Кременчугский национальный университет
имени Михаила Остроградского

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Математические методы вычислений на ЭВМ

А.П. Черный, д.т.н., профессор
http:\\saue.kdu.edu.ua

ЛЕКЦИЯ 6

ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ И ИНТЕГРИРОВАНИЕ

ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

Производной функции $y = f(x)$ называется предел отношения приращения функции Δy к соответствующему приращению аргумента Δx при стремлении Δx к нулю:

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

В численных расчетах производную приближенно находят полагая Δx равным некоторому конечному числу, получая приближенное равенство для вычисления производной

$$f(x) = \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

Это соотношение называется *аппроксимацией* (*приближением*) *производной с помощью конечных разностей.*

Это соотношение может быть использовано для приближенного вычисления производной от функции, заданной как аналитическим выражением, так и таблично.

- Если функция задана как аналитическое выражение, то выбор величины Δx произволен и определяется характером поведения функции. Для получения хорошей точности величину Δx выбирают достаточно малой, такой чтобы на интервале $[x, x + \Delta x]$ функция $f(x)$ была бы монотонна и менялась не существенно.

- Если функция задана таблично, величина Δx равна разности между соседними узлами таблицы в окрестности которых вычисляется производная. При этом, если количество узлов невелико и узлы расположены на большом расстоянии друг от друга, формула конечных разностей может давать существенную погрешность.

Общий подход к задаче численного дифференцирования функции, заданной таблицей значений, основан на использовании интерполяционных полиномов.

Пусть в точках $x_0, x_1, \dots, x_n$ известны значения функции $f(x)$: $y_0, y_1, \dots, y_n$. По табличным данным аппроксимируем функцию $f(x)$ интерполяционным полином степени n:

$$f(x) \approx P_n(x)$$

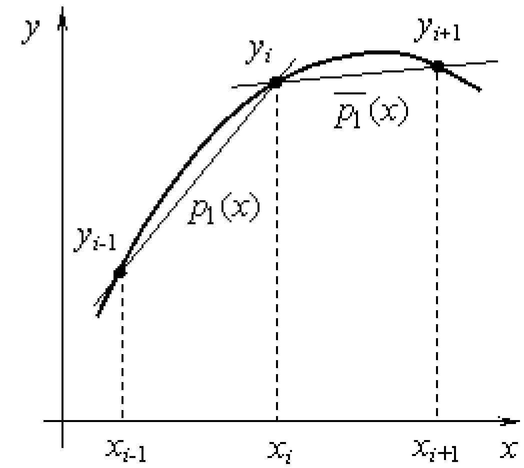
Тогда для *k*-той производной от функции $f(x)$ на отрезке интерполирования $[x_0, x_n]$ получим приближенную формулу

$$\frac{d^k f(x)}{dx^k} \approx \frac{d^k P_n(x)}{dx^k}$$

На практике редко прибегают к аппроксимации функции методом глобальной интерполяции интерполяционным полиномом, из-за большой погрешности. Как правило, пользуются локальную интерполяцию
При этом в окрестности точки, в которой нужно вычислить производную, функцию интерполируют полиномом невысокой степени (например, $n = 1, 2, 3$.

Рассмотрим вычисление производных функции $f(x)$ в окрестности табличной точки $x \sim x_i$. Для простоты будем считать, что табличные точки равноотстоят друг от друга, т.е. $x_i - x_{i-1} = h = const$

Пример 4.1. Приблизим в рассматриваемой окрестности функцию $f(x)$ интерполяционным полиномом первой степени $P_1(x)$, т.е. прямой, проходящей через точки (x_{i-1}, y_{i-1}) и (x_i, y_i)



$$f(x) \approx P_1(x) = y_{i-1} + \frac{y_i - y_{i-1}}{h}(x - x_{i-1})$$

Тогда получим *левое разностное отношение*

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \sim x_i} \approx \frac{dP_1(x)}{dx} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h}$$

С другой стороны в рассматриваемой окрестности функцию $f(x)$ можно приблизить и так

$$f(x) \approx \overline{P_1}(x) = y_i + \frac{y_{i+1} - y_i}{h}(x - x_i)$$

В этом случае получим *правое разностное отношение*

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \sim x_i} \approx \frac{d\overline{P_1}(x)}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}$$

Смысл этих названий хорошо понятен из рисунка.

