2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

doi 10.26089/NumMet.v26r211 УДК 519.6

О вычислении высших производных аналитических функций

А. Н. Громов
Московский государственный институт международных отношений
Министерства иностранных дел Российской Федерации, Одинцовский филиал,
факультет финансовой экономики, Одинцово, Российская Федерация
ORCID: 0000-0002-7575-8452, e-mail: a.gromov@odin.mgimo.ru

Аннотация: С помощью интегральной формулы Коши найдено представление производной аналитической функции в виде дискретного преобразования Фурье с остаточным членом. Дана оценка остаточного члена. Рассмотрен пример совместного использования полученной формулы и стандартной компьютерной программы, в которой реализован алгоритм быстрого преобразования Фурье, для различного числа дискретных отсчетов.

Ключевые слова: аналитическая функция, производная высшего порядка, интегральная формула Коши, дискретное преобразование Фурье, быстрое преобразование Фурье, интерполяционный многочлен Лагранжа, остаточный член интерполяционной формулы.

Для цитирования: Громов А.Н. О вычислении высших производных аналитических функций // Вычислительные методы и программирование. 2025. **26**, № 2. 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211.

On the computation of higher derivatives of analytic functions

Anatoliy N. Gromov
Moscow State Institute of International Relations at Odintsovo,
Faculty of Financial Economics, Odintsovo, Moscow Region, Russia
ORCID: 0000-0002-7575-8452, e-mail: a.gromov@odin.mgimo.ru

Abstract: The representation of the derivative of an analytic function as a discrete Fourier transform with a residual term is found using the Cauchy integral formula. The estimation of the residual term is given. An example of joint use of the obtained formula and a standard computer program, in which the algorithm of fast Fourier transform is implemented, for different number of discrete samples is considered.

Keywords: analytic function, higher-order derivative, Cauchy integral formula, discrete Fourier transform, fast Fourier transform, interpolation Lagrange polynomial, residual term of the interpolation formula.

For citation: A. N. Gromov, “On the computation of higher derivatives of analytic functions,” Numerical Methods and Programming. **26** (2), 150–159 (2025). doi 10.26089/NumMet.v26r211.

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

1. Переход от интегральной формулы Коши к дискретному преобразованию Фурье. Работы [1–5] показывают, что вопросы дифференцирования функций остаются актуальными.

Имеются задачи [6, 7], при решении которых требуется вычислять значения высших производных. Получить аналитические выражения для высших производных функции $y(z)$ путем ее последовательного дифференцирования бывает невозможно из-за лавинообразного нарастания громоздкости выражений.

Пусть $y(z)$ — функция, аналитическая в области G, z^0 — какая-либо точка этой области. В основе данной работы лежит идея, изложенная в [8], когда для вычисления $y^{(s)}\left(z^0\right)$ используется известное [9] интегральное представление

$$y^{(s)}\left(z^0\right) = \frac{s!}{2\pi i}\int\limits_{\gamma_r} \frac{y\left(z\right)}{\left(z - z^0\right)^{s+1}}\, dz. \tag{1}$$

Здесь γ_r — окружность с центром в точке z^0 такого радиуса r, что точки круга $\left|z - z^0\right| \leqslant r$ принадлежат области G.

Уравнение кривой интегрирования γ_r:

$$z = z^0 + r\eta, \quad \eta = e^{i\varphi}, \quad 0 \leqslant \varphi \leqslant 2\pi, \quad dz = ire^{i\varphi} d\varphi. \tag{1.1}$$

Следовательно,

$$y^{(s)}\left(z^0\right) = \frac{s!}{2\pi r^s}\int\limits_0^{2\pi} \frac{\hat{y}(\eta)}{\eta^s}\, d\varphi. \tag{1.2}$$

При этом $y\left(z^0 + r\eta\right) = \hat{y}(\eta) = \tilde{y}(\varphi)$; переменные η, φ определены в (1.1); подынтегральная функция $\hat{y}\left(\eta\right)/\eta^s = \tilde{y}\left(\varphi\right) e^{-is\varphi}$ периодическая с периодом 2π.

Как показано в [10], для интегралов от периодических функций с периодом 2π наивысшую тригонометрическую степень точности имеет квадратурная формула с n узлами, равномерно расположенными на отрезке интегрирования $[0,\ 2\pi]$, и равными коэффициентами. Эта степень точности равна $n-1$. Таким образом, квадратурная формула вида

$$\int\limits_0^{2\pi} \frac{\hat{y}(\eta)}{\eta^s}\, d\varphi \approx \frac{2\pi}{n}\sum_{k=1}^{n} \tilde{y}(\varphi_k) e^{-is\varphi_k}, \tag{1.3}$$

где $\varphi_k = \alpha + (k-1)\dfrac{2\pi}{n}$, $\alpha \in \left[0,\ \dfrac{2\pi}{n}\right]$, точна для любого тригонометрического многочлена порядка $n-1$.

В качестве недостатка подхода, основанного на интегральной формуле (1), указывают на необходимость проведения большого числа вычислений подынтегральной функции для достижения подходящей точности. При этом упускается из виду важная особенность (1.3), состоящая в том, что правая часть формулы (с точностью до множителя 2π) представляет дискретное преобразование Фурье (ДПФ), для вычисления которого могут использоваться стандартные компьютерные программы, в которых реализован алгоритм быстрого преобразования Фурье (БПФ) [11, 12].

