

Численное дифференцирование

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Математико-механический факультет

2025

1 Основные формулы численного дифференцирования

2 Замечания

3 Формулы численного дифференцирования для первой производной высокого порядка точности

4 Задание 3.1

5 Задание 3.2

6 О подборе оптимального шага

Основные формулы численного дифференцирования |

Пусть функция $f(x)$ достаточно гладкая. Пусть известна таблица ее значений в равноотстоящих с шагом $h > 0$ точках.

Простейшие формулы численного дифференцирования, полученные дифференцированием интерполяционного многочлена, построенного по выбранному набору узлов таковы:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{h}{2} f''(\xi_1), \quad \xi_1 \in (x, x+h), \quad (1)$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{h}{2} f''(\xi_2), \quad \xi_2 \in (x-h, x), \quad (2)$$

Основные формулы численного дифференцирования II

Формулы (1) и (2) — соответственно правая и левая разностные производные.

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f'''(\xi_3), \quad \xi_3 \in (x-h, x+h), \quad (3)$$

Формула (3) — центральная разностная производная.

Точка в начале таблицы ($f(x-h)$ неизвестно):

$$f'(x) = \frac{-3f(x) + 4f(x+h) - f(x+2h)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_4), \quad \xi_4 \in (x, x+2h). \quad (4)$$

Основные формулы численного дифференцирования III

Точка в конце таблицы ($f(x + h)$ неизвестно):

$$f'(x) = \frac{3f(x) - 4f(x - h) + f(x - 2h)}{2h} + \frac{h^2}{3} f'''(\xi_5),$$
$$\xi_5 \in (x - 2h, x). \quad (5)$$

Формула для второй производной:

$$f''(x) = \frac{f(x + h) - 2f(x) + f(x - h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi_6),$$
$$\xi_6 \in (x - h, x + h). \quad (6)$$

Понятно, что формулой (6) можно воспользоваться, если точка x — внутренняя точка в исходной таблице значений функции.

- ① Формулы (1) и (2) имеют погрешности порядка $O(h)$, и из представления погрешностей ясно, что эти формулы точны для любого многочлена, степени не выше 1. И неточны для одночлена $f(x) = x^2$.
- ② Формулы (3),(4) и (5) имеют погрешности порядка $O(h^2)$, и из представления их погрешностей ясно, что эти формулы точны для любого многочлена, степени не выше 2. И неточны для одночлена $f(x) = x^3$.
- ③ Формула (6) также имеет погрешность порядка $O(h^2)$, но точна для любого многочлена, степени не выше 3. И неточна для $f(x) = x^4$.

Замечания II

- 4 Ясно, что представленные формулы (1) — (6) можно использовать для приближенного вычисления производных как для случая таблично заданной функции, так и в случае, если функция задана аналитически, формулой. При решении реальной задачи с таблично заданной функцией мы оперируем числами из таблицы, их линейные комбинации в соответствии с выбранной формулой численного дифференцирования, будут приближенными значениями соответствующих производных. При решении тестовой задачи возникает искушение подставлять аргументы в формулу для функции. Этого следует избегать, так как в дальнейшем такая программа не будет работать для функции, не имеющей аналитического представления.

Формулы численного дифференцирования для первой производной высокого порядка точности

|

Пусть узлы $x_0, x_1, x_2, \dots, x_m$ — равноотстоящие, т. е.
 $x_{i+1} - x_i = h$ ($i = 0, 1, 2, \dots, m - 1$), и пусть для функции
 $y = f(x)$ известны значения $y_i = f(x_i)$ ($i = 0, 1, \dots, m$).
Формулы, имеющие погрешность порядка $O(h^4)$:

$$f'(x_0) = \frac{-25y_0 + 48y_1 - 36y_2 + 16y_3 - 3y_4}{12h} + \frac{h^4 f^{(5)}}{5}. \quad (7)$$

$$f'(x_1) = \frac{-3y_0 - 10y_1 + 18y_2 - 6y_3 + y_4}{12h} - \frac{h^4 f^{(5)}}{20}. \quad (8)$$

Формулы численного дифференцирования для первой производной высокого порядка точности

II

$$f'(x_i) = \frac{y_{i-2} - 8y_{i-1} + 8y_{i+1} - y_{i+2}}{12h} + \frac{h^4 f^{(5)}}{30}, \quad i = 2, 3, \dots, n-2. \quad (9)$$

$$f'(x_{m-1}) = \frac{3y_m + 10y_{m-1} - 18y_{m-2} + 6y_{m-3} - y_{m-4}}{12h} - \frac{h^4 f^{(5)}}{20}. \quad (10)$$

$$f'(x_m) = \frac{25y_m - 48y_{m-1} + 36y_{m-2} - 16y_{m-3} + 3y_{m-4}}{12h} + \frac{h^4 f^{(5)}}{5}. \quad (11)$$

Задание 3.1

Задание 3.1

Исследовательский этап задания 3:

Получить методом неопределенных коэффициентов формулу численного дифференцирования для второй производной $f''(x)$ и представление ее погрешности по значениям $f(x), f(x + h), f(x + 2h), f(x + 3h)$. Пусть далее эта формула будет под номером (12).

Заменой h на $-h$ получить формулу для второй производной $f''(x)$ по значениям $f(x), f(x - h), f(x - 2h), f(x - 3h)$. Далее эта формула будет под номером (13).

Результаты расчетов оформить письменно, подробно; показать при сдаче задания.

