6. ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

Производная функции − одно из основных понятий математики, а в математическом анализе производная наряду с интегралом занимает центральное место.

Процесс нахождения производной называется **дифференцированием**.

Обратная операция − восстановление функции по известной производной − называется **интегрированием.**

Производная функции в некоторой точке характеризует скорость изменения функции в этой точке.

Оценку скорости изменения можно получить, вычислив отношение изменения функции Δy к соответствующему изменению аргумента Δx. В определении производной такое отношение рассматривается в пределе при условии $\Delta x \to 0$.

Перейдем к более строгой формулировке.

Определение производной функции в точке

Рассмотрим функцию $y = f(x)$, область определения которой содержит некоторый открытый интервал вокруг точки x_0. Тогда функция $f(x)$ является **дифференцируемой** в точке x_0, и ее **производная** определяется формулой

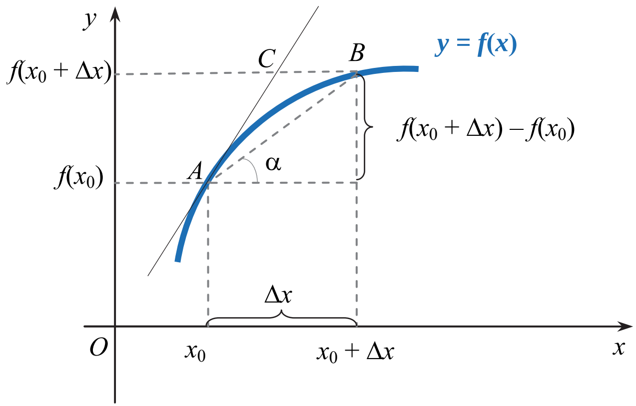
$$f'(x_0) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x}.$$

Для производной используются обозначения:

$$y' = f'(x) = \frac{df}{dx}.$$

Геометрический смысл производной в точке

Рассмотрим график функции $y = f(x)$



Для любых двух точек A и B графика функции:

$$\frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x} = \operatorname{tg}\alpha$$

где α – угол наклона секущей AB.

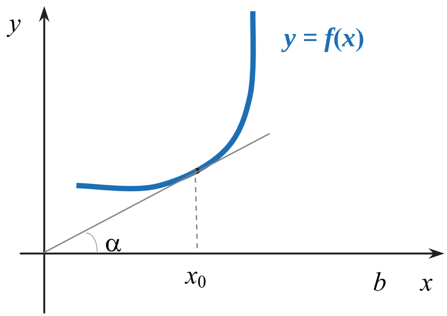
Таким образом, разностное отношение равно угловому коэффициенту секущей.

Если зафиксировать точку A и двигать по направлению к ней точку B, то Δx неограниченно уменьшается и приближается к 0, а секущая AB приближается к касательной AC.

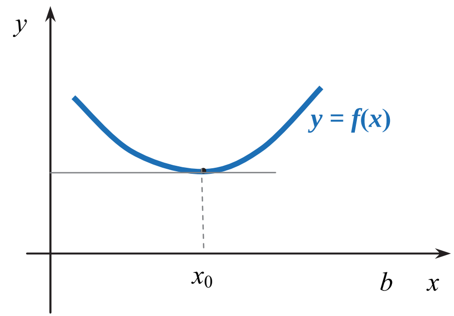
Следовательно, предел разностного отношения равен угловому коэффициенту касательной в точке A.

Отсюда следует:

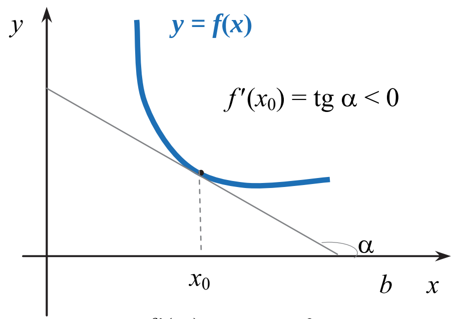
производная в точке x_0 равна угловому коэффициенту касательной к графику функции $y = f(x)$ в этой точке.



$f'(x_0) = \mathrm{tg}\,\alpha > 0$



$f'(x_0) = \mathrm{tg}\,\alpha = 0$



$f'(x_0) = \mathrm{tg}\,\alpha < 0$

Известны правила дифференцирования

1. $c' = 0,\ c = \text{const}$
2. $\left(x^n\right)' = nx^{n-1}$
3. $\left(a^x\right)' = a^x \cdot \ln a$
4. $\left(e^x\right)' = e^x$
5. $(\log_a x)' = \dfrac{1}{x \ln a}$
6. $(\ln x)' = \dfrac{1}{x}$
7. $(\sin x)' = \cos x$
8. $(\cos x)' = -\sin x$
9. $\left(\sqrt{x}\right)' = \dfrac{1}{2\sqrt{x}}$
10. $(\text{tg}x)' = \dfrac{1}{\cos^2 x}$
11. $(\text{ctg}x)' = -\dfrac{1}{\sin^2 x}$
12. $(\arcsin x)' = \dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
13. $(\arccos x)' = -\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$
14. $(\text{arctg}x)' = \dfrac{1}{1+x^2}$
15. $(\text{arcctg}x)' = -\dfrac{1}{1+x^2}$
16. $(\text{sh}\,x)' = \text{ch}\,x$
17. $(\text{ch}\,x)' = \text{sh}\,x$
18. $(\text{th}\,x)' = \dfrac{1}{\text{ch}^2 x}$
19. $(\text{th}\,x)' = -\dfrac{1}{\text{sh}^2 x}$

$(C)' = 0 \qquad (Cu)' = Cu'$

$(u \pm v)' = u' \pm v' \qquad (uv)' - u'v + uv'$

$$\left(\frac{u}{v}\right)' = \frac{u'v - uv'}{v^2} \qquad \frac{dy}{dx} = \frac{dy}{du} \cdot \frac{du}{dx}$$

$y' - y(\ln y)'$

$(u^v)' = vu^{v-1}u' \mid u^v v' \ln u$

Перечисленными правила можно пользоваться при нахождении функции, заданной аналитически (в виде формулы), если ее вид достаточно простой.

