

УДК 519. 853. 3

АДАПТИВНЫЙ МЕТОД ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ ТРУДНОВЫЧИСЛИМЫХ ФУНКЦИЙ

Г. А. Шелудько

ORCID: 0000-0003-4171-9591

С. В. Угримов,

д-р техн. наук

sugrimov@ipmach.kharkov.ua

ORCID: 0000-0002-0846-4067

Институт проблем
машиностроения
им. А. Н. Подгорного
НАН Украины,
61046, Украина, г. Харьков,
ул. Пожарского, 2/10

Рассмотрен адаптивный подход к численному дифференцированию трудновычислимых функций. Сложные зависимости, являющиеся результатом многократных суперпозиций функций или продуктом различных алгоритмических процессов, трудны для непосредственного исследования. Для установления характера поведения таких зависимостей приходится прибегать к численному анализу. Одной из важных характеристик функций является производная, указывающая направление и быстроту изменения зависимости. Однако при трудновычислимых функциях имеющейся априорно информации не всегда достаточно, чтобы известными средствами можно было бы достичь надлежащей точности решения. Потеря точности происходит за счёт накопления ошибок округления, растущих пропорционально количеству вычисленных значений функции. В этом случае приходится переходить к апостериорному подходу, чтобы определить поведение функции и отойти от схемы равноотстоящих узлов, опираясь на адаптивный способ изучения локальной обстановки в области определения функции. В статье реализован адаптивный метод поиска производных функции при минимуме ограничений требований к классу функций и формы их задания. Благодаря этому значительно уменьшились затраты на вычисление функции, в результате чего количество вычислений было доведено почти до оптимального уровня. При этом резко снизился объём используемой оперативной памяти. Отсутствует необходимость в предварительном анализе задачи по установлению класса исследуемой функции, в привлечении спецфункций или преобразовании начальных условий для использования стандартных таблиц весовых коэффициентов и т.п. Для исследования достаточно задать непрерывную и ограниченную функцию на фиксированном отрезке и минимальный шаг, косвенно отвечающий за обеспечение необходимой точности дифференцирования. Эффективность предложенного метода демонстрируется на ряде тестовых примеров. Разработанный метод может быть использован в более сложных задачах, например, при решении некоторых типов дифференциальных и интегральных уравнений, а также для широкого ряда задач оптимизации в самых разнообразных областях прикладного анализа и синтеза.

Ключевые слова: недифференцируемая функция, кусочно-линейное приближение, адаптивный пошаговый выбор узлов.

Введение

Перечень задач, приводящих к необходимости вычисления производной от функции, чрезвычайно разнообразен и многочислен [1–4]. Фактически всегда для анализа характеристик процессов, а также оценок, связанных с точностью полученных решений, прибегают к использованию производных, устанавливающих скорость изменения того или иного признака, его экстремальные свойства и т.п.

Класс функций, предлагаемый практикой, весьма широк, а сами функции зачастую трудновычислимы [5–7]. Иногда они представлены сложными аналитическими структурами (например, многократными суперпозициями функций, результатами какого-либо эксперимента) или заданы алгоритмически. Поэтому приходится ориентироваться на такие численные методы, которые не предъявляют жестких требований к функции $f(x)$, разве что требуют её непрерывности с конечным числом особенностей на отрезке $[A, B]$.

Дифференцирование элементарных функций является достаточно простой операцией. В общем случае погрешность приближенного получения производной m порядка $f^{(m)}(x^*)$ в точке $x^* \in [A, B]$

Статья доступна по лицензии Creative Commons «Attribution» («Атрибуция») 4.0 Международная.

© Г. А. Шелудько, С. В. Угримов, 2021

от заданной таблично функции $y=f(x)$ (в узлах $A \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq B$ известны значения функции y_0, y_1, \dots, y_n может быть представлена в виде [8, 9]

$$R_n^{(m)}(x^*) = f^{(m)}(x^*) - P_n^{(m)}(x^*) = \frac{\omega^{(m)}(x^*)}{(n+1)!} f^{(n)}(\xi) \quad (1)$$

при условии, что функция $n+1$ раз непрерывно дифференцируема в $[A, B]$. Здесь $P_n(x)$ – интерполяционный полином, удовлетворяющий условиям

$$P_n(x_i) = f(x_i), \quad \{x_i\} \in [A, B], \quad \omega(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i) \quad \xi \in [A, B].$$

