5.2.2. ФОРМУЛЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ПЕРВООБРАЗНЫХ ПО ФОРМУЛЕ ТЕЙЛОРА

А. Двухточечный шаблон. На неравномерной сетке Ω_n рассмотрим двухточечный шаблон $Ш_{2,i} = (x_i, x_{i+1})$ с шагом $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$. Предположив, что $f(x) \in C_2[a, b]$, разложим первообразную $F(x)$ относительно точки x_i по формуле Тейлора при $k = 2$ и найдем выражение для $F(x)\big|_{x=x_{i+1}} = F_{i+1}$:

$$F_{i+1} = F_i + h_{i+1}f_i + \frac{h_{i+1}^2}{2}f_i' + \frac{h_{i+1}^3}{6}f''(\xi),$$

где $\xi \in (x_i, x_{i+1})$. Выражая из этого разложения сначала первую производную, а затем интеграл $I_i^{i+1} = F_{i+1} - F_i$, получаем

$$f_i' = \frac{2I_i^{i+1}}{h_{i+1}^2} - \frac{2f_i}{h_{i+1}} - \frac{h_{i+1}}{3}f''(\xi);\;\; I_i^{i+1} = h_{i+1}f_i + \frac{h_{i+1}^2}{2}f_i' + \frac{h_{i+1}^3}{6}f''(\xi).$$

Первые два слагаемых в правых частях последних двух соотношений представляют собой *интегрально-функциональную* (интегрально-точечную) *аппроксимацию производной* f_i' и *функционально-дифференциальную аппроксимацию интеграла* I_i^{i+1} соответственно:

$$\hat{f}_i' = \frac{2I_i^{i+1}}{h_{i+1}^2} - \frac{2f_i}{h_{i+1}} \quad \left(\frac{h_{i+1}}{3}M_2\right); \tag{5.19}$$

$$\hat{I}_i^{i+1} = h_{i+1}f_i + \frac{h_{i+1}^2}{2}f_i' \quad \left(\frac{h_{i+1}^3}{6}M_2\right). \tag{5.20}$$

Порядки этих аппроксимаций устанавливают остаточные слагаемые в выражениях для f_i' и I_i^{i+1}, из которых следуют оценки, правые части которых указаны в скобках рядом с формулами.

Данные оценки свидетельствуют о том, что порядок аппроксимации, обеспечиваемый (5.19), равен единице, а обеспечиваемый (5.20) равен трем при условии, что I_i^{i+1} и f_i для (5.19) известны с точностью не ниже $O(h_{i+1}^3)$ и $O\left(h_{i+1}^2\right)$, а f_i и f_i' для (5.20) с точностью не ниже $O\left(h_{i+1}^2\right)$ и $O(h_{i+1})$. Этот же результат следует из рассмотренного п. В.4 правила соответствия порядков аппроксимации математических моделей различного типа.

Замечания

1. Выразив из разложения для F_{i+1} непосредственно функцию f_i, получим еще одно аппроксимационное выражение:

$$\hat{f}_i = \frac{1}{h_{i+1}}I_i^{i+1} - \frac{h_{i+1}}{2}f_i',$$

позволяющее восстанавливать со вторым порядком аппроксимации значение функции f_i в точке x_i по значениям I_i^{i+1} и f_i', известным с точностью не ниже $O\left(h_{i+1}^3\right)$ и $O(h_{i+1})$ соответственно.

2. Если в точке x_i известны производные более высоких порядков, то могут быть построены аппроксимации $\hat{f}_i'$, $\hat{I}_i^{i+1}$, $\hat{f}_i$ более высокого порядка, которые здесь не рассматриваются.

Б. Трехточечный шаблон. Возьмем на неравномерной сетке Ω_n трехточечный 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 нерегулярности $\delta_{i+1} = \frac{h_{i+1}}{h_i}$. Предположив, что $f(x) \in C_3[a, b]$, найдем разложения для первообразной $F(x)$ при $x = x_{i+1}$ и $x = x_{i-1}$ относительно точки x_i и выпишем выражения для $F(x_{i+1})$, $F(x_{i-1})$ по формуле Тейлора (В.23) при $k = 3$:

$$F_{i+1} = F_i + h_{i+1} f_i + \frac{h_{i+1}^2}{2} f_i' + \frac{h_{i+1}^3}{6} f_i'' + \frac{h_{i+1}^4}{24} f'''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x_i, x_{i+1});$$

$$F_{i-1} = F_i - h_i f_i + \frac{h_i^2}{2} f_i' - \frac{h_i^3}{6} f_i'' + \frac{h_i^4}{24} f'''(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x_{i-1}, x_i).$$

Умножая первое соотношение на h_i, а второе на h_{i+1}, складывая их с учетом равенства $I_i^{i+1} = F_{i+1} - F_i$ и разрешая относительно f_i', получаем

$$f_i' = \frac{2}{h_i(1+\delta_{i+1})}\left(\frac{I_i^{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{I_{i-1}^i}{h_i}\right) - \frac{h_i(\delta_{i+1}-1)}{3} f_i'' - \frac{h_i^2}{12(1+\delta_{i+1})}(\delta_{i+1}^3 f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)).$$

Отсюда следует *интегрально-дифференциальная аппроксимационная формула для первой производной f_i' на нерегулярном шаблоне*:

$$\hat{f}_{i,v}' = \frac{2}{h_i(1+\delta_{i+1})}\left(\frac{I_i^{i+1}}{h_{i+1}} - \frac{I_{i-1}^i}{h_i}\right) - \frac{h_i(\delta_{i+1}-1)}{3} f_i''. \tag{5.21}$$

Формула (5.21) при заданных интегралах I_i^{i+1}, I_{i-1}^i (известных с точностью не ниже $O(h_{i+1}^3)$ и $O(h_i^3)$) и производной f_i'' (известной с точностью не ниже первого порядка) аппроксимирует первую производную f_i' на нерегулярном шаблоне со вторым порядком (безусловная аппроксимация).