Однако:

1. Получение производной в некоторой точке от функции, у которой аналитическая запись представляет собой комбинацию нескольких функций, с помощью этих формул является алгоритмически разрешимой задачей, но достаточно трудоемкой.

2. Если формула задана таблично, то применить данные формулы к ней для получения ее производной в некоторой точке, даже узловой, не получится.

6.1. Постановка вопроса численного дифференцирования

Постановка 1. Найти производные функции $y = f(x)$, которая задана таблично:

Значения аргументов функции x_i	x_0	x_1	x_2	…	x_{n-1}	x_n
Значения функции $f(x)$ *в точках* x_i	y_0	y_1	y_2		y_{n-1}	y_n

Постановка 2. Функция $f(x)$ задана аналитически, но из-за ее сложности непосредственное дифференцирование ее затруднительно.

В этих случаях обычно прибегают к **численному дифференцированию**.

Решение задачи численного дифференцирования

1. Пусть требуется найти производную функции на отрезке $[a, b]$.

2. На отрезке $[a, b]$ функция $f(x)$ заменяется интерполирующей функцией $P(x)$ (чаще всего полиномом).

3. Полагают, что

$$f'(x) \approx P'(x) \text{ для } x \in [a, b]. \qquad \textbf{(6.1)}$$

Аналогично поступают при нахождении производных функции $f(x)$ второго и более высших порядков.

Если для интерполирующей функции $P(x)$ известна погрешность

$$R(x) = f(x) - P(x),$$

то погрешность производной $P'(x)$ выражается формулой

$$r(x) = f'(x) - P'(x) = R'(x),$$

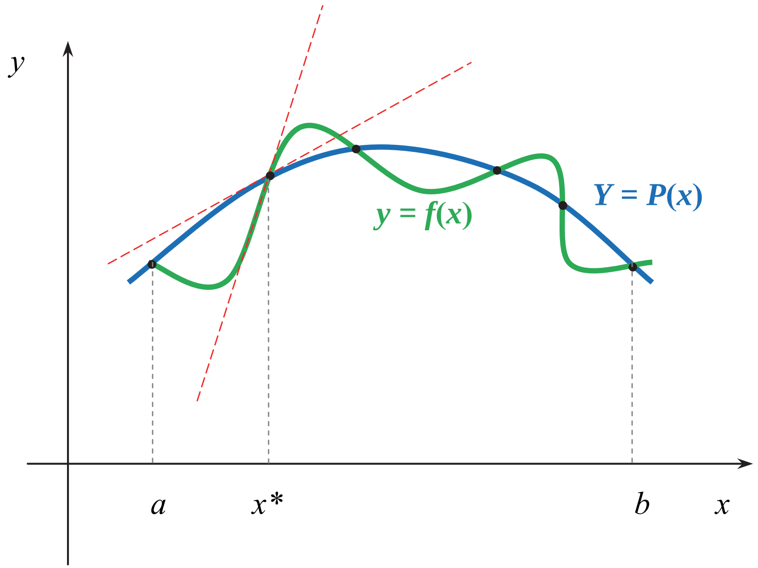
т.е. погрешность производной интерполирующей функции равна производной от погрешности этой функции.

Вообще говоря, **приближенное дифференцирование представляет собой операцию менее точную, чем интерполирование**.

Действительно, близость друг к другу ординат двух кривых

$$y = f(x) \text{ и } Y = P(x)$$

на отрезке [a, b] еще не гарантирует близости на этом отрезке их производных $f'(x)$ и $P'(x)$, т.е. малого расхождения угловых коэффициентов касательных к рассматриваемым кривым при одинаковых значениях аргумента (рисунок).



Для вычисления производной часто применяют аналитические методы:

- аппроксимация производной;
- метод неопределенных коэффициентов;
- использование интерполяционных формул.

6.1.1. Аппроксимация производной

Известно, что производная функции $y = f(x)$ представляет собой предел приращения функции к приращению аргумента

$$y' = \frac{\Delta y}{\Delta x} \qquad \textbf{(6.2)}$$

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

При использовании метода «аппроксимация производной» функция приближенно заменяется на этот предел.

Пусть заданы значения функции y_{i-1}, y_i, y_{i+1} в соответствующих узлах интерполяции x_{i-1}, x_i, x_{i+1}: $x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = h = \mathrm{const}$.

В зависимости от того, в какую сторону дается приращение аргумента, производную в точке x_i вычисляют по следующим формулам:

а) если приращение дается в сторону увеличения, то:

$$y'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i} = \frac{f(x_i + h) - f(x_i)}{(x_i + h) - x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}. \qquad \textbf{(6.3)}$$

б) если приращение дается в сторону уменьшения, то:

$$y'(x_i) = \frac{f(x_{i-1}) - f(x_i)}{x_{i-1} - x_i} = \frac{f(x_i - h) - f(x_i)}{(x_i - h) - x_i} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}. \qquad \textbf{(6.4)}$$

Формулы (6.3) и (6.4) называются соответственно **правой** и **левой односторонней конечной производной**.

