Численное дифференцирование

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Математико-механический факультет

2025

Содержание I

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.

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

Формула (3) — центральная разностная производная.
Точка в начале таблицы ($f(x-h)$ неизвестно):

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

Основные формулы численного дифференцирования III

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

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

Формула для второй производной:

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

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

Замечания I

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 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 $x_0,\ x_1,\ x_2, \ldots, x_m$ — равноотстоящие, т. е. $x_{i+1} - x_i = h$ $(i = 0,\ 1,\ 2, \ldots, m-1)$, и пусть для функции $y = f(x)$ известны значения $y_i = f(x_i)$ $(i = 0, 1, \ldots, m)$. 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

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

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

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

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 $x_k = x_0 + kh,\ k = 0, 1, \ldots, m$.

Нахождение производных по формулам численного дифференцирования

a) 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 $x_k,\ k = 1, 2, \ldots, m-1$ и для конечной точки в таблице. Обозначим эти значения через $\widetilde{f}'$.

Задание 3.2 III

b) Вычислить приближенно значения первой производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h^4)$ для всех $x_k,\ k = 0, 1, \ldots, m$. (использовать формулы (7)—(11)).
Обозначим эти значения через $\widetilde{f'}$.

c) Вычислить приближенно значения второй производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h^2)$ для $k = 1, \ldots, m-1$ 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 $\widetilde{f''}$.

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

- таблицу значений узлов x_k, $k = 0,\ 1,\ \ldots,\ m$;
- значений функции в узлах $y_k = f(x_k)$, $k = 0,\ 1,\ \ldots,\ m$;
- "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	$\widetilde{f'}$ $O(h^2)$	погр. $O(h^2)$	$\tilde{\tilde{f}}'$ $O(h^4)$	погр. $O(h^4)$	f''_T	$\widetilde{f''}$ $O(h^2)$	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 экпериментально.

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:

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

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
$\widetilde{f}'$ 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 $h_{opt} \approx 0.0069$.