ГЛАВА 7. ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ И ИНТЕГРИРОВАНИЕ

7.1. Численное дифференцирование функций, заданных аналитически

По определению производная функции $f(x)$ равна

$$f^{'}(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \qquad (1)$$

Переходя в (1) от бесконечно малых разностей к конечным, получаем приближенную формулу численного дифференцирования:

$$f^{'}(x) = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \qquad (2)$$

Формула (2) позволяет построить простой вычислительный алгоритм:
1) задать значение точки, в которой вычисляется производная;
2) задать значение приращения Δx;
3) вычислить производную по формуле (2).

Замена бесконечно малых приращений конечными является причиной возникновения ошибки. Для оценки ее величины разложим функцию $f(x)$ в точке $x+\Delta x$ в ряд Тейлора:

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \frac{f'(x)}{1!}\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}(\Delta x)^2 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(\Delta x)^n + \ldots \qquad (3)$$

Подставив (3) в (2) и приведя подобные члены, получим

$$f'(x) = f'(x) + \frac{f''(x)}{2!}\Delta x + \ldots \qquad (4)$$

Из (4) видно, что все члены ряда, начиная со второго, определяют отличие численного значения производной от ее точного значения. Основной член погрешности равен $\frac{f''(x)}{2!}\Delta x$, поэтому говорят, что формула (2) имеет первый порядок точности по Δx.

Можно вычислить производную, используя вторую конечную разность, по формуле

$$f'(x) = \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x}. \qquad (5)$$

Для оценки точности формулы (5) необходимо оставить первые четыре члена в разложении в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} f'(x) = {} & \frac{1}{2\Delta x}\left(f(x) + \frac{f'(x)}{1!}\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}(\Delta x)^2 + \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^3 + \ldots \right) - \\ & - \frac{1}{2\Delta x}\left(f(x) - \frac{f'(x)}{1!}\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}(\Delta x)^2 - \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^3 + \ldots \right) \end{aligned} \qquad (6)$$

Раскрывая в (6) скобки и приведя к подобным членам, получим

$$f'(x) = f'(x) + \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^2 + \ldots \tag{7}$$

Из формулы (7) видно, что основной член погрешности равен $\frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^2$. Поэтому говорят, что формула (5) имеет второй порядок точности по Δx.

7.2. Численное дифференцирование таблично заданных функций

Пусть известны табличные значения функции $f(x)$ на конечном множестве узлов $x_i \in [a;b]$, $\left(i = \overline{0, n}\right)$. Требуется определить значение производной в некоторой точке $x \in [a;b]$.

Для определения значения производной в этом случае будем использовать интерполяционный полином Ньютона $Q_I(x)$, который мы определили ранее:

$$Q_I(x) = y(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \ldots + \frac{q(q-1)\ldots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_0$$

или

$$y(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q^2 - q}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{q^3 - 3q^2 + 2q}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{q^4 - 6q^3 + 11q^2 - 6q}{24}\Delta^4 y_0 + \ldots, \tag{8}$$

где $q = \frac{x - x_0}{h}$, $h = x_{i+1} - x_i$ – шаг между узлами.

Продифференцируем (8) по x. Так как $\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dq}\frac{dq}{dx} = \frac{1}{h}\frac{dy}{dq}$, получим

$$y'(x) = \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3q^2 - 6q + 2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{4q^3 - 18q^2 + 22q - 6}{24}\Delta^4 y_0 + \ldots\right). \tag{9}$$

Продифференцируем (9) по x. $y''(x) = \frac{d(y')}{dx} = \frac{d(y')}{dq}\frac{dq}{dx} = \frac{1}{h}\frac{d(y')}{dq}$, т.е., зная вид полинома Ньютона для первой производной, можно получить производные более высоких порядков.

$$y''(x) = \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 + (q-1)\Delta^3 y_0 + \frac{6q^2 - 18q + 11}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right). \tag{10}$$

Пример 1. Используя ИП Ньютона, вычислить первую и вторую производные в точке $x = 57$ для функции $y_i = f(x_i)$, заданной таблицей 12.