



№3

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

## ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

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

Вычисление производной по ее определению

По определению производная функции равна:

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

Переходя от бесконечно малых разностей к конечным, получаем приближенную формулу численного дифференцирования:

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

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

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

Подставив правую часть в  $f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$   
и приведя подобные члены, получим:

$$f'(x) \approx f'(x) + \frac{f''(x)}{2!} \Delta x + \dots$$

Отсюда видно, что все члены, начиная со второго, определяют отличие значения производной от ее точного значения. Так как основной член погрешности  $\sim \Delta x$ , говорят, что приближенная формула имеет первый порядок точности по  $\Delta x$ .

## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Можно вычислять производную, используя симметричную разностную схему:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x}$$

Для оценки точности данной формулы воспользуемся разложением в ряд Тейлора:

$$f'(x) \approx \frac{1}{2\Delta x} \left( f(x) + \frac{f'(x)}{1!} \Delta x + \frac{f''(x)}{2!} (\Delta x)^2 + \frac{f'''(x)}{3!} (\Delta x)^3 + \dots \right) - \frac{1}{2\Delta x} \left( f(x) - \frac{f'(x)}{1!} \Delta x + \frac{f''(x)}{2!} (\Delta x)^2 - \frac{f'''(x)}{3!} (\Delta x)^3 + \dots \right).$$

Раскрыв скобки и приведя подобные члены, получаем:

---

$$f'(x) \approx f'(x) + \frac{f'''(x)}{3!} (\Delta x)^2 + \dots$$

Отсюда видно, что основной член погрешности равен  $\frac{f'''(x)}{3!} (\Delta x)^2$ ; а так как данный член  $\sim (\Delta x)^2$ , говорят, что эта формула имеет второй порядок по  $\Delta x$ .

## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Значение производной в точке  $x_0$  можно получить следующим образом:

1. задаем начальное приращение  $\Delta x$ , например,  $\Delta x = 0,1$ ;
2. вычисляем значение производной в точке  $x_0$  :

$$f_1 := \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x};$$

3. изменяем  $\Delta x = \Delta x / a$ , где  $a$  — некоторое число, большее единицы, как правило,  $a = 10$ .

## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

4. вычисляем значение производной

$$f_2 := \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x};$$

---

5. проверяем условие  $|f_1 - f_2| < \varepsilon$ .

Если условие истинно, то производная  $f'(x_0)$  найдена с требуемой точностью  $\varepsilon$ .

Иначе полагаем  $f_1 := f_2$ ; переходим на №3

Пример

Вычислить производную функции  $f(x) = x^2$  в точке  $x = 2$  с точностью  $\varepsilon = 0,005$ .

---

Решение

Задаем начальное приращение  $\Delta x = 0,1$ .

Вычисляем  $f_1 := \frac{f(x + \Delta) - f(x)}{\Delta} = \frac{2.1^2 - 2^2}{0.1} = 4.1;$

Изменяем приращение  $\Delta x = 0.1 / 10 = 0.01$ .

Вычисляем  $f_2 := \frac{2.01^2 - 2^2}{0.01} = \frac{4.0401 - 4}{0.01} = 4.01;$

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Проверяем условие окончания вычислений:

$$|f_1 - f_2| < 0.005: \quad |4.1 - 4.01| = 0.09 > 0.005.$$

Точность не достигнута, поэтому  $f_1 := 4.01$ .

Изменяем приращение  $\Delta x = 0.01 / 10 = 0.001$ .

Вычисляем  $f_2 := \frac{2.001^2 - 2^2}{0.01} = \frac{4.0401 - 4}{0.01} = 4.001$ ;

Погрешность не достигнута  $|4.01 - 4.001| = 0.009$ ;

$$\Rightarrow f_1 := 4.001; \quad \Delta x = 0.001 / 10 = 0.0001.$$

$$f_2 := \frac{2.0001^2 - 2^2}{0.01} = 4.0001; \quad |4.001 - 4.0001| = 0.0009;$$

$$0.0009 < 0.005, \quad \Rightarrow \quad f'(x) \approx 4.0001$$

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Формула вычисления производной второго  
порядка:

---

$$f''(x) = \frac{d^2 f}{dx^2} \approx$$

$$\frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2}$$

## Формулы численного дифференцирования функции многих переменных

В этом случае все аргументы функции становятся константами, кроме аргумента, по которому проводится дифференцирование.