Задание 3.2 |

Задание 3.2

Собственно решение задачи численного дифференцирования:

Требуется написать программу, реализующую вычисление производных для таблично заданной функции.

Подготовительный этап

- Описать в коде программы не менее четырех функций. А именно, $f_1(x)$ —многочлен степени 2, $f_2(x)$ —многочлен степени 3, быстро растущую функцию (например, $f_3(x) = e^{4x}$) и гладкую функцию типа $f_4(x) = \sin(2x) - 1, 25x^2 + 0, 35$.
- Предложить пользователю выбрать функцию для задачи численного дифференцирования.

Задание 3.2 II

- ▢ Чтобы построить таблично заданную функцию, запрашивать у пользователя количество точек $m + 1$ в таблице, начальную точку x_0 и шаг $h > 0$.
- ▢ Результатом подготовительного этапа является таблица (вывести на экран) значений функции f в точках $x_k = x_0 + kh, k = 0, 1, \dots, m$.

Нахождение производных по формулам численного дифференцирования

- ▢ Вычислить приближенно значения первой производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h^2)$ (использовать формулы (4), (3) и (5)) соответственно для начальной точки, для всех внутренних точек $x_k, k = 1, 2, \dots, m - 1$ и для конечной точки в таблице. Обозначим эти значения через f' .

Задание 3.2 III

- б) Вычислить приближенно значения первой производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h^4)$ для всех x_k , $k = 0, 1, \dots, m$. (использовать формулы (7)–(11)).
Обозначим эти значения через f' .
- в) Вычислить приближенно значения второй производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h^2)$ для $k = 1, \dots, m - 1$ по формуле (6), а в начале (в точке x_0) и в конце таблицы (в точке x_m) — по полученным самостоятельно формулам (смотри пункт 3.1 задания).
Обозначим эти значения через f'' .

Визуализация результатов.

Результаты расчетов оформить в виде таблицы (см. образец) Таблица должна содержать

- таблицу значений узлов x_k , $k = 0, 1, \dots, m$;
- значений функции в узлах
$$y_k = f(x_k), k = 0, 1, \dots, m,$$
- “точных” значений производных в узлах f'_T и f''_T ;
- приближенных значений производных;
- их разностей по абсолютной величине (абсолютные фактические погрешности).

Образец заполнения для функции $f(x)$ представлен в таблице 1.

Таблица 1

| x_k | y_k | f'_T | \tilde{f}' $O(h^2)$ | погр. $O(h^2)$ | \tilde{f}' $O(h^4)$ | погр. $O(h^4)$ | f''_T | \tilde{f}'' $O(h^2)$ | погр. $O(h^2)$ |
|-----------|-----------|--------|--------------------------|-------------------|--------------------------|-------------------|---------|---------------------------|-------------------|
| x_0 | y_0 | | (4) | | (7) | | | (12) | |
| x_1 | y_1 | | (3) | | (8) | | | (6) | |
| x_2 | y_2 | | (3) | | (9) | | | (6) | |
| ... | ... | | ... | | ... | | | ... | |
| x_{m-2} | y_{m-2} | | (3) | | (9) | | | (6) | |
| x_{m-1} | y_{m-1} | | (3) | | (10) | | | (6) | |
| x_m | y_m | | (5) | | (11) | | | (13) | |

Этап анализа результатов.

Предложение выбрать функцию, создать новую таблицу и
проводить новые расчеты или выйти из программы.

О подборе оптимального шага

Не всегда есть информация о неустранимой погрешности формулы численного дифференцирования (это отдельная задача), потому определить оптимальный шаг теоретически бывает затруднительно. Но если, пользуясь выбранной формулой ч.д., в заданной точке x вычислить приближенное значение производной первого или второго порядка, последовательно уменьшая шаг h (например, вдвое) до тех пор, пока фактическая погрешность не начнет возрастать, то можно определить h оптимальное экспериментально.

Пример

При использовании формулы (4) в результате ошибок, допускаемых в каждом значении функции и не превосходящих по модулю ε , оценка для суммарной погрешности будет выглядеть следующим образом:

$$|R_\varepsilon(x, h, f)| \leq \frac{8\varepsilon}{2h} + \frac{h^2}{3} M_3, \quad M_3 = \max |f'''(\xi)|, \quad \xi \in (x, x+2h).$$

Оптимальный шаг, т. е. такой, при котором обеспечивается минимальная суммарная погрешность, находится обычным образом, как решение задачи на экстремум.

Напечатать

- таблицу значений h ;
- “точных” значений производной в точке x ;
- приближенных значений производной;
- их разностей (фактические погрешности).

Образец выполнения задания для функции $f(x) = e^{2x}$

представлен в [таблице 2](#).

Здесь $x = 1$, начальный шаг $h = 0.1$, “точное” значение производной $f'(1) = 14.778112$

Значения функции округляются до пятого знака после запятой, т. е. $\varepsilon = 5 \cdot 10^{-6}$.

Таблица 2

| | | | | | | |
|----------------------------|---------|---------|---------|--------|-----------|----------|
| h | 0.1 | 0.05 | 0.025 | 0.0125 | 0.00625 | 0.003125 |
| \tilde{f}' пор. $O(h^2)$ | 14.5484 | 14.7249 | 14.765 | 14.774 | 14.7768 | 14.7744 |
| погр. | 0.22971 | 0.05321 | 0.01311 | 0.0037 | 0.0013122 | 0.003712 |

Из таблицы видно, что оптимальным экспериментально является шаг 0.00625, теоретически $h_{opt} \approx 0.0069$.