7. Чисельне диференціювання

7.1. Побудова формул чисельного диференціювання

Задача чисельного диференціювання виникає у випадку коли необхідно обчислити похідну функції, значення якої задані таблицею. Нехай задано

$$f_i = f(x), \quad i = \overline{0, n}, \quad x_i \in [a, b]. \tag{1}$$

Проінтерполюємо ці значення. Тоді

$$f(x) = L_n(x) + r_n(x), \tag{2}$$

де залишковий член у формі Ньютона має вигляд:

$$r_n(x) = f(x; x_0, \ldots, x_n)\omega_n(x), \tag{3}$$

де

$$\omega_n(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i). \tag{4}$$

Звідси

$$f^{(k)}(x) = L_n^{(k)}(x) + r_n^{(k)}(x). \tag{5}$$

За наближене значення похідної в точці x беремо $f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x)$, $x \in [a, b]$.

Оцінимо похибку наближення — $r^{(k)}(x)$. За формулою Лейбніца:

$$r_n^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{k} C_k^j f^{(j)}(x; x_0, \ldots, x_n)\omega_n^{(k-j)}(x). \tag{6}$$

З властивості розділених різниць маємо для $f(x) \in C^{n+k+1}[a, b]$:

$$f^{(j)}(x; x_0, \ldots, x_n) = j! \cdot f(\underbrace{x, \ldots, x}_{j+1}; x_0, \ldots, x_n) = \frac{j!}{(n+j+1)!} \cdot f^{(n+j+1)}(\xi_j), \tag{7}$$

де всі $x_j \in [a, b]$.

Остаточно вираз для похибки наближення похідної має вигляд:

$$r_n^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{k} \frac{k!}{(k-j)!(n+j+1)!} \cdot f^{(n+j+1)}(\xi_j)\omega_n^{(k-j)}(x). \tag{8}$$

Оцінка похибки матиме вигляд:

$$\left| f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x) \right| \le M \sum_{j=0}^{k} \frac{k!}{(k-j)!(n+j+1)!} \cdot \left| \omega_n^{(k-j)}(x) \right|, \tag{9}$$

де $M = \max\limits_{0 \le j \le k} \max\limits_{x \in [a,b]} \left| f^{(n+j+1)}(x) \right|$.

Нагадаємо, що процес інтерполювання розбіжний. Крім того, якщо $k > n$, то $L_n^{(k)}(x) \equiv 0$. Тому не можна брати великими значення n та k. Як правило $k = 1, 2$, іноді $k = 3, 4$. Відповідно, $n = k$, або $n = k + 1$, або $n = k + 2$.

Подивимося як залежить порядок збіжності процесу чисельного диференціювання від кроку. Нехай $x_i = x_0 + ih$, $h > 0$ — крок. Тоді за умови $x_n - x_0 = O(h)$:

$$\omega_n(x) = (x - x_0) \cdot \ldots \cdot (x - x_n) = O(h^{n+1}), \tag{10}$$

де $x \in [x_0, x_n]$.

Перша похідна від $\omega_n(x)$ має порядок на одиницю менше, тобто

$$\omega_n'(x) = O(h^n). \tag{11}$$

Далі

$$r_n^{(k)}(x) = O(h^{n+1-k}), \tag{12}$$

тому

$$f^{(k)}(x) - L_n^{(k)} = O(h^{n+1-k}). \tag{13}$$

При умові $n \geq k$ останній вираз збігається до нуля, тобто

$$f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x) \xrightarrow[h \to 0]{} 0. \tag{14}$$

Далі

$$r_n^{(k)}(x) = \underbrace{f(x; x_0, \ldots, x_n)\omega_n^{(k)(x)}}_{O(h^{n+1-k})} + \underbrace{\sum_{j=1}^{k} C_k^j f^{(j)}(x; x_0, \ldots, x_n)\omega_n^{(k-j)}(x)}_{O(h^{n+2-k})}. \tag{15}$$

Якщо

$$\omega_n^{(k)}\left(\overline{x}\right) = 0, \tag{16}$$

то

$$r_n^{(k)}\left(\overline{x}\right) = O(h^{n+2-k}). \tag{17}$$

Точки $x = \overline{x}$ називаються *точками підвищеної точності формул чисельного диференціювання*.

Приклад 1: Виведемо формули чисельного диференціювання для $k = 1, n = 1$.