Также видно, что для получения приближенных формул для второй и высших производных линейного приближения функции недостаточно.

Пример 4.2. Приблизим в рассматриваемой окрестности функцию $f(x)$ интерполяционным полиномом второй степени $P_2(x)$, т.е. параболой, проходящей значения функции в точках $\{x_{i-1}, x, x_{i+1}\}$

$$f(x) \approx P_2(x) = y_i + \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}(x - x_i) + \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{2h^2}(x - x_i)^2$$

Дифференцируя это выражение один раз, получим новую приближенную формулу для первой производной:

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \sim x_i} \approx \frac{dP_2(x)}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h}(x - x_i)$$

Здесь видно, что приближение зависит от x. В частности, для $x = x_i$ имеем

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x = x_i} \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \qquad (4.1)$$

Дифференцируя полином $P_2(x)$ два раза, получаем приближенную формулу для второй производной:

$$\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{x \sim x_i} \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} \qquad (4.2)$$

Аналогичным образом, привлекая интерполяцию полиномами более высокой степени, можно получать новые формулы для первой и второй производных, а также формулы для производных высших порядков.

Так, например, в случае интерполяции функции $f(x)$ полиномом четвертой степени $P_2(x)$ можно получить следующие формулы (*центральные разностные соотношения*) для первой и второй производной:

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i} \approx \frac{1}{12h}(y_{i-2} - 8y_{i-1} + 8y_{i+1} - y_{i+2})$$

$$\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{x=x_i} \approx \frac{1}{12h^2}(-y_{i-2} + 16y_{i-1} - 30y_i + 16y_{i+1} - y_{i+2})$$

Источниками погрешности численного дифференцирования являются:

- Погрешность аппроксимации, которая при уменьшении шага h, как правило, уменьшается.
- Погрешности вычисления значений функции y_i в узлах и погрешности округлений. Эти погрешности, в отличие от погрешности аппроксимации, возрастают с уменьшением шага h.

Например. Если при вычислении значения функции $f(x)$ абсолютная погрешность равна ε, то при вычислении дробей в формулах для левого и правого разностных отношений (слайд 6) она составит $\frac{2\varepsilon}{h}$. Поэтому суммарная погрешность численного дифференцирования может убывать при уменьшении шага лишь до некоторого предельного значения, после чего дальнейшее уменьшение шага не повысит точности результата.

Если функция задана в узлах с абсолютной погрешностью ε, то для конкретной формулы численного дифференцирования можно примерно указать оптимальный шаг. Например,

для формулы $\left.\frac{df}{dx}\right|_{x=x_i} \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}$ суммарная погрешность (без учета ошибок) округления принимает минимальное значение при

$$h = 2 \cdot \sqrt[3]{\frac{2\varepsilon}{M_3}}$$

где $M_3 = \min\limits_{x_{i-1} \le x \le x_{i+1}} |f'''(x)|$

для формулы $\left.\frac{d^2f}{dx^2}\right|_{x\sim x_i} \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$ выражение для оптимального шага имеет вид

$$h = 2 \cdot \sqrt[4]{\frac{2\varepsilon}{M_4}}$$

где $M_4 = \min\limits_{x_{i-1} \le x \le x_{i+1}} |f^{IV}(x)|$

ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

Классификация методов

Поставим задачу вычислить определенный интеграл вида

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

где $f(x)$ непрерывная функция на интервале $[a, b]$

Вычисление определенного интеграла непосредственно с помощью формулы Ньютона-Лейбница

$$\int_a^b f(x)dx = F(a) - F(b)$$

невозможно если

- вид функции $f(x)$ не позволяет аналитически выразить ее первообразную $F(x)$ через элементарные функции;
- подынтегральная функция $f(x)$ задана таблично.

