Численное дифференцирование

К численному (приближенному) дифференцированию чаще всего прибегают, когда приходится вычислять производные от функций, заданных таблично, или, когда непосредственное дифференцирование затруднительно.

При вычислении производной функции, будем иметь в виду, что один из способов найти производную

$$f'(x_0)$$

- это взять достаточно малые значения справа и слева на равном расстоянии от x_0

- точке, в которой мы хотим найти производную.

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + dx/2) - f(x_0 - dx/2)}{dx}.$$

Таким образом, вычисляется производная в середине промежутка.

По значениям f' можно таким же способом найти производную от f', т.е. f''. Можно выразить f'' непосредственно через f(x):

$$f''(x) \approx \frac{f'(x_0 + dx/2) - f'(x_0 - dx/2)}{dx} \approx \frac{\dfrac{f(x_0 + dx) - f(x_0)}{dx} - \dfrac{f(x_0) - f(x_0 - dx)}{dx}}{dx} \approx$$

$$\approx \frac{f(x_0 + dx) - 2f(x_0) + f(x_0 - dx)}{dx^2}.$$

Для производной третьего порядка можно использовать следующую формулу:

$$f'''(x) \approx \frac{f(x_0 + 2dx) - 2f(x_0 + dx) + 2f(x_0 - dx) - f(x_0 - 2dx)}{2dx^3}.$$

Возникают естественные вопросы, откуда происходят эти формулы и как оценивать точность вычисления производных по этим формулам?

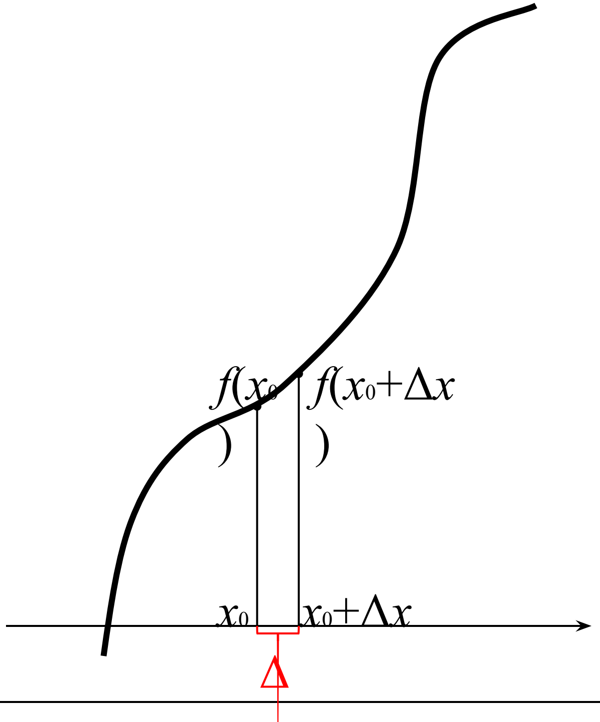
Односторонняя разность

- Производная функции определяется выражением:

$$f'(x_0) = \frac{df}{dx} = \lim_{dx \to 0} \frac{f(x_0 + dx) - f(x_0)}{dx}$$

- заменяем приращение на конечную величину (шаг дифференцирования):

