{arctg} x$, $x \in [0; 1]$, щоб формула чисельного диференціювання $f'(x_0) \approx \dfrac{f_1 - f_0}{h}$ давала найменшу похибку. Оцінити цю похибку.

11. Функція Бесселя задана таблицею

x_i	0.96	0.98	1.00	1.02	1.04
y_i	0.782536	0.773933	0.765198	0.756332	0.747339

Знайти $y'(1)$, якщо відомо, що різницями вище третього порядку можна знехтувати.