Еще одна особенность рассматриваемого подхода в том, что если аналитическая в области G функция $L_{\gamma_r}(z)$ является приближением (интерполянтом) к данной функции

$$y(z) = L_{\gamma_r}(z) + R_{\gamma_r}(z),$$

то из (1) следует

$$y^{(s)}\left(z^0\right) = L^{(s)}_{\gamma_r}\left(z^0\right) + R^{(s)}_{\gamma_r}\left(z^0\right).$$

Тем самым вычисление производных по формуле (1) сводится к вычислению производных путем дифференцирования интерполяционных формул [10, 11].

В силу сказанного, чтобы оценить остаточный член $R^{(s)}_{\gamma_r}\left(z^0\right)$, т.е. точность вычисления $y^{(s)}\left(z^0\right)$, рассмотрим в качестве $L_{\gamma_r}(z)$ интерполяционный многочлен Лагранжа $L_{n-1}(z)$ степени $n-1$.

Поскольку $L^{(s)}_{n-1}\left(z\right) \equiv 0$, если $n-1 < s$, то далее принято, что $n-1 \geqslant s$.

Выражение для интерполяционного многочлена Лагранжа с остаточным членом, следуя [13], получаем из интеграла

$$R_{n-1}(z) = \frac{1}{2\pi i}\int\limits_{\gamma_\rho} \frac{\omega_n(z) y(\xi)\, d\xi}{\omega_n(\xi)(\xi - z)}. \tag{2}$$

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

Здесь

$$\omega_n(z) = \prod_{k=1}^{n}(z - z_k), \tag{2.1}$$

где z_k — узлы интерполяции (различные числа).

Контур γ_ρ лежит в области регулярности функции $y(z)$, содержит внутри себя узлы интерполяции и точку z, которые являются простыми полюсами подынтегральной функции.

По теореме о вычетах [9] из (2), (2.1) следует

$$R_{n-1}(z) = y(z) - \sum_{k=1}^{n} y(z_k)\frac{\omega_n(z)}{\omega_n'(z_k)(z - z_k)}. \tag{3}$$

Сумма вычетов по узлам $z_k,\ k = \overline{1,n}$, составляет, согласно [10], интерполяционный многочлен Лагранжа

$$L_{n-1}(z) = \sum_{k=1}^{n} y(z_k)\frac{\omega_n(z)}{\omega_n'(z_k)(z - z_k)},$$

причем полиномы степени $n-1$

$$\mathit{\Phi}_k(z) = \frac{\omega_n(z)}{\omega_n'(z_k)(z - z_k)}$$

являются фундаментальными полиномами интерполирования.

Равенство (3) показывает, что функцию $R_{n-1}(z)$, которая определена интегралом (2), следует рассматривать как остаточный член формулы Лагранжа.

Примем в качестве узлов интерполяции различные равноотстоящие точки контура γ_r

$$z_k = z^0 + r\eta_k, \quad \eta_k = e^{i\varphi_k}, \quad \varphi_k = \frac{2(k-1)\pi}{n}, \quad k = \overline{1,n}. \tag{4}$$

Здесь η_k — корни n-й степени из 1.

Таким образом, рассматривается случай, когда множество узлов интерполяции совпадает со множеством узлов квадратурной формулы (1.3).

Из (1.1)–(1.3), (3), (4) имеем

$$\hat{y}(\eta) = \hat{L}_{n-1}(\eta) + \hat{R}_{n-1}(\eta),$$

где $L_{n-1}(z) = \hat{L}_{n-1}(\eta) = \tilde{L}_{n-1}(\varphi),\ \ R_{n-1}(z) = \hat{R}_{n-1}(\eta) = \tilde{R}_{n-1}(\varphi)$.

Тогда

$$\int_0^{2\pi}\frac{\hat{y}(\eta)}{\eta^s}\,d\varphi = \int_0^{2\pi}\tilde{y}(\varphi)\,e^{-is\varphi}\,d\varphi =$$

$$= \int_0^{2\pi}\tilde{L}_{n-1}(\varphi)\,e^{-is\varphi}\,d\varphi + \int_0^{2\pi}\tilde{R}_{n-1}(\varphi)\,e^{-is\varphi}\,d\varphi. \tag{5}$$

Поскольку $\tilde{L}_{n-1}(\varphi)\,e^{-is\varphi}$ — тригонометрический многочлен порядка $n-1$, то квадратурная формула (1.3) является для него точной:

$$\int_0^{2\pi}\tilde{L}_{n-1}(\varphi)\,e^{-is\varphi}\,d\varphi = \frac{2\pi}{n}\sum_{k=1}^{n}\tilde{L}_{n-1}(\varphi_k)\,e^{-is\varphi_k} = \frac{2\pi}{n}\sum_{k=1}^{n}\tilde{y}(\varphi_k)\,e^{-is\varphi_k} \tag{5.1}$$

(можно показать непосредственным интегрированием, выписав явное выражение для $\tilde{L}_{n-1}(\varphi)$).