При условной аппроксимации, когда $\delta_{i+1} = 1$ (равномерная сетка), из (5.21) следует *интегральная аппроксимационная формула для первой производной f_i' на регулярном шаблоне*:

$$\hat{f}_{i,c}' = \frac{1}{h^2}\left(I_i^{i+1} - I_{i-1}^i\right) \quad \left(\frac{h^2}{12} M_3\right). \tag{5.22}$$

Эта формула аппроксимирует первую производную f_i' со вторым порядком.

Из сопоставления мажорант оценок аппроксимационных операторов $\hat{f}_{i,c}'$ (см. (5.10)) и $\hat{f}_{i,c}'$ (см. (5.22)) вытекает, что они имеют одинаковый (второй) порядок аппроксимации, однако мажоранта или остаточное слагаемое оператора интегрального типа содержит константу $\left(\frac{1}{12}\right)$, в два раза меньшую соответствующей константы в мажоранте оператора точечного (функционального) типа.

Замечание. При условии $f(x) \in C_2[a, b]$ на регулярном шаблоне из разложения первообразных получается аппроксимационная *интегрально-функциональная формула для второй производной*:

$$\hat{f}_i'' = \frac{3}{h^2} I_{i-1}^{i+1} - \frac{6}{h^2} f_i \quad (O(h)), \tag{5.23}$$

из которой можно выразить интеграл I_{i-1}^{i+1} через значения функции f_i и производной f_i'':

$$\hat{I}_{i-1}^{i+1} = 2hf_i + \frac{h^3}{3} f_i''.$$

Пример 5.4. Пусть некоторая функция (взята функция $f(x) = x^3$) на трехточечном шаблоне $x_1 = 1$; $x_2 = 1,5$; $x_3 = 2$ ($h = 0,5 = \text{const}$) задана двумя независимыми способами:

1) значениями функции $f_1 = 1$; $f_2 = 3,375$; $f_3 = 8$;

2) значениями интегралов на двух соседних отрезках: на отрезке $[x_1, x_2]$: $I_1^2 = 1,015625$, а на отрезке $[x_2, x_3]$: $I_2^3 = 2,734375$ (значения функций $f(x_i)$ и интегралов вычислены по $f(x) = x^3$ точно).

Требуется найти значение производной $f'(x)|_{x=1,5}$ с помощью функциональной и интегральной аппроксимаций.

□Для определения $f'(x)|_{x=1,5}$ сначала воспользуемся функциональной аппроксимационной формулой (5.10):

$$\hat{f}_{2,c}' = \frac{f_3 - f_1}{2h} = \frac{8-1}{1} = 7 \ (3,7\%).$$

Применим интегральную формулу (5.22):

$$\hat{f}_{2,c}' = \frac{I_2^3 - I_1^2}{h^2} = \frac{2,734375 - 1,015625}{0,25} = 6,875 \ (1,8\%).$$

В скобках, сразу за численными результатами значений производных указана относительная погрешность в процентах. Из сопоставления полученных приближенных значений с точными следует, что интегральная аппроксимация дает лучший результат.■

Пример 5.5. Пусть сеточная функция (табл. 5.2), являющаяся представлением $f(x) = x^4$, задана интегралами на отрезках $[x_i, x_{i+1}]$ ($i = 1, 2, 3$), $h = 1$.

Требуется вычислить производную $f'(x)|_{x=2}$ с использованием интегральной формулы (5.22), имеющей второй порядок аппроксимации.

□Вычисление производной основывается на методике, изложенной выше.

1. Так как в задаче указан конкретный аппроксимационный оператор, то выбор формулы осуществлять не нужно.

2. Формула (5.22) записана через значение двух интегралов I_{i-1}^i и I_i^{i+1}, что соответствует двухшаговому (трехточечному) шаблону $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$,

Таблица 5.2

i	0	1	2	3	4
x_i	0	1	2	3	4
I_i^{i+1}		$\frac{1}{5}$	$\frac{31}{5}$	$\frac{211}{5}$	$\frac{781}{5}$

в котором $x_i = 2$ ($i = 2$), $x_{i-1} = 1$($i - 1 = 1$), $x_{i+1} = 3$ ($i + 1 = 2$). В данном шаблоне центральная точка $x_i = 2$ совпадает с точкой $x_j = 2$.

3. Получим искомое значение

$$\hat{f}' = \frac{I_i^{i+1} - I_{i-1}^i}{h^2} = \frac{\frac{211}{5} - \frac{31}{5}}{1} = \frac{180}{5} = 36.$$

Здесь вычисления выполнены точно, хотя результат является приближенным.

