Вычисление производных (численное дифференцирование)

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?

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.

Оценка погрешности и точности вычисления не менее серьезный и сложный процесс, чем само приближенное вычисление.

Так для оценки погрешности дифференцирования могут быть применены следующие формулы:

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

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. Впрочем, читатель может предложить другие способы изменения промежутка dx, когда значительно быстрее достигается вычисление производной с заданной степенью точности

{ Вычисление 1-й производной и опред. точности ее вычислен.}

{ derivative - производная }

```
Function derivat1(x0, eps : real) : real;
    var
      dx, dy, dy2 : real;
    begin
       dx := 1;
       repeat
         dx := dx/2;
         dy := fx(x0 + dx/2) - fx(x0 - dx/2);
         dy2 := fx(5*x0/4 + dx) - 2*fx(5*x0/4);
         dy2 := dy2 + fx(5*x0/4 - dx)
      until abs(dy2/(2*dx)) < eps;
     derivat1 := dy/dx

    end;
```

Здесь, для определения точности вычисления, используется вторая производная в точке

$$c = 5 \cdot \frac{x_0}{4};$$

*dy2 := fx(5*x0/4 + dx) - 2*fx(5*x0/4) + fx(5*x0/4 - dx);*

Запись ее вычисления выполнена в две строки только из-за лучшей наглядности написания программы.

Возможен и другой вариант написания функции с использованием формулы (3) для оценки точности вычисления.

Тогда функция запишется так:

*{**Вычисление** 1-**й производной и опред**. **точности ее вычислен**.}*
*{ derivative - **производная** }*

```
Function derivat1(x0, eps : real) : real;
   var
     dx, dy, dy2 : real;
   begin
      dx := 1;
      repeat
        dx := dx/2;
        dy := fx(x0 + dx/2) - fx(x0 - dx/2);
        dy2 := fx(5*x0/4 + dx) - 2*fx(5*x0/4);
        dy2 := dy2 + fx(5*x0/4 - dx)
      until abs((dy2*dy2*fx(x0))/(2*dx)) < eps;
      derivat1 := dy/dx

   end;
```