Доклады Академии наук СССР
1970. Том 194, № 4

УДК 518.5 *МАТЕМАТИКА*

А. С. КРОНРОД, В. А. КРОНРОД, И. А. ФАРАДЖЕВ

О ВЫБОРЕ ШАГА ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ ПРОИЗВОДНЫХ

(Представлено академиком И. Г. Петровским 24 III 1970)

1°. Пусть $f(x)$ — функция, дифференцируемая до $(k+2)$-го порядка включительно. Пусть $x_0, x_1, \ldots, x_k$ — точки, образующие решетку с равным шагом $\Delta: x_{p+1} = x_p + \Delta$. Пусть, далее, оператор $L^k_{\Delta, x_0}[f]$ задан равенством

$$L^k_{\Delta, x_0}[f] = \frac{(-1)^k}{\Delta^k}\sum_{s=0}^{k}(-1)^s C^s_k f(x_k). \tag{1}$$

Пусть, наконец, $x = {}^1/_2(x_0 + x_k)$. Тогда имеет место

Теорема.

$$L^k_{\Delta,x_0}[f] = f^{(k)}(x) + \frac{k\Delta^2}{24}f^{(k+2)}(x) + o(\Delta^2). \tag{2}$$

Доказательство. Непосредственно проверяется, что

$$L^k_{\Delta,x_0}[f] = \frac{1}{\Delta}\{L^{k-1}_{\Delta,x_1}[f] - L^{k-1}_{\Delta,x_0}[f]\}. \tag{3}$$

Заметим, что оператор L^k_{Δ,x_0} линеен и инвариантен относительно замены переменной $z = x - {}^1/_2(x_0 + x_k)$. Поэтому в дальнейшем мы будем обозначать оператор L^k_{Δ,x_0}, примененный к $f(x)$ на решетке $x_0, x_1, \ldots, x_k$, где $x_0 = -x_k$, через $L_\Delta{}^k[f(x)]$.

В этих обозначениях (3) записывается так:

$$L^k_\Delta[f(x)] = \frac{1}{\Delta}\left\{L^{k-1}_\Delta\left[f\left(x + \frac{\Delta}{2}\right)\right] - L^{k-1}_\Delta\left[f\left(x - \frac{\Delta}{2}\right)\right]\right\}. \tag{4}$$

Докажем по индукции, что:

A. $L^s_\Delta(x^m) = 0$ при $m < s$.

B. $L^s_\Delta(x^s) = s!$ и $L^s_\Delta(x^{s+1}) = 0$.

C. $L^s_\Delta(x^{s+2}) = \frac{s\Delta^2}{24}(s+2)!$

При $k = 1$ имеем:

A°. $L^1_\Delta(x^0) = 0$.

B°. $L^1_\Delta(x) = \frac{1}{\Delta}\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{\Delta}{2}\right) = 1!$ и $L^1_\Delta(x^2) = \frac{1}{\Delta}\left(\frac{\Delta^2}{2^2} - \frac{\Delta^2}{2^2}\right) = 0$.

C°. $L^1_\Delta(x^3) = \frac{1}{\Delta}\left(\frac{\Delta^3}{2^3} + \frac{\Delta^3}{2^3}\right) = \frac{\Delta^2}{4} = \frac{1\cdot\Delta^2}{24}\cdot 3!$

Пусть A, B и C верны при всех $s \leqslant k$. Тогда

$$L^{k+1}_\Delta(x^m) = \frac{1}{\Delta}\left\{L^k_\Delta\left[\left(x + \frac{\Delta}{2}\right)^m\right] - L^k_\Delta\left[\left(x - \frac{\Delta}{2}\right)^m\right]\right\} =$$

$$= \frac{1}{\Delta}\left\{L^k_\Delta(x^m) + C^1_m\frac{\Delta}{2}L^k_\Delta(x^{m-1}) + C^2_m\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 L^k_\Delta(x^{m-2}) + C^3_m\left(\frac{\Delta}{2}\right)^3 L^k_\Delta(x^{m-3}) + \right.$$

$$+L_\Delta^k[P_{m-4}(x)]-L_\Delta^k(x^m)+C_m^1\frac{\Delta}{2}L_\Delta^k(x^{m-1})-C_m^2\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2L_\Delta^k(x^{m-2})+$$
$$+C_m^3\left(\frac{\Delta}{2}\right)^3L_\Delta^k(x^{m-3})-L_\Delta^k[Q_{m-4}(x)]\Big\}=\frac{2}{\Delta}\left\{C_m^1\frac{\Delta}{2}L_\Delta^k(x^{m-1})+C_m^3\left(\frac{\Delta}{2}\right)^3L_\Delta^k(x^{m-3})+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{2}L_\Delta^k[P_{m-4}(x)]-\frac{1}{2}L_\Delta^k[Q_{m-4}(x)]\right\}. \tag{5}$$

Здесь $P_{m-4}(x)$ и $Q_{m-4}(x)$ — многочлены степени $m-4$.

Из (5) мы получаем:

A¹. При $m<k+1$ $L_\Delta^{k+1}(x^m)=0$.

B¹. При $m=k+1$ $L_\Delta^{k+1}(x^{k+1})=\frac{2}{\Delta}C_{k+1}^1\frac{\Delta}{2}L_\Delta^k(x^k)=$

$=(k+1)k!=(k+1)!$ и при $m=k+2$ $L_\Delta^{k+1}(x^{k+2})=\frac{2}{\Delta}C_{k+2}^1\frac{\Delta}{2}\cdot L_\Delta^k(x^{k+1})=0$.

C¹. При $m=k+3$ $L_\Delta^{k+1}(x^{k+3})=C_{k+3}^1L_\Delta^k(x^{k+2})+C_{k+3}^3\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2L_\Delta^k(x^k)=$

$$=(k+3)\ \frac{k\Delta^2}{24}\ (k+2)!+\frac{(k+3)(k+2)(k+1)}{6}\ \frac{\Delta^2}{4}\ k!=\frac{k\Delta^2}{24}(k+3)!+$$
$$+\frac{\Delta^2}{24}(k+3)!=\frac{(k+1)\Delta^2}{24}(k+3)!$$

Из A⁰, B⁰, C⁰ и A¹, B¹, C¹ следуют A, B и C.

Поскольку функция $f(x)$ предположена дифференцируемой до $(k+2)$-го порядка, из A, B и C легко получается утверждение теоремы.

2°. Пусть вычисления производятся на машине с n-разрядной двоичной мантиссой. Пусть мы вычисляем k-ю производную f в точке x по формуле

$$f^{(k)}(x)=L_{\Delta,x_0}^k[f], \tag{6}$$

используя схему последовательных разностей, т. е. применяя формулу (3) $k(k+1)/2$ раз. Тогда абсолютная ошибка в правой части (6) в результате неточности машинного счета составляет в среднем

$$\text{ош}_M\approx\frac{k\cdot 2^{-n}\,|f(x)|}{\sqrt{2}\,\Delta^k}. \tag{7}$$

С другой стороны, из (2) следует, что при счете по формуле (6) мы допускаем абсолютную ошибку

$$\text{ош}_B\approx\frac{k\Delta^2}{24}\,|f^{(k+2)}(x)|. \tag{8}$$

Минимизируя по Δ сумму (7) и (8), мы получаем выражение для оптимального шага Δ_k при машинном счете $f^{(k)}(x)$

$$\Delta_k=\sqrt[k+2]{\frac{2^{-n}\cdot 12k\,|f(x)|}{\sqrt{2}\,|f^{(k+2)}(x)|}}. \tag{9}$$

3°. При вычислении односторонней производной (по точкам $x_0, x_1, \ldots, x_k$) мы получаем абсолютную ошибку в $f^{(k)}(x_0)$ порядка

$$f^{(k)}\left(\frac{x_0+x_k}{2}\right)-f^{(k)}(x_0)\approx\frac{k\Delta}{2}f^{(k+1)}(x). \tag{8'}$$

Отсюда выражение для оптимального шага при счете односторонней производной получается

$$\Delta_k^{\text{одн}}=\sqrt[k+1]{\frac{2^{-n}\cdot 2k\,|f(x)|}{\sqrt{2}\,|f^{(k+1)}(x)|}}. \tag{9'}$$

4°. Численный пример. При $n = 40$ для $f(x) = \exp(x)$ при $x = 1$ для Δ_k получаются величины

$$\Delta_1 = 0{,}000198, \quad \Delta_2 = 0{,}00198, \quad \Delta_3 = 0{,}00746.$$

При тех же предположениях для шага в случае односторонних производных величины $\Delta_k^{\text{одн}}$ получаются существенно меньшими, а именно:

$$\Delta_1^{\text{одн}} = 0{,}00000113, \quad \Delta_2^{\text{одн}} = 0{,}000137, \quad \Delta_3^{\text{одн}} = 0{,}00140.$$

Для вычисления $(k+2)$-й производной можно пользоваться, например, тем же $L_{\Delta,x_0}^{k+2}[f]$. Нужно лишь следить за тем, чтобы при данном шаге не исчезли все верные знаки. Если это все же случится, следует увеличить Δ при вычислении $L_{\Delta,x_0}^{k+2}[f]$.

Центральный научно-исследовательский институт патентной информации и технико-экономических исследований

Поступило
4 III 1970