Для вычисления производной методом «аппроксимация производной» существует еще одна формула, которая называется **центральной разностной производной:**

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \qquad \textbf{(6.3)}$$

$$y'(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \qquad \textbf{(6.4)}$$

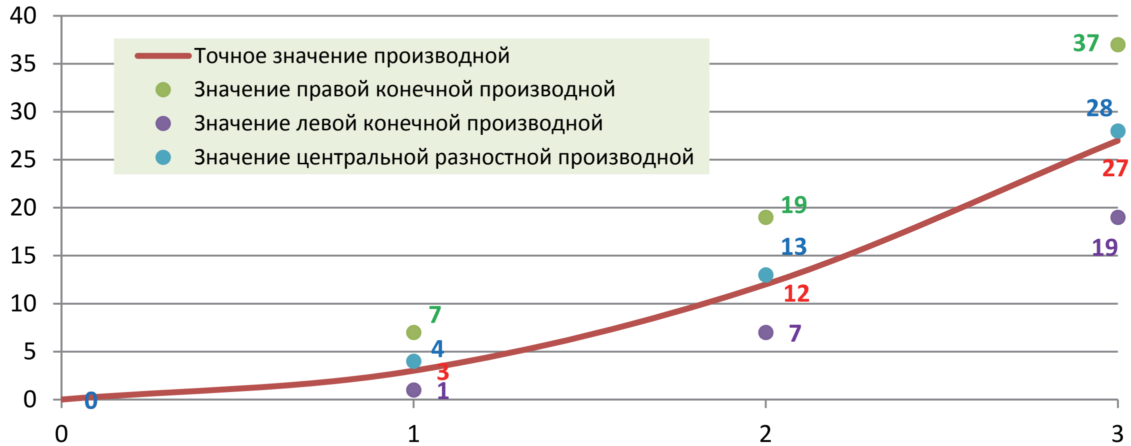
$$y'(x_i) = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{x_{i+1} - x_{i-1}} = \frac{f(x_i + h) - f(x_i - h)}{(x_i + h) - (x_i - h)} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}. \qquad \textbf{(6.5)}$$

При $h \to 0$, выражения (6.3), (6.4), (6.5) стремятся к точному значению производной в заданной точке.

Пример. Пусть задана функция $y = x^3$. Известно, что ее производная равна $y' = 3x^2$.

Предположим, что данная функция задана таблично (шаг $h = 1$)

x_i	0	1	2	3	4
y_i	0	1	8	27	64



Таким образом, по таблице, содержащей 5 узлов, мы смогли найти производные первого порядка только для 3 точек. Для крайних узлов значения производных с помощью описанных выше методов невозможно.

$$y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \qquad \textbf{(6.3)}$$

Аналогично находятся и производные более высших порядков. Так, вторая производная может быть определена по формуле:

$$y_i'' = \frac{y_{i+1}' - y_i'}{h} = \frac{\dfrac{y_{i+1} - y_i}{h} - \dfrac{y_i - y_{i-1}}{h}}{h} = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}. \qquad \textbf{(6.6)}$$

Увеличение порядка производной (выше второго) при численном дифференцировании потребует увеличения количества узлов интерполяции.

6.1.2. Погрешности аппроксимации производной

Оценку погрешности можно производить с помощью разложения функции в ряд Тейлора.

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

Запишем значения функции в точке x_i в соответствии с рядом Тейлора:

а) для точки x_{i-1}: $\Delta x = x_{i-1} - x_i = -h$.

$$y_{i-1} = y_i - hy_i' + \frac{h^2}{2!} y_i'' - \frac{h^3}{3!} y_i''' + \ldots, \qquad \textbf{(6.7)}$$

б) для точки x_{i+1}: $\Delta x = x_{i+1} - x_i = h$

$$y_{i+1} = y_i + hy_i' + \frac{h^2}{2!} y_i'' + \frac{h^3}{3!} y_i''' + \ldots \qquad \textbf{(6.8)}$$

$$y_{i-1} = y_i - hy_i' + \frac{h^2}{2!} y_i'' - \frac{h^3}{3!} y_i''' + \ldots \quad \textbf{(6.7)}$$

$$y_{i+1} = y_i + hy_i' + \frac{h^2}{2!} y_i'' + \frac{h^3}{3!} y_i''' + \ldots \quad \textbf{(6.8)}$$

Из уравнения (6.7) и (6.8) находим первые производные

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

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

где $O(h^2)$ – остаточный член ряда Тейлора; $O(h)$ – погрешность аппроксимации первого порядка точности.

Из формулы (6.8) вычтем (6.7) и выразим y_i':

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + \frac{2h^3}{2h3!} y_i'' + \ldots = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2).$$

Погрешность пропорциональная квадрату шага.

Теперь сложим формулы (6.7) и (6.8) и выразим y_i'':

$$y_{i-1} = y_i - hy_i' + \frac{h^2}{2!} y_i'' - \frac{h^3}{3!} y_i''' + \ldots \qquad \textbf{(6.7)}$$

$$y_{i+1} = y_i + hy_i' + \frac{h^2}{2!} y_i'' + \frac{h^3}{3!} y_i''' + \ldots \qquad \textbf{(6.8)}$$

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

Погрешность пропорциональная квадрату шага.