Виберемо точки x_0, $x_1 = x_0 + h$і інтерполяційний багаточлен має вигляд:

$$L_1(x) = f_0 + (x - x_0) \cdot \frac{f_1 - f_0}{h}. \tag{18}$$

Для похідної отримаємо вираз:

$$f'(x) \approx L_1'(x) = \frac{f_1 - f_0}{h}, \quad x \in [x_0, x_1]. \tag{19}$$

Розписавши за формулою Тейлора, отримаємо вираз для похибки:

$$r_1'(x) = \frac{f^{(3)}(\xi_1)}{3!} \cdot (x - x_0)(x - x_1) + \frac{f^{(2)}(\xi_0)}{2!} \cdot (2x - x_1 - x_0) = O(h). \tag{20}$$

Якщо $2\overline{x} - x_1 - x_0 = 0$, то $r_1'\left(\overline{x}\right) = O(h^2)$. Тобто $\overline{x} = \frac{x_1+x_0}{2}$ — точка підвищеної точності. Більш точно (див. приклад 3):

$$\left|r_1'\left(\overline{x}\right)\right| \le \frac{h^2 M_3}{24}, \tag{21}$$

де $M_3 = \max\limits_{x\in[a,b]} \left|f^{(3)}(x)\right|$.

> **Приклад 2**: Аналогічно виведемо формули чисельного диференціювання для $k = 1, n = 2$.

Виберемо точки x_0, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$. Інтерполяційний поліном має вигляд:

$$L_2(x) = f_0 + (x - x_0) \cdot \frac{f_1 - f_0}{h} + (x - x_0)(x - x_1) \cdot \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{2h^2}. \tag{22}$$

Тоді замінимо $f'(x) \approx L_2;(x) = \frac{f_1-f_0}{h} + (2x - x_0 - x_1) \cdot \frac{f_2-2f_1+f_0}{2h^2}$, $x \in [x_0, x_2]$.

Якщо сюди підставити $x = x_0$, то отримаємо $f'(x_0) \approx \frac{-f_2+4f_1-3f_0}{2h}$. Для точки $x = x_1$ маємо $f'(x_1) \approx \frac{f_2-f_0}{2h} = f^0_{x,1}$. Для точки $x = x_2$ маємо $f'(x_2) \approx \frac{f_0-4f_1+3f_2}{2h}$, $x \in [x_0, x_2]$. Для похибки маємо оцінку $r_2'(x) = O(h^2)$.

Позначимо

- для $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $f_{x,i} = \frac{f_{i+1}-f_i}{h} \approx f'(x)$, (різницева похідна вперед);
- для $x \in [x_{i-1}, x_i]$ — $f_{\overline{x},i} = \frac{f_i-f_{i-1}}{h} \approx f'(x)$, (різницева похідна назад);
- для $x \in [x_{i-1}, x_{i+1}]$ — $f^0_{x,i} \approx f'(x)$ (центральна різницева похідна).

Замість $f'(x_i)$ можна взяти будь-яке із значень: $f_{x,i}$, $f_{\overline{x},i}$ або $f^0_{x,i}$.

> **Задача 21**: Знайти точки підвищеної точності формул чисельного диференціювання для $k = 1, n = 2$ і оцінити похибку в цих точках.

> **Приклад 3**: При $n = 1$, $k = 1$ оцінимо точність формул чисельного диференціювання за формулою Тейлора.

1. Нехай $f(x) \in C^2([a, b])$. Тоді

$$f'(x_0) - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = f'(x_0) - \frac{1}{h}\left(f_0 + hf_0' + \frac{h^2}{2}f''(\xi) - f_0\right) = -\frac{h}{2} \cdot f''(\xi), \tag{23}$$

$$\left|f'(x_0) - \frac{f_1 - f_0}{h}\right| \le \frac{M_2 h}{2}, \tag{24}$$

   де $M_2 = \max\limits_{[x_0,x_1]} |f''(\xi)|$.