Такая схема, основанная на интерполяционной формуле Лагранжа [8, 9], чаще всего предусматривает равноотстоящие узлы $x_i \in [A, B]$. В результате предполагается некий одинаковый характер поведения функции в отдельных подобластях отрезка $[A, B]$, что может повлечь за собой потерю необходимой точности вычисления производной $f^{(m)}(x^*)$. Простое увеличение числа n узлов x_i не всегда решает эту проблему, т.к. близость функций $f(x_i)$ и $P_n(x_i)$ ещё не гарантирует близости их производных в остальных точках, тем более что при этом растёт погрешность из-за накопления ошибок от округлений. При больших n малые ошибки в значениях f_i могут дать в результате большую погрешность [9–11].

Для приближённого дифференцирования широко применяются формулы, основанные на интерполянтах Грегори-Ньютона и Ньютона-Стирлинга [10]. Однако в первом случае часто приходится сталкиваться со сравнительно большими коэффициентами при разделённых разностях, что влечёт за собой потерю точности, а во втором – имеет место погрешность, возникающая за счёт использования меньшего числа значащих цифр в конечных разностях, а следовательно, и в вычисленных значениях производных.

Применяя какую-либо формулу приближённого дифференцирования, всегда вводят ряд предположений и ограничений относительно свойств функции, например, отсутствие быстро колеблющихся составляющих, период которых не превосходит величины шага. Использование обычных формул дифференцирования (Ньютон, Стирлинг и др.) предполагает определённую «правильность» в поведении конечных разностей при заданных равноотстоящих узлах сетки. Если же такая правильность нарушается, то каждый раз приходится проводить специальное исследование характера функции.

Попытка выбора оптимального шага дифференцирования, поставленная как задача минимизации суммы погрешностей усечения и округления, решает вопрос, но только для конкретной функции [11, 12].

Поскольку при нелинейных трансцендентных функциях $f(x)$ использование разделённых разностей для аппроксимации проблематично, то недостаток информации о характере функции пытаются компенсировать простым увеличением числа узлов, что не всегда оправдано. Это особенно заметно в случае трудновычислимых функций [13].

Казалось бы, что более удобным здесь может стать приближение функций $f(x)$ сплайнами [12]. Они обладают большей локальной гибкостью. Даже при небольшой степени n полинома (три, пять) на выделенном небольшом подсегменте отрезка $[A, B]$ сплайны показывают хорошие результаты. Но опять-таки вопрос предварительного разбиения узлами x_i области $[A, B]$ на подсегменты остается открытым. Поэтому для трудновычислимых функций можно рассчитывать на получение производной только ограниченного уровня точности. Уменьшение погрешности вычисления производной при делении отрезка $[A, B]$ на всё большее число подсегментов ($n > 5$ сплайны) происходит довольно медленно. При этом сложность вычислений существенно возрастает за счёт появления большого количества коэффициентов в используемых формулах.

Целью предлагаемой работы является повышение эффективности приближенного дифференцирования в условиях слабой информированности о характере поведения заведомо трудновычислимой функции.

Постановка задачи

Основным источником погрешности при вычислении производных (особенно при трудновычислимых функциях) является, с одной стороны, количество n её вычислений, а с другой – неопределённость способа деления отрезка $[A, B]$ на подсегменты при заранее неизвестном характере поведения функции $y=f(x)$. Это обстоятельство заставляет отказаться от априорного назначения числа уз-

лов n и обратиться к апостериорному их выбору на основе анализа возникающей поисковой ситуации. Такой выбор точек для функции, заданной на интервале большой протяжённости, выдвигает жесткие требования к построению вычислительного процесса. Он должен обеспечить качественное отслеживание изменения характера поведения функции на всем исследуемом интервале.