Пусть дана функция  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , тогда производная по  $x_i$  вычисляется по формуле:

$$\frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} \approx \frac{f(x_1, \dots, x_i + \Delta x_i, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\Delta x_i}$$

Или, используя центральную разность,

---

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_i} &= \\ &= \frac{f(x_1, \dots, x_i + \Delta x_i, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i - \Delta x_i, \dots, x_n)}{2\Delta x_i} \end{aligned}$$

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

## Вычисление частной производной второго порядка

На практике используют также формулы вычисления частных производных высоких порядков. Ниже приведены формулы для случая функции двух переменных  $f(x, y)$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} = \frac{f(x + \Delta x, y) - 2f(x, y) + f(x - \Delta x, y)}{(\Delta x)^2}$$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} = \frac{f(x, y + \Delta y) - 2f(x, y) + f(x, y - \Delta y)}{(\Delta y)^2}$$

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

---

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x \partial y} = [f(x + \Delta x, y + \Delta y) - f(x + \Delta x, y - \Delta y) - f(x - \Delta x, y + \Delta y) + f(x - \Delta x, y - \Delta y)] \cdot \frac{1}{4\Delta x \Delta y}$$

**Конечно-разностные аппроксимации  
производных**

Пусть отрезок  $[a, b]$  разбит на  $n$  ( $\geq 2$ ) частей

точками  $\{x_i\}$ :

$$x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \dots < x_n.$$

Далее, пусть на этом отрезке определена функция  $y_i = f(x_i)$  ( $i = 0, 1, 2, \dots, n$ ). Тогда выражения для первой производной функции в точке  $x_i$  с помощью отношения конечных разностей запишем следующим образом:

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

а) аппроксимация с помощью разностей вперед (правых разностей)

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (i = 0, 1, \dots, n-1);$$

б) аппроксимация с помощью разностей назад (левых разностей)

$$y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad (i = 1, 2, \dots, n);$$

в) аппроксимация с помощью центральных разностей

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \quad (i = 1, \dots, n-1).$$

Приближенное значение производной второго порядка в точке  $x_i$  :

---

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{(x_{i+1} - x_{i-1})^2} \quad (i = 1, 2, \dots, n-1).$$

Погрешность аппроксимации имеет порядок  $O(h^2)$ .

Естественно, что представление с помощью конечных разностей позволяет вычислять значения второй производной только во **внутренних точках** отрезка.



№3

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

---

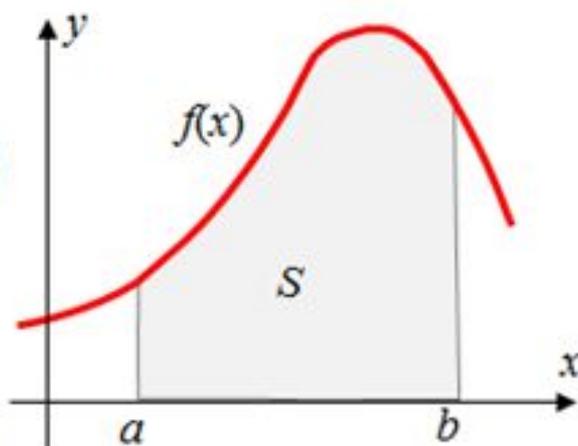
## Численные методы интегрирования

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

В ряде задач возникает необходимость вычисления определенного интеграла от некоторой функции:

$$I = \int_a^b f(x) dx$$

Геометрический смысл интеграла заключается в том, что если  $f(x) > 0$  на отрезке  $[a, b]$ , то интеграл  $\int_a^b f(x) dx$  численно равен площади фигуры, ограниченной графиком функции  $y = f(x)$  отрезком оси абсцисс, прямыми  $x = a$  и  $x = b$ .



## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Численное интегрирование применяется, когда:

- сама подынтегральная функция не задана аналитически, а например, представлена в виде таблицы значений;
- аналитическая запись подынтегральной функции известна, но ее первообразная не выражается через аналитические функции.

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

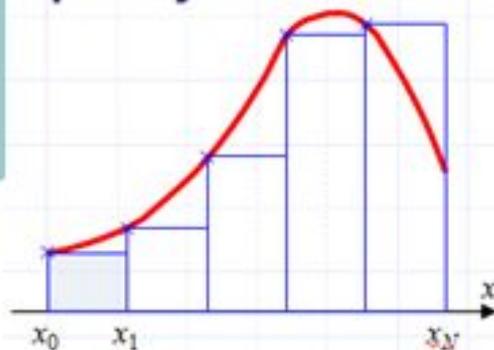
№3

## Метод прямоугольников

Интегрируемый интервал  $[a, b]$  делится на  $N$  равных отрезков длиной  $h = \frac{b-a}{N}$ .

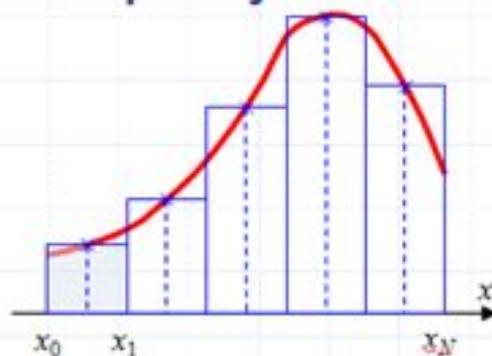
Интеграл вычисляется как сумма площадей вписанных прямоугольников.

Левые  
прямоугольники



$$I \approx \sum_{j=1}^N h \cdot f(x_{j-1})$$

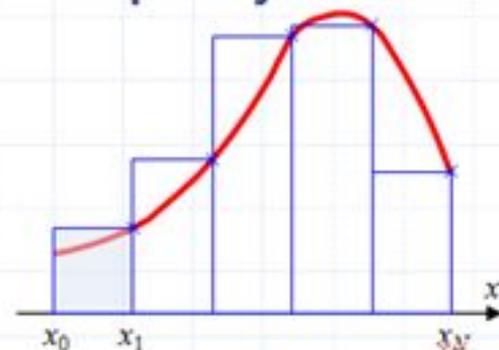
Средние  
прямоугольники



$$I \approx \sum_{j=1}^N f(x_{j-0.5}) \cdot h$$

$$x_{j-0.5} = x_j - 0.5h$$

Правые  
прямоугольники

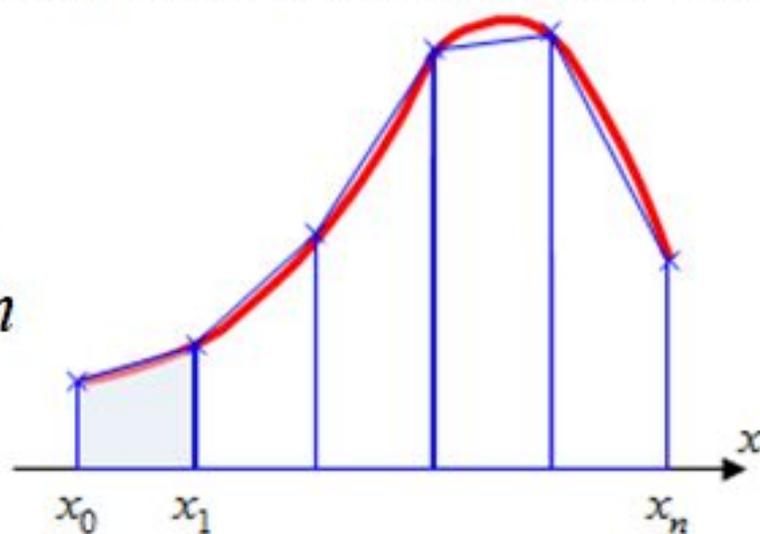


$$I \approx \sum_{j=1}^N h \cdot f(x_j)$$

Метод трапеций

Площадь криволинейной трапеции заменяется площадью многоугольника, составленного из  $N$  трапеций.