Кроме погрешностей усечения имеет место погрешность округления, которая возрастает с уменьшением шага *h*. Поэтому суммарная погрешность аппроксимации производной может убывать при уменьшении шага лишь до некоторого предела, после – точность не повышается.

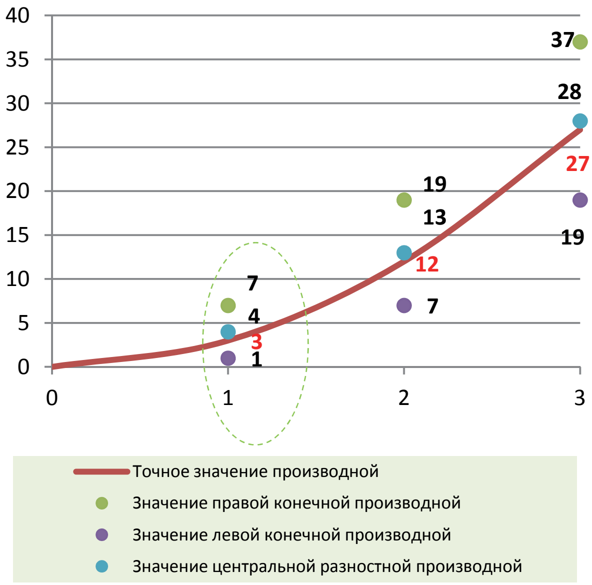
Пример. Пусть задана функция $y = x^3$. Известно, что ее производная равна $y' = 3x^2$.

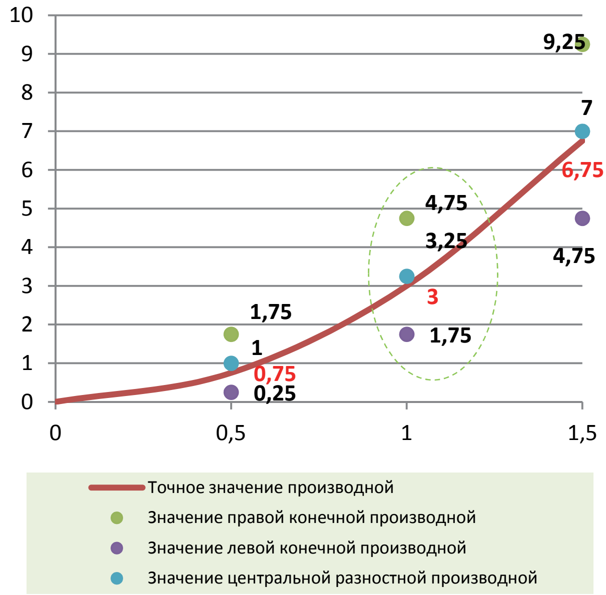
С шагом $h = 1$

x_i	0	1	2	3	4
y_i	0	1	8	27	64

С шагом $h = 0,5$

x_i	0	0,5	1	1,5	2
y_i	0	0,125	1	3,375	8





6.1.3. Метод неопределенных коэффициентов

Согласно методу неопределенных коэффициентов, производную функции k-го порядка в точке x_i можно представить в виде линейной комбинации значений функции $f(x)$: $y_0, y_1, ..., y_n$ в узлах интерполяции $x_0, x_1, ..., x_n$:

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{i=0}^{n} c_i y_i \qquad \mathbf{(6.9)}$$

Коэффициенты c_i формулы (6.9) выбирается из условия, чтобы формула была точна для многочленов максимально высокой степени.

Пусть

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{i=0}^{n} c_i y_i \qquad \textbf{(6.9)}$$

$$f(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j$$

и потребуем, чтобы для такого многочлена соотношение (6.9) обратилось в равенство в точке x_0

$$\left.\sum_{j=0}^{m} a_j \left(x^j\right)^{(k)}\right|_{x_0} = \sum_{i=0}^{n} c_i \left(\sum_{j=0}^{m} a_j x^j\right).$$

Для выполнения данного равенства для любого многочлена степени m необходимо и достаточно, чтобы коэффициенты при a_j в правой и левой частях были равны.

Поскольку

$$\sum_{j=0}^{m} a_j \left(x^j\right)^{(k)}\Big|_{x_0} = \sum_{i=0}^{n} c_i \left(\sum_{j=0}^{m} a_j x^j\right)$$

$$\left(x^j\right)^{(k)} = j(j-1)\ldots(j-k-1)x^{j-k},$$

то получаем линейную систему уравнений

$$j(j-1)\ldots(j-k-1)x_0^{\,j-k} = \sum_{i=0}^{n} c_i x_i^j, \quad j = 0,1,\ldots,m, \qquad \textbf{(6.10)}$$

относительно неизвестных c_i.

Если $m = n$, то число уравнений равно числу неизвестных.

Определитель системы коэффициентов при неизвестных c_i является определителем Вандермонда:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \ldots & x_2^n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{bmatrix},$$

который, как известно, в нетривиальном варианте отличен от нуля.

Таким образом, всегда можно построить формулу численного дифференцирования с k узлами, точную для многочленов (k – 1)-й степени.

Пример

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{i=0}^{n} c_i y_i \qquad \textbf{(6.9)}$$

Найти выражение для производной $f'(x_1)$ в случае четырех равноотстоящих узлов ($n = 3$). Степень многочлена следовательно равна 3.

