ГЛАВА 5

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ И ИНТЕГРИРОВАНИЯ

5.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ПРИНЦИПЫ КОНСТРУИРОВАНИЯ АППРОКСИМАЦИОННЫХ ФОРМУЛ

Если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ и известна ее первообразная $F(x)$, то определенный интеграл от этой функции может быть вычислен по формуле Ньютона — Лейбница

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a),$$

где $F'(x) = f(x)$. Однако во многих случаях возникают большие трудности, связанные с нахождением первообразной, или эта задача не может быть решена элементарными способами. Например, в элементарных функциях не выражается интеграл $\int_1^2 \frac{dx}{\ln x}$.

Кроме того, в вычислительной практике часто требуется находить значения производных и определенных интегралов от сеточных функций, заданных в общем случае на неравномерной сетке $\Omega_n = \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$, $x_{i+1} = x_i + h_{i+1}$, $i = \overline{0, n-1}$, $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$.

В связи с этим в численном анализе имеется специальный математический аппарат численного дифференцирования и интегрирования, отличный от соответствующего аппарата математического анализа.

Традиционно интегралы вычисляются с помощью квадратурных формул (явно), выражающихся линейными комбинациями значений функции $y_i = f(x_i)$ в узлах сетки Ω_n, функционально-дифференциальной квадратурной формулы Эйлера — Маклорена, формул Гаусса — Кристоффеля, Маркова и различных нестандартных формул [2], [4], [6], [9], [14], [26], [28], [29], [35]. В данной главе кратко описаны как классические, так и новые методы численного дифференцирования и интегрирования, разработанные на основе аппарата интегрально-дифференциальных сплайнов [15]–[24]. Приведен ряд обобщенных явных квадратурных формул функционально-дифференциального типа, а также описан новый способ вычисления интегралов на основе решения систем линейных алгебраических уравнений. Последний подход в отличие от способа вычисления интегралов по квадратурным формулам носит неявный характер и связан с построением *неявных алгоритмов*.

Особенность аппарата численного дифференцирования и интегрирования, изложенного в данной главе, состоит в том, что в некоторых аппроксимационных операторах дифференцирования могут использоваться как значения сеточной функции в узлах, так и значения определенных интегралов на частичных отрезках $[x_i, x_{i+1}]$, а в аппроксимационных операторах интегрирования — значения функции и ее производных в узлах. В соответствии с этим далее выделяются классические постановки задач численного дифференцирования и интегрирования, формулируемые обычно на равномерной сетке ($h_{i+1} = \text{const}$), и обобщенные постановки, учитывающие связи производных с интегралами в задаче численного дифференцирования и интегралов с производными в задаче численного интегрирования, формулируемые на неравномерной сетке ($h_{i+1} = \text{var}$). Классические постановки ниже нумеруются цифрой 1, а обобщенные — цифрой 2. Данные постановки относятся только к явным аппроксимационным формулам численного дифференцирования и интегрирования. Соответствующие неявные алгоритмы рассматриваются отдельно.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ 1 ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

Пусть на отрезке $[a, b]$ на равномерной сетке $\Omega_n(h_{i+1} = h = \text{const})$ заданы:

а) сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, своими значениями $f_i = f(x_i)$;

б) точки x_j сетки Ω_n, в которых требуется найти значения производных;

в) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно h.

Требуется с заданным порядком точности (аппроксимации) вычислить значения производных $\hat{f}^{(p)}(x)\big|_{x=x_j}$ в точках x_j сетки, где p — порядок производной.

Иначе, требуется получить аппроксимационный оператор $\hat{f}^{(p)}(x_j)$, удовлетворяющий условию $\left|f^{(p)}(x_j) - \hat{f}^{(p)}(x_j)\right| \le Ch^t$, где $C = \text{const}$, не зависящая от величины шага h.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ 2 ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

Пусть на отрезке $[a, b]$ в общем случае на неравномерной сетке $\Omega_n = \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$, $x_{i+1} = x_i + h_{i+1}$, $i = \overline{0, n-1}$, $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ ($h_{i+1} = \text{var}$) заданы:

а) сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, своими значениями $f_i = f(x_i)$ и/или значениями интегралов $I_i^{i+1} = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ на частичных отрезках $[x_i, x_{i+1}]$;

б) точки x_j сетки Ω_n, в которых требуется найти значения производных;

в) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно величины шага.

Требуется с заданным порядком точности (аппроксимации) вычислить значения производных $\hat{f}^{(p)}(x)\big|_{x=x_j}$ в точках x_j сетки (получить аппроксимационный оператор), где p — порядок производной.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ 1 ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Пусть на отрезке $[a, b]$ на равномерной сетке $\Omega_n (h_{i+1} = h = \text{const})$ заданы:

а) сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, своими значениями $f_i = f(x_i)$ или сеточное представление формульной функции $y = f(x)$;

б) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно величины шага h.

Требуется с заданным порядком точности вычислить значение интеграла

$$\hat{I}_a^b \cong I_a^b = \int_a^b f(x)dx.$$

Иначе, требуется получить аппроксимационный оператор интегрирования $\hat{I}_a^b$, удовлетворяющий условию $\left|\hat{I}_a^b - I_a^b\right| \le Ch^t$, где $C = \text{const}$, не зависящая от h.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ 2 ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Пусть на отрезке $[a, b]$ в общем случае на неравномерной сетке $\Omega_n = \{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$ $(x_{i+1} = x_i + h_{i+1}$, $i = \overline{0, n-1}$, $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i = \text{var})$ заданы:

а) сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0, n}$, своими значениями $f_i = f(x_i)$ и возможно значениями производных $f^{(p)}(x_i)$;

б) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно шага.

Требуется с заданным порядком точности вычислить значение интеграла (получить аппроксимационный оператор)

$$\hat{I}_a^b \cong I_a^b = \int_a^b f(x)dx.$$

Отметим, что символом «^» здесь и далее обозначаются операторы дифференцирования и интегрирования.