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{j=0}^{N-1} \frac{f(x_j) + f(x_{j+1})}{2} h$$



$$\int_a^b f(x) dx \approx h \cdot \sum_{j=1}^N \frac{f(x_{j-1}) + f(x_j)}{2} = h \cdot \left[ \frac{1}{2} (f_0 + f_N) + \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) \right]$$

Метод Симпсона (парабол)

Каждый отрезок аппроксимируется параболой

---

Парабола проходит через три точки: узлы интегрирования  $x_j$  и  $x_{j+1}$  и середину отрезка  $x_{j+0,5}$ .

Площадь параболы на отрезке  $[x_j, x_{j+1}]$

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x) dx \approx \frac{h}{6} (f_j + 4f_{j+0.5} + f_{j+1})$$

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Тогда интеграл функции на отрезке  $[a, b]$ :

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{6} \left[ f_0 + f_N + 2 \cdot \sum_{j=1}^{N-1} f_j + 4 \cdot \sum_{j=1.5}^{N-0.5} f_j \right]$$

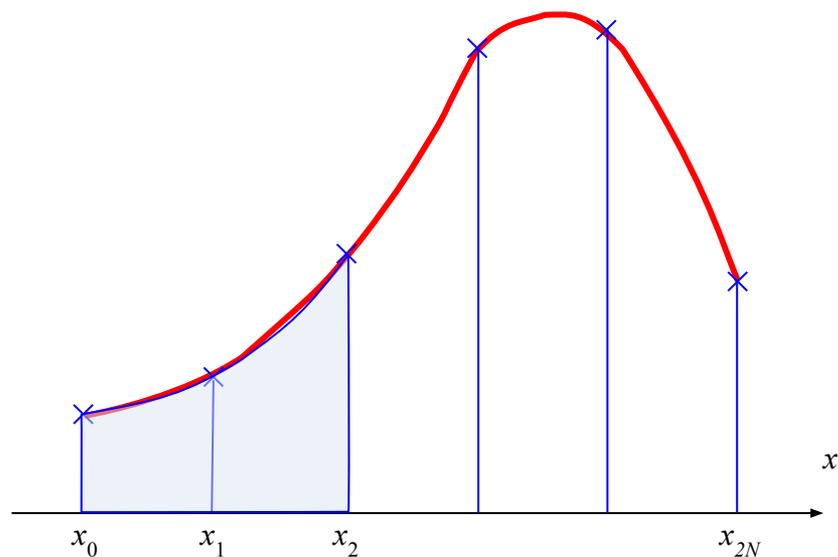
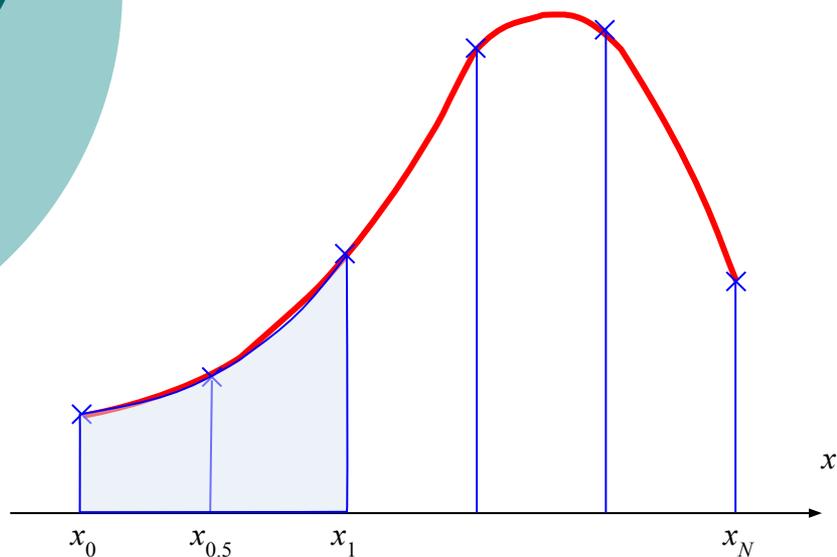
Избавимся от дробных индексов. Разобьем интервал интегрирования на  $N$  равных отрезков. Тогда формула Симпсона имеет вид:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} \left[ f_0 + f_{2N} + 2 \cdot \sum_{j=2,2}^{2N-2} f_j + 4 \cdot \sum_{j=1,2}^{2N-1} f_j \right]$$