Стремление к наиболее экономному и простому способу аппроксимации исходной функции $f(x)$, заданной дискретным набором ее значений, приводит к применению сплайнов первого порядка, т.е. к кусочно-линейной аппроксимации $g(x)$ (рис. 1). Это порождает нежелательные изломы функции $g(x)$. Однако производную в точке c (см. рис. 1) можно приближенно представить кусочно-разностным её

аналогом, используя, например, метод взвешенных наклонов [14]. Точность аппроксимаций производной $f'(x)$ в точке c разностями «слева» Δ_{ca} , и «справа» Δ_{bc} ($\Delta_{uv}=(f(u)-f(v))/(u-v)$) пропорциональна удалённости точек a и b от c . Поэтому, положив

$$\Delta_c=[(b-c) \Delta_{ca}+(c-a) \Delta_{bc}]/(b-a),$$

приходим к методу взвешенных наклонов

$$\Delta_c=\Delta_{ca}+\Delta_{bc}-\Delta_{ba}. \quad (2)$$



В этом случае производная в точке c функции $f(x)$ заменяется средневзвешенным приближением, когда в роли весов выступают соответствующие отношения длин дуг $\widehat{ca}/\widehat{ba}$ и $\widehat{bc}/\widehat{ba}$. Огрубляя приближение производной, можно заменить длины дуг \widehat{bc} и \widehat{ca} длиной стягивающих их хорд \overline{bc} и \overline{ca} , т.е. положить

$$\Delta_c \approx \frac{\overline{bc}}{\overline{bc} + \overline{ca}} \Delta_{ca} + \frac{\overline{ca}}{\overline{bc} + \overline{ca}} \Delta_{bc}.$$

Чем меньше окрестность точки c , тем ближе Δ_c к $f'(c)$.

Погрешность приближения производной от заданной функции $f(x)$ в точке c может быть представлена величиной

$$\delta = |\Delta_c - f'(c)| = \frac{(c-a)(c-b)(c-d)}{3!} \max_{x \in I} |f^{(3)}(x)|, \quad I = [a, b, c, d],$$

предположив, что $\max_{x \in I} |f^{(3)}(x)| \approx f^{(3)}((c+b)/2)$ и считая приближённо

$$f^{(3)}(x) \approx 3(\Delta_b'' - \Delta_c'')/(d-a),$$

где $\Delta_b'' \approx 2(\Delta_{db} - \Delta_{bc})/(d-c)$, $\Delta_c'' \approx 2(\Delta_{bc} - \Delta_{ca})/(b-a)$.

Разделение отрезка $[A, B]$ на подсегменты с разным поведением функции $f(x)$ будем проводить по изменению величины дискриминанта

$$D = \varepsilon - \sigma_k, \quad (3)$$

где ε – заданный средний уровень точности для всей области дифференцирования функции $f(x)$, а σ_k – критерий локальной ситуации [15, 16]. Последний условимся измерять следующим образом (см. рис. 2):

$$\sigma_k = |y_k^* - g_k^*|, \quad (4)$$

$$y_k^* = 0,25 | (1 + \lambda_k) y_{k+1} + 3 y_k - \lambda_k y_{k-1} |, \quad \lambda_k = h_k / (h_k + h_{k-1}),$$

$$g_k^* = 0,5 (y_k + y_{k+1}), \quad x_k^* = 0,5 (x_k + x_{k+1}).$$

Ситуация σ_k моделирует близость функции $f(x)$ к приближающей её ломаной $g(x)$ в месте вероятного самого большого отклонения функции $f(x)$ от $g(x)$, т.е. в окрестности точки x_k^* . Для этого используется направление производной $\overline{ae} \parallel \overline{lb}$ в точке a , а не направление предыдущей хорды \overline{la} .

Таким образом, если метод приближённого дифференцирования даже в самых неблагоприятных точках вида x_k^* обеспечивает заданную точность, то во всех остальных случаях гарантируется приемлемый результат. Принятый здесь выбор точки $c=(e+d)/2$ (см. рис. 2) преследует единственную цель – как можно более упростить алгоритм аппроксимации.

Для получения новых точек $x_{k+1}=x_k+h_k$, адаптивный выбор которых определяется ситуацией σ_k , описывающей характер поведения функции $f(x)$ на отрезке $[A, B]$ в окрестности точки x_k^* , применяем управляемый процесс [14–16]

$$h_{k+1}=h_k \exp(\alpha D), \quad \alpha>0. \quad (5)$$

Здесь коэффициент α отвечает за степень воздействия складывающейся ситуации на быстроту изменения шагов в (5).

Изменение D в (5) увеличивает (или уменьшает) величину шага h_{k+1} . Тем самым это косвенно влияет на точность вычисления производной через точность аппроксимации функции $f(x)$.