Из (6.9) получаем

$$f'(x) = c_0 y_0 + c_1 y_1 + c_2 y_2 + c_3 y_3 \qquad \textbf{(1*)}$$

Используем следующие многочлены степеней 0, 1, 2 и 3, соответственно:

$$y = 1,\ \ y = x - x_0,\ \ y - (x - x_0)^2,\ \ y = (x - x_0)^3 \qquad \textbf{(2*)}$$

Вычислим их производные:

$$y' = 0,\ \ y' = 1,\ \ y' = 2(x - x_0),\ \ y' = 3(x - x_0)^2. \qquad \textbf{(3*)}$$

Подставляем последовательно соотношения (2*) и (3*), соответственно, в правую и левую части равенства (1*) при $x = x_1$:

$$f'(x) = c_0 y_0 + c_1 y_1 + c_2 y_2 + c_3 y_3 \qquad \textbf{(1*)}$$

$$y = 1,\ y = x - x_0,\ y - (x - x_0)^2,\ y = (x - x_0)^3 \qquad \textbf{(2*)}$$

$$y' = 0,\ y' = 1,\ y' = 2(x - x_0),\ y' = 3(x - x_0)^2. \qquad \textbf{(3*)}$$

$$\begin{aligned}
0 &= c_0 \cdot 1 + c_1 \cdot 1 + c_2 \cdot 1 + c_3 \cdot 1,\\
1 &= c_0 \cdot (x_0 - x_0) + c_1 \cdot (x_1 - x_0) + c_2 \cdot (x_2 - x_0) + c_3 \cdot (x_3 - x_0),\\
2 \cdot (x_1 - x_0) &= c_0 \cdot (x_0 - x_0)^2 + c_1 \cdot (x_1 - x_0)^2 + c_2 \cdot (x_2 - x_0)^2 + c_3 \cdot (x_3 - x_0)^2,\\
3 \cdot (x_1 - x_0)^2 &= c_0 \cdot (x_0 - x_0)^3 + c_1 \cdot (x_1 - x_0)^3 + c_2 \cdot (x_2 - x_0)^3 + c_3 \cdot (x_3 - x_0)^3.
\end{aligned}$$

Получаем окончательно систему уравнений в виде:

$$\begin{aligned}
&c_0 + c_1 + c_2 + c_3 = 0,\\
&hc_1 + 2hc_2 + 3hc_3 = 1,\\
&hc_1 + 4hc_2 + 9hc_3 = 2,\\
&hc_1 + 8hc_2 + 27hc_3 = 3.
\end{aligned}$$

Решая эту систему, получаем:

$$c_0 = -\frac{1}{3h},\ c_1 = -\frac{1}{2h},\ c_2 = \frac{1}{h},\ c_0 = -\frac{1}{6h}.$$

Подставляя эти значения в равенство (1), находим выражение для вычисления производной в точке x_1:

$$f'(x_1) = \frac{1}{6h}(-2y_0 - 3y_1 + 6y_2 - y_3).$$

Пример. Пусть задана функция $y = x^3$. Известно, что ее производная равна $y' = 3x^2$.

$$f'(x_1) = \frac{1}{6h}(-2y_0 - 3y_1 + 6y_2 - y_3).$$

Вычислим с помощью полученной формулы значение производной y' в точке $x_1 = 1$. Зададим табличный вариант функции с шагом $h = 1$.

x_i	**0**	**1**	**2**	**3**
y_i	**0**	**1**	**8**	**27**

$$y'(x_1) = f'(x_1) = \frac{1}{6}(-2 \cdot 0 - 3 \cdot 1 + 6 \cdot 8 - 27) = 3$$

6.1.4. Формулы численного дифференцирования, полученные на основе интерполяционных формул

Использование полинома Ньютона

Пусть на отрезке $[a, b]$ в равноотстоящих точках x_i $(i=\overline{0,n})$ заданы значения функции $f(x)$: $y_i = f(x_i)$.

Значения аргументов функции x_i	x_0	x_1	x_2	…	x_{n-1}	x_n
Значения функции $f(x)$ *в точках* x_i	y_0	y_1	y_2		y_{n-1}	y_n

Для нахождения на $[a, b]$ производных y', y'' и т.д. функцию y приближенно заменим интерполяционным полиномом Ньютона, построенным для системы узлов $x_0, x_1, ..., x_k$ $(k \le n)$.

Интерполяционный полином Ньютона (в случае интерполяции вперед) имеет вид:

$$N(x_0 + th) = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0 +$$

$$+\frac{t(t-1)(t-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{t(t-1)(t-2)(t-3)}{4!}\Delta^4 y_0 + \ldots =$$

$$= y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t^2 - t}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{t^3 - 3t^2 + 2t}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{t^4 - 6t^3 + 11t^2 - 6t}{4!}\Delta^4 y_0 + \ldots$$

где

$$\frac{x - x_0}{h} = t, \text{ т.е. } x = x_0 + ht, \; h = x_i - x_{i-1} = \text{const}.$$

Так как

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dt}\frac{dt}{dx} = \frac{1}{h}\frac{dy}{dt},$$

$$N(x_0 + th) = y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t^2 - t}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{t^3 - 3t^2 + 2t}{6}\Delta^3 y_0 + \\ + \frac{t^4 - 6t^3 + 11t^2 - 6t}{4!}\Delta^4 y_0 + \ldots$$

то

$$y'(x) \approx N'(x) =$$

$$= \left[y_0 + t\Delta y_0 + \frac{t^2 - t}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{t^3 - 3t^2 + 2t}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{t^4 - 6t^3 + 11t^2 - 6t}{4!}\Delta^4 y_0 + \ldots \right]' =$$

$$= \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 + \frac{2t - 1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2 - 6t + 2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{2t^3 - 9t^2 + 11t - 3}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots \right].$$

$$y'(x) = \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 + \frac{2t - 1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2 - 6t + 2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{2t^3 - 9t^2 + 11t - 3}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots \right].$$

$$y'(x)=\frac{1}{h}\left[\Delta y_0+\frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0+\frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0+\frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0+\ldots\right]$$

Так как

$$y''(x)=\frac{d(y')}{dx}=\frac{d(y')}{dt}\frac{dt}{dx}=\frac{1}{h}\frac{d(y')}{dt},$$

Получаем, что

$$y''(x)=\frac{1}{h^2}\left[\Delta^2 y_0+(t-1)\Delta^3 y_0+\frac{6t^2-18t+11}{12}\Delta^4 y_0+\ldots\right].$$

Таким же способом в случае необходимости можно вычислить и производные функции $y(x)$ любого порядка.

Замечание: При нахождении производных $y'(x), y''(x), \ldots$ в фиксированной точке x в качестве x_0 следует выбрать ближайшее табличное значение аргумента.

Иногда требуется находить производные функции y в основных табличных точках x_i.

$$y'(x) = \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right]$$

$$y''(x) = \frac{1}{h^2}\left[\Delta^2 y_0 + (t-1)\Delta^3 y_0 + \frac{6t^2-18t+11}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right]$$

В этом случае формулы численного дифференцирования упрощаются.

Так как любое табличное значение аргумента таблично заданной функции $y(x)$ можно считать начальным, положим $x = x_0$, $t = 0$.

Тогда значение первой и второй производной в узловой точке x_0 можно вычислить по формуле:

$$y'(x_0) = \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \frac{\Delta^5 y_0}{5} - \ldots\right)$$

и

$$y''(x_0) = \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12}\Delta^4 y_0 - \frac{5}{6}\Delta^5 y_0 + \ldots\right).$$

Пример. Пусть задана функция $y = x^3$. Известно, что ее производная равна $y' = 3x^2$.

$$y'(x) = \frac{1}{h}\left[\Delta y_0 + \frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0 + \ldots\right]$$

$$\frac{x-x_0}{h} = t$$

Предположим, что данная функция задана таблично (шаг $h = 1$)

x_i	**0**	**1**	**2**	**3**
y_i	**0**	**1**	**8**	**27**

Вычислим с помощью формулы Ньютона значение производной y' в точке $x = 1,5$.

Вычислим конечные разности

$$y'(x)=\frac{1}{h}\left[\Delta y_0+\frac{2t-1}{2}\Delta^2 y_0+\frac{3t^2-6t+2}{6}\Delta^3 y_0+\frac{2t^3-9t^2+11t-3}{12}\Delta^4 y_0+\ldots\right]$$

$$\frac{x-x_0}{h}=t\,;\quad \Delta^k y_i=y_{i+k}-ky_{i+k-1}+\frac{k(k-1)}{2!}y_{i+k-2}-\ldots+(-1)^k y_i$$

	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
$i=0$	0	1	6	6	0
$i=1$	1	7	12	6	
$i=2$	8	19	18		
$i=3$	27	37			
$i=4$	64				

При $x = 1{,}5$ с учетом того, что шаг сетки h равен 1, получим: $t = 1{,}5$. Отсюда

$$y'(1{,}5)=\frac{1}{1}\left(1+\frac{2\cdot 1{,}5-1}{2}\cdot 6+\frac{3\cdot 1{,}5^2-6\cdot 1{,}5+2}{6}\cdot 6+\right.$$

$$\left.+\frac{2\cdot 1{,}5^3-9\cdot 1{,}5^2+11\cdot 1{,}5-3}{12}\cdot 0\right)=6{,}75.$$

Погрешность метода

Если $N_k(x)$ – интерполяционный полином Ньютона, содержащий разности $\Delta y, \Delta^2 y, ..., \Delta^k y$, и $R_k(x) = y - N_k(x)$ – соответствующая погрешность, то погрешность в определении производной есть

$$R'_k(x) = y'(x) - P'_k(x).$$

Как известно,

$$R'_k(x) = h^{k+1} \frac{t(t-1)...(t-k)}{(k+1)!} y^{(k+1)}(\xi),$$

где ξ – некоторое промежуточное число между значениями $x_0, x_1, ..., x_n, x$. Поэтому, предполагая, что $y(x)$ – имеет непрерывные производные до (k+2)-го порядка на [a, b], получим:

$$R'_k(x) = \frac{dR_k}{dt}\frac{dt}{dx} = \frac{h^k}{(k+1)!}\left\{ y^{(k+1)}(\xi)\frac{d}{dt}[t(t-1)...(t-k)] + t(t-1)...(t-k)\frac{d}{dt}[y^{(k+1)}(\xi)] \right\}.$$

Предлагая, далее, $\dfrac{d}{dt}[y^{(k+1)}(\xi)]$ ограниченной, и учитывая, что $\dfrac{d}{dt}[t(t-1)...(t-k)]\Big|_{t=0} = (-1)^k k!$ отсюда при $x = x_0$ и, следовательно, при $t = 0$, будем иметь:

$$R_k'(x_0) = (-1)^k \frac{h^k}{k+1} y^{(k+1)}(\xi).$$

Аналогично может быть найдена погрешность $R_k''(x_0)$ для второй производной $y''(x_0)$.

Использование полинома Лагранжа

Пусть на отрезке $[a, b]$ в равноотстоящих точках $x_i \quad (i = \overline{0, n})$ заданы значения функции $f(x)$: $y_i = f(x_i)$.

Значения аргументов функции x_i	x_0	x_1	x_2	…	x_{n-1}	x_n
Значения функции $f(x)$ в точках x_i	y_0	y_1	y_2		y_{n-1}	y_n

Шаг интерполирования имеет значение $h = \dfrac{(b-a)}{n}$, а интерполяционный многочлен Лагранжа строится на равностоящих узлах и имеет более удобный вид.

Интерполяционная формула Лагранжа имеет вид:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \frac{w(x)}{(x-x_i)w'(x_i)}, \qquad (*)$$

где

$$w_{\overline{0,n}}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n),$$

$$w'(x_i) = (x_i - x_0)(x_i - x_1)\dots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})...(x_i - x_n)$$

Введем следующее обозначение:

$$\frac{x-x_0}{h} = t. \qquad \textbf{(6.11)}$$

Получим новые выражения для $w(x)$.

С учетом формулу (6.11) получим

$$x - x_0 = ht;$$

$$x - x_1 = x - x_0 - h = h(t-1)$$

$$\frac{x - x_0}{h} = t. \qquad \textbf{(6.11)}$$

$$w_{\overline{0,n}}(x) = (x - x_0)(x - x_1)\ldots(x - x_n)$$

и так далее, то есть в общем случае

$$x - x_i = x - x_0 - ih = h(t-i), \quad i = \overline{0,n}.$$

Тогда получим

$$w_{\overline{0,n}}(n) = h^{n+1} t(t-1)(t-2)\ldots(t-n),$$

или

$$w_{\overline{0,n}}(n) = h^{n+1} t^{[n+1]}, \qquad \textbf{(6.12)}$$

где

$$t^{[n+1]} = t(t-1)(t-2)\ldots(t-n).$$

Имеют место также следующие соотношения:

$$w'(x_i) = (x_i - x_0)(x_i - x_1)\ldots(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})\ldots(x_i - x_n)$$

$$\begin{aligned} & x_i - x_0 = hi; \\ & x_i - x_1 = x_i - x_0 - h = h(i-1); \\ & \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ & x_i - x_n = x_i - x_0 - nh = h(i-n) \end{aligned} \qquad \textbf{(6.13)}$$

Тогда для $w'(x_i)$ получаем:

$$w'(x_i) = \underbrace{hi \cdot h(i-1) \cdot \ldots \cdot h}_{i \text{ множителей}} \cdot \underbrace{(-1)h \cdot \ldots (i-n)h}_{n-i \text{ множителей}} = h^n i!(n-i)!(-1)^{n-i}. \qquad \textbf{(6.14)}$$

С учетом представлений (6.12) и (6.14) формула Лагранжа (*) для равностоящих узлов принимает вид

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i \frac{(-1)^{n-i} t^{[n+1]}}{i!(n-i)!(t-i)} \qquad \textbf{(6.15)}$$

Тогда для производной этой функции имеем:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \frac{w(x)}{(x-x_i)w'(x_i)} \qquad \textbf{(*)}$$

$$w_{\overline{0,n}}(n) = h^{n+1} t^{[n+1]} \qquad \textbf{(6.12)}$$

$$t^{[n+1]} = t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)$$

$$w'(x_i) = h^n i!(n-i)!(-1)^{n-i} \qquad \textbf{(6.14)}$$

$$x - x_i = h(t-i), \qquad i = \overline{0,n}$$

$$\frac{x-x_0}{h} = t. \qquad \textbf{(6.11)}$$

$$f'(x) \approx \frac{dL_n(x)}{dt}\frac{dt}{dx} = \left(\sum_{i=0}^{n} y_i \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \frac{d}{dt}\left[\frac{t^{[n+1]}}{t-i} \right] \right) \frac{dt}{dx}$$

Тогда с учетом формулы (6.11) получаем, что $\dfrac{dt}{dx}=\dfrac{1}{h}$.

$$f'(x)\approx\frac{dL_n(x)}{dt}\frac{dt}{dx}=\left(\sum_{i=0}^{n}y_i\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!}\frac{d}{dt}\left[\frac{t^{[n+1]}}{t-i}\right]\right)\frac{dt}{dx}$$

$$\frac{x-x_0}{h}=t. \qquad \textbf{(6.11)}$$

Следовательно,

$$f'(x)\approx f'(x_0+th)\approx\frac{1}{h}\sum_{i=0}^{n}y_i\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!}\frac{d}{dt}\left[\frac{t^{[n+1]}}{t-i}\right] \qquad \textbf{(6.16)}$$

Пользуясь полученной формулой, можно вычислить приближенные значения производной функции $f(x)$, если она задана на отрезке $[a,b]$ значениями в равностоящих узлах $a=x_0<x_1<\ldots<x_n=b$ (параметр t пробегает значения от 1 до n).

Аналогично могут быть найдены производные функции $f(x)$ высших порядков.

Пример. Пусть задана функция $y = x^3$. Известно, что ее производная равна
$y' = 3x^2$.

$$f'(x) \approx f'(x_0 + th) \approx \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{n} y_i \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \frac{d}{dt} \left[\frac{t^{[n+1]}}{t-i} \right]$$

$$\frac{x - x_0}{h} = t; \qquad t^{[n+1]} = t(t-1)(t-2)\ldots(t-n)$$

Предположим, что данная функция задана таблично (шаг $h = 1$)

x_i	**0**	**1**	**2**	**3**
y_i	**0**	**1**	**8**	**27**

Вычислим с помощью формулы Ньютона значение производной y' в точке $x = 1{,}5$. На заданной сеточной функции ($n = 3$, $h = 1$) формула для производной примет вид:

$$f'(x) \approx f'(x_0 + th) \approx \frac{1}{h}\sum_{i=0}^{n} y_i \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!}\frac{d}{dt}\left[\frac{t^{[n+1]}}{t-i}\right]$$

$$n = 3,\ h = 1,\ x_0 = 0,\ y_0 = 0,\ y_1 = 1,\ y_2 = 8,\ y_3 = 27$$

$$t^{[4]} = t(t-1)(t-2)(t-3)$$

$$t = \frac{x - x_0}{h} = \frac{1{,}5 - 0}{1} = 1{,}5$$

$$f'(x) = \sum_{i=0}^{3} y_i \frac{(-1)^{3-i}}{i!\,(3-i)!}\frac{d}{dt}\left[\frac{t^{[4]}}{(t-i)}\right] =$$

$$= \sum_{i=0}^{3} y_i \frac{(-1)^{3-i}}{i!\,(3-i)!}\frac{d}{dt}\left[\frac{t(t-1)(t-2)(t-3)}{(t-i)}\right] =$$

$$= \frac{(-1)^3 y_0}{0!\,3!}[(t-1)(t-2)(t-3)]'_t + \frac{(-1)^2 y_1}{1!\,2!}[t(t-2)(t-3)]'_t + \frac{(-1)^1 y_2}{2!\,1!}[t(t-1)(t-3)]'_t +$$

$$+ \frac{(-1)^0 y_3}{3!\,0!}[t(t-1)(t-2)]'_t = -\frac{y_0}{27}[(t-2)(t-3) + (t-1)(t-3) + (t-1)(t-2)] +$$

$$+ \frac{y_1}{2}[(t-2)(t-3) + t(t-3) + t(t-2)] - \frac{y_2}{2}[(t-1)(t-3) + t(t-3) + t(t-1)] +$$

$$+ \frac{y_3}{27}[(t-1)(t-2) + t(t-2) + t(t-1)] =$$

$$= -\frac{y_0}{6}[3t^2 - 12t + 11] + \frac{y_1}{2}[3t^2 - 10t + 6] - \frac{y_2}{2}[3t^2 - 8t + 3] + \frac{y_3}{6}[3t^2 - 6t + 2] =$$

$$= -\frac{0}{6}[3 \cdot 1{,}5^2 - 12 \cdot 1{,}5 + 11] + \frac{1}{2}[3 \cdot 1{,}5^2 - 10 \cdot 1{,}5 + 6] - \frac{8}{2}[3 \cdot 1{,}5^2 - 8 \cdot 1{,}5 + 3] +$$

$$+ \frac{27}{6}[3 \cdot 1{,}5^2 - 6 \cdot 1{,}5 + 2] = 0 - 1{,}125 + 9 - 1{,}125 -= 6{,}75.$$

Погрешность метода

Если известно аналитическое выражение функции $f(x)$, то формулу для погрешности численного дифференцирования можно при этом же условии получить на основе формулы погрешности интерполирования

$$R_n(x) = f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\,\omega_{\overline{0,n}}(x), \qquad \textbf{(6.17)}$$

где $\xi = \xi(x)$ – значение из отрезка $[a,b]$, отличное от узлов и x

Допуская, что $f(x)$ дифференцируема $n+1$ раз, имеем:

$$r_n(x) = R_n'(x) = \frac{1}{(n+1)!}\left\{ f^{(n+1)}(\xi)\cdot\omega_{\overline{0,n}}'(x)\frac{d}{dx}\left[f^{(n+1)}(\xi)\right]\right\} \qquad \textbf{(6.18)}$$

Формула (6.18) значительно упрощается, если оценка находится для значения производной $f(x)$ в узле x_i таблицы. В этом случае, с учетом формулы (6.14), получаем

$$r_n(x) = R_n'(x) = \frac{1}{(n+1)!}\left\{ f^{(n+1)}(\xi)\cdot \omega'_{\overline{0,n}}(x)\frac{d}{dx}\left[f^{(n+1)}(\xi)\right]\right\} \qquad \textbf{(6.18)}$$

$$w'(x_i) = h^n i!(n-i)!(-1)^{n-i} \qquad \textbf{(6.14)}$$

$$r_n(x_i) = R_n'(x_i) = (-1)^{n-i} h^n \frac{i!(n-i)!}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi), \qquad \textbf{(6.19)}$$

где ξ – промежуточное значение между $x_0, x_1, \ldots x_n$. Обозначив $M_{n+1} = \max\left|f^{(n+1)}(x)\right|$, получим верхнюю оценку абсолютной ошибки численного дифференцирования в узлах:

$$\left|r_n(x)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} h^n i!(n-i)! \qquad \textbf{(6.10)}$$