Численное дифференцирование

1. Первая производная

Для формулы Тейлора

$$f(t) = f(t_0) + \frac{f'(t_0)}{1!}(t - t_0) + \frac{f''(t_0)}{2!}(t - t_0)^2 + \dots$$

сделаем подстановки $t_0 = x,\ t = x + h,$ где $h > 0$ — достаточно малая постоянная величина. Получим:

$$f(x + h) = f(x) + \frac{h}{1!}f'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \dots$$

Воспользовавшись теоремой Лагранжа о среднем, можем записать остаточный член в виде:

$$f(x + h) = f(x) + \frac{h}{1!}f'(x) + \frac{(x - \tilde{x})^2}{2!}f''(\tilde{x})$$

где $\tilde{x}$ некая точка из отрезка $[x, x + h]$. Перенесём слагаемые:

$$f'(x) = \frac{f(x + h) - f(x)}{h} + \frac{(x - \tilde{x})^2}{2!}f''(\tilde{x})$$

Выражение $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ называется *разделённой разностью*. Как видно из формулы, разделённая разность является приближением для производной.

Отсюда же имеем *оценку погрешности* для разделённой разности:

$$\left|f'(x) - \frac{f(x + h) - f(x)}{h}\right| = \frac{|x - \tilde{x}|^2}{2!}\ |f''(\tilde{x})| \le \frac{h^2}{2}\max|\,f''(x)|$$

Обычно $\max\left|\,f''^{(x)}\right|$ не велико, поэтому при малых h ($h \le 0{,}01$) погрешность пренебрежимо мала. Поэтому вместо аналитической функции $f(x)$ можно рассматривать её дискретизацию $f(x_k)$ на отрезке $[a, b]$ по *N+1* точке, где $x_k = a + hk,\ h = \frac{b-a}{N}$, $k = \overline{0..N}$.

Таким образом, если задана гладкая функция $f(x)$ и выбрана *N+1* точка на отрезке $[a, b]$, то

$$f'(x_k) \approx \frac{f(x_{k+1}) - f(x_k)}{h}$$

где $x_k = a + hk,\ h = \frac{b-a}{N},\ k = \overline{0..N}.$

Примечание: обратите внимание, что при малых h могут возникать вычислительные погрешности, связанные с ограниченной точностью компьютерных типов данных.

2. Вторая производная

Применим формулу Тейлора для положительного и отрицательного шага:

$$f(x+h) = f(x) + \frac{h}{1!}f'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{IV}(x) - \ldots$$

$$f(x-h) = f(x) - \frac{h}{1!}f'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{IV}(x) - \ldots$$

А теперь сложим их:

$$f(x+h) + f(x-h) = 2f(x) + 2\frac{h^2}{2!}f''(x) + 2\frac{h^4}{4!}f^{IV}(x) + \ldots$$

Отсюда

$$f''(x) = \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} + 2\frac{(x-\tilde{x})^4}{4!}f^{IV}(\tilde{x}).$$

Погрешность:

$$\left|2\frac{(x-\tilde{x})^4}{4!}f^{IV}(\tilde{x})\right| \le \frac{h^4}{12}\max|f^{IV}(x)|$$

Для гладких функций $\max|f^{IV}(x)|$ обычно мало, поэтому даже для небольших h достигается высокая точность.

Таким образом, если задана 2-гладкая функция $f(x)$ и выбрана $N+1$ точка на отрезке $[a,b]$, то

$$f''(x_k) \approx \frac{f(x_{k-1}) - 2f(x_k) + f(x_{k+1})}{h^2}$$

где $x_k = a + hk$, $h = \frac{b-a}{N}$, $k = \overline{0..N}$.

Примечание: данные формулы не применимы к граничным точкам, поэтому в общем случае значение численных производных на границах имеет меньшую точность. Однако если функцию можно аналитически продолжить (или экстраполировать), то эти формулы можно применить и для граничных точек.