Из рис. 2 следует, что мониторинг локальной ситуации σ_k (4) совместно с уровнем точности ε и с учётом (3) может служить регулирующим воздействием в шаговом процессе (5), т.е.

$$h_{k+1}=h_k \exp [\alpha(\varepsilon-\sigma_k)]. \quad (6)$$

Для ускорения продвижения вдоль отрезка $[A, B]$ принимаем некоторое $\varepsilon>\sigma_0$, которое может оставаться постоянным либо перестраиваться в ходе процесса (6) в соответствии со степенью изменения ситуации σ_k .

Величину начального шага h_0 процесса (6) определим из условия положительности дискриминанта D , т.е. выбрав $\varepsilon>\sigma_k$, например $\varepsilon=(1,01\div 1,1) \sigma_0$, поскольку нет достаточной информации о функции $f(x)$ и распределении её характерных точек различной природы (экстремальные точки, изломы и т.п.) на заданном отрезке $[A, B]$.

При подходе к окрестностям с изломами или с экстремальными точками угол между направлениями производных в соседних точках x_{k-1}, x_k заметно увеличивается, что соответственно влечёт за собой резкое уменьшение шага, вплоть до значений, близких к h_{\min} , ниже которых уже нецелесообразно различать изменение функции $f(x)$ для её аппроксимации. Но если указанная окрестность уже пройдена и $D>0$, то для ускорения процесса (6) можно вновь вернуться к начальному шагу, например, $h_0=(1,1\div 1,2) h_{\min}$.

Проход области $[A, B]$ адаптивным методом (6) за N вычислений функции $f(x)$ даёт возможность получить столько же значений приближённой производной Δ_c (2).

На примере простой функции $f(x)=\sqrt{x}$ $[0,01; 1,01]$ проведём запуск и выход из программы при применении адаптивного метода дифференцирования. Рис. 3 изображает точное поведение производной $f'(x)$ на $[A, B]$, а также точки приближённого её значения Δ (2).

После совершения двух равных начальных шагов $h_0=h_1=0,01$, определённых принятым значением $h_{\min}=0,005$, появляется возможность вычисления критерия локальной ситуации (4) $\sigma_k=0,009637592$ и задания значения $\varepsilon=0,01>\sigma_k$ учитывая σ_k , чтобы включить в процесс основной механизм (6) переменного шага.