В этих случаях используют приближенные, методы интегрирования.

Сущность большинства приближенных методов вычисления определенных интегралов состоит в замене подынтегральной функции $f(x)$ аппроксимирующей функцией $\varphi(x)$, для которой можно легко записать первообразную в элементарных функциях, т.е.

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \varphi(x)dx + R$$

где R - погрешность вычисления интеграла.

С целью уменьшения погрешности, связанной с аппроксимацией подынтегральной функции, интервал интегрирования $[a, b]$ разбивают на n отрезков и на каждом частичном отрезке заменяют подынтегральную функцию аппроксимирующей функцией $\varphi(x)$. Тогда приближенное значение интеграла определяется суммой частичных интегралов от функций $\varphi_i(x)$, взятых в пределах от x_{i-1} до x_i

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i(x)\,dx \tag{4.3}$$

Используемые на практике методы численного интегрирования можно сгруппировать в зависимости от способа аппроксимации подынтегральной функции.

- *Методы Ньютона-Котеса* основаны на полиномиальной аппроксимации (интерполяции) подынтегральной функции. Методы этого класса отличаются друг от друга степенью используемого полинома, от которого зависит количество узлов, где необходимо вычислять функцию $f(x)$. Отрезок интегрирования разбивается, как правило, на отрезки равной длины, величина которых определяется как $h = (b - a)/n$ и называется *шагом интегрирования*.
- *Сплайновые методы* базируются на аппроксимации подынтегральной функции сплайнами. Методы различаются по типу выбранных сплайнов. Такие методы имеет смысл использовать в задачах, где алгоритмы сплайновой аппроксимации применяются для обработки данных.
- *Методы наивысшей алгебраической точности* используют неравноотстоящие узлы, расположенные так, чтобы обеспечить минимальную погрешность интегрирования при заданном количестве узлов. Методы различаются способом выбора узлов. Наиболее широкое применение получили *методы Гаусса*, в которых узлы интегрирования выбираются как корни полиномов Лежандра.
- *Методы Монте-Карло* узлы выбираются с помощью генератора случайных чисел, результат в итоге носит вероятностный характер. Методы оказываются особенно эффективны при вычислении кратных интегралов.

Погрешность, численного интегрирования, также как и при численном дифференцировании, имеет два основных источника.

- Погрешность аппроксимации – из-за приближенной замены подынтегральной функции аппроксимирующей функцией. Уменьшается с увеличением количества отрезков разбиения интервала интегрирования n за счет более точной аппроксимации подынтегральной функции.
- Погрешности неточности в вычислении подынтегральной функции в узловых точках и ошибки округления. Возрастает с ростом n и с некоторого значения n^* начинает преобладать над погрешностью аппроксимации. Поэтому нельзя выбирать чрезмерно большое число n.

ИНТЕРПОЛЯЦИОННЫЕ МЕТОДЫ НЬЮТОНА-КОТЕСА

Получение формул для вычисления приближенного значения интеграла в методах Ньютона-Котеса состоит в аппроксимации подынтегральной функции, на каждом частичном отрезке интегрирования $[x_{i-1}, x_i]$, интервала интегрирования $[a, b]$, интерполяционным полиномом.

Точки разбиения $a = x_0, x_1, \ldots, x_n = b$, будем называть *узлами интегрирования*, а расстояния между узлами $h_i = x_i - x_{i-1}$ – *шагами интегрирования*. В частном случае шаг интегрирования может быть постоянным $h = (b - a)/n$

К интерполяционным методам Ньютона-Котеса можно отнести следующие:

- Методы прямоугольников (правых, левых, средних)
- Метод трапеций.
- Метод Симпсона (метод парабол).

