6. Чисельне диференціювання функцій

6.1. Постановка задачі

Задача чисельного диференціювання полягає в знаходженні значень похідних функції $y = f(x)$ в заданих точках у випадках, коли аналітичний вид функції $f(x)$ невідомий (задана неявно), дуже складний або функція $f(x)$ задана таблицею. Привабливість чисельного підходу пояснюється наявністю простих формул, за допомогою яких похідні в заданих точках можна приблизно обчислити за кількома значеннями функції $f(x)$ в цих та близьких до них точках.

6.2. Формули чисельного диференціювання

Формули чисельного диференціювання застосовуються в тих випадках, коли функція $y = f(x)$ може бути задана таблицею своїх значень $y_i = f(x_i)$ у рівновіддалених вузлах $x_i = x_0 + i \times h$ $i = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Варто зазначити, що нумерація точок x_i для зручності запису проводиться відносно точки x_0, в якій обчислюється похідна. Вибравши яку-небудь множину $(n+1)$-го вузлів, функцію $y = f(x)$ наближають інтерполяційним багаточленом $P_n(x)$. Тоді похідна від цього багаточлена $P_n'(x)$ в точці x_0 застосовується для наближеного подання шуканої похідної $y'(x_0) = f'(x_0)$, а саме $f'(x_0) \approx P_n'(x_0)$.

Найбільш зручним інтерполяційним багаточленом для чисельного диференціювання є поліном Ньютона (див. розділ 7.5). На його основі отримані формули різного порядку точності залежно від кількості задіяних точок x_i [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**; **Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Слід навести кілька найпростіших формул для похідної першого порядку:

формула диференціювання вперед

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{y_1 - y_0}{h}; \qquad (6.1)$$

формула диференціювання назад

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} = \frac{y_0 - y_{-1}}{h}; \quad (6.2)$$

симетрична формула диференціювання

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h}. \quad (6.3)$$

Варто зазначити, що запис формул через функцію $f(x)$ відповідає постановці задачі диференціювання, коли її аналітичний вигляд невідомий або дуже складний. Це означає, що значення функції $f(x)$ можна розрахувати в потрібних точках x_i з кроком h. При цьому h називають кроком чисельного диференціювання та підбирають залежно від поведінки функції $f(x)$ в околі точки x_0.

Запис формул через y_i відповідає постановці задачі диференціювання, коли функція $f(x)$ задана таблицею. При цьому для крайніх точок x_i можна застосовувати формули диференціювання вперед та назад (відповідно до того, з якого вони боку), а для внутрішніх точок краще застосовувати симетричну формулу диференціювання.

Погрішність формул (6.1) та (6.2) порядку $O(h)$, формули (6.3) – $O(h^2)$ [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Для похідних 1-го порядку (додатково до формул (6.1) – (6.3)) можна застосовувати **симетричну формулу диференціювання**

$$f'(x_0) \approx \frac{-y_2 + 8y_1 - 8y_{-1} + y_{-2}}{12h}. \quad (6.4)$$

Погрішність формули (6.4) – $O(h^4)$ [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**; **Ошибка! Источник ссылки не найден.**; **Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Варто навести кілька найпростіших формул для похідної другого порядку:

симетричні формули диференціювання:

$$f''(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2} = \frac{y_1-2y_0+y_{-1}}{h^2}, \tag{6.5}$$

$$f''(x_0) \approx \frac{-y_2+16y_1-30y_0+16y_{-1}-y_{-2}}{12h^2}. \tag{6.6}$$

Погрішність формули (6.5) порядку $O(h)$, формули (6.6) – $O(h^3)$ [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

Треба зазначити, що крок чисельного диференціювання h не можна брати дуже малим, бо тоді, внаслідок похибок округлення на комп'ютері, похибка розрахунку похідної з застосуванням формул чисельного диференціювання може бути дуже великою. Значення h також краще брати залежно від величини x_0, наприклад $h = h_R \times |x_0|$, де h_R знаходиться у межах від 10^{-6} до 10^{-2} та підбирають залежно від поведінки функції $f(x)$ в околі точки x_0.