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$



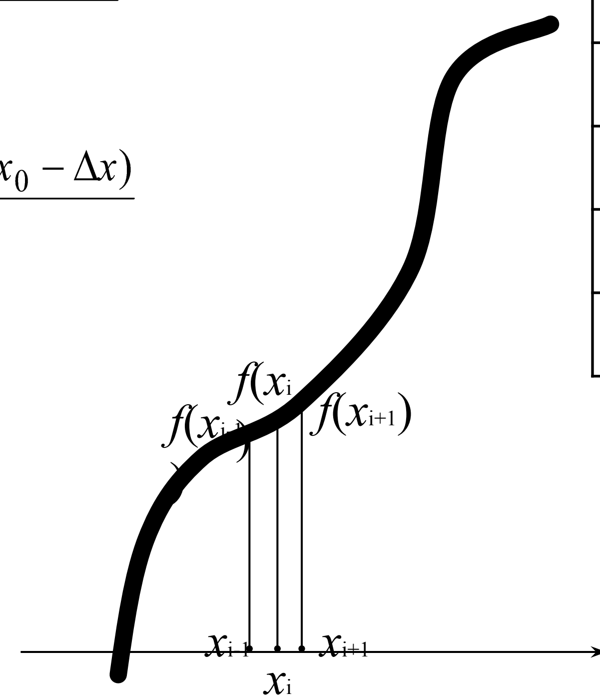
Односторонняя разность

- Численное дифференцирование:
  - правосторонняя разность:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{(x_{i+1} - x_i)} \qquad f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}$$

  - левосторонняя разность:

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{(x_i - x_{i-1})} \qquad f'(x_0) = \frac{f(x_0) - f(x_0 - \Delta x)}{\Delta x}$$



f_1	x_1
f_2	x_2
…	…
f_i	x_i
…	…
f_n	x_n

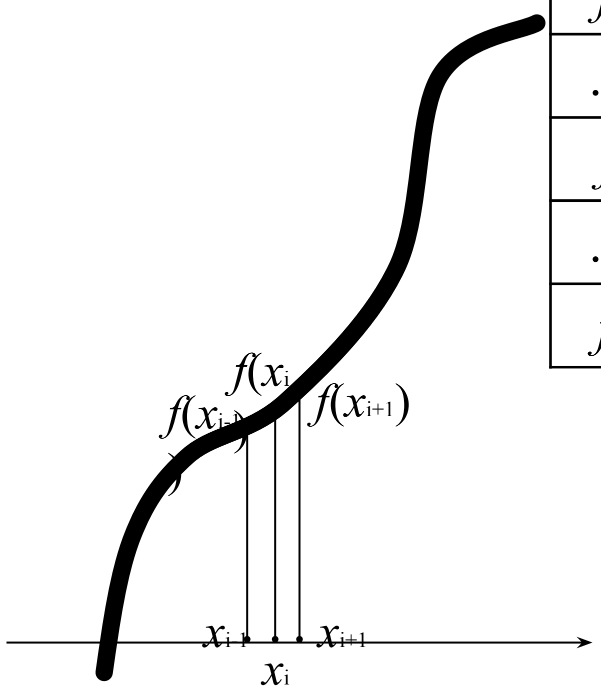
Двусторонняя разность

- Более точное значение производной:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0 - \Delta x)}{2 \cdot \Delta x}$$

- Двусторонняя разность:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{(x_{i+1} - x_{i-1})}$$



f_1	x_1
f_2	x_2
…	…
f_i	x_i
…	…
f_n	x_n

Формулы являются результатом дифференцирования интерполяционных многочленов Ньютона и других. Сущность которых состоит в том, что заданная функция $f(x)$ ***представляется в виде многочлена, который значительно проще дифференцировать, чем какие-либо другие функции, особенно трансцендентные или представляющие собой сложные выражения.***

менее серьезный и сложный процесс, чем само приближенное вычисление.

Так для оценки погрешности дифференцирования могут быть применены следующие формулы:

$$r_n(x) = (-1)^n \frac{dx^n}{n+1} f^{(n+1)}(\xi), \qquad (2)$$

где предполагается, что функция $f(x)$ ***дифференцируемая*** $n+1$ ***раз, а точка*** ξ ***- некоторое промежуточное значение между*** $x0$ ***- точкой, в которой находится производная и точками (x0 - 2dx), (x0 - dx), (x0 + dx), (x0 + 2dx), ... из заданного промежутка [a, b].***

На практике $f^{(n+1)}(c)$ оценивать непросто, поэтому при малых dx приближенно полагают:

$$f^{(n+1)}(\xi) \approx \frac{\Delta^{(n+1)} y_0}{dx^{n+1}}$$

и тогда получается следующая формула

$$r_n(x_0) \approx \frac{(-1)^n \Delta^{n+1} y_0}{dx(n+1)} \qquad (3)$$

Мы будем пользоваться формулой (2), а впоследствии и формулой (3), в зависимости от конкретной задачи и тех сложностей, которые могут возникнуть при составлении программ.
Используя эти формулы, составим функцию для вычисления первой производной. Точность вычисления eps задается пользователем, а первоначальная величина промежутка dx устанавливается 1, а затем, для уточнения вычисления - делится на 2.

Частное дифференцирование функции от многих переменных

- Все аргументы функции становятся константами, кроме аргумента по которому проводится дифференцирование

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = \frac{f(\ldots, x_i + \Delta x_i, \ldots) - f(\ldots, x_i, \ldots)}{\Delta x_i}$$

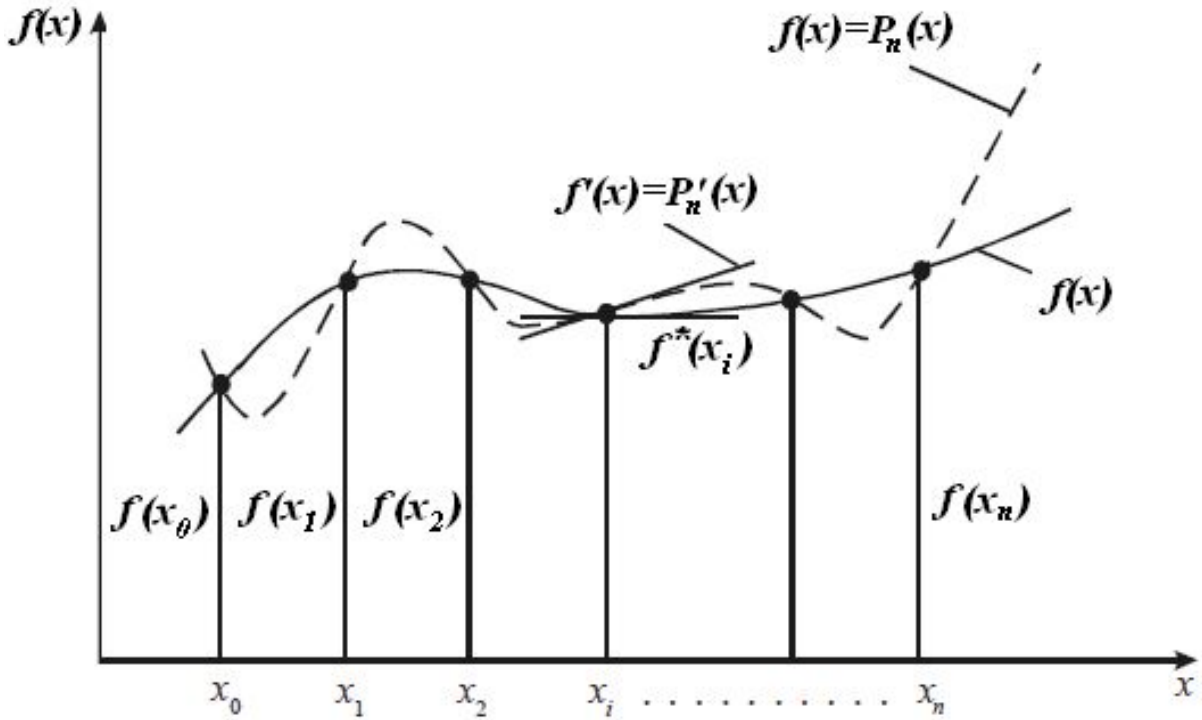
- Требуемый порядок производной получается путем последовательного вычисления производных, вплоть до требуемого порядка

