5. Численное дифференцирование

5.1. Основные формулы численного дифференцирования для функции, заданной аналитически

Предполагается, что функция $f(x)$ достаточно гладкая.

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

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} \text{ — разность вперед.}$$

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

$$\frac{f(x)-f(x-h)}{h} \text{ — разность назад.}$$

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

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} \text{ — симметричная разность.}$$

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

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

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

5.2. Формулы численного дифференцирования для равноотстоящих узлов

Пусть узлы $x_0,\ x_1,\ x_2, \ldots, x_n$ — равноотстоящие, т. е. $x_{i+1} - x_i = h$ $(i = 0,\ 1,\ 2, \ldots, n-1)$, и пусть для функции $y = f(x)$ известны значения $y_i = f(x_i)$ $(i = 0, 1, \ldots, n)$. Формулы (1)-(6) перепишем в следующем виде:

$$f'(x_i) = \frac{y_{i+1}-y_i}{h} + O(h), \ \ i = 0, 1, \ldots, n-1. \tag{1a}$$

$$f'(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + O(h), \ \ i = 1, 2, \ldots, n. \tag{2a}$$

$$f'(x_i) = \frac{y_{i+1}-y_{i-1}}{2h} + O(h^2), \ \ i = 1, 2, \ldots, n-1. \tag{3a}$$

$$f'(x_i) = \frac{-3y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}}{2h} + O(h^2), \ \ i = 0, \ldots, n-2. \tag{4a}$$

$$f'(x_i) = \frac{3y_i - 4y_{i-1} + y_{i-2}}{2h} + O(h^2), \ \ i = 2, \ldots, n. \tag{5a}$$

$$f''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^2), \ \ i = 1, \ldots, n-1. \tag{6a}$$

5.3. Задание

1. Вычислить приближенно значения:

   а) первой производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h)$ и $O(h^2)$ при $i = 0, 1, \ldots, n$.

   б) второй производной функции $y = f(x)$ с порядком погрешности $O(h^2)$ при $i = 1, \ldots, n-1$.

   Напечатать таблицу значений узлов, "точных" значений производных в узлах, приближенных значений производных и их разностей (фактические погрешности) (см. образец). Проверить результаты на многочленах соответствующих степеней. Объяснить полученные результаты.

   Образец выполнения задания для функции $f(x) = x + 3$ представлен в таблице 1.

   Таблица 1

x	$f(x)$	$f'(x)$	fx $O(h)$	погр. $O(h)$	fx $O(h^2)$	погр. $O(h^2)$	$f''(x)$	fxx $O(h^2)$	погр. $O(h^2)$
0	3	1	1	0	1	0	0		
0,1	3,1	1	1	0	1	0	0	0	0
0,2	3,2	1	1	0	1	0	0	0	0
0,3	3,3	1	1	0	1	0	0	0	0
0,4	3,4	1	1	0	1	0	0	0	0
0,5	3,5	1	1	0	1	0	0	0	0
0,6	3,6	1	1	0	1	0	0	0	0
0,7	3,7	1	1	0	1	0	0	0	0
0,8	3,8	1	1	0	1	0	0	0	0
0,9	3,9	1	1	0	1	0	0	0	0
1	4	1	1	0	1	0	0		

2. Пользуясь одной из формул (1)-(6) (указывается преподавателем) в заданной точке x вычислить разностную производную первого или второго порядка, последовательно уменьшая шаг h (например, вдвое) до тех пор, пока фактическая погрешность не начнет возрастать. Определить h оптимальное экпериментально и теоретически, объяснить полученные результаты.

   Пример:

   При использовании формулы (4) в результате ошибки ε, допускаемой в каждом из значений функции, оценка для суммарной погрешности будет выглядеть следующим образом:

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

   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 , приближенных значений производной и 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 5-го 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
f_x 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 $h_{opt} \approx 0,0069$.

3. Дифференцированием интерполяционного многочлена в форме Ньютона, построенного ранее в задании 3,

   а) получить формулы численного дифференцирования различных порядков аппроксимации для вычисления приближенного значения первой производной в узле ближайшем к точке интерполирования;

   б) убедиться, что формулы первого и второго порядков аппроксимации совпадают с формулами, приведенными выше;

   в) вычислить приближенные значения производной и фактическую погрешность;

   г) сравнить фактическую и теоретическую погрешности.

Варианты заданий