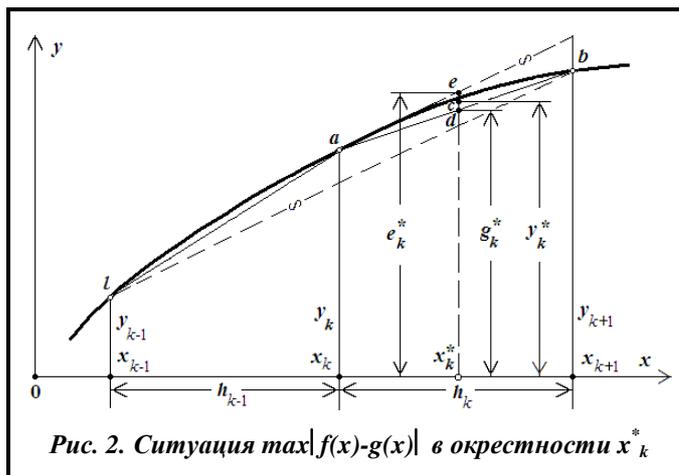


Рис. 2. Ситуация $\max|f(x)-g(x)|$ в окрестности x_k^*

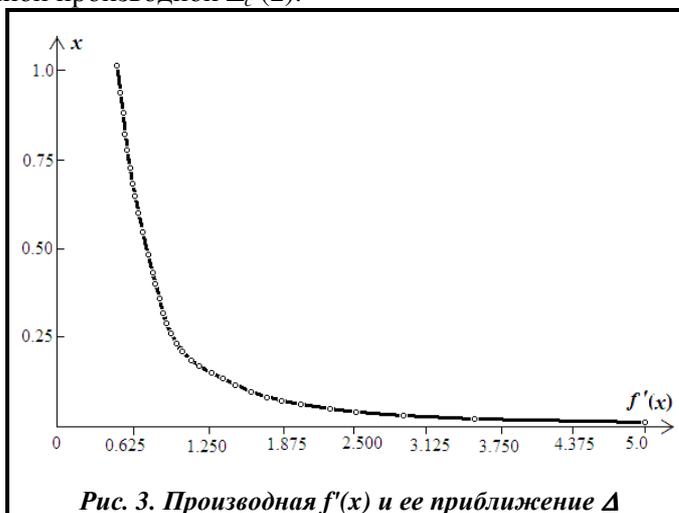


Рис. 3. Производная $f'(x)$ и ее приближение Δ

Так как конечный шаг $h_{33}=0,01703624$ процесса (6) выводит последнюю точку $x_{33}=1,041639436$ за точку $B=1,01$ отрезка $[A, B]$, то алгоритм заменяет значение x_{33} величиной $B=1,01$. Результат получен при интенсивности, равной $\alpha=10$.

Если бы с таким же, но постоянным шагом $h=h_0$, обеспечивающим полученную среднюю точность, проводился процесс приближения производной, то на заданном интервале пришлось бы вычислять функцию 100 раз, вместо 33.

Как видим, адаптивное действие формулы (6) направлено не только на выбор надлежащих шагов с целью сокращения вычислительных затрат, но также и к созданию благоприятных условий для лучшего приближения производных (2). В то же время, когда процесс (6) попадает в окрестность резкого изменения характера функции $f(x)$, характеризуемый критерием (4), применение метода взвешенных наклонов (2) может оказаться недостаточным для обеспечения должного уровня точности производной. В этом случае приходится на подсегментах резкого изменения характера функции переходить на простое сканирование области намеренно уменьшенным шагом, близким к h_{\min} . Это отчасти способствует непропуску особенностей функции $f(x)$.

Численный эксперимент

Принятый способ численного дифференцирования (2)–(6) тестировался на множестве примеров функций разного уровня сложности. Часть тестовых функций, имеющих резкие локальные изменения поведения, в том числе «изломов», представлена ниже [8, 10–12, 17–24]

$$f_I = x \sin(1/x); \quad f_{II} = \left| (|x|-1)^3 \right|; \quad f_{III} = |\sin x + \sin 2x|; \quad f_{IV} = |x - e| / (4 + x^2)^{0.5};$$

$$f_V = \left| \sin(x^3/20) \right|; \quad f_{VI} = \left| (2\pi x^2 - x^3)^{1/3} \right|; \quad f_{VII} = (\operatorname{tg} 3x)^{1/3}; \quad f_{VIII} = (3x^5 - 25x^3 + 60x + 16)/15;$$

$$f_{IX} = \left| \arctg[(x-3)/(x+4)] \right|; \quad f_X = |\sin(\ln x)|; \quad f_{XI} = (e^x - 1)^2 + [(1 + x^2)^{-0.5} - 1]^2; \quad f_{XII} = |\ln(\operatorname{arctg} x)|;$$

$$f_{XIII} = \sin\left(2^{\left[\lg_7(1+\operatorname{tg}(x+1))\right]^{0.2}}\right); \quad f_{XIV} = \sqrt[3]{x} - \sqrt[3]{x+1}; \quad f_{XV} = (2 - \cos x - \cos 2x)^{0.5}; \quad f_{XVI} = \exp(3x^2 - x^3)^{1/3};$$

$$f_{XVII} = \sin x + \sin(10x/3) + \ln x - 0,84x + 3; \quad f_{XVIII} = -\left\{ \sin[\pi(1 - x^2)^{0.5}] + x + \pi + 1 \right\};$$

$$f_{XIX} = \arctg[(x-8)/(x^2 + 4)]; \quad f_{XX} = x / (1 + x^2 \sin^2 x).$$

Введём простое понятие удельной стоимости получения интегральной усреднённой ошибки вычисления производных в области $[A, B]$ в виде

$$C = N \sum_{k=1}^N |f'_k - \Delta_k^*| / (B - A), \quad (7)$$

где f'_k – («точное») и $\Delta_k^* = \Delta(x_k^*)$ – (приближённое) значения производных в соответствующих узлах x_k^* ; N – затраты на достижение желаемого результата данным методом, т.е. количество вычислений функций $f(x)$ для этого.