2. Нехай $f(x) \in C^3([a, b])$. Тоді, розписавши розклад по формулі Тейлора до третьої похідної, маємо оцінку:

$$\begin{aligned}
&f'\left(\overline{x}\right)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}= \\
&\quad=f'\left(\overline{x}\right)-\frac{1}{h}\Bigg(f'\left(\overline{x}\right)+\frac{h}{2}\cdot f'\left(\overline{x}\right)+\frac{h^2}{8}\cdot f''\left(\overline{x}\right)+\frac{h^3}{48}\cdot f'''(\xi))- \\
&\qquad -f\left(\overline{x}\right)+\frac{f}{2}\cdot f'\left(\overline{x}\right)-\frac{h^2}{8}\cdot f''\left(\overline{x}\right)+\frac{h^3}{48}\cdot f'''(\eta)\Bigg)=-\frac{h^2}{24}\cdot f'''(\zeta).
\end{aligned} \tag{25}$$

$$\left|f'\left(\overline{x}\right)-\frac{f_1-f_0}{h}\right|\le\frac{h^2M_3}{24}, \tag{26}$$

де $\overline{x}=\frac{x_1+x_0}{2}$.

Задача 22: Показати, що якщо $f(x)\in C^3([a,b])$, то $\left|f'(x_1)-\frac{f_2-f_0}{2h}\right|\le\frac{M_3h^2}{6}$.

Приклад 4: При $n=2$, $k=2$ маємо:

$$\begin{aligned}
L_2(x)=f_{i-1}+\frac{f_i-f_{i-1}}{h}\cdot(x-x_{i-1})+ \\
+\frac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{h^2}\cdot(x-x_{i-1})\cdot(x-x_i)
\end{aligned} \tag{27}$$

$$L_2''(x)=\frac{f_{i+1}-2f_i+f_{i-1}}{h^2}. \tag{28}$$

Для $f(x)\in C^4([a,b])$ оцінимо точність формул чисельного диференціювання за формулою Тейлора:

$$\begin{aligned}
&f''(x_1)-\frac{f_2-2f_1+f_0}{h^2}= \\
&\quad=f''(x_1)-\frac{f(x_1+h)-2f(x_1)+f(x_1-h)}{h^2}= \\
&\quad=f''(x_1)-\frac{1}{h^2}\Bigg(f_1+hf_1''+\frac{h^2}{2}\cdot f_1''+\frac{h^3}{6}\cdot f_1'''+\frac{h^4}{24}\cdot f^{(4)}(\xi_1)-2f_1+ \\
&\qquad +f_1-hf_1''+\frac{h^2}{2}\cdot f_1''-\frac{h^3}{6}\cdot f_1'''+\frac{h^4}{24\cdot f^{(4)}}(\xi_2)\Bigg)=\frac{h^2}{12}\cdot f^{(4)}(\xi),
\end{aligned} \tag{29}$$

де $\xi_1,\xi_2,\xi\in[x_0,x_2]$.

Отже,

$$\left|f_1''-\frac{f_2-2f_1+f_0}{h^2}\right|\le\frac{M_4h^2}{12}. \tag{30}$$

Задача 23: Побудувати формулу чисельного диференціювання $k=2$, $n=2$ у випадку нерівновіддалених вузлів: x_0, $x_1=x_0+h_1$, $x_2=x_1+h_2$. Оцінити точність формули. Знайти точки підвищеної точності оцінити похибку.

Крім інтерполяційних формул для чисельного диференціювання можна застосовувати сплайни. Нехай $f_i=f(x_i)$. Побудуємо інтерполяційний сплайн першого степеня $s_1(x)$, для якого має місце оцінка $\left|f^{(k)}(x)-s_1^{(k)}(x)\right|=O(h^{2-k})$, $k=0,1$. Звідси при $k=1$ маємо $f'(x)-s_1'(x)=O(h)$.

Для кубічного інтерполяційного сплайну $s_3(x)$ маємо для першої та другої похідних:

$$\left|f^{(k)}(x)-s_3^{(k)}(x)\right|-O(h^{4-k}),\quad k=1,2. \tag{31}$$

7.2. Про обчислювальну похибку чисельного диференціювання

Нехай значення функції обчисленні з деякою похибкою. Постає питання про вплив цих похибок на значення похідних обчислених за формулами чисельного диференціювання.

Перед цим зробимо зауваження про вплив збурення функції на значення звичайних похідних.

