

# 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 I

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  $f(x) = x^4$ .

- 4 Ясно, что представленные формулы (1) — (6) можно использовать для 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

I

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

I

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

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

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

# 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

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  $f'$ .
- с) 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 провести 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.



При использовании формулы (4) в результате ошибок, допускаемых в каждом значении функции и не превосходящих по модулю  $\varepsilon$ , 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  $h_{opt} \approx 0.0069$