4. Используя точное значение производной $f'(2) = 32$, можно получить фактическую погрешность результата

$$\frac{|36-32|}{32} \cdot 100\% = 12{,}5\%. \ ■$$

Изложенная в п. 5.2.1 методика определения остаточного слагаемого основана на соответствующей теореме для интерполяционного многочлена Лагранжа. Полезно рассмотреть и другой способ получения оценки погрешности, использующей разложение функций по формуле Тейлора.

Методика оценки погрешности дифференциальных операторов на основе разложения функции по формуле Тейлора

1. Составить разность $f_i^{(p)} - \hat{f}_i^{(p)}$, где $\hat{f}_i^{(p)}$ — обозначение оператора, в качестве которого может быть принят оператор как функционального типа, так и интегрального или интегрально-функционального, а $f_i^{(p)}$ — точное значение производной.

2. Все функции, входящие в $\hat{f}_i^{(p)}$, разложить по формуле Тейлора с остаточным слагаемым в форме Лагранжа относительно точки x_i, в которой записан $\hat{f}_i^{(p)}$. Если оператор $\hat{f}_i^{(p)}$ выражается через интегралы, то они записываются через разности первообразных ($F(x)$). При этом предполагается, что функции $f(x)$, $F(x)$ являются непрерывными, и для них существуют непрерывные производные соответствующего порядка.

3. Подставить разложения функции в разность (см. п. 1) и выполнить ее преобразование, в процессе которого получается остаточное слагаемое.

4. На основе остаточного слагаемого оценить погрешность аппроксимации.

Пример 5.6. Для заданного дифференциального оператора (5.22) $\hat{f}_i' = \frac{I_i^{i+1} - I_{i-1}^i}{h^2}$, записанного на шаблоне $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, найти остаточное слагаемое и оценить погрешность в точке $x_j = x_i$.

□1. Составим разность $f_i' - \hat{f}_i' = f_i' - \frac{1}{h^2}\left(I_i^{i+1} - I_{i-1}^i\right)$, где f_i' — точное значение производной, а $\hat{f}_i$ — аппроксимирующий ее оператор.

2. Интегралы заменим разностями первообразных:

$$I_i^{i+1} = F_{i+1} - F_i \quad (F_{i+1} = F(x_{i+1}), F_i = F(x_i)), \ \ I_{i-1}^i = F_i - F_{i-1}.$$

Функцию $F(x)$ при $x = x_i$, $x = x_{i+1}$ разложим по формуле Тейлора с остаточным слагаемым в форме Лагранжа относительно точки x_i и выпишем выражения для $F(x_{i+1})$, $F(x_{i-1})$:

$$F(x_{i+1}) = F_i + hf_i + \frac{h^2}{2} f_i' + \frac{h^3}{6} f_i'' + \frac{h^4}{24} f_i'''(\xi_+);$$
$$F(x_{i-1}) = F_i - hf_i + \frac{h^2}{2} f_i' - \frac{h^3}{6} f_i'' + \frac{h^4}{24} f_i'''(\xi_-),$$

где $\xi_+ \in (x_i, x_{i+1})$, $\xi_- \in (x_{i-1}, x_i)$.

3. Подставим данные разложения в разность, составленную в п. 1, и осуществим преобразования:

$$f_i' - \frac{1}{h^2}\left(F_i + h\cdot f_i + \frac{h^2}{2} f_i' + \frac{h^3}{6} f_i'' + \frac{h^4}{24} f_i'''(\xi_+) - F_i - F_i + F_i - hf_i + \frac{h^2}{2} f_i' - \frac{h^3}{6} f_i'' + \frac{h^4}{24} f_i'''(\xi_-)\right) =$$
$$= \frac{h^2}{24}\left(f'''(\xi_+) + f'''(\xi_-)\right).$$

Применяя теорему о среднем (см. утверждение В.1), находим остаточное слагаемое

$$f_i' - \hat{f}_i' = \frac{h^2}{12} f'''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

4. С помощью последнего соотношения получим оценку погрешности аппроксимации f_i' интегральным оператором (5.22):

$$\left| f_i' - \frac{1}{h^2}\left(I_i^{i+1} - I_{i-1}^i\right)\right| \le \frac{M_{3,i}}{12} h^2,$$

где $M_{3,i} = \max\limits_{[x_{i-1}, x_i]} |f'''(x)|$. ■

5.2.3. ФОРМУЛЫ, ПОЛУЧЕННЫЕ НА ОСНОВЕ СПЛАЙНОВ

ЯВНЫЕ ФОРМУЛЫ

А. Двухточечный шаблон. Из рассмотрения интегрально-дифференциальных сплайн-многочленов второй степени в работе [17] получены *интегрально-функциональные* аппроксимационные формулы для первых производных на двухточечном шаблоне $Ш_{2,i} = (x_i, x_{i+1})$:

$$\hat{f}_{i-1}' = \frac{6}{h_i^2} I_{i-1}^i - \frac{2}{h_i}(2f_{i-1} + f_i);$$
$$\hat{f}_i' = \frac{2}{h_i}(f_{i-1} + 2f_i) - \frac{6}{h_i^2} I_{i-1}^i. \qquad (5.24)$$

Формулы (5.24) в силу их одноинтервального характера могут использоваться при $h_i = \text{var}$, если значение интеграла I_{i-1}^i либо известно, либо заранее вычислено с точностью не ниже $O\left(h_i^4\right)$. Для операторов $\hat{f}'_{i-1}$, $\hat{f}'_i$ справедливы оценки

$$\left|\hat{f}'_k - f'_k\right| \le \frac{h_i^2}{12} M_{3,i}, \quad k = i-1, i.$$

Замечание. Из (5.24) можно выразить величину I_{i-1}^i, и тогда получаются следующие *функционально-дифференциальные* квадратурные формулы:

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

$$\hat{I}_{i-1}^i = \frac{h_i}{3}(f_{i-1} + 2f_i) - \frac{h_i^2}{6} f'_i.$$

Б. Трехточечный шаблон. Из рассмотрения интегрально-дифференциальных сплайн-многочленов третьей степени на трехточечном шаблоне $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ получены следующие *интегрально-функциональные* формулы:

- для левой, центральной и правой точек *нерегулярного шаблона* аппроксимационные формулы *для первой производной* имеют вид

$$\hat{f}'_{i-1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}} \left[\begin{gathered} 4\left(\frac{h_i}{h_{i+1}^2} I_i^{i+1} + \frac{\left(2H_i^{i+1} + h_i\right)}{h_i^2} I_{i-1}^i \right) - \\ -\left(\frac{h_i}{h_{i+1}} f_{i+1} + \frac{3\left(H_i^{i+1}\right)^2}{h_i h_{i+1}} f_i + \frac{5H_i^{i+1} + h_i}{h_i} f_{i-1} \right) \end{gathered} \right],$$

$$\hat{f}'_{i,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}} \left[\begin{gathered} 4\left(\frac{h_i}{h_{i+1}^2} I_i^{i+1} - \frac{h_{i+1}}{h_i^2} I_{i-1}^i \right) - \\ -\left(\frac{h_i}{h_{i+1}} f_{i+1} + \frac{3\left(h_i^2 - h_{i+1}^2\right)}{h_i h_{i+1}} f_i - \frac{h_{i+1}}{h_i} f_{i-1} \right) \end{gathered} \right],$$

$$\hat{f}'_{i+1,v} = \frac{1}{H_i^{i+1}} \left[\begin{gathered} -4\left(\frac{\left(2H_i^{i+1} + h_{i+1}\right)}{h_{i+1}^2} I_i^{i+1} + \frac{h_{i+1}}{h_i^2} I_{i-1}^i \right) + \\ +\left(\frac{5H_i^{i+1} + h_{i+1}}{h_{i+1}} f_{i+1} + \frac{3\left(H_i^{i+1}\right)^2}{h_i h_{i+1}} f_i + \frac{h_{i+1}}{h_i} f_{i-1} \right) \end{gathered} \right];$$

- для левой, центральной и правой точек *регулярного шаблона* аппроксимационные формулы *для первой производной* принимают форму

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{2h}\left[\frac{4}{h}\left(I_i^{i+1} + 5I_{i-1}^i\right) - (f_{i+1} + 12f_i + 11f_{i-1}) \right] \quad \left(\frac{h^3}{60} M_{4,i} \right),$$

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{2h}\left[\frac{4}{h}\left(I_i^{i+1} - I_{i-1}^i\right) - (f_{i+1} - f_{i-1}) \right] = \frac{1}{2h}\left[\frac{4}{h}\Delta I_i^{i+1} - (\Delta f_i + \Delta f_{i-1}) \right] \quad \left(\frac{h^4}{360} M_{5,i} \right),$$

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{2h}\left[-\frac{4}{h}\left(5I_i^{i+1} + I_{i-1}^i\right) + (11f_{i+1} + 12f_i + f_{i-1}) \right] \quad \left(\frac{h^3}{60} M_{4,i} \right);$$

- для левой, центральной и правой точек *нерегулярного шаблона* аппроксимационные формулы *для второй производной* имеют вид

$$\hat{f}''_{i-1,v} = \frac{6}{H_i^{i+1}}\left[-4\left(\frac{1}{h_{i+1}^2}I_i^{i+1} + \frac{H_{2i}^{i+1}}{h_i^3}I_{i-1}^i\right) + \frac{1}{h_{i+1}}f_{i+1} + \frac{H_i^{i+1}\left(2H_i^{i+1} + h_i\right)}{h_i^2 h_{i+1}}f_i + \frac{2H_i^{i+1} + h_i}{h_i^2}f_{i-1}\right],$$

$$\hat{f}''_{i,v} = \frac{6}{H_i^{i+1}}\left[4\left(\frac{1}{h_{i+1}^2}I_i^{i+1} + \frac{1}{h_i^2}I_{i-1}^i\right) - \left(\frac{f_{i+1}}{h_{i+1}} + \frac{3H_i^{i+1}}{h_{i+1}h_i}f_i + \frac{f_{i-1}}{h_i}\right)\right],$$

$$\hat{f}''_{i+1,v} = \frac{6}{H_i^{i+1}}\left[-4\left(\frac{H_i^{2(i+1)}}{h_{i+1}^3}I_i^{i+1} + \frac{1}{h_i^2}I_{i-1}^i\right) + \frac{2H_i^{i+1} + h_{i+1}}{h_{i+1}^2}f_{i+1} + \frac{H_i^{i+1}\left(2H_i^{i+1} + h_{i+1}\right)}{h_i h_{i+1}^2}f_i + \frac{f_{i-1}}{h_i}\right];$$

- для левой, центральной и правой точек *регулярного шаблона* аппроксимационные формулы *для второй производной* принимают форму

$$\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{3}{h^2}\left[-\frac{4}{h}\left(I_i^{i+1} + 3I_{i-1}^i\right) + (f_{i+1} + 10f_i + 5f_{i-1})\right] \quad \left(\frac{7}{20}h^2 M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{3}{h^2}\left[\frac{4}{h}\left(I_i^{i+1} + I_{i-1}^i\right) - (f_{i+1} + 6f_i + f_{i-1})\right] \quad \left(\frac{1}{20}h^2 M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i+1,c} = \frac{3}{h^2}\left[-\frac{4}{h}\left(3I_i^{i+1} + I_{i-1}^i\right) + (5f_{i+1} + 10f_i + f_{i-1})\right] \quad \left(\frac{7}{20}h^2 M_{4,i}\right).$$

Подчеркнем, что правые части данных аппроксимационных соотношений записаны через интегралы I_{i-1}^i, I_i^{i+1} на двух смежных отрезках, составляющих шаблон, и через значения функций в точках этого шаблона. Если известны интегралы и значения самой функции, то по этим формулам можно вычислить первые производные с третьим порядком, а вторые производные — со вторым (остаточные слагаемые некоторых аппроксимационных формул указаны в скобках, расположенных рядом с этими формулами). При этом формула для $\hat{f}'_{i,c}$, имеющая симметричный вид относительно центральной точки x_i и содержащая интегральные и функциональные разности, обеспечивает повышенный (четвертый) порядок аппроксимации. Если интегралы для исследуемой функции неизвестны, они должны быть предварительно рассчитаны с порядком, по крайней мере на два превышающим порядок аппроксимации дифференциальных операторов.

Замечание. В вычислительной практике могут оказаться полезными еще два аппроксимационных оператора $\hat{f}''_{\text{Л(П)}v}$, $\hat{f}''_{i,c}$:

$$\hat{f}''_{\text{Л(П)}v} = \frac{6}{h_{i+1}^2}(f_i + f_{i+1}) - \frac{12}{h_{i+1}^3}I_i^{i+1} \quad \left(\frac{h_{i+1}}{2}M_{3,i}\right); \tag{5.25}$$

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{3}{2h^2}(f_{i-1} + f_{i+1}) - \frac{3}{2h_i}I_{i-1}^{i+1} \quad \left(\frac{h^2}{10}M_{4,i}\right), \tag{5.26}$$

где $\hat{f}''_{\text{Л(П)}v}$ — лево- или правосторонний оператор, а $\hat{f}''_{i,c}$ — центральный оператор, записанный на трехточечном шаблоне при $h = \text{const}$.

В. Четырехточечный шаблон. Выше приведены формулы численного дифференцирования на трехточечном (или для некоторых формул на двухточечном) шаблоне, имеющие порядок аппроксимации $h^{3-(p-1)}$, где p — порядок производных, для которых записаны эти формулы. В дополнение к изложенному материалу приведем формулы, аппроксимирующие производную $f^{(p)}(p = 1, 2)$ с порядками $h^{3-(p-1)}$ на четырехточечном шаблоне. Данные формулы получены в работах [17], [23] путем анализа кубических дифференциальных и интегрально-дифференциальных сплайнов.

1. Формулы для *первых производных* третьего порядка аппроксимации на шаблоне $Ш_{4,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$:

- для *лево- и правосторонних внутренних точек* x_{i-1}, x_i *нерегулярного шаблона* справедливы *функциональные* формулы:

$$\hat{f}'_{i-1,v} = \frac{1}{a}\Big\{-h_i^2 h_{i+1}^2 \left(H_i^{i+1}\right)^2 f_{i-2} + h_{i+1}\left(h_i^2\left(H_i^{i+1}\right)^2 - h_{i-1}^2 K_{2i-1}^2\right) f_{i-1} + \\ + h_{i-1}^2\left[h_i^2 H_{i-1}^i + K_{2i-1}^2 h_{i+1}\right] f_i - h_i^2 h_{i-1}^2 H_{i-1}^i f_{i+1}\Big\}; \tag{5.27}$$

$$\hat{f}'_{i,v} = \frac{1}{a}\Big\{h_i^2 h_{i+1}^2 H_i^{i+1} f_{i-2} - h_{i+1}^2\left(h_i^2 H_i^{i+1} + h_{i-1} K_{2i}^2\right) f_{i+1} + \\ + h_{i-1}\left[h_{i+1}^2 K_{2i}^2 - h_i^2\left(H_{i-1}^i\right)^2\right] f_i + h_i^2 h_{i-1}\left(H_{i-1}^i\right)^2 f_{i+1}\Big\}, \tag{5.28}$$

где $a = H_{i-1}^{i+1} H_{i-1}^i H_i^{i+1} \Pi_{i-1}^{i+1}$; $K_{2i}^2 = h_{i-1}\left(H_{i-1}^{i+1} + 2h_i\right) + h_i\left(2H_i^{i+1} + h_i\right)$; $K_{2i-1}^2 = h_{i+1}\left(H_{i-1}^{i+1} + 2h_i\right) + h_i\left(2H_{i-1}^i + h_i\right)$; $\Pi_{i-1}^{i+1} = h_{i-1} h_i h_{i+1}$; $H_{i-1}^{i+1} = h_{i-1} + h_i + h_{i+1}$;

- для *левой и правой крайних точек* x_{i-2}, x_{i+1} *нерегулярного шаблона* справедливы *функционально-дифференциальные* формулы рекуррентного типа:

$$\hat{f}'_{i-2,v} = \frac{h_{i-1}^2}{H_{i-1}^i}\left(\frac{2H_{i-1}^i + h_{i-1}}{h_{i-1}^3}\Delta f_{i-2} + \frac{\Delta f_{i-1}}{h_i^2}\right) - \frac{H_{i-1}^i}{h_i}\hat{f}'_{i-1}; \tag{5.29}$$

$$\hat{f}'_{i+1,v} = \frac{h_{i+1}^2}{H_i^{i+1}}\left(\frac{2H_i^{i+1} + h_{i+1}}{h_{i+1}^3}\Delta f_i + \frac{\Delta f_{i-1}}{h_i^2}\right) - \frac{H_i^{i+1}}{h_i}\hat{f}'_i. \tag{5.30}$$

На регулярном четырехточечном шаблоне при $h = \text{const}$ формулы (5.27)–(5.30) упрощаются и сводятся к формулам (5.15). Можно показать, что (5.27)–(5.30), так же как и формулы (5.15), имеют третий порядок аппроксимации.

Параболические и кубические интегрально-дифференциальные сплайны позволяют сконструировать интегральные формулы численного дифференцирования [15]–[24].

На *четырехточечном нерегулярном шаблоне* $Ш_{4,i+1} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$ получаются следующие *интегральные и рекуррентные формулы* для первых производных:

$$\hat{f}'_i = \frac{2}{A}\left\{\frac{h_i^2 - h_{i+1}^2}{h_{i+2}} I_{i+1}^{i+2} + \left[3h_{i+1} H_{i+1}^{i+2} + \left(h_{i+2}^2 - h_i^2\right)\right]\frac{1}{h_{i+1}} I_i^{i+1} - \frac{H_{i+1}^{i+2} H_{2(i+1)}^{i+2}}{h_i} I_{i-1}^i\right\}; \tag{5.31}$$

$$\hat{f}'_{i+1} = \frac{2}{A}\left\{\frac{H_i^{i+1} H_i^{2(i+1)}}{h_{i+2}} I_{i+1}^{i+2} - \frac{3h_{i+1} H_i^{i+1} + \left(h_i^2 - h_{i+2}^2\right)}{h_{i+1}} I_i^{i+1} + \frac{h_{i+1}^2 - h_{i+2}^2}{h_i} I_{i-1}^i\right\}; \tag{5.32}$$

$$\hat{f}'_{i-1} = \frac{H_{i-1}^{i}}{h_i}\hat{f}'_i - \frac{h_{i-1}}{h_i}\hat{f}'_{i+1}; \quad \hat{f}'_{i+2} = \frac{H_{i+1}^{i+2}}{h_i}\hat{f}'_{i+1} - \frac{h_{i+2}}{h_{i+1}}\hat{f}'_i, \qquad (5.33)$$

где $A = h_{i+1}^2(2h_i + h_{i+1} + 2h_{i+2}) + h_{i+1}\left(h_i^2 + h_{i+2}^2\right) + h_i h_{i+2}(h_i + 3h_{i+1} + h_{i+2})$.

Формулы (5.31), (5.32) относятся к внутренним точкам шаблона и при $h = \mathrm{const}$ переходят в (5.22), а формулы (5.33) (рекуррентные) — к крайним точкам шаблона и являются подобными формулам (5.36), справедливыми для вторых производных.

На регулярном шаблоне из (5.33) при $h = \mathrm{const}$ легко получаются явные трехинтервальные аппроксимации *интегрального типа*:

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{h^2}\left(-2I_{i-1}^{i} + 3I_i^{i+1} - I_{i+1}^{i+2}\right) \quad \left(\frac{11}{12}h^2 M_{3,i}\right);$$

$$\hat{f}'_{i+2,c} = \frac{1}{h^2}\left(I_{i-1}^{i} - 3I_i^{i+1} + 2I_{i+1}^{i+2}\right) \quad \left(\frac{11}{12}h^2 M_{3,i}\right).$$

Последние две формулы могут быть получены также методом подобия из первой и последней формул (5.16). Их можно записать через интегральные разности:

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{h^2}\left(2\Delta I_i^{i+1} - \Delta I_{i+1}^{i+2}\right);$$

$$\hat{f}'_{i+2,c} = \frac{1}{h^2}\left(2\Delta I_{i+1}^{i+2} - \Delta I_i^{i+1}\right),$$

где $\Delta I_k^{k+1} = I_k^{k+1} - I_{k-1}^{k}$.

2. Формулы для *вторых производных* второго порядка апппроксимации на шаблоне $Ш_{4,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$:

- для *лево- и правосторонних внутренних точек* x_{i-1}, x_i *нерегулярного шаблона* справедливы следующие *функциональные формулы*:

$$\hat{f}''_{i,v} = \frac{2}{a}\Big[K_i^{i+1}\Delta h_{i+1} f_{i-2} + H_{i-1}^{i} h_{i+1}\left(H_{i-1}^{2i} h_{i-1} - H_i^{i+1}\Delta h_{i+1}\right) f_i - $$
$$ - H_i^{i+1} h_{i-1}\left(H_{i-1}^{2i} H_{i-1}^{i} - h_{i+1}\Delta h_i\right) f_i + K_{i-1}^{i} H_{i-1}^{2i} f_{i+1}\Big], \qquad (5.34)$$

$$\hat{f}''_{i-1,v} = \frac{2}{a}\Big[K_i^{i+1} H_{2i}^{i+1} f_{i-2} - h_{i+1} H_i^{i+1}\left(H_{2i}^{i+1} H_i^{i+1} + h_{i-1}\Delta h_i\right) f_{i-1} + $$
$$ + H_i^{i+1} h_{i-1}\left(h_{i+1} H_{2i}^{i+1} + H_{i-1}^{i}\Delta h_i\right) f_i - K_{i-1}^{i}\Delta h_i f_{i+1}\Big], \qquad (5.35)$$

где $K_t^{t+1} = \Pi_t^{t+1} H_t^{t+1}$; $\Pi_t^{t+1} = h_t h_{t+1}$; $t = i-1, i$; $H_{i-1}^{2i} = h_{i-1} + 2h_i$; $H_{2i}^{i+1} = 2h_i + h_{i+1}$; $\Delta h_{i+1} = h_{i+1} - h_i$; $a = H_{i-1}^{i+1} H_{i-1}^{i} H_i^{i+1} \Pi_{i-1}^{i+1}$;

- для *левой и правой крайних точек нерегулярного шаблона* справедливы *дифференциальные формулы* рекуррентного типа:

$$\hat{f}''_{i-2,v} = \frac{H_{i-1}^{i}}{h_i}\hat{f}''_{i-1,v} - \frac{h_{i-1}}{h_i}\hat{f}''_{i,v};$$
$$\hat{f}''_{i+1,v} = \frac{H_i^{i+1}}{h_i}\hat{f}''_{i,v} - \frac{h_{i+1}}{h_i}\hat{f}''_{i-1,v}. \qquad (5.36)$$

Формулы (5.27), (5.28) и (5.34), (5.35) могут использоваться для расчета значений производных во внутренних точках сетки $\{x_i\}$, $i=\overline{1,n-1}$, а (5.29), (5.30) и (5.36) — для расчета производных в крайних точках x_0, x_n сетки Ω_n.

На регулярном шаблоне при $h = \text{const}$ последняя группа формул для аппроксимации вторых производных во внутренних точках шаблона преобразуется к традиционным:

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

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

а (5.36) — к рекуррентным формулам:

$$\hat{f}''_{i-2,c} = 2\hat{f}''_{i-1,c} - \hat{f}''_{i,c}; \quad \hat{f}''_{i+1,c} = 2\hat{f}''_{i,c} - \hat{f}''_{i-1,c},$$

а также к первой и последней формулам из (5.16), имеющим второй порядок аппроксимации.

НЕЯВНЫЕ АЛГОРИТМЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

Путем несложного анализа параболических и кубических дифференциальных сплайнов получаются нижеследующие *неявные алгоритмы* вычисления первых и вторых производных сеточных функций. Значения производных могут быть получены не по явным формулам, а в результате решения трехдиагональных систем линейных алгебраических уравнений методом прогонки.

Первые производные по заданной сеточной функции $y_i = f(x_i)$, $i=\overline{0,n}$, можно вычислить несколькими способами:

а) следствием параметрических соотношений параболических сплайнов является система линейных алгебраических уравнений относительно первых производных:

$$\frac{h_i}{2}\hat{f}'_{i-1} + \frac{1}{2}(h_i + h_{i+1})\hat{f}'_i + \frac{h_{i+1}}{2}\hat{f}'_{i+1} = \Delta f_{i-1} + \Delta f_i, \quad i=\overline{1,n-1}, \tag{5.37}$$

где $\Delta f_i = f_{i+1} - f_i$; $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$.

При заданных значениях производных на концах отрезка $[x_0, x_n]$ эта система позволяет *со вторым порядком аппроксимации* вычислить значения первых производных $\hat{f}'_i$ во всех внутренних точках.

На регулярном шаблоне при $h = \text{const}$ эта система упрощается:

$$\hat{f}'_{i-1} + 2\hat{f}'_i + \hat{f}'_{i+1} = \frac{2(f_{i+1} - f_{i-1})}{h}, \quad i=\overline{1,n-1};$$

б) *на регулярном шаблоне значения первых производных $\hat{f}'_i$ со вторым порядком аппроксимации* могут быть вычислены также из системы, удовлетворяющей свойству преобладания диагональных элементов [44]:

$$\hat{f}'_{i-\frac{1}{2}} + 6\hat{f}'_{i+\frac{1}{2}} + \hat{f}'_{i+\frac{3}{2}} = \frac{8\Delta f_i}{h_i}, \quad i=\overline{0,n-1}. \tag{5.38}$$

Решением этой системы будут производные в узлах, сдвинутых влево на полшага. Если производные на концах неизвестны, то их необходимо предварительно вычислить с порядком не ниже второго;

в) *первые производные с третьим порядком аппроксимации* могут быть определены из системы, являющейся следствием кубических дифференциальных сплайнов [1] (см. (4.76)):

$$\frac{\hat{f}'_{i-1}}{h_i}+2\left(\frac{1}{h_{i+1}}+\frac{1}{h_i}\right)\hat{f}'_i+\frac{\hat{f}'_{i+1}}{h_{i+1}}=3\left(\frac{\Delta f_i}{h_{i+1}^2}+\frac{\Delta f_{i-1}}{h_i^2}\right),\ \ i=\overline{1,n-1}. \tag{5.39}$$

Данная система, удовлетворяющая свойству преобладания диагональных элементов, может быть замкнута либо значениями $\hat{f}'_0$, $\hat{f}'_n$, либо двумя функционально-дифференциальными граничными соотношениями (4.77);

г) *первые производные со вторым порядком аппроксимации* могут вычисляться также по значениям интегралов с использованием системы, подобной системе (4.72), в которой порядок производных понижен на единицу (в этом случае вместо Δf_i и Δf_{i-1} следует подставить $\Delta F_i=I_i^{i+1}$ и $\Delta F_{i-1}=I_{i-1}^{i}$):

$$h_i\hat{f}'_{i-1}+2(h_i+h_{i+1})\hat{f}'_i+h_{i+1}\hat{f}'_{i+1}=6\left(\frac{I_i^{i+1}}{h_{i+1}}-\frac{I_{i-1}^{i}}{h_i}\right),\ \ i=\overline{1,n-1}. \tag{5.40}$$

Замыкающие соотношения формируются аналогично предыдущему случаю.

На регулярном шаблоне система (5.40) для $\hat{f}'_i$ записывается через интегральные приращения:

$$\hat{f}'_{i-1}+4\hat{f}'_i+\hat{f}'_{i+1}=\frac{6}{h}\left(\Delta I_i^{i+1}\right),\ \ i=\overline{1,n-1}.$$

Вторые производные со вторым порядком аппроксимации могут быть определены из системы, являющейся следствием применения кубических дифференциальных сплайнов (см. систему (4.72)):

$$h_i\hat{f}''_{i-1}+2(h_i+h_{i+1})\hat{f}''_i+h_{i+1}\hat{f}''_{i+1}=6\left(\frac{\Delta f_i}{h_{i+1}}-\frac{\Delta f_{i-1}}{h_i}\right),\ \ i=\overline{0,n-1}. \tag{5.41}$$

Данная система, удовлетворяющая условию преобладания диагональных элементов, может быть замкнута либо известными значениями $\hat{f}''_0$, $\hat{f}''_n$, либо двумя граничными соотношениями, следующими из равенства

$$\frac{\Delta\hat{f}''_i}{h_{i+1}}=\frac{\Delta\hat{f}''_{i-1}}{h_i}\ \ \left(\frac{\hat{f}''_{i+1}-\hat{f}''_i}{h_{i+1}}=\frac{\hat{f}''_i-\hat{f}''_{i-1}}{h_i}\right),$$

которое записывается для трех крайних точек сетки Ω_n, т. е. для (x_0, x_1, x_2) и (x_{n-2}, x_{n-1}, x_n).

Подчеркнем, что неявные алгоритмы вычисления производных предпочтительно использовать в случае, когда для заданной сеточной функции необходимо определять производные во всех узлах.

Таблица 5.3

x_k	$f(x_k)$	Δf_k	$f'(x_k)$
$x_{i-1} = 2$	4	12	4
$x_i = 4$	16	33	8
$x_{i+1} = 7$	49		14

Пример 5.7. Проверить соотношение (5.37) при фиксированном i путем подстановки в него степенной функции.

□Соотношение (5.37) является следствием применения параболических сплайнов, поэтому оно должно выполняться для сеточного представления степенной функции (параболы) $f(x) = x^2$. Возьмем трехточечный нерегулярный шаблон $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ с шагами $h_{i+1} = 3$; $h_i = 2$; $x_{i-1} = 2$; $x_i = 4$; $x_{i+1} = 7$. Значения функции $f(x_k)$ $(k = i - 1,\ i,\ i + 1)$ и ее производной $f'(x)\big|_{x=x_k} = 2x_k$ вместе с функциональными приращениями приведены в таблице 5.3.

Тогда соотношению (5.37) при фиксированном i и выбранном шаблоне будет соответствовать численное равенство

$$\frac{2}{2}\cdot 4+\frac{1}{2}(2+3)\cdot 8+\frac{3}{2}\cdot 14=12+33.$$

В левой и правой частях получаются одинаковые значения, что свидетельствует о правильности системы (5.37). ■

Методика вычисления производных по неявным алгоритмам

1. С учетом характера задания сеточной функции (заданы значения функции $y_i = f(x_i)$, $i=\overline{0,n}$, или значения интегралов I_i^{i+1} $(i=\overline{0,n-1})$) и порядка аппроксимации t, который необходимо обеспечить в алгоритме, выбрать систему алгебраических уравнений относительно значений производных во всех внутренних узлах сетки. При этом, если данная система является следствием параболических сплайнов, то для первых производных $t = 2$, для вторых производных $t = 1$. В случае, когда система получена из кубических сплайнов, порядок t возрастает на единицу. Данные системы являются незамкнутыми (число неизвестных превышает на два число уравнений).

2. Замкнуть выбранную систему двумя граничными условиями на концах сетки Ω_n. Эти условия могут выбираться либо в виде явных аппроксимационных формул, либо в виде двух дополнительных алгебраических соотношений, включающих по два слагаемых с $f_0^{(p)}$, $f_1^{(p)}$ и $f_{n-1}^{(p)}$, $f_n^{(p)}$, $p = 1,2$. При этом необходимо соблюсти соответствие порядков аппроксимации последних соотношений (или формул) и исходного порядка t.

3. Решить полученную замкнутую систему линейных алгебраических уравнений трехдиагонального вида методом прогонки.

Приведенная методика является составной частью построения кубического дифференциального сплайна. Она была применена при решении примера 4.13.