Построение аппроксимационных формул для производных и интегралов в данной книге выполняется различными путями на основе:

1) разложения функции $f(x)$ по формуле Тейлора;

2) разложения первообразной функции $F(x)$ по формуле Тейлора;

3) замены заданной функции интерполяционными многочленами и последующим дифференцированием или интегрированием этих многочленов. Дополнительные возможности построения аппроксимационных операторов предоставляют интегрально-дифференциальные сплайны (ИД-сплайны).

Общая *интегрально-функционально-дифференциальная* формула для аппроксимационного оператора дифференцирования $\hat{f}^{(p)}(x_j)$ может быть записана в форме

$$\hat{f}^{(p)}(x_j) = \sum_{k_1}\left(\sum_{l_1} a_{k_1,l_1}(h)\right) I_{k_1}^{k_1+1} + \sum_{k_2}\left(\sum_{l_2} b_{k_2,l_2}(h)\right) f_{k_2} + \sum_{k_3}\left(\sum_{l_3} c_{k_3,l_3}(h)\right) f'_{k_3} + \ldots, \tag{5.1}$$

где $a_{k_1,l_1}(h)$, $b_{k_2,l_2}(h)$, $c_{k_3,l_3}(h), \ldots$ — некоторые коэффициенты, индексы при h для упрощения записи не указаны.

Общая *функционально-дифференциальная* формула для аппроксимационного оператора интегрирования $\hat{I}_i^{i+1}$ может быть записана в виде

$$\hat{I}_i^{i+1} = h\sum_{k_1} a_{k_1}(h) f_{k_1} + h^2 \sum_{k_2} b_{k_2}(h) f'_{k_2} + h^3 \sum_{k_3} c_{k_3}(h) f''_{k_3} + \ldots, \tag{5.2}$$

где $a_{k_1}(h),\ b_{k_2}(h),\ c_{k_3}(h),\ \ldots$ — некоторые коэффициенты.

Возможность такого комбинированного представления следует из разложения первообразной $F(x)$ по формуле Тейлора относительно точки x_i и последующего выражения из него производной некоторого порядка или определенного интеграла.

В формулы (5.1), (5.2), очевидно, входят суммы нескольких групп линейных комбинаций. Так, вторая сумма в (5.1) и первая сумма в (5.2) соответствуют функциональным комбинациям, первая сумма в (5.1) соответствует интегральной части суммы. Дифференциальным комбинациям соответствуют третья и последующие части в (5.1) и вторая, третья и т. д. суммы в (5.2).

Если в (5.1) присутствуют только интегральные комбинации, формула численного дифференцирования называется *интегральной*, если только функциональные комбинации — *функциональной* (или *точечной*), а если только дифференциальные комбинации — *дифференциальной*. Если же в (5.1) отсутствуют интегральные комбинации, формула называется *функционально-дифференциальной*, если отсутствуют функциональные комбинации — *интегрально-дифференциальной*, если отсутствуют дифференциальные комбинации — *интегрально-функциональной*.

Аналогичная классификация справедлива и для формулы (5.2) численного интегрирования.

5.2. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

5.2.1. ФОРМУЛЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ФУНКЦИЙ ПО ФОРМУЛЕ ТЕЙЛОРА

Рассмотрим решение задач 1 и 2 численного дифференцирования на различных регулярных и нерегулярных шаблонах.

А. Двухточечный шаблон. Выберем шаблон $Ш_{2,i} = (x_i,\ x_{i+1})$ на неравномерной сетке Ω_n. Предполагая, что $f(x) \in C_2[a, b]$, разложим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора (В.20) при $k = 1$ относительно точки x_i с остаточным слагаемым в форме Лагранжа и найдем выражение для $f_{i+1} = f(x_{i+1})$:

$$f_{i+1} = f_i + h_{i+1} f'_i + \frac{h_{i+1}^2}{2} f''(\xi), \tag{5.3}$$

где $\xi \in (x_i,\ x_{i+1})$, $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$. Отсюда получаем

$$f'_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} - \frac{h_{i+1}}{2} f''(\xi).$$

Очевидно, справедлива оценка

$$\left|-\frac{h_{i+1}}{2}f''(\xi)\right| \le \frac{h_{i+1}}{2}\max_{[x_i,\, x_{i+1}]}|f''(x)| = \frac{h_{i+1}\cdot M_{2,i}}{2},$$

где $M_{2,i} = \max\limits_{[x_i, x_{i+1}]}|f''(x)|$.

Отсюда следует *функциональная формула* (функциональный оператор) для первой производной:

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} \quad \left(\frac{h_{i+1}}{2}M_{2,i}\right). \tag{5.4}$$

В скобках справа от аппроксимационных операторов здесь и далее указываются правые части оценок их погрешностей.

Отметим, что формула (5.4) является несимметричной, односторонней (левосторонней). Если функцию $f(x)$ разложить по формуле Тейлора относительно точки x_{i+1}, то получим правостороннюю формулу

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \quad \left(\frac{h}{2}M_{2,i}\right).$$

Б. Трехточечный шаблон. На неравномерной сетке Ω_n выбираем трехточечный (двухшаговый) шаблон $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, характеризующийся шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$, $h_i = x_i - x_{i-1}$ и параметром его нерегулярности $\delta_{i+1} = \frac{h_{i+1}}{h_i}$, который в общем случае не равен единице.

Аппроксимационные функциональные (точечные) формулы второго порядка в левой крайней, центральной и правой крайней точках шаблона можно получить на основе разложения функции $f(x)$ по формуле Тейлора с остаточным слагаемым в форме Лагранжа. При этом предполагается, что $f(x) \in C_3[a, b]$. Это позволяет получить разностные дифференциальные операторы $\hat{f}'(x_t)$ $(t = i-1, i, i+1)$ и провести оценки их погрешностей.

Разложим функцию $f(x)$ при $x = x_i$ и $x = x_{i+1}$ по формуле Тейлора при $k = 2$ относительно точки x_{i-1} с остаточным слагаемым в форме Лагранжа. В результате находим соотношения, определяющие $f_i = f(x_i)$ и $f_{i+1} = f(x_{i+1})$:

$$f_i = f_{i-1} + h_i f'_{i-1} + \frac{h_i^2}{2}f''_{i-1} + \frac{h_i^3}{6}f'''(\xi_-); \tag{5.5}$$

$$f_{i+1} = f_{i-1} + H_i^{i+1} f'_{i-1} + \frac{\left(H_i^{i+1}\right)^2}{2}f''_{i-1} + \frac{\left(H_i^{i+1}\right)^3}{6}f'''(\xi_+), \tag{5.6}$$

где $H_i^{i+1} = h_i + h_{i+1}$, $\xi_- \in (x_{i-1}, x_i)$, $\xi_+ \in (x_{i-1}, x_{i+1})$, $f_{i-1}^{(p)} = f^{(p)}(x_{i-1})$, $p = 0, 1, 2$.

Исключая из (5.5), (5.6) слагаемое, содержащее вторую производную, и выражая из полученного соотношения f'_{i-1}, получаем следующую аппроксимацию *первой производной в левой крайней точке* (левостороннюю формулу или оператор)

$$\hat{f}'_{i-1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(-(2+\delta_{i+1})f_{i-1} + \frac{(1+\delta_{i+1})^2}{\delta_{i+1}}f_i - \delta_{i+1}^{-1}f_{i+1}\right). \tag{5.7}$$

При $h = \text{const}(\delta_{i+1} = 1)$ формула (5.7) упрощается и приводится к известному виду [6]:

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{2h}(-3f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}) \quad \left(\frac{h^2}{3} M_{3,i}\right). \tag{5.8}$$

Данную формулу можно записать через конечные разности:

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{2h}(3\Delta f_{i-1} - \Delta f_i).$$

Здесь нижние индексы v и c, относящиеся к аппроксимационным операторам (5.7) и (5.8), указывают на тип шаблона — *нерегулярный* ($h_{i+1} = \text{var}$) и *регулярный* ($h_{i+1} = \text{const}$). Остаточное слагаемое для (5.7) получается равным $\dfrac{h_i^2(1+\delta_{i+1})}{6} f'''(\xi)$, $\xi \in (x_{i-1}, x_{i+1})$, и поэтому для этой аппроксимации справедлива следующая оценка погрешности: $\left|f'_{i-1} - \hat{f}'_{i-1,v}\right| \le \dfrac{h_i^2(1+\delta_{i+1})}{6} M_{3,i}$, где $M_{3,i} = \max\limits_{x \in \text{Ш}_{3,i}} (f'''(x))$.

Приводимые здесь и ниже остаточные слагаемые для дифференциальных операторов также получаются путем дифференцирования остаточных слагаемых $R(x)$ интерполяционных многочленов соответствующей степени. Из (4.20) для трехточечных формул при $n = 2$ следует соотношение

$$R(x) = \frac{1}{3!} f'''(\xi) \cdot \omega(x), \quad \omega(x) = (x - x_{i-1})(x - x_i)(x - x_{i+1}).$$

Аналогично, разложив функцию $f(x)$ относительно точки x_{i+1} и получив соотношения для f_{i-1}, f_i, найдем $\hat{f}'_{i+1}$ — разностный оператор, аппроксимирующий *первую производную* f'_{i+1} *в правой крайней точке* (правосторонняя формула):

$$\begin{gathered} \hat{f}'_{i+1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(\delta_{i+1} f_{i-1} - \frac{(1+\delta_{i+1})^2}{\delta_{i+1}} f_i + \frac{2\delta_{i+1}+1}{\delta_{i+1}} f_{i+1}\right); \\ \hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{2h}(f_{i-1} - 4f_i + 3f_{i+1}) \text{ или } \hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{2h}(3\Delta f_i - \Delta f_{i-1}) \quad \left(\frac{h^2}{3} M_{3,i}\right). \end{gathered} \tag{5.9}$$

Оператор $\hat{f}'_{i+1,v}$ имеет остаточное слагаемое $\dfrac{h_i^2}{6}\delta_{i+1}(1+\delta_{i+1}) f'''(\xi)$.

Разложение функции $f(x)$ относительно центральной точки x_i шаблона, получение выражений для f_{i-1}, f_{i+1} и исключение из них слагаемого со второй производной приводят к следующим разностным операторам функционального типа, аппроксимирующим *первую производную в центральной точке* (формула центрального вида):

$$\begin{gathered} \hat{f}'_{i,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(\delta_{i+1}\Delta f_{i-1} + \frac{1}{\delta_{i+1}}\Delta f_i\right) = \frac{1}{H_i^{i+1}}\left(-\delta_{i+1} f_{i-1} + \frac{(\delta_{i+1}^2 - 1)}{\delta_{i+1}} f_i + \frac{1}{\delta_{i+1}} f_{i+1}\right); \\ \hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{2h}(f_{i+1} - f_{i-1}) \text{ или } \hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{2h}(\Delta f_i + \Delta f_{i-1}) \quad \left(\frac{h^2}{6} M_{3,i}\right). \end{gathered} \tag{5.10}$$

Оператор $\hat{f}'_{i,v}$ имеет остаточное слагаемое $\dfrac{h_i^2}{6}\delta_{i+1}f'''(\xi)$.

Приведенные остаточные слагаемые разностных операторов обусловливают следующие оценки их погрешностей:

$$\begin{aligned}&\left|f'_{i-1}-\hat{f}'_{i-1,v}\right|\le\frac{h_i^2}{6}(1+\delta_{i+1})M_{3,i},\ \left|f'_i-\hat{f}'_{i,v}\right|\le\frac{h_i^2}{6}\delta_{i+1}M_{3,i};\\&\left|f'_{i+1}-\hat{f}'_{i+1,v}\right|\le\frac{h_i^2}{6}(1+\delta_{i+1})\delta_{i+1}M_{3,i},\ \ M_{3,i}=\max_{x\in Ш_{3,i}}\left|f'''(x)\right|.\end{aligned}\qquad(5.11)$$

Замечания

1. Далее в тексте оценочная константа $M_{p,i}$ для краткости будет использоваться без дополнительного ее описания. В нижнем индексе этой константы всюду указывается p — порядок производной.

2. Из оценок (5.11) вытекает, что разностные операторы $\hat{f}_{i-1}$, $\hat{f}_i$, $\hat{f}_{i+1}$ аппроксимируют при $h_{i+1} = \text{var}$ соответствующие производные f'_{i-1}, f'_i, f'_{i+1} со вторым порядком, если шаблон произвольный (*безусловная аппроксимация*). Если же на шаблоне с $\delta_{i+1} \ll 1$ наложить условие, например $\delta_{i+1} \le h_i$, т. е. $h_{i+1}\le h_i^2$, то порядок аппроксимации $\hat{f}'_i$, $\hat{f}'_{i+1}$ может быть повышен до третьего (*условная аппроксимация*). Такая возможность повышения порядка аппроксимации относительно h_i без увеличения количества точек шаблона обеспечивается введением в мажоранты, соответствующие аппроксимациям, параметра δ_{i+1}, на который в случае необходимости можно наложить условие $\delta_{i+1} \le h_i$. При этом следует иметь в виду, что данный параметр входит в знаменатель некоторых слагаемых аппроксимационных формул (5.9), (5.10) и при его уменьшении увеличиваются погрешности арифметических операций.

3. Аппроксимации (5.8), (5.9) являются условными, так как для них справедливо условие $\delta_{i+1} = 1$.

Предположим, что $f(x) \in C_4[a, b]$, и разложим функцию $f(x)$ в точках x_i, x_{i+1} на трехточечном нерегулярном шаблоне $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ до слагаемого четвертого порядка относительно шага. Складывая эти разложения и выражая из суммы вторую производную, получаем *функционально-дифференциальную формулу для второй производной*:

$$f''_i=\frac{2(f_{i-1}-2f_i+f_{i+1})}{h_{i+1}^2+h_i^2}-\frac{2(h_{i+1}-h_i)}{h_{i+1}^2+h_i^2}f'_i-\frac{2\left(h_{i+1}^3-h_i^3\right)}{6\left(h_{i+1}^2+h_i^2\right)}f'''_i-\frac{2\left(h_{i+1}^4+h_i^4\right)}{4!\left(h_{i+1}^2+h_i^2\right)}f^{(4)}(\xi).\qquad(5.12)$$

Подставляя в (5.12) аппроксимационную формулу (5.10) для первой производной, находим разностный аппроксимационный оператор $\hat{f}''_i$, выраженный через параметры δ_{i+1}, h_i^2 и *аппроксимирующий* (безусловно) *вторую производную* f''_i *на нерегулярном шаблоне* с первым порядком:

$$\hat{f}''_{i,v}=\frac{2}{h_i^2}\left(\frac{1}{1+\delta_{i+1}}f_{i-1}-\frac{1}{\delta_{i+1}}f_i+\frac{1}{(1+\delta_{i+1})\delta_{i+1}}f_{i+1}\right).\qquad(5.13)$$

Выражение (5.13) можно преобразовать к виду

$$\hat{f}''_{i,v}=\frac{2}{H_i^{i+1}}\left(\frac{\Delta f_i}{h_{i+1}}-\frac{\Delta f_{i-1}}{h_i}\right)=\frac{2}{H_i^{i+1}}\left[\frac{f_{i-1}}{h_i}-\left(\frac{1}{h_i}+\frac{1}{h_{i+1}}\right)f_i+\frac{f_{i+1}}{h_{i+1}}\right].$$

Если сетка равномерная ($\delta_{i+1} = 1$), то указанный порядок условной аппроксимации возрастает на единицу, так как третье слагаемое в (5.12) становится равным нулю. В этом случае из (5.13) получаем широко распространенный оператор, *аппроксимирующий вторую производную на регулярном шаблоне* [6]:

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) \text{ или } \hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}(\Delta f_i - \Delta f_{i-1}) \quad \left(\frac{h^2}{12}M_{4,i}\right). \tag{5.14}$$

Замечание. Из (5.12) следует, что порядок условной аппроксимации (5.13) можно повысить на единицу и на нерегулярном шаблоне, если принять $|\delta_{i+1} - 1| < h_i$, т. е. $h_i - h_i^2 \le h_{i+1} \le h_i + h_i^2$ (квазиравномерная сетка).

Как следует из приведенных выше постановок задач, в вычислительной практике аппроксимационные формулы (операторы) для производных используются для вычисления значений производных либо для замены ими соответствующих дифференциальных операторов. В связи с этим приведем методику вычисления $f^{(p)}(x)\big|_{x=x_j}$.

Методика вычисления значений производных

1. Выбрать конкретную аппроксимационную формулу (или несколько разных формул), в которой порядок аппроксимации должен соответствовать заданному в задаче порядку точности t.

2. Выбрать наборы точек (шаблоны $Ш_{k,i}$), которым принадлежат точки x_j ($x_j \in Ш_{k,i}$), причем для каждого из наборов расположение точки x_j должно быть зафиксировано относительно точек шаблона (k — количество точек, определяющих шаблон). Эта фиксация определяется структурой формулы. Например, если формула имеет центральный тип (см. формулу (5.10)), то точка x_j должна совпадать со средней точкой шаблона, а если формула левосторонняя (см. формулы (5.7) и (5.8)), то точка x_j должна совпадать с левой крайней точкой шаблона и т. д.

3. В правую часть выбранной формулы (или формул) подставить значения функций и (или) интегралов, которые соответствуют выбранным точкам шаблона (шаблонов).

4. Произвести требуемые вычисления с учетом того, что количество сохраняемых цифр должно приблизительно соответствовать величине остаточного слагаемого аппроксимационной формулы и порядку точности t.

Пример 5.1. Дана сеточная функция (табл. 5.1), являющаяся сеточным представлением формульной функции $y(x) = \dfrac{1}{x}$.

Заданы также порядок $t = 2$ относительно шага h, который необходимо обеспечить при решении задачи, и точка $x_j = 1{,}4$.

Таблица 5.1

i	0	1	2	3	4	5
x_i	1	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
f_i	1,000000	0,83333333	0,7142857	0,6250000	0,5555555	0,500000

Требуется вычислить значение первой производной $f'(1{,}4)$ и второй производной $f''(1{,}4)$ с помощью различных шаблонов и соответствующих формул.

□Воспользуемся вышеприведенной методикой.

1. Так как шаг задания сеточной функции постоянный $h = x_{i+1} - x_i = 0{,}2$, точка $x_j = 1{,}4$ находится внутри сетки Ω_n, то для вычисления производной в этой точке выбирается вторая формула из (5.10), имеющая второй порядок аппроксимации относительно шага h . При этом центральная точка шаблона совпадает с точкой $x_j = 1{,}4$.

2. Выберем трехточечный шаблон $Ш_{3,i} = (x_{i-1},\ x_i,\ x_{i+1}) = (1{,}2;\ 1{,}4;\ 1{,}6)$, в котором $x_i = 1{,}4$ $(i = 2)$; $x_{i-1} = 1{,}2$ $(i - 1 = 1)$; $x_{i+1} = 1{,}6$ $(i + 1 = 3)$. В данном шаблоне центральная точка $x_i = 1{,}4$, что соответствует центральному типу аппроксимационной формулы.

3. Подсчитаем искомое значение производной по формуле (5.10):

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = \frac{0{,}6250000 - 0{,}8333333}{2 \cdot 0{,}2}.$$

4. Прежде чем выполнить вычисление, необходимо определить количество знаков, которое сохраняется при этом. Остаточное слагаемое выбранной формулы равно $\dfrac{h^2}{6} M_{3,i}$. Для его вычисления необходимо сначала определить $M_{3,i} = \max\limits_{[x_{i-1}, x_{i+1}]} |f'''(x)|$. Поэтому воспользуемся интерполяционным многочленом Ньютона с конечными разностями:

$$f_i''' \approx N_3'''(x_i) = \frac{\Delta^3 f}{h^3},$$

где $\Delta^3 f$ — конечная разность третьего порядка. Эта разность может быть вычислена по значениям функции f_i в четырех точках. Возьмем точки x_2, x_3, x_4, x_5. При этом будем считать, что $M_{3,i} \approx f'''(x_i)$ (порядок вычислений конечных разностей описан в главе 4 и отображен в таблице 4.2).

Вычисление дает

$$f'''(x_i) \approx -\frac{0{,}005935}{0{,}008} = -0{,}741875.$$

Тогда остаточное слагаемое по модулю будет равно

$$\frac{0{,}04 \cdot 0{,}74405}{6} \approx 0{,}0049 < 0{,}01.$$

На основе полученного приближенного значения остаточного слагаемого можно заключить, что в вычислениях ожидается одна верная цифра после запятой. Обычно в расчетах оставляют еще одну или две дополнительные цифры (в нашем примере это составляет всего 3 цифры). Оставляя три цифры после запятой, получаем результат:

$$\hat{f}'(x)|_{x=1{,}4} = -0{,}521.$$

Фактическая абсолютная погрешность составляет

$$\left|-0{,}521+\frac{1}{1{,}4^2}\right|=|-0{,}521+0{,}5102|=0{,}0108,$$

т. е. относительная погрешность равна

$$\frac{0{,}0108}{0{,}5102}\cdot 100\%=2{,}1\%.$$

Если эта погрешность не устраивает вычислителя, необходимо повышать порядок точности относительно h, например, до $t = 3$. В дальнейшем приводятся соответствующие примеры с порядком $t = 3$.

Для вычисления первой производной можно было использовать и другие формулы. При выборе шаблона $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = (1{,}4; 1{,}6; 1{,}8)$ по формуле (5.8) имеем

$$f'(1{,}4)=\hat{f}'_{i-1,c}=\frac{1}{2h}(-3f_{i-1}+4f_i-f_{i+1})=\frac{1}{2h}[-3f(1{,}4)+4f(1{,}6)-f(1{,}8)]=$$
$$=\frac{1}{2\cdot 0{,}2}[-3\cdot 0{,}7142857+4\cdot 0{,}625-0{,}5555]=-0{,}496017.$$

Фактическая абсолютная погрешность составляет $|-0{,}496017-0{,}510204|\cong$ $\cong 0{,}0142$, относительная погрешность равна $2{,}78\%$.

Если выбрать шаблон $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = (1; 1{,}2; 1{,}4)$, то по формуле (5.9) получаем

$$f'(1{,}4)\cong\hat{f}'_{i+1,c}=\frac{1}{2h}(f_{i-1}-4f_i+3f_{i+1})=\frac{1}{2\cdot 0{,}2}[f(1)-4f(1{,}2)+3f(1{,}4)]=$$
$$=\frac{1}{0{,}4}[1{,}0-4\cdot 0{,}83333+3\cdot 0{,}7142857]=-0{,}476187.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $|-0{,}476187-0{,}510204|\cong$ $\cong 0{,}03401$, относительная погрешность составляет $6{,}66\%$.

Для вычисления второй производной можно взять формулу (5.14) на шаблоне $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = (1{,}2; 1{,}4; 1{,}6)$:

$$\hat{f}''_{i,c}=\frac{1}{h^2}(f_{i-1}-2f_i+f_{i+1})=\frac{1}{0{,}2^2}[f(1{,}2)-2\cdot f(1{,}4)+f(1{,}6)]=$$
$$=\frac{1}{0{,}04}[0{,}8333-2\cdot 0{,}7142857+0{,}625]=0{,}743965.$$

Точное значение $f''(1{,}4)=\dfrac{2}{1{,}4^3}=0{,}7288629$. Фактическая абсолютная погрешность равна $0{,}0151$, относительная погрешность $2{,}07\%$.■

В вычислительной практике иногда применяют аппроксимационные формулы, порядок аппроксимации которых не известен или не приведен в используемом источнике, и в этом случае, прежде чем использовать эту формулу, нужно получить оценку ее погрешности.

Данную процедуру можно выполнить с помощью различных подходов, один из которых основан на разложении функций, входящих в правую часть оператора, по формуле Тейлора относительно той точки x_j, для которой записан этот оператор. Другой подход использует анализ остаточного слагаемого, полученного для интерполяционного многочлена Лагранжа. При этом рассматривается соотношение (4.19), которое дифференцируется нужное количество раз:

$$f^{(p)}(x) = L_n^{(p)} + R_n^{(p)}(x).$$

Тогда если нужно найти погрешность численного дифференцирования в точке $x = x_j$, то осуществляется подстановка $x = x_j$. В результате находится оценка погрешности в точке $x = x_j$:

$$\left|R_n^{(p)}(x)\right|_{x=x_j}\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\omega_n^{(p)}(x_j),$$

где n — степень алгебраического многочлена, по которому получен аппроксимационный оператор. Если априори степень n неизвестна, то она может быть определена путем подстановки в правую часть оператора произвольных узлов x_i и значений $f(x_i)$ для многочленов $N_1(x) = ax + b$; $N_2(x) = ax^2 + bx + c$ и т. д. Максимальная степень многочлена $N_n(x)$, для которого остаточное слагаемое равно нулю, является искомой.

Если необходимо оценить погрешность аппроксимационного оператора $\hat{f}^{(p)}(x)$ не в точке, а на всем отрезке $[a, b]$, то для этого используется неравенство (4.22), которое дифференцируется p раз:

$$\max_{[a,b]}\left|R_n^{(p)}(x)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\max_{[a,b]}\left|\omega_n^{(p)}(x)\right|.$$

Изложим простейшую методику оценки погрешности в точке $x = x_j$, когда степень многочлена $L_{k-1}(x)$ и шаблон $Ш_{k,i}$, на котором этот многочлен получен, известны.

Методика оценки погрешности аппроксимационного оператора

1. На заданном шаблоне, который в общем случае имеет структуру $Ш_{k,i} = (x_{i-r}, \ldots, x_i, \ldots, x_{i+s})$, $k = r + s + 1$, записать выражение для оценки остаточного слагаемого в точке $x = x_j \in Ш_{k,i}$:

$$\left|R_{k-1}^{(p)}(x)\right|_{x=x_j}\right| \le \frac{M_k}{k!}\left|\omega_{k-1}^{(p)}(x)\right|_{x=x_j}\right|.$$

Здесь r и s — количество точек, расположенных соответственно левее и правее точки x_j, которая фиксируется на этом шаблоне.

2. Найти производную $\omega_{k-1}^{(p)}(x) = [(x - x_{i-r})(x - x_{i-r+1})\ldots(x - x_{i+s})]^{(p)}$.

3. В полученную производную подставить значение x_j. Далее преобразовать ее, выразив через h (при $h = \mathrm{const}$) или через параметр нерегулярности $\delta_{i+1} = h_{i+1}/h_i$, и записать окончательно оценку погрешности.

Пример 5.2. Для заданного дифференциального оператора (5.8), записанного для производной в левой крайней точке шаблона $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, требуется найти остаточное слагаемое и оценить погрешность в точке $x_j = x_{i-1}$.

□1. На шаблоне $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ записываем выражение ($k = 3$):

$$\left|R_2'(x)\big|_{x=x_{i-1}}\right| \le \frac{M_3}{3!}\left|\omega_2'(x)\big|_{x=x_{i-1}}\right| \text{ или}$$

$$\left|R_2'(x)\big|_{x=x_{i-1}}\right| \le \frac{M_3}{3!}\left|[(x-x_{i-1})(x-x_i)(x-x_{i+1})]'\big|_{x=x_{i-1}}\right|.$$

2. Находим производную многочлена $\omega_2(x)$:

$$\omega'_2(x) = (x - x_i)(x - x_{i+1}) + (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) + (x - x_{i-1})(x - x_i).$$

3. Так как $h = \text{const}$, то

$$\omega_2'(x)\big|_{x-x_{i-1}} = (x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1}) + (x_{i-1}-x_{i-1})(x_{i-1}-x_i) +$$
$$+(x_{i-1}-x_{i-1})(x_{i-1}-x_i) = (-h)(-2h) = 2h^2.$$

В результате получаем

$$\left|R_2'(x)\big|_{x=x_{i-1}}\right| \le \frac{M_3}{3}h^2.$$

Именно эта оценка и приведена в скобках справа от формулы (5.8).■

В. Четырехточечный шаблон. Формулы третьего порядка для первых производных на регулярном шаблоне $Ш_{4,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ имеют вид [6]:

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{6h}(-11f_{i-2} + 18f_{i-1} - 9f_i + 2f_{i+1}) \quad \left(\frac{h^3}{4}M_{4,i}\right),$$

или

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{6h}(11\Delta f_{i-2} - 7\Delta f_{i-1} + 2\Delta f_i);$$

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{6h}(-2f_{i-2} - 3f_{i-1} + 6f_i - f_{i+1}) \quad \left(\frac{h^3}{12}M_{4,i}\right),$$

или

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{6h}(2\Delta f_{i-2} + 5\Delta f_{i-1} - \Delta f_i);$$

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{6h}(f_{i-2} - 6f_{i-1} + 3f_i + 2f_{i+1}) \quad \left(\frac{h^3}{12}M_{4,i}\right), \tag{5.15}$$

или

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{6h}(-\Delta f_{i-2} + 5\Delta f_{i-1} + 2\Delta f_i);$$

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{6h}(-2f_{i-2} + 9f_{i-1} - 18f_i + 11f_{i+1}) \quad \left(\frac{h^3}{4}M_{4,i}\right),$$

или

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{6h}(2\Delta f_{i-2} - 7\Delta f_{i-1} + 11\Delta f_i).$$

Замечание. Вариант записи производных через конечные разности здесь и выше приведен для того, чтобы в дальнейшем можно было преобразовать эти формулы на основе теории подобия для аппроксимации (восстановления) функций по интегралам (см. замечание в конце параграфа).

Формулы второго порядка на регулярном шаблоне для вторых производных имеют вид

$$\begin{aligned}
&\hat{f}''_{i-2,c} = \frac{1}{h^2}(2f_{i-2} - 5f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}) \quad \left(\frac{11h^2}{12}M_{4,i}\right);\\
&\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{h^2}(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i) \quad \left(\frac{h^2}{12}M_{4,i}\right);\\
&\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) \quad \left(\frac{h^2}{12}M_{4,i}\right);\\
&\hat{f}''_{i+1,c} = \frac{1}{h^2}(-f_{i-2} + 4f_{i-1} - 5f_i + 2f_{i+1}) \quad \left(\frac{11h^2}{12}M_{4,i}\right).
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Г. Пятиточечный шаблон. Формулы четвертого порядка для первых производных на регулярном шаблоне $Ш_{5,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$ имеют вид

$$\begin{aligned}
&\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{12h}(-25f_{i-2} + 48f_{i-1} - 36f_i + 16f_{i+1} - 3f_{i+2}) \quad \left(\frac{h^4}{5}M_{5,i}\right);\\
&\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{12h}(-3f_{i-2} - 10f_{i-1} + 18f_i - 6f_{i+1} + f_{i+2}) \quad \left(\frac{h^4}{20}M_{5,i}\right);\\
&\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{12h}(f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}) \quad \left(\frac{h^4}{30}M_{5,i}\right);\\
&\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{12h}(-f_{i-2} + 6f_{i-1} - 18f_i + 10f_{i+1} + 3f_{i+2}) \quad \left(\frac{h^4}{20}M_{5,i}\right);\\
&\hat{f}'_{i+2,c} = \frac{1}{12h}(3f_{i-2} - 16f_{i-1} + 36f_i - 48f_{i+1} + 25f_{i+2}) \quad \left(\frac{h^4}{5}M_{5,i}\right).
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Формулы третьего порядка для вторых производных на указанном шаблоне имеют вид

$$\begin{aligned}
&\hat{f}''_{i-2,c} = \frac{1}{12h^2}(35f_{i-2} - 104f_{i-1} + 114f_i - 56f_{i+1} + 11f_{i+2});\\
&\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{12h^2}(11f_{i-2} - 20f_{i-1} + 6f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2});\\
&\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{12h^2}(-f_{i-2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i+1} - f_{i+2});\\
&\hat{f}''_{i+1,c} = \frac{1}{12h^2}(-f_{i-2} + 4f_{i-1} + 6f_i - 20f_{i+1} + 11f_{i+2});\\
&\hat{f}''_{i+2,c} = \frac{1}{12h^2}(11f_{i-2} - 56f_{i-1} + 114f_i - 104f_{i+1} + 35f_{i+2}).
\end{aligned} \tag{5.18}$$

Пример 5.3. Для сеточной функции из примера 5.1 вычислить значение первой производной $f'(x)\big|_{x_j=1,4}$ и второй производной $f''(x)\big|_{x_j=1,4}$, используя каждую из приведенных выше формул для четырехточечного и пятиточечного шаблонов.

Для вычисления производных воспользуемся соответствующей методикой.

Используем сначала четырехточечные шаблоны.

Для шаблона $Ш_{4,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = (1{,}4;\ 1{,}6;\ 1{,}8;\ 2)$ по первой из формул (5.15) при $x_{i-2} = x_j$ имеем

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{6h}(-11f_{i-2} + 18f_{i-1} - 9f_i + 2f_{i+1}) = \frac{1}{6\cdot 0{,}2}[-11f(1{,}4) + 18f(1{,}6) - 9f(1{,}8) + 2f(2)] =$$

$$= \frac{1}{1{,}2}[-11\cdot 0{,}7142857 + 18\cdot 0{,}625 - 9\cdot 0{,}5555 + 2\cdot 0{,}5] = -0{,}505535.$$

Фактическая абсолютная ошибка равна $0{,}00467$, относительная погрешность $0{,}915\%$.

Значение второй производной найдем по первой из формул (5.16) при $x_{i-2} = x_j$:

$$\hat{f}''_{i-2,c} = \frac{1}{h^2}(2f_{i-2} - 5f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}) = \frac{1}{0{,}2^2}[2f(1{,}4) - 5f(1{,}6) + 4f(1{,}8) - f(2)] =$$

$$= \frac{1}{0{,}04}[2\cdot 0{,}7142857 - 5\cdot 0{,}625 + 4\cdot 0{,}5555 - 0{,}5] = 0{,}639285.$$

Фактическая абсолютная ошибка равна $0{,}10468$, относительная погрешность $14{,}07\%$.

Заметим, что величина мажоранты в оценке остаточного слагаемого для использованной формулы в 11 раз больше, чем для двух других формул в (5.16), аппроксимирующих производные в точках, расположенных внутри шаблона.

Для шаблона $Ш_{4,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = (1{,}2;\ 1{,}4;\ 1{,}6;\ 1{,}8)$ по второй из формул (5.15) при $x_{i-1} = x_j$ получаем

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{6h}(-2f_{i-2} - 3f_{i-1} + 6f_i - f_{i+1}) = \frac{1}{6\cdot 0{,}2}[-2f(1{,}2) - 3f(1{,}4) + 6f(1{,}6) - f(1{,}8)] =$$

$$= \frac{1}{1{,}2}[-2\cdot 0{,}8333 - 3\cdot 0{,}7142857 + 6\cdot 0{,}625 - 0{,}5555] = -0{,}51256.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $0{,}002357$, относительная погрешность $0{,}462\%$.

Значение второй производной найдем по формуле

$$\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{h^2}(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i) = \frac{1}{0{,}2^2}[f(1{,}2) - 2f(1{,}4) + f(1{,}6)] = 0{,}743965.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $0{,}0151$, относительная погрешность $2{,}07\%$ (см. пример 5.1).