Приклад 6.1. Знайти чисельно першу похідну функції, заданої таблично, в усіх точках x_i.

x	– 1,5	– 1	– 0,5	0	0,5	1	1,5	2	2,5
y	9,8	6,4	5,2	1,7	2,9	5,6	7,2	16,5	27,5

Розв'язання в математичному пакеті R

Відправними даними задачі є вектор значень аргумента X, вектор значень функції Y та кількість точок спостереження N:

```
X = c(-1.5, -1, -0.5, 0, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5)
Y = c(9.8, 6.4, 5.2, 1.7, 2.9, 5.6, 7.2, 16.5, 27.5)
N = 9
```

Процедуру обчислення першої похідної за формулами чисельного диференціювання для таблично заданої функції в усіх точках x_i можна записати так:

```
# Похідна таблично заданої функції
PohidnaTabl = function(x, y, n)
{
      df=c(1:n)
      h = x[2]-x[1]
      for (i in 1:n)
      {
            if (i==1)
                  df[i]=(y[2]-y[1])/h
            else
            {
                  if (i==n)
                        df[i]=(y[n]-y[n-1])/h
                  else df[i]=(y[i+1]-y[i-1])/(2*h)
            }
      }
      return (df)
}
```

Результат обчислення похідних із використанням записаної процедури:

```
> DF = PohidnaTabl(X, Y, N)
> DF
[1] -6.8 -4.6 -4.7 -2.3  3.9  4.3 10.9 20.3 22.0
```

Приклад 6.2. Знайти чисельно першу похідну функції $f(x) = x^3 - 5x + 2$ в точці $x = 3$, прийнявши крок диференціювання $h = 0{,}01$.

Розв'язання в математичному пакеті R

Відправними даними задачі є функція $F(x)$. Додатково задається точка X, в якій необхідно обчислити похідну, крок диференціювання h та тип формули, за якою проводити обчислення tf (при $tf = 1$ використовується формула диференціювання вперед, при $tf = -1$ – формула диференціювання назад, при $tf = 0$ – симетрична формула диференціювання):

```
F = function(x)
{
 return (x^3-5*x+2)
}
X = 3
h = 0.01
tf = 1
```

Процедуру обчислення першої похідної за формулами чисельного диференціювання для аналітично заданої функції можна записати так:

```
# Похідна аналітично заданої функції
PohidnaAnalyt = function(f, x, h, tf)
{
     if (tf==1)
          df=(f(x+h)-f(x))/h
     else
     {
          if (tf==-1)
               df=(f(x)-f(x-h))/h
          else
          {
               if (tf==0)
                    df=(f(x+h)-f(x-h))/(2*h)
          }
     }
  return (df)
 }
```

Результат обчислення похідної в заданій точці з використанням записаної процедури:

```
> DF = PohidnaAnalyt(F, X, h, tf)
> DF
[1] 22.0901
```

6.3. Висновки

1. Чисельне диференціювання функції в заданій точці здійснюється за простими формулами, в яких присутні значення функції в цій точці та кількох близьких до неї точках.
2. Формули чисельного диференціювання відрізняються точністю та способом застосування.
3. Крок чисельного диференціювання не можна брати дуже малим у зв’язку з похибкою округлення та розрахунків на комп’ютері.
4. При табличному задаванні функції значення похідних розраховуються тільки в вузлових точках.

6.4. Контрольні запитання та завдання

1. Сформулюйте постановку задачі диференціювання функцій.
2. У яких випадках виникає задача чисельного диференціювання?
3. Що називається інтерполяційним багаточленом Ньютона? Як його застосовують при виведенні формул чисельного диференціювання функцій?

4. На якому принципі заснований чисельний розрахунок похідних функції в точці?

5. Який інтерполяційний багаточлен є найбільш зручним для чисельного диференціювання?

6. У яких випадках краще застосовувати формули диференціювання вперед, назад та симетричні формули?

7. Знайдіть чисельно першу та другу похідну в точці $x = 3$ функції, заданої таблицею

x	2	2,5	3	3,5	4	4,5
y	5,5	4,5	3	2	4,5	7