Методы прямоугольников

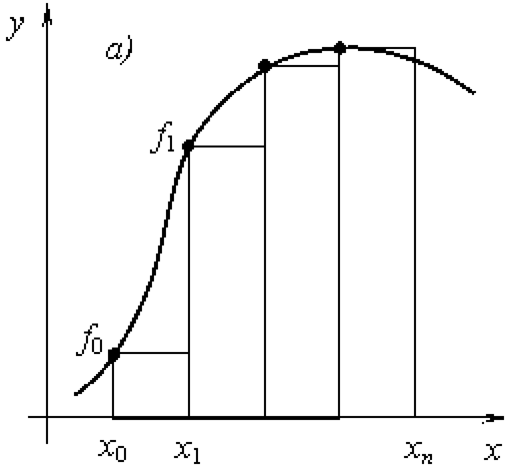
Заменим подынтегральную функцию $f(x)$ на отрезке интегрирования $[x_{i-1}, x_i]$ полиномом нулевой степени, т.е. константой: $f(x) \approx \varphi_i(x) = c_i$.

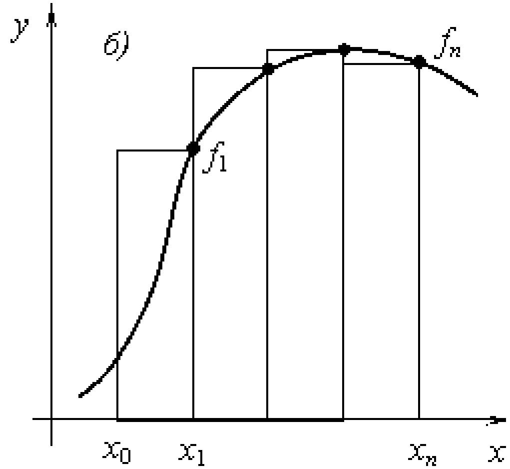
Подставляя $\varphi_i(x)$ в $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i(x)\,dx$ и интегрируя, получаем

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} c_i \int_{x_{i-1}}^{x_i} dx = \sum_{i=1}^{n} c_i\, x\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} = \sum_{i=1}^{n} c_i h_i$$

Таким образом, приближенное значение интеграла определяется суммой площадей прямоугольников, одна из сторон которых есть длина отрезка интегрирования h_i, а другая – аппроксимирующая константа.

Выбирая константу c_i равную значению подынтегральной функции в левой (рис. а) или правой (рис. б) границах отрезка $[x_{i-1}, x_i]$ приходим к формулам *левых* и *правых прямоугольников*, соответственно:





полагая

$$f_{i-1} = f(x_{i-1}),$$

$$f_i = f(x_i)$$

левых прямоугольников $$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_i f_{i-1} = h_1 f_0 + h_2 f_1 + \cdots + h_n f_{n-1}$$

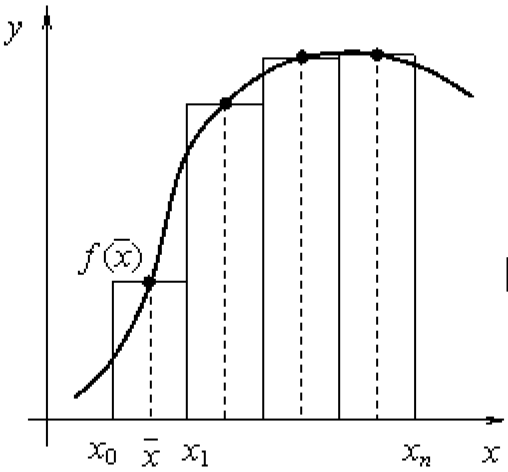
правых прямоугольников $$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_i f_i = h_1 f_1 + h_2 f_2 + \cdots + h_n f_n$$

В случае постоянного шага формулы интегрирования приобретают вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_i f_{i-1} = h(f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1})$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_i f_i = h(f_1 + f_2 + \cdots + f_n)$$

Наиболее широко на практике используется формула *средних прямоугольников*, в которой значение константы c_i выбирается равной значению подынтегральной функции в средней точке $\overline{x_i}$ отрезка интегрирования.