Ясно, что эффективность метода, проявленная при решении конкретной задачи, тем больше, чем меньше стоимость C (7) при прочих равных условиях.

Полагаем, что сканирование той же области $[A, B]$ самым малым возможным шагом h_{\min} обеспечивает более точное приближение производных. Тогда приходим к неравенству

$$\sum_{i=1}^{N'} |f'_i - \Delta_i^*| \leq \sum_{k=1}^N |f'_k - \Delta_k^*|, \quad (8)$$

где $i \vee k$ – номера узлов соответствующих сеток, а N' – целая часть $[(B-A)/h_{\min}]$.

Исходя из (8), эффективность метода (2)–(6) условно будем оценивать с помощью упрощённого критерия качества («индекса эффективности» [25])

$$E = \frac{C_{scan}}{C_{adap}} = \frac{N' \sum_{i=1}^{N'} |f'_i - \Delta_i^*|}{N \sum_{k=1}^N |f'_k - \Delta_k^*|} \quad (9)$$

т.е. отношением стоимостей достижения соответствующих среднеинтегральных абсолютных погрешностей на одном и том же отрезке $[A, B]$, но на разных $i \setminus k$ сетках.

В критерии (9) заложен известный принцип равных влияний, когда полагается, что суммарная абсолютная погрешность на всём отрезке $[A, B]$ не превышает заданной величины. Для удобства «точное» значение f'_k производной во всех приведённых выше примерах вычислялось по формуле

$$(f(x_k^* + \delta) - f(x_k^* - \delta)) / 2\delta,$$

где $\delta = 10^{-10}$.

Эти вычислительные затраты, естественно, не включаются в количество N и N' .

В таблице приведены результаты вычисления критерия эффективности E (9) для функций I–XX адаптивным способом и достигнутая при этом стоимость C_{adap} на отрезке $[A, B]$. Здесь представлен конкретный случай использования значения постоянной на подсегментах $[x_k, x_{k+1}]$ точности $\epsilon = 0,001$, $\alpha = 10$, $h_0 = h_{\min} = 0,001$.

Эффективность нахождения производных адаптивным методом для тестовых функций, заданных на отрезке $[A, B]$

$f(x)$	$[A, B]$	C_{adap}	N	E
I	$[0, 2\pi; 5\pi]$	73,93731498	25	4,493741243
II	$[-0,995; 2]$	38,67561466	190	4,388755049
III	$[0; 2\pi]$	200,8427336	625	1,006234064
IV	$[-2,995; 4]$	10,13399088	693	1,011373266
V	$[0; 3\pi/2]$	135,9652785	307	1,773252544
VI	$[-1; 3,5]$	242,4711093	390	1,175904877
VII	$[0; 2\pi]$	300,2439079	31	126,3714985
VIII	$[0; 4,5]$	150,9098132	451	4,666437614
IX	$[-\pi; \pi]$	3,029803189	430	1,58827937
X	$[0,01; 5]$	343,3627677	90	5,467829259
XI	$[-2; 5]$	3365,971896	657	1,088513516
XII	$[0,01; \pi]$	54,35070561	39	7,146833836
XIII	$[-1,75; 0,56]$	909,3456208	125	1,885660155
XIV	$[-1; 2]$	200,9964238	94	15,46132117
XV	$[-\pi; \pi]$	14,62555623	419	3,433101097
XVI	$[-1; 1,6]$	57,04142104	156	3,918496306
XVII	$[0,1; 3,5]$	5,518200797	142	1,213207504
XVIII	$[-1; 1]$	269,4804473	27	10,13027855
XIX	$[0; 1]$	126,9048103	25	4,817065532
XX	$[-\pi/4; 3\pi]$	45719,13737	549	2,803608813

Из таблицы видно, что предложенный способ адаптивного дифференцирования для рассмотренных тестовых функций, заданных на отрезках разной длины и с разными характерными точками, показал достаточно хорошую эффективность процесса при вполне приемлемой погрешности результата (несмотря на принятый для всех тестовых примеров одинаковый уровень точности ϵ). Практически всегда адаптивный метод на отрезке $[A, B]$ достигает меньшей усреднённой погрешности дифференцирования, чем в случае простого сканирования шагом h_{\min} , и поэтому для всех примеров величина $E > 1$. При подходе к окрестности с резко меняющейся ситуацией σ_k , когда значения σ_k и ϵ оказываются слабо коррелированными, приходится уменьшать шаг до минимального, меняя производную Δ_c (2) на Δ_{bc} . Совпадение или близость результатов сравниваемых стоимостей (9) возможно лишь, если в методах типа *Scan* какая-

либо из точек x_k окажется инцидентной центру острого симметричного излома функции $f(x)$ со слабо искривлёнными почти линейными его сторонами. Хотя, в общем-то, это маловероятно.