Интерполяция полиномом

- Заданная таблица сглаживается какой-либо функцией ***P(x)***, являющейся интерполяционным полиномом, или полиномом, полученным с использованием МНК (метода наименьших квадратов) с некоторой погрешностью ***R_n(x)***, в результате чего имеют место следующие равенства:
- $f(x) = P(x) + R_n(x), \quad f(x^*) = P(x^*) + R_n(x^*)$:
- $f'(x) = P'(x) + R'_n(x), \quad f'(x^*) = P'(x^*) + R'_n(x^*)$:
- $f''(x) = P''(x) + R''_n(x)$,

$f''(x^*) = P''(x^*) + R''_n(x^*)$

- *численное дифференцирование представляет собой операцию менее точную (иногда говорят — некорректную), чем интерполирование*. Действительно, близость друг другу ординат двух кривых $y=f(x)$ и $y=P(x)$ на отрезке [a,b] еще не гарантирует близости на этом отрезке их производных $f'(x)$ и $P'(x)$



Интерполяция конечными разностями

- В *этом случае* ($x^* = x_i$, $i = 0, \ldots, n$) используется аппарат разложения функций в ряд Тейлора, для чего функция в точке x^* должна иметь достаточное число производных. Предполагается, что заданная таблица является сеточной функцией для некоторой функции $\boldsymbol{y(x)}$ (т.е. $\boldsymbol{y_i = y(x_i)}$), имеющей в точке производные до четвертого порядка включительно.

$$y_{i-1} = y(x_i - h) = y_i - y_i'h + y_i''\frac{h^2}{2} - y_i'''\frac{h^3}{6} + y^{IV}(\xi)\frac{h^4}{24},\ \xi \in [x_{i-1}, x_i]$$

$$y_{i+1} = y(x_i + h) = y_i + y_i'h + y_i''\frac{h^2}{2} + y_i'''\frac{h^3}{6} + y^{IV}(\xi)\frac{h^4}{24},\ \xi \in [x_i, x_{i+1}]$$

Выразим y_i', разделив предварительно на *h* и оставляя слагаемые с первой степенью шага *h*, получим

$$\overline{y}_i' = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + O(h) = \frac{\Delta\overline{y}_i}{h} + O(h)$$

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + O(h) = \frac{\Delta y_i}{h} + O(h)$$

$$\mathring{y}'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2) = \frac{\Delta \mathring{y}_i}{2h} + O(h^2)$$

где $\Delta \mathring{y}_i = y_{i+1} - y_{i-1}$ нтральная разность первого порядка

$$y''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^2) = \frac{\Delta^2 y_i}{h^2} + O(h^2)$$

Метод Рунге

$$f'(x) = \varphi'_h(x) + h^p \cdot \psi(x) + O(h^{p+1}) + O_1(h^{p+2}) + \ldots,$$

$$f'(x) \approx \varphi'_h(x),$$

$$R_p = h^p \psi(x) + O(h^{p+1}) + O_1(h^{p+2}) + \ldots \,.$$

С целью оценки погрешности продифференцируем численно методом *p*-го порядка функцию $f(x_i) = y_i$, $i = 0, \ldots, n$ с шагом *h*. Затем продифференцируем численно функцию тем же методом *p*-го порядка, с шагом *kh* (k=1/2; 1/4; 1/16; ...)

$$f'(x) = \varphi'_{kh}(x) + (kh)^p \psi(x) + O_2(h^{p+1})$$

$$h^p \psi(x) = \frac{\varphi'_h(x) - \varphi'_{kh}(x)}{k^p - 1} + O_3(h^{p+1})$$

$$f'(x) = \varphi'_{kh}(x) + \frac{\varphi'_h(x) - \varphi'_{kh}(x)}{1 - k^{-p}} + O_4(h^{p+1})$$

Из этого выражения видно, что это уже метод порядка *p+1*, т.е. на порядок точнее