Нехай $f(x)\in C^1([a,b])$ і її збурення має вигляд:

$$\tilde{f}(x)=f(x)+\frac{\sin(\omega x)}{n}. \tag{32}$$

При $n\to\infty$ маємо $\left\|f(x)-\tilde{f}(x)\right\|_{C([a,b])}=\frac{1}{n}\to 0$, звідси $\tilde{f}(x)\xrightarrow[n\to\infty]{}f(x)$. Таким чином це малі збурення. Маємо $\tilde{f}'(x)=f'(x)+\frac{\omega}{n}\cdot\cos(\omega x)$. Нехай $\omega=n^2$, тоді

$$\left|f(x)-\tilde{f}(x)\right|_{C([a,b])}=\frac{|\omega|}{n}=n\xrightarrow[n\to\infty]{}\infty. \tag{33}$$

Цей приклад ілюструє нестійкість оператора диференціювання. Є сподівання, що ця нестійкість має місце і для чисельного диференціювання.

Нехай $\tilde{f}_i=f_i+\delta_i$, $f_i=f(x_i)$, $i=\overline{0,n}$, $|\delta_i|\le\delta$. Розглянемо вплив похибок δ_i на конкретних формулах чисельного диференціювання.

> **Приклад 1**: Оцінімо вплив збурень на похибку обчислення першої похідної $n=1$, $k=1$.

$$f_i'=\frac{\tilde{f}_i-\tilde{f}_{i-1}}{h}=f_i'-\frac{f_i-f_{i-1}}{h}-\frac{\delta_i-\delta_{i-1}}{h}, \tag{34}$$

$$\left|f_i'-\frac{\tilde{f}_i-\tilde{f}_{i-1}}{h}\right|\le\left|f_i'-\frac{f_i-f_{i-1}}{h}\right|+\left|\frac{\delta_i-\delta_{i-1}}{h}\right|\le\frac{M_2h}{2}+\frac{2\delta}{h}\xrightarrow[h\to 0]{}\infty \tag{35}$$

Таким чином, як і для аналітичного диференціювання, маємо некоректність: при малих збуреннях $|\delta_i| le \delta_i$ можуть бути як завгодно великі похибки, якщо $\frac{\delta}{h}\to\infty$ при $h\to 0$.

Мінімізуємо вплив цих збурень. Позначимо

$$\varphi(h)=\frac{M_2h}{2}+\frac{2\delta}{h}. \tag{36}$$

Тоді мінімум цієї функції досягається для таких h:

$$\varphi'(h)=\frac{M_2}{2}-\frac{2\delta}{h^2}=0, \tag{37}$$

звідки $h_0=2\sqrt{\frac{\delta}{M_2}}$. При такому значенні h оцінка похибки (35) така:

$$\varphi(h_0)=2\sqrt{M_2\delta}=O\left(\sqrt{\delta}\right)\xrightarrow[\delta\to 0]{}0. \tag{38}$$

> **Приклад 2**: Подивимося на вплив збурень на похибку обчислення першої похідної при використанні центральної різницевої похідної.

$$\left| f_i' - \frac{\tilde{f}_{i+1} - \tilde{f}_{i-1}}{2h} \right| \le \left| f_i' - \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \right| + \left| \frac{\delta_{i+1} - \delta_{i-1}}{2h} \right| \le \frac{M_3 h^2}{6} + \frac{\delta}{h} = \varphi(h). \tag{39}$$

З рівняння $\varphi'(h) = \frac{M_3 h}{3} - \frac{\delta}{h^2} = 0$ маємо: $h_0^3 = \frac{3\delta}{M_3}$, $h_0 = \sqrt[3]{\frac{3\delta}{M_3}}$. Отже,

$$\varphi(h_0) = \frac{M_3}{6} \sqrt[3]{\frac{9\delta^2}{M_3^2}} + \frac{\delta}{\sqrt[3]{\frac{3\delta}{M_3}}} = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{M_3 \delta^2}{3}} + \sqrt[3]{\frac{M_3 \delta^2}{3}} = \frac{3}{2} \sqrt[3]{\frac{M_3 \delta^2}{3}} = O\left(\sqrt[3]{\delta^2}\right). \tag{40}$$

Таким чином швидкість збіжності при $\delta \to 0$ похибки формули чисельного диференціювання центральною похідною вища ніж для формули з прикладу 1 (похідна вперед або назад).

Задача 24: Дослідити похибку чисельного диференціювання для $n = 2$, $k = 2$, вибрати оптимальний крок h_0, дати оцінку $\varphi(h_0)$.