Выводы

В статье реализован адаптивный метод поиска производных функции при минимуме ограничительных требований к классу функций и формы их задания. Для реальных задач чаще всего не требуется особо высокой точности результата, однако большие численные затраты нежелательны, поэтому главный акцент при реализации метода был направлен на эффективность процесса дифференцирования. Для реализации метода не требуется какого-либо предварительного исследования заданной функции или применения её преобразований. Особенно это важно в случае заметной нелинейности, чаще всего присущей трудновычислимым функциям. Фактически использована минимальная информация, обеспечивающая заданную точность дифференцирования, не прибегая заранее к тому или иному специальному приёму дискретизации области.

При помощи созданного шагового способа выяснения ситуации и простой техники вычисления локальной производной удалось ограничиться кусочно-линейной аппроксимацией, когда легко выполняются все требуемые условия без излишних численных затрат. Эффективность предложенного метода демонстрируется на множестве примеров дифференцирования функций разного уровня сложности, часть из которых имеет резкие локальные изменения поведения, в том числе «изломы». Численный эксперимент показал заметное повышение эффективности при использовании разработанного адаптивного метода по сравнению с известными способами приближённого дифференцирования.

Предложенный подход приближённого адаптивного дифференцирования, происходящий в автоматическом режиме, может оказаться удобным при решении некоторых классов дифференциальных и интегральных уравнений, возникающих в самых различных прикладных областях.

Литература

1. Mhaskar H. N., Naumova V., Pereverzyev S. V. Filtered Legendre expansion method for numerical differentiation at the boundary point with application to blood glucose predictions. *Appl. Mathematics and Computation*. 2013. Vol. 224. P. 835–847. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2013.09.015>.
2. Шелудько Г. А., Шупіков О. М., Сметанкіна Н. В., Угримов С. В. Прикладний адаптивний пошук. Х.: Око, 2001. 188 с.
3. Grakovski A., Alexandrov A. Spectral method for numerical calculation of derivatives in digital processing of subsurface radar sounding signals. *Math. Modelling and Analysis*. 2005. Vol. 10. No. 1. P. 31–40. <https://doi.org/10.1080/13926292.2005.9637268>.
4. Zhao Z. A Hermite extension method for numerical differentiation. *Appl. Numerical Mathematics*. 2021. Vol. 159. P. 46–60. <https://doi.org/10.1016/j.apnum.2020.08.016>.
5. П'ін В. П., Zadorin A. I. Adaptive formulas of numerical differentiation of functions with large gradients. *J.: Conf. Series*. 2019. Vol. 1260. Iss. 4. P. 042003-1–042003-7. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1260/4/042003>.
6. Lu S., Pereverzev S. V. Numerical differentiation from a viewpoint of regularization theory. *Mathematics Computation*. 2006. Vol. 75. No. 256. P. 1853–1870. <https://doi.org/10.1090/S0025-5718-06-01857-6>.
7. Zhao Z., You L. A numerical differentiation method based on legendre expansion with super order Tikhonov regularization. *Appl. Mathematics and Computation*. 2021. Vol. 393. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2020.125811>.
8. Крылов А. Н. Лекции о приближенных вычислениях. М.: Гостехиздат, 1954. 98 с.
9. Гончаров В. Л. Теория интерполирования и приближения функций. Изд. 2. М: Гостехиздат, 1954. 386 с.
10. Мелентьев П. В.. Приближенные вычисления. М.: Физматгиз, 1966. 388 р.
11. Чебышев П. Л. О функциях, мало удаляющихся от нуля при некоторых величинах переменных. Полн. собр. соч. в 5 т. Т. 3: Математический анализ. М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1948. С. 108–127.
12. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и её приложения. М.: Мир, 1977. 349 с.
13. Беллман Р., Дрейфус С. Прикладные задачи динамического программирования. М.: Наука, 1964. 385 с.
14. Шелудько Г. А., Стрельникова Е. А., Кантор Б. Я. Гибридные методы в задачах оптимального проектирования. Поискные методы. Харьков: Новое слово, 2008. 188 с.
15. Шелудько Г. А., Угримов С. В. Адаптивная гибридизация. Х.: Міськдрук, 2011. 308 с.
16. Sheludko G. A., Ugrimov S. V. Modernization adaptive piecewise linear approximation of difficult-to-compute functions. *J. Mech Eng.* 2018. Vol. 21. No. 2. P. 60–67. <https://doi.org/10.15407/pmach2018.02.060>.
17. Бахвалов Н. С. Численные методы. М.: Наука, 1975. 632 с.
18. Рамм А. Г. О численном дифференцировании. *Изв. вузов. Математика*. 1968. № 11. С. 131–134.
19. Гилл Ф., Мюррей У., Райт М. Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985. 509 с.

20. Тихомиров В. М. Рассказы о максимумах и минимумах. М.: Наука, 1986. 192 с.
21. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980. 280 с.
22. Gander W., Gautschi W. Adaptive quadrature – revisited. *BIT Numerical Mathematics*. 2000. Vol. 40. Iss. 1. P. 84–101. <https://doi.org/10.1023/A:1022318402393>.
23. Mathews J., Fink K. Numerical methods using Matlab. 4th ed. New Jersey: Prentice-Hall, 2004. 696 p.
24. Долгополова Т. Ф., Иванов В. К. О численном дифференцировании. *Журн. вычисл. математики и мат. физики*. 1966. Т. 6. № 3. С. 57–71. [https://doi.org/10.1016/0041-5553\(66\)90145-5](https://doi.org/10.1016/0041-5553(66)90145-5).
25. Островский А. М. Решение уравнений и систем уравнений. М.: Изд-во иностр. лит., 1963. 220 с.

Поступила в редакцию 29.03.2021

Чисельне диференціювання важкообчислювальних функцій

Г. А. Шелудько, С. В. Угрімов

Інститут проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного НАН України,
61046, Україна, м. Харків, вул. Пожарського, 2/10

Розглянуто адаптивний підхід до чисельного диференціювання важкообчислювальних функцій. Складні залежності, які є результатом багаторазових суперпозицій функцій або різних алгоритмічних процесів, складні для безпосереднього дослідження. Для встановлення характеру поведінки таких залежностей доводиться вдаватися до чисельного аналізу. Однією з важливих характеристик функцій є похідна, яка вказує напрям і швидкість зміни залежності. Однак при складнообчислювальних функціях наявної апріорно інформації не завжди достатньо, щоб відомими засобами можна було б досягти належної точності розв'язку. Втрата точності відбувається внаслідок накопичення помилок округлення, які зростають пропорційно кількості задіяних значень функцій. У цьому випадку доводиться переходити до апостеріорного підходу для того, щоб визначити поведінку функції та відійти від схеми рівновіддалених вузлів, спираючись на адаптивний спосіб вивчення локальної обстановки в області визначення функції. У статті реалізовано адаптивний метод пошуку похідних функції при мінімумі обмежувальних вимог до класу функцій і форми їх задання. Завдяки цьому значно зменшилися витрати на обчислення функції, в результаті чого кількість обчислень було доведено майже до оптимального рівня. При цьому різко знизився обсяг використовуваної оперативної пам'яті. Немає потреби в проведенні попереднього аналізу зі встановлення класу досліджуваної функції, в залученні спецфункцій або перетворенні початкових умов для використання стандартних таблиць вагових коефіцієнтів і т.п. Для дослідження достатньо задати неперервну і обмежену функцію на фіксованому відрізьку та мінімальний крок, який побічно відповідає за забезпечення необхідної точності диференціювання. Ефективність запропонованого методу демонструється на ряді тестових прикладів. Розроблений метод може бути використано у більш складних задачах, наприклад, при розв'язанні деяких типів диференціальних і інтегральних рівнянь, а також для широкого ряду задач оптимізації в найрізноманітніших областях прикладного аналізу та синтезу.

Ключові слова: недиференційована функція, кусково-лінійне наближення, адаптивний покроковий вибір вузлів.