Для шаблона $Ш_{4,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = (1;\ 1{,}2;\ 1{,}4;\ 1{,}6)$ при $x_i = x_j$ имеем

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{6h}(f_{i-2} - 6f_{i-1} + 3f_i + 2f_{i+1}) = \frac{1}{6\cdot 0{,}2}[f(1) - 6f(1{,}2) + 3f(1{,}4) + 2f(1{,}6)] =$$
$$= \frac{1}{1{,}2}[1{,}0 - 6\cdot 0{,}8333 + 3\cdot 0{,}7142857 + 2\cdot 0{,}625] = -0{,}505785.$$

Фактическая абсолютная ошибка равна $0{,}00442$, относительная погрешность $0{,}866\%$.

Значение второй производной найдем по формуле

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}) = \frac{1}{0{,}2^2}[f(1{,}2) - 2f(1{,}4) + f(1{,}6)] = 0{,}743965.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $0{,}0151$, относительная погрешность $2{,}07\%$ (см. пример 5.1).

Используем формулы (5.17), (5.18) для пятиточечного шаблона.

Для шаблона $Ш_{5,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = (1{,}2;\ 1{,}4;\ 1{,}6;\ 1{,}8;\ 2)$ имеем

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{12h}(-3f_{i-2} - 10f_{i-1} + 18f_i - 6f_{i+1} + f_{i+2}) =$$
$$= \frac{1}{12\cdot 0{,}2}[-3f(1{,}2) - 10f(1{,}4) + 18f(1{,}6) - 6f(1{,}8) + f(2)] =$$
$$= \frac{1}{2{,}4}[-3\cdot 0{,}83333 - 10\cdot 0{,}7142857 + 18\cdot 0{,}625 - 6\cdot 0{,}555 + 0{,}5] = -0{,}5107696.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $0{,}000566$, относительная погрешность $0{,}11\%$.

Значение второй производной вычислим по формуле

$$\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{12h^2}(11f_{i-2} - 20f_{i-1} + 6f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}) =$$
$$= \frac{1}{12\cdot 0{,}2^2}[11f(1{,}2) - 20f(1{,}4) + 6f(1{,}6) + 4f(1{,}8) - f(2)] =$$
$$= \frac{1}{0{,}48}[11\cdot 0{,}83333 - 20\cdot 0{,}7142857 + 6\cdot 0{,}625 + 4\cdot 0{,}5555 - 0{,}5] = 0{,}735241.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $0{,}00637$, относительная погрешность $0{,}875\%$.

Для шаблона $Ш_{5,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}) = (1;\ 1{,}2;\ 1{,}4;\ 1{,}6;\ 1{,}8)$ получаем

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{12h}(f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}) = \frac{1}{12\cdot 0{,}2}[f(1) - 8f(1{,}2) + 8f(1{,}6) - f(1{,}8)] =$$
$$= \frac{1}{2{,}4}[1 - 8\cdot 0{,}8333 + 8\cdot 0{,}625 - 0{,}5555] = -0{,}5092.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна 0,00098, относительная погрешность 0,192%.

Вычислим вторую производную по формуле

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{12h^2}(-f_{i-2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i+1} - f_{i+2}) =$$
$$= \frac{1}{12 \cdot 0{,}2^2}[-f(1) + 16f(1{,}2) - 30f(1{,}4) + 16f(1{,}6) - f(1{,}8)] =$$
$$= \frac{1}{0{,}48}[-1{,}0 + 16 \cdot 0{,}8333 - 30 \cdot 0{,}7142857 + 16 \cdot 0{,}625 - 0{,}5555] = 0{,}72751.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна 0,00134, относительная погрешность 0,18%.

Анализ точности аппроксимации показывает, что значения производных в точках, расположенных вблизи центра шаблона, вычисляются с большей точностью, чем значения производных в точках, расположенных вблизи концов шаблона. При повышении порядка аппроксимации точность вычисления производных возрастает.■

Замечание. Формулы, записанные выше для аппроксимации производных через приращения функций, могут быть переписаны для восстановления функции $y = f(x)$ по значениям интегралов. С этой целью можно использовать изложенный в главе 4 метод подобия, состоящий в соответствующем изменении порядка производной в левой и правой частях аппроксимационного выражения. Так, из оператора $\hat{f}'_k$ (k — номер точки шаблона) можно получить оператор $\hat{f}_k$ путем замены $\Delta f_{k-1} = f_k - f_{k-1}$ на интеграл $I^k_{k-1} = F_k - F_{k-1}$. Проделав это, вместо формулы, следующей за (5.8), вторых из формул (5.9), (5.10) и формул (5.15) получим операторы, восстанавливающие функцию $y = f(x)$ по значениям интегралов:

$$\hat{f}_{i-1,c} = \frac{1}{2h}\left(3I^i_{i-1} - I^{i+1}_i\right); \;\; \hat{f}_{i,c} = \frac{1}{2h}\left(I^{i+1}_i + I^i_{i-1}\right);$$
$$\hat{f}_{i-2,c} = \frac{1}{6h}\left(11I^{i-1}_{i-2} - 7I^i_{i-1} + 2I^{i+1}_i\right); \;\; \hat{f}_{i-1,c} = \frac{1}{6h}\left(2I^{i-1}_{i-2} + 5I^i_{i-1} - I^{i+1}_i\right);$$
$$\hat{f}_{i,c} = \frac{1}{6h}\left(-I^{i-1}_{i-2} + 5I^i_{i-1} + 2I^{i+1}_i\right); \;\; \hat{f}_{i+1,c} = \frac{1}{6h}\left(2I^{i-1}_{i-2} - 7I^i_{i-1} + 11I^{i+1}_i\right).$$

Первые две формулы имеют второй порядок аппроксимации по h (они записаны на трехточечном шаблоне), а последние четыре — третий порядок (они записаны на четырехточечном шаблоне).

Вместо формулы (5.14) имеем следующую:

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{h^2}\left(I^{i+1}_i - I^i_{i-1}\right).$$

В п. 5.2.2 эта формула выведена другим способом.

Аналогичным путем можно найти и другие интегральные аппроксимации первой производной.