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

## Геометрическая интерпретация метода Симпсона

---



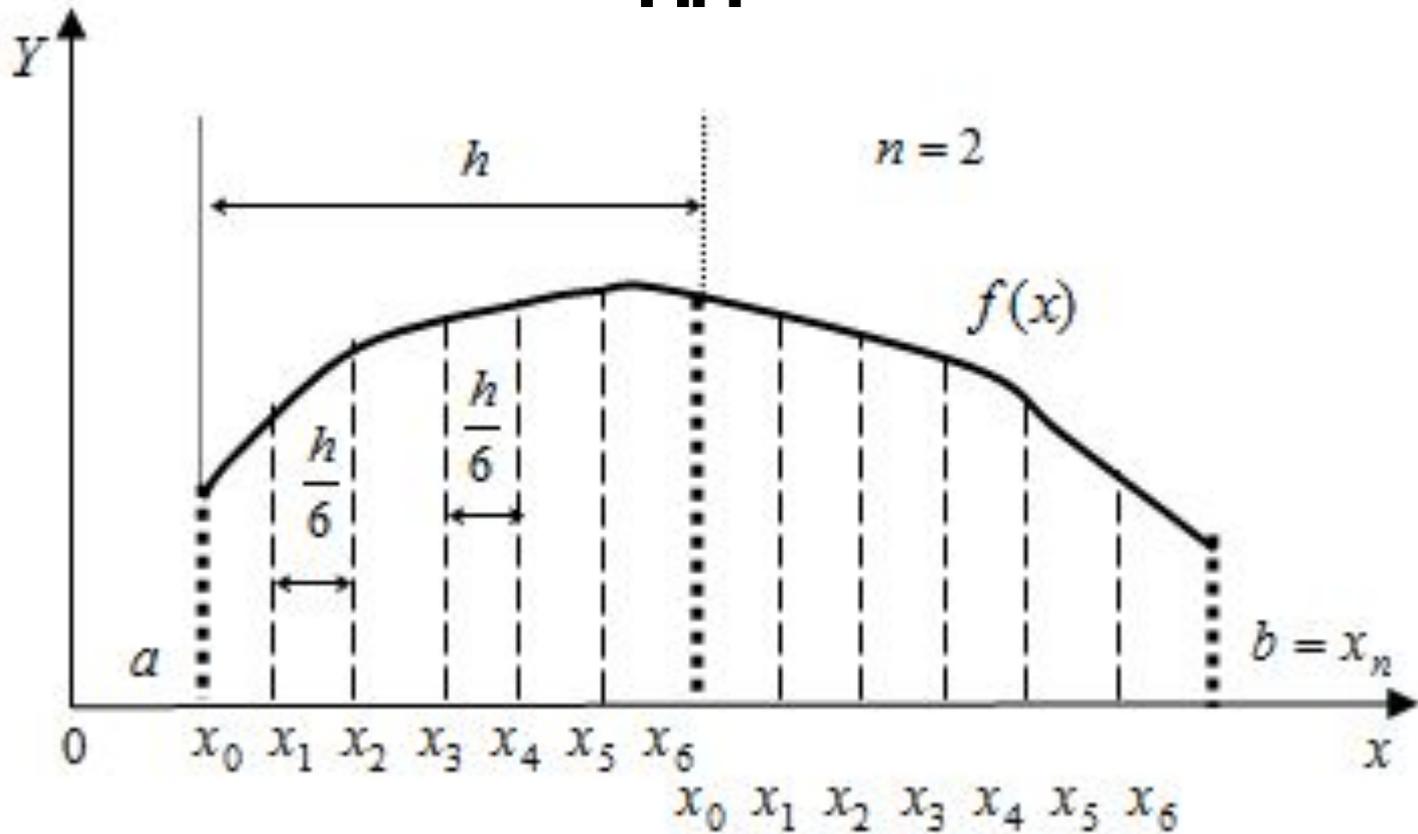
Метод Уэддл

Метод базируется на применении к каждому из  $N$  отрезков разбиения  $[a, b]$  формулы:

$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x) dx \approx \frac{3h}{10} (f(x_0) + 5f(x_1) + f(x_2) + 6f(x_3) + f(x_4) + 5f(x_5) + f(x_6)).$$

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

## Геометрическая интерпретация метода Уэддлля



# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

## Правило Рунге оценивания погрешности формул интегрирования

Вычисляют величину интеграла  $I$  по выбранной формуле при числе интервалов  $n$  и  $2 \cdot n$  (соответственно  $I_n$  и  $I_{2n}$ ).

$\Delta \approx |I_n - I_{2n}|$  — для формул правых и левых прямоугольников;

$\Delta \approx \frac{|I_n - I_{2n}|}{3}$  — для формулы срединных прямоугольников и трапеций;

# ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

$$\Delta \approx \frac{|I_n - I_{2n}|}{15} \quad \text{— для формулы Симпсона;}$$

---

$$\Delta \approx \frac{|I_n - I_{2n}|}{63} \quad \text{— для формулы Уэддл.$$

Если  $\Delta \geq \varepsilon$ , количество интервалов разбиения увеличивают вдвое, т.е. значения интеграла вычисляются для последовательных значений  $n = n, 2n, 4n \dots$ . Вычисления заканчиваются при выполнении условия  $\Delta < \varepsilon$ .

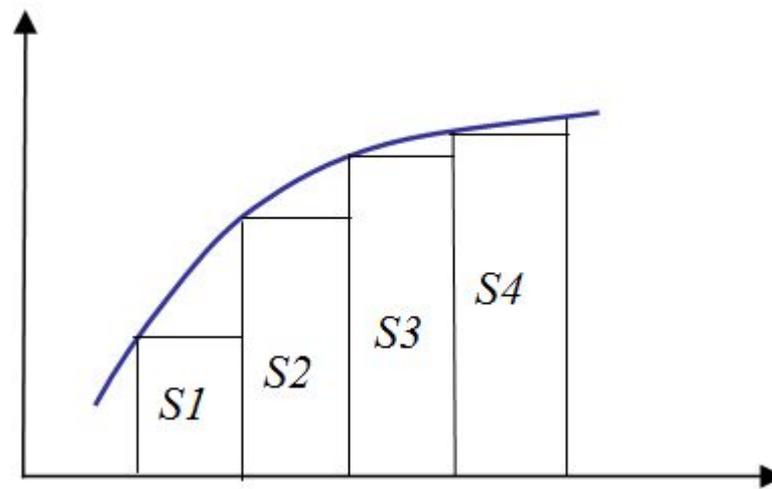
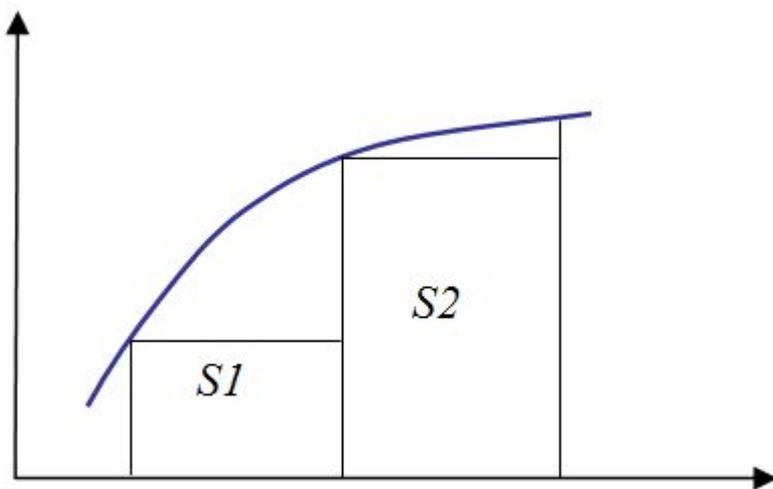


Иллюстрация повышения точности  
вычисления  
интеграла методом левых  
прямоугольников  
при удвоении числа разбиений.