Обозначим через $\triangle_n$ второе слагаемое формулы (5). В силу (5), (5.1) эту величину следует рассматривать как остаточный член квадратурной формулы (1.3)

$$\triangle_n = \int_0^{2\pi}\tilde{R}_{n-1}(\varphi)\,e^{-is\varphi}\,d\varphi. \tag{5.2}$$

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

Объединяя (1.2), (5)–(5.2), получаем формулу для вычисления производной $y^{(s)}\left(z^0\right)$ посредством ДПФ с остаточным членом

$$y^{(s)}\left(z^0\right) = \frac{s!}{r^s} \cdot \underbrace{\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \tilde{y}\left(\varphi_k\right) e^{-is\varphi_k}}_{\text{ДПФ}} + \triangle_n\left[y^{(s)}\right]. \tag{6}$$

Здесь

$$\triangle_n\left[y^{(s)}\right] = \frac{s!}{2\pi r^s}\triangle_n, \qquad \triangle_n \text{ определено } (5.2). \tag{6.1}$$

2. Оценка остаточного члена. Оценим величины (5.2), (6.1). Многочлен (2.1), имеющий корни (4), можно записать так:

$$\omega_n(z) = \prod_{k=1}^{n}\left(z^0 + r\eta - z^0 - r\eta_k\right) = r^n \prod_{k=1}^{n}(\eta - \eta_k) = r^n(\eta^n - 1). \tag{7}$$

В силу (1.1), (2), (7)

$$\tilde{R}_{n-1}(\varphi) = \frac{r^n}{2\pi i}\int_{\gamma_\rho} \frac{(e^{in\varphi}-1)y(\xi)\,d\xi}{\omega_n(\xi)(\xi - z^0 - re^{i\varphi})}. \tag{7.1}$$

Возьмем в качестве контура γ_ρ окружность радиуса ρ, концентрическую с γ_r и такую, что $r = \varkappa\rho$ и $0 < \varkappa < 1$:

$$\xi = z^0 + \rho v, \quad v = e^{i\tau}, \quad 0 \leqslant \tau \leqslant 2\pi, \quad d\xi = i\rho e^{i\tau}d\tau, \quad y\left(\xi\right) = \breve{y}\left(\tau\right). \tag{7.2}$$

Для знаменателя подынтегральной функции в (7.1), учитывая (4), получаем

$$\omega_n(\xi) = \prod_{k=1}^{n}(\xi - z_k) = \prod_{k=1}^{n}\left(z^0 + \rho v - z^0 - re^{i\varphi_k}\right) =$$
$$= \prod_{k=1}^{n}\left(\rho v - \varkappa\rho e^{i\varphi_k}\right) = \rho^n \prod_{k=1}^{n}\left(v - \varkappa e^{i\varphi_k}\right) = \rho^n\left(v^n - \varkappa^n\right) = \rho^n\breve{\omega}_n\left(\tau\right),$$
$$\xi - z^0 - re^{i\varphi} = \rho e^{i\tau} - \varkappa\rho e^{i\varphi} = \rho\left(e^{i\tau} - \varkappa e^{i\varphi}\right). \tag{7.3}$$

Имея в виду (5.2), (7.1)–(7.3), введем функции

$$T(\tau) = \frac{\breve{y}(\tau)\,e^{i\tau}}{\breve{\omega}_n(\tau)}, \quad Y(\varphi,\tau) = T(\tau)\cdot\frac{(e^{in\varphi}-1)\,e^{-is\varphi}}{e^{i\tau} - \varkappa e^{i\varphi}}. \tag{8}$$

Функция $Y(\varphi,\tau)$ непрерывна по обеим переменным в квадрате $[0,2\pi]\times[0,2\pi]$, что позволяет использовать теорему о возможности перестановки порядка интегрирования [14] и записать (5.2) таким образом:

$$\triangle_n = \frac{\varkappa^n}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left[\int_0^{2\pi} Y\left(\varphi,\tau\right)\,d\tau\right]d\varphi = \frac{\varkappa^n}{2\pi}\int_0^{2\pi}\left[\int_0^{2\pi} Y\left(\varphi,\tau\right)\,d\varphi\right]d\tau. \tag{9}$$

Вычислим интеграл по переменной φ, предварительно преобразовав второй множитель функции (8). Так как

$$\frac{1}{e^{i\tau} - \varkappa e^{i\varphi}} = e^{-i\tau}\sum_{k=0}^{\infty}\varkappa^k e^{i(\varphi-\tau)k},$$

то

$$\int_0^{2\pi} Y(\varphi,\tau)\,d\varphi = T(\tau)e^{-i\tau}\cdot\sum_{k=0}^{\infty}\varkappa^k e^{-i\tau k}\int_0^{2\pi}(e^{in\varphi}-1)e^{i(k-s)\varphi}\,d\varphi =$$
$$= T(\tau)e^{-i\tau}\cdot\sum_{k=0}^{\infty}\varkappa^k e^{-i\tau k}\int_0^{2\pi}\left[e^{i(n+k-s)\varphi} - e^{i(k-s)\varphi}\right]d\varphi.$$

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

Интеграл от $e^{i(n+k-s)\varphi}$ равен нулю, поскольку $n-1 \geqslant s$, а интеграл от $e^{i(k-s)\varphi}$ отличен от нуля только при $k=s$. Таким образом,

$$\int\limits_0^{2\pi} Y(\varphi,\tau)\,d\varphi = -2\pi\varkappa^s T(\tau)e^{-i(s+1)\tau}$$

и остаточный член (9) запишется в виде

$$\triangle_n = -\varkappa^{n+s}\int\limits_0^{2\pi} T(\tau)e^{-i(s+1)\tau}\,d\tau = -\varkappa^{n+s}\int\limits_0^{2\pi}\frac{\breve{y}(\tau)e^{-is\tau}}{e^{in\tau}-\varkappa^n}\,d\tau. \tag{9.1}$$

Почленно интегрируя разложение

$$\frac{1}{e^{in\tau}-\varkappa^n} = e^{-in\tau}\frac{1}{1-e^{-in\tau}\varkappa^n} = e^{-in\tau}\sum_{k=0}^{\infty}\left(e^{-in\tau}\varkappa^n\right)^k,$$

имеем

$$\triangle_n = -\varkappa^{n+s}\sum_{k=0}^{\infty}\varkappa^{nk}I_k, \quad I_k = \int\limits_0^{2\pi}\breve{y}(\tau)e^{-i\beta_k\tau}\,d\tau, \quad \beta_k = s+n+nk. \tag{9.2}$$

Интегралы I_k можно выразить через производные в точке z^0 или преобразовать, используя интегрирование по частям. Рассмотрим оба варианта.

Преобразуем I_k в интеграл по контуру γ_ρ. Из (7.2) имеем

$$e^{-i\beta_k\tau}d\tau = \frac{1}{i\rho}\left[\frac{1}{\rho}\left(\xi-z^0\right)\right]^{-(\beta_k+1)}d\xi$$

и, следовательно,

$$I_k = \frac{\rho^{\beta_k}}{i}\int\limits_{\gamma_\rho}\frac{y(\xi)}{\left(\xi-z^0\right)^{\beta_k+1}}\,d\xi = \frac{2\pi\rho^{\beta_k}}{\beta_k!}\cdot\frac{\beta_k!}{2\pi i}\int\limits_{\gamma_\rho}\frac{y(\xi)}{\left(\xi-z^0\right)^{\beta_k+1}}\,d\xi = \frac{2\pi\rho^{\beta_k}}{\beta_k!}y^{(\beta_k)}\left(z^0\right).$$

Выражение (9.2) для $\triangle_n$ принимает вид

$$\triangle_n = -2\pi\varkappa^{n+s}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\varkappa^{nk}\rho^{\beta_k}}{\beta_k!}\,y^{(\beta_k)}\left(z^0\right) = -2\pi r^{n+s}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{r^{nk}}{\beta_k!}\,y^{(\beta_k)}\left(z^0\right), \quad \beta_k = s+n+nk. \tag{9.3}$$

Формулы (6.1), (9.3) дают величину погрешности вычисления производной посредством ДПФ (6)

$$\triangle_n\left[y^{(s)}\right] = -\frac{s!}{\rho^s}\varkappa^n\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\varkappa^{nk}\rho^{\beta_k}}{\beta_k!}\,y^{(\beta_k)}\left(z^0\right) = -s!\,r^n\sum_{k=0}^{\infty}\frac{r^{nk}}{\beta_k!}\,y^{(\beta_k)}\left(z^0\right), \quad n-1 \geqslant s, \quad \beta_k = s+n+nk. \tag{10}$$

Используя для оценки производных в формуле (10) неравенства Коши [9]

$$\left|y^{(\beta_k)}\left(z^0\right)\right| \leqslant \beta_k!\,\frac{M_0(\rho)}{\rho^{\beta_k}}, \quad M_0(\rho) = \max_{\xi\in\gamma_\rho}\left|y(\xi)\right|,$$

и суммируя получающийся ряд геометрической прогрессии, находим:

$$\left|\triangle_n\left[y^{(s)}\right]\right| \leqslant \frac{s!\,M_0(\rho)}{\rho^s}\cdot\frac{\varkappa^n}{1-\varkappa^n}, \quad n-1 \geqslant s. \tag{10.1}$$

Так как $\varkappa < 1$, то из (10.1) следует (s фиксировано), что остаточный член (6.1) стремится к нулю при $n\to\infty$. Отметим, что первый множитель правой части неравенства (10.1) представляет оценку $\left|y^{(s)}\left(z^0\right)\right|$.

Неравенство (10.1) получается также непосредственной оценкой интеграла в (9.1), так как для знаменателя подынтегральной функции справедливо неравенство $\left|e^{in\tau}-\varkappa^n\right| \geqslant |1-\varkappa^n|$.

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

Для высших производных от логарифмической производной $y(z) = f'(z)/f(z)$, где $f(z)$ — целая функция конечного порядка p с нулями в точках ζ_j, $j = \overline{1, N}$, справедливо [6] представление

$$\frac{1}{s!}\,y^{(s)}(z) = \frac{1}{s!}\left(\frac{f'(z)}{f(z)}\right)^{(s)} = (-1)^s \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{\left(z-\zeta_j\right)^{s+1}}, \quad s = p, p+1, \ldots .$$

Пусть s и n таковы, что $\beta_k \geqslant p$ для любого k. Тогда, поскольку $\left|z^0 - \zeta_j\right| > \rho$, выполняется неравенство

$$\left|\frac{1}{\beta_k!}\,y^{(\beta_k)}\left(z^0\right)\right| \;\leqslant\; \sum_{j=1}^{N}\left|\frac{1}{\left(z^0-\zeta_j\right)^{\beta_k+1}}\right| \;<\; \frac{N}{\rho^{s+n+nk+1}},$$

которое совместно с (10) дает

$$\left|\triangle_n\left[y^{(s)}\right]\right| \;<\; s!\,r^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r^{nk}N}{\rho^{s+n+nk+1}} = s!\,\frac{r^n N}{\rho^{s+n+1}} \sum_{k=0}^{\infty} (\varkappa^n)^k = \frac{s!\,N}{\rho^{s+1}}\,\frac{\varkappa^n}{1-\varkappa^n}.$$

Другой подход состоит в том, что интегралы I_k (см. (9.1)), применяя m раз интегрирование по частям и учитывая периодичность $\breve{y}\,(\tau)$, приводим к виду

$$I_k = \frac{1}{(i\beta_k)^m}\,I_k^m, \quad I_k^0 = I_k, \quad I_k^m = \int\limits_0^{2\pi} \breve{y}^{(m)}(\tau) e^{-i\beta_k \tau}\,d\tau, \quad m = 0, 1, \ldots ,$$

и получаем

$$|I_k| = \frac{1}{\beta_k^m}\,|I_k^m| \;\leqslant\; \frac{2\pi}{\beta_k^m} M_m, \quad M_m = \max_{\tau}\left|\breve{y}^{(m)}(\tau)\right|.$$

Из (9.2) следует

$$|\triangle_n| \;\leqslant\; 2\pi \varkappa^{n+s} M_m \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\varkappa^{nk}}{(s+n+nk)^m}.$$

Оценим сумму ряда, выделив слагаемое, соответствующее $k = 0$:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\varkappa^{nk}}{(s+n+nk)^m} = \frac{1}{(s+n)^m} + \varkappa^n \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\varkappa^{n(k-1)}}{(s+2n+n(k-1))^m} <$$
$$< \frac{1}{(s+n)^m} + \frac{\varkappa^n}{(s+2n)^m} \sum_{k=1}^{\infty} \varkappa^{n(k-1)} = \frac{1}{(s+n)^m} + \frac{1}{(s+2n)^m}\,\frac{\varkappa^n}{1-\varkappa^n}.$$

Находим оценку остаточного члена квадратуры (1.3):

$$|\triangle_n| < 2\pi \varkappa^{n+s} M_m \left[\frac{1}{(s+n)^m} + \frac{1}{(s+2n)^m}\,\frac{\varkappa^n}{1-\varkappa^n}\right], \quad m = 0, 1, \ldots . \tag{11}$$

Формулы (6.1), (11) дают оценку погрешности вычисления производной посредством ДПФ (6)

$$\left|\triangle_n\left[y^{(s)}\right]\right| \leqslant \frac{s!\,M_m}{\rho^s}\left[\frac{\varkappa^n}{(s+n)^m} + \frac{1}{(s+2n)^m}\,\frac{\varkappa^{2n}}{1-\varkappa^n}\right], \quad n-1 \geqslant s, \quad m = 0, 1, \ldots . \tag{12}$$

Положив $m = 0$, приходим к неравенству (10.1) как частному случаю неравенства (12).

3. Результаты численного моделирования. Для численного эксперимента, который выполнен в системе Mathcad, используется формула (6), записанная в следующем виде:

$$Y_s = \frac{s!}{r^s} A_s, \quad A_s = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \tilde{y}\,(\varphi_k)\,e^{-is\varphi_k}. \tag{13}$$

Здесь Y_s — производная порядка s; A_s — коэффициенты ДПФ, вычисляемые функцией $CFFT(d)$, в которой реализован алгоритм БПФ для вектора (матрицы) d с комплексными элементами.

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

Компоненты вектора d формируются согласно (4):

$$d_k = \tilde{y}(\varphi_{k+1}) = y\left(z^0 + re^{i\frac{2\pi}{n}k}\right), \quad k = \overline{0, n-1}. \tag{13.1}$$

Команды

$$A := CFFT(d), \quad Y_s := \frac{s!}{r^s} A_s, \quad s = \overline{0, n-1}, \tag{13.2}$$

дают вектор производных Y. Компонента вектора Y с индексом s содержит производную порядка s (используется индексация, принятая в Mathcad по умолчанию).

Для иллюстрации зависимости точности формулы (13.2) от числа узлов интерполяции n и состоятельности оценок (10), (12) используется функция $y(z) = \ln z$ (главное значение логарифма). Так как [9] для любой ветви $\operatorname{Ln} z$ справедливо $(\operatorname{Ln} z)' = z^{-1}$, то это приводит к простым выражениям для высших производных

$$y^{(s)}(z) = (-1)^{s-1} \frac{(s-1)!}{z^s}, \quad s = 1, 2, \ldots, \tag{14}$$

позволяя вычислить погрешности $y^{(s)}(z^0) - Y_s$. Примем $n = 5$, $z^0 = 2$, $r = 0.5$, $\rho = 1.0$. Выполнив (13.1), (13.2), получаем

$$\left[y^{(s)}(z^0) - Y_s\right] \sim 10^{-4}\text{–}10^{-5}, \quad s = \overline{0, 4}.$$

Используя значения производных, вычисленных по формулам (14), и ограничившись в (10) отрезком ряда до $k = 5$, наблюдаем разности

$$\triangle_5\left[y^{(s)}\right] - \left[y^{(s)}(z^0) - Y_s\right] \sim 10^{-15}, \quad s = \overline{0, 4}.$$

Чтобы фактическую погрешность сравнить с погрешностью, предсказываемой неравенством (12), вычислены производные $\breve{y}^{(m)}(\tau)$, $m = \overline{0, 4}$. Для $m = 4$ имеем

$$\breve{y}^{(4)}(\tau) = \frac{\rho e^{i\tau}}{z^0 + \rho e^{i\tau}} - \frac{7\rho^2 e^{i2\tau}}{\left(z^0 + \rho e^{i\tau}\right)^2} + \frac{12\rho^3 e^{i3\tau}}{\left(z^0 + \rho e^{i\tau}\right)^3} - \frac{6\rho^4 e^{i4\tau}}{\left(z^0 + \rho e^{i\tau}\right)^4}.$$

Поскольку

$$\left|z^0 + \rho e^{i\tau}\right|^2 = \left(z^0\right)^2 + \rho^2 + 2z^0\rho\cos\tau \geqslant \left(z^0 - \rho\right)^2,$$

то

$$M_4 = \max_\tau \left|\breve{y}^{(4)}(\tau)\right| \leqslant \frac{\rho}{z^0 - \rho} + \frac{7\rho^2}{\left(z^0 - \rho\right)^2} + \frac{12\rho^3}{\left(z^0 - \rho\right)^3} + \frac{6\rho^4}{\left(z^0 - \rho\right)^4} = 26$$

и (12) при заданных начальных данных дает

$$\left|\triangle_5\left[y^{(s)}\right]\right| \sim 10^{-3}\text{–}10^{-4}, \quad s = \overline{0, 4},$$

завышая фактические величины на порядок.

Далее рассмотрен пример из работы [2], где в качестве функции $y(z)$ выступает вольт-амперная характеристика полупроводниковой структуры

$$y(u) = V_0 \cdot \ln\left(u + \sqrt{u^2 + 1}\right), \quad u = \frac{z}{I_0}, \quad V_0 = 36.3, \quad I_0 = 0.9. \tag{15}$$

Для оценки погрешностей $\left|y^{(s)} - Y_s\right|$ найдены аналитические выражения $y_u^{(s)}(u)$. Так, например,

$$y_u^{(10)}(u) = -45V_0\left(1 + u^2\right)^{-\frac{19}{2}} \cdot \left(8064u^9 - 145152u^7 + 381024u^5 - 211168u^3 + 19845u\right).$$

Производные вычисляются в точке $z^0 = 0.325364$, $r = z^0$ и $\rho = 1$. В точке z^0 производная четвертого порядка имеет максимум равный

$$y_z^{(4)}\left(z^0\right) = \frac{y_u^{(4)}\left(\dfrac{z^0}{I_0}\right)}{(I_0)^4} = 106.907548.$$

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

Таблица 1. Погрешности вычислений

Table 1. Calculation Errors

Производная Derivative $y^{(s)}(z^0)$	Точная Precise	Погрешность Error $n=8$, $\left\|y^{(s)}-Y_s\right\|$	Погрешность Error $n=10$, $\left\|y^{(s)}-Y_s\right\|$
$y(z^0)$	$1.285\,278\times10^{1}$	$1.236\,667\times10^{-4}$	$3.156\,162\times10^{-6}$
$y^{(1)}(z^0)$	$3.793\,077\times10^{1}$	$2.083\,591\times10^{-4}$	$1.579\,879\times10^{-5}$
$y^{(2)}(z^0)$	$-1.347\,508\times10^{1}$	$5.963\,243\times10^{-5}$	$2.486\,548\times10^{-5}$
$y^{(3)}(z^0)$	$-2.705\,413\times10^{1}$	$8.953\,542\times10^{-4}$	$3.339\,386\times10^{-5}$
$y^{(4)}(z^0)$	$1.069\,075\times10^{2}$	$2.818\,463\times10^{-3}$	$3.425\,124\times10^{-4}$
$y^{(5)}(z^0)$	$1.413\,691\times10^{-13}$	$6.307\,936\times10^{-3}$	$5.082\,529\times10^{-4}$
$y^{(6)}(z^0)$	$-1.867\,662\times10^{3}$	$9.705\,508\times10^{-2}$	$7.198\,89\times10^{-3}$
$y^{(7)}(z^0)$	$7.298\,453\times10^{3}$	$2.016\,452\times10^{-1}$	$5.192\,525\times10^{-2}$
$y^{(8)}(z^0)$	$3.970\,614\times10^{4}$		$9.769\,825\times10^{-2}$
$y^{(9)}(z^0)$	$-6.020\,652\times10^{5}$		$4.024\,881$
$y^{(10)}(z^0)$	$8.614\,226\times10^{5}$		

Результаты вычислений для разных значений n приведены в табл. 1.

Чтобы использовать предсказательные возможности формулы (10), необходимо вычислить (оценить) производные высокого порядка функции (15). Рекуррентное соотношение, связывающее три последовательных производных (по переменной u), находим, рассмотрев соотношение для производных первого и второго порядков

$$\left(1+u^2\right)y''(u)=-uy'(u)\,.$$

Применив формулу Лейбница [14], находим производные порядка $s-2$ левой и правой частей этого равенства. После приведения подобных членов получаем искомое рекуррентное соотношение

$$\left(1+u^2\right)y^{(s)}(u)=-(2n-3)uy^{(s-1)}(u)-(n-2)^2y^{(s-2)}(u),\quad s\geqslant 3. \tag{16}$$

Стремительный рост $\left|y^{(s)}(u)\right|$ по мере увеличения порядка s ограничивает использование (16). Учтем, что формула (10) содержит не сами производные, а отношения $y^{(s)}(u)/s!$ и преобразуем (16) к виду

$$\frac{y^{(s)}(u)}{s!}=-\frac{1}{1+u^2}\left[\left(2-\frac{3}{s}\right)u\,\frac{y^{(s-1)}(u)}{(s-1)!}+\frac{\left(1-\dfrac{2}{s}\right)^2}{1-\dfrac{1}{s}}\,\frac{y^{(s-2)}(u)}{(s-2)!}\right]. \tag{16.1}$$

Равенство (16.1) и соотношение $y_z^{(s)}=y_u^{(s)}/\left(I_0\right)^s$ дают возможность вычислить величину ожидаемой погрешности по формуле (10). Как и в первом примере, ограничившись отрезком ряда до $k=5$, имеем

$$\triangle_8\left[y^{(s)}\right]-\left[y^{(s)}\left(z^0\right)-Y_s\right]\sim10^{-15},\quad s=\overline{0,4}.$$

Из оценки (10.1) следует, что при переходе от $n=8$ к $n=10$ можно ожидать увеличение точности на величину

$$\varkappa^2\frac{1-\varkappa^8}{1-\varkappa^{10}}=1.203\,929\times10^{-1}.$$

Таблица показывает фактическое увеличение точности на величину $1.215\,245\times10^{-1}$ для четвертой производной, что хорошо согласуется с оценкой (10.1).

2025, **26** (2), 150–159. doi 10.26089/NumMet.v26r211

4. Заключение. Известно [15], что для численного дифференцирования Mathcad применяет алгоритм Риддера, вычисляющий первую производную с точностью до 7–8-го знака после запятой. Погрешность дифференцирования не зависит от констант TOL или CTOL, а определяется непосредственно алгоритмом.

Расчет производных высших порядков производится тем же методом Риддера, но при повышении порядка производной на единицу точность падает примерно на один разряд. Так, оператор $\dfrac{d^4}{dz^4}$, примененный к функции (15), вычисляет значение четвертой производной в точке z^0 с погрешностью $1.385\,948 \times 10^{-5}$, что на один-два порядка точнее данных таблицы.

Из оценок (10.1), (12) следует, что точность вычисления производных по формуле (6) можно улучшить не только за счет увеличения числа узлов интерполяции n, но и за счет уменьшения параметра $\varkappa = r/\rho$. Однако увеличение ρ ограничивается областью регулярности функции $y(z)$, а также величинами M_m. Это ограничение можно обойти уменьшением параметра r. Например, в рассмотренном выше примере уменьшение r до значения $r = \varkappa = 0.2$ дает соизмеримую с Mathcad точность

$$n = 8, \quad \left|y^{(4)} - Y_4\right| = 5.745\,347 \times 10^{-5},$$

$$n = 10, \quad \left|y^{(4)} - Y_4\right| = 2.638\,004 \times 10^{-6}.$$

Проведенный анализ позволяет сделать вывод, что основная сложность в использовании формулы (6) связана не с требованием к числу узлов интерполяции n, а обусловлена необходимостью предварительного анализа расположения особых точек аналитической функции.

В работах [3–5] использован новый подход к рассматриваемой задаче, который базируется на обобщении комплексных чисел, мультикомплексных числах (multicomplex numbers) и функциях. Малый опыт применения алгоритмов численного дифференцирования, основанных на этой теории, не позволяет сделать однозначных выводов об их эффективности.

Список литературы

1. *Албу А.Ф., Горчаков А.Ю., Зубов В.И.* БАД-методология и дифференцирование сложной функции // Журн. вычисл. матем. матем. физики. 2023. **63**, № 1. 61–73. doi 10.31857/S0044466923010039.
2. *Кузьмичев Н.Д.* Численный метод нахождения высших производных с помощью дискретного и быстрого преобразования Фурье // Труды XIV Международной конференции “Дифференциальные уравнения и их приложения в математическом моделировании”. Саранск: Мордовский гос. унив., 2019. https://conf.svmo.ru/files/2019/ProceedingsSaransk2019.pdf.
3. *Lantoine G., Russell R.P., Dargent T.* Using multicomplex variables for automatic computation of high-order derivatives // ACM Trans. Math. Softw. 2012. **38**, N 3. Article 16, 1–21. doi 10.1145/2168773.2168774.
4. *Millwater H.R., Shirinkam S.* Multicomplex Taylor series expansion for computing high-order derivatives // Int. J. Appl. Math. 2014. **27**, N 4. 311–334. doi 10.12732/ijam.v27i4.2.
5. *Aguirre-Mesa A.M., Garcia M.J., Millwater H.* MultiZ: a library for computation of high-order derivatives using multicomplex or multidual numbers // ACM Trans. Math. Softw. 2020. **46**, N 3. 1–30. doi 10.1145/3378538.
6. *Громов А.Н.* О теореме Кенига для целых функций конечного порядка // Вычислительные методы и программирование. 2020. **21**, № 3. 280–289. doi 10.26089/NumMet.v21r324.
7. *Громов А.Н.* Глобально сходящийся метод для отыскания нулей целых функций конечного порядка // Вычислительные методы и программирование. 2017. **18**, № 2. 115–128. doi 10.26089/NumMet.v18r209.
8. *Lyness J.N., Moler C.B.* Numerical differentiation of analytic functions // SIAM J. on Numerical Analysis. 1967. **4**, N 2. 202–210.
9. *Маркушевич А.И.* Теория аналитических функций. Т. 1. М.: Наука, 1967.
10. *Березин И.С., Жидков Н.П.* Методы вычислений. Т. 1. М.: Наука, 1962.
11. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. М.: БИНОМ, 2011.
12. *Марчук Г.И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980.
13. *Ибрагимов И.И.* Методы интерполяции функций и некоторые их применения. М.: Наука, 1971.

14. *Фихтенгольц Г.М.* Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. 2. М.: Наука, 1972.
15. *Кирьянов Д.В.* Самоучитель Mathcad 11. СПб.: БХВ-Петербург, 2003.

Поступила в редакцию
2 марта 2025 г.

Принята к публикации
2 апреля 2025 г.

Информация об авторе

Анатолий Николаевич Громов — ст. преподаватель; Московский государственный институт международных отношений Министерства иностранных дел Российской Федерации, Одинцовский филиал, факультет финансовой экономики, ул. Ново-Спортивная, д. 3, 143007, Одинцово, Российская Федерация.

References

1. A. F. Albu, A. Yu. Gorchakov, and V. I. Zubov, "FAD Technique and Differentiation of a Composite Function," Zh. Vychisl. Mat. Mat. Fiz. **63** (1), 61–73 (2023) [Comput. Math. Math. Phys. **63** (1), 57–68 (2023)]. doi 10.1134/S0965542523010037.
2. N. D. Kuzmichev, "Numerical Methods for Finding Higher Derivatives Using Discrete and Fast Fourier Transform," in *Proc. XIV Int. Scientific Conf. on Differential Equations and Their Applications in Mathematical Modeling, Saransk, Russia, July 9–12, 2019.* https://conf.svmo.ru/files/2019/ProceedingsSaransk2019.pdf.
3. G. Lantoine, R. P. Russell, and T. Dargent, "Using Multicomplex Variables for Automatic Computation of High-Order Derivatives," ACM Trans. Math. Softw. **38** (3), Article 16, 1–21 (2012). doi 10.1145/2168773.2168774.
4. H. R. Millwater and S. Shirinkam, "Multicomplex Taylor Series Expansion for Computing High-Order Derivatives," Int. J. Appl. Math. **27** (4), 311–334 (2014). doi 10.12732/ijam.v27i4.2.
5. A. M. Aguirre-Mesa, M. J. Garcia, and H. Millwater, "MultiZ: A Library for Computation of High-Order Derivatives Using Multicomplex or Multidual Numbers," ACM Trans. Math. Softw. **46** (3), 1–30 (2020). doi 10.1145/3378538.
6. A. N. Gromov, "On Koenig's Theorem for Integer Functions of Finite Order," Numerical Methods and Programming **21** (3), 280–289 (2020). doi 10.26089/NumMet.v21r324.
7. A. N. Gromov, "A Globally Convergent Method for Finding Zeros of Integer Functions of Finite Order," Numerical Methods and Programming **18** (2), 115–128 (2017). doi 10.26089/NumMet.v18r209.
8. J. N. Lyness and C. B. Moler, "Numerical Differentiation of Analytic Functions," SIAM J. Numer. Anal. **4** (2), 202–210 (1967).
9. A. I. Markushevich, *Theory of Analytic Functions*, Vol. 1 (Nauka, Moscow, 1967; Chelsea, New York, 1977).
10. I. S. Berezin and N. P. Zhidkov, *Computing Methods* (Nauka, Moscow, 1962; Oxford, Pergamon, 1965).
11. N. S. Bakhvalov, N. P. Zhidkov, and G. M. Kobelkov, *Numerical Methods* (BINOM, Moscow, 2011) [in Russian].
12. G. I. Marchuk, *Methods of Computational Mathematics* (Nauka, Moscow, 1980; Springer, New York, 1982).
13. I. I. Ibragimov, *Function Interpolation Methods and Some of Their Applications* (Nauka, Moscow, 1971) [in Russian].
14. G. M. Fichtenholz, *Course of Differential and Integral Calculus*, Vol. 2 (Nauka, Moscow, 1972) [in Russian].
15. D. V. Kiryanov, *Mathcad Tutorial 11* (BHV-Petersburg, St. Petersburg, 2003) [in Russian].

Received
March 2, 2025

Accepted for publication
April 2, 2025

Information about the author

Anatoliy N. Gromov — Associate Professor; Moscow State Institute of International Relations at Odintsovo, Faculty of Financial Economics, ulitsa Novo-Sportivnaya, 3, 143007, Odintsovo, Moscow Region, Russia.