$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_i f(\overline{x_i})$$

$$\overline{x_i} = x_{i-1} + h/2$$

В случае постоянного шага интегрирования, когда $h_i = h$ формула средних прямоугольников будет иметь следующий вид

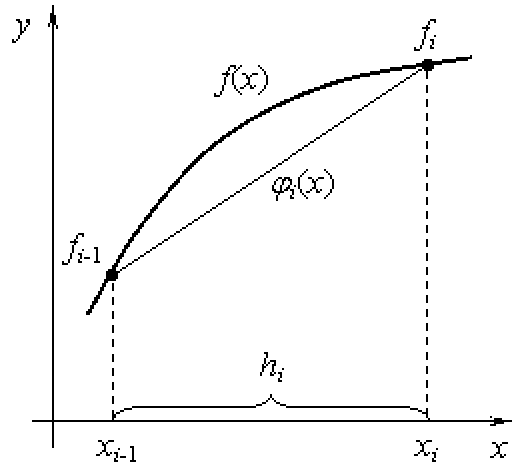
$$\int_a^b f(x)dx \approx h \sum_{i=1}^{n} f(\overline{x_i})$$

где $\overline{x_i} = a + h(i - 1/2)$

Из трех рассмотренных методов прямоугольников метод средних прямоугольников является наиболее точным.

Метод трапеций

На частичном отрезке интегрирования $[x_{i-1}, x_i]$ заменим подынтегральную функцию $f(x)$ интерполяционным полиномом первой степени, т.е. прямой, проходящей через точки (x_{i-1}, f_{i-1}), (x_i, f_i)



$$f(x) \approx \varphi(x) = f_{i-1} + \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}(x - x_{i-1})$$

Поставляя это выражение в формулу

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi_i(x)\,dx$$

и выполняя интегрирование по частичным отрезкам, приходим к формуле трапеций:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} h_i(f_{i-1} + f_i)$$

В случае постоянного шага интегрирования формула трапеций принимает вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}[f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{n-1} + f_n]$$ или $$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left[\frac{f_0 + f_n}{2} + \sum_{i=1}^{n} f_i\right]$$

Метод Симпсона (метод парабол)

Разобьем интервал интегрирования $[a, b]$ на четное число n равных отрезков с шагами h. На каждом отрезке $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ содержащем три узла, заменим подынтегральную функцию интерполяционным полиномом второй степени, т.е. параболой

$$f(x) \approx \varphi(x) = f_i + \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}(x - x_i) + \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{2h^2}(x - x_i)^2$$

Интегрируя это выражение на отрезке $[x_{i-1}, x_{i+1}]$, получим

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \varphi_i(x)dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f_i + \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}(x - x_i) + \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{2h^2}(x - x_i)^2 dx = $$
$$= \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1})$$

Приближенное значение интеграла на интервале $[a, b]$ получим суммированием частичных интегралов по всем отрезкам $[x_{i-1}, x_{i+1}]$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}}(f_{2i-2} + 4f_{2i-1} + f_{2i}) =$$
$$= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \ldots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n)$$

Это соотношение называется *формулой Симпсона* или *формулой парабол*.

Если подынтегральную функцию $f(x)$ интерполировать полиномом второй степени на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ с привлечением дополнительной точки $x_{i-\frac{1}{2}}$ – середины отрезка, то в этом случае число отрезков разбиения *n* может быть произвольным (не обязательно четным), а формула Симпсона в этом случае будет иметь вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}\sum_{i=1}^{n}\left(f_{i-1} + 4f_{i-\frac{1}{2}} + f_i\right) =$$

$$= \frac{h}{6}\left(f_0 + 4f_{\frac{1}{2}} + 2f_1 + 4f_{\frac{3}{2}} + 2f_2 + \ \ldots + 2f_{n-1} + 4f_{n-\frac{1}{2}} + f_n\right)$$

При этом $f_{i-\frac{1}{2}} = f(x_i - h/2), \qquad f_i = f(x_i)$

Полученная формула применима только в тех случаях, когда подынтегральная функция задана аналитически.

Формулы, используемые для приближенного вычисления интеграла, называются *квадратурными формулами* и имеют следующую структуру:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f_i =$$

где f_i - значения подынтегральной функции в узловых точках; A_i - *весовые коэффициенты*, независящие от функции $f(x)$

Погрешность формул Ньютона-Котеса

Методы левых и правых прямоугольников являются методами первого порядка.

$$|R_0| \leq \frac{1}{2}(b-a)hM_1$$

Методы средних прямоугольников и трапеций имеют второй порядок точности, при этом метод трапеций обладает вдвое большей по абсолютной величине погрешностью по сравнению с методом средних прямоугольников. Поэтому, если подынтегральная функция задана аналитически, то предпочтительнее из методов второго порядка применять метод средних прямоугольников вследствие его меньшей погрешности.

$$|R_0| \leq \frac{1}{24}(b-a)h^2M_2 \qquad |R_0| \leq \frac{1}{12}(b-a)h^2M_2$$

Метод Симпсона имеет четвертый порядок точности с очень малым численным коэффициентом. Формула Симпсона позволяет получить очень высокую точность, если четвертая производная подынтегральной функции не слишком велика. В противном случае, методы второго порядка точности могут дать большую точность, чем метод Симпсона.

$$|R_0| \leq \frac{1}{180}(b-a)h^2M_4$$

Например, для функции $f(x) = -25x^4 + 45x^2 - 7$ формула трапеций при $n = 2$ для интеграла в пределах $[-1, 1]$ дает точный результат, равный 4, тогда как по формуле Симпсона получим результат, несовпадающий даже по знаку $(-8/3)$.

Вычисление интеграла с заданной точностью

Используя приведенные выше оценки можно априори (до проведения расчета) определить шаг интегрирования h, при котором погрешность вычисленного результата гарантированно не превысит допустимый уровень погрешности ε. Однако на практике пользоваться априорными оценками погрешности не всегда удобно. Тогда контроль за точностью получаемого результата можно организовать следующим образом.

На каждом частичном интервале вычисляют значение интеграла с шагом интегрирования h и с шагом $h/2$. При необходимости вычислить результат с заданной точностью ε вычисления повторяют с последовательно уменьшающимся (вдвое) шагом до тех пор, пока не выполнится условие

$$\left|I^{(h/2)} - I^{(h)}\right| \le \varepsilon$$

При этом длина очередного интервала, посредством последовательного уменьшения (или увеличения) начальной длины вдвое, устанавливается такой, чтобы выполнялось неравенство

$$\left|I^{(h/2)} - I^{(h)}\right| \le \varepsilon \frac{h_i}{b-a}$$

Способ вычисления интеграла с автоматическим выбором шага “приспосабливается” к особенностям подынтегральной функции: в областях резкого изменения функции шаг уменьшается, а там, где функция меняется слабо, – увеличивается. Такого рода алгоритмы называются *адаптивными*.

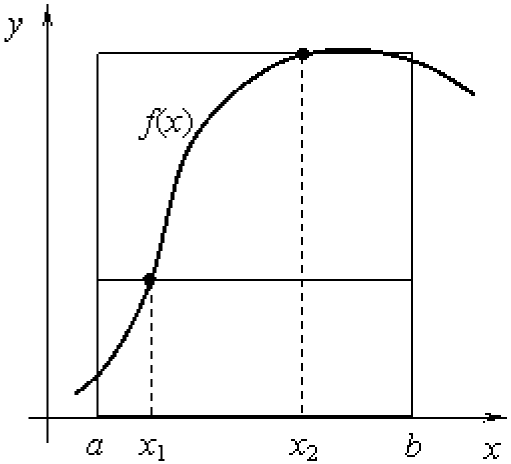
Интегрирование разрывных функций

Если подынтегральная функция в некоторых внутренних точках c_i, $(i = 1, 2, \dots)$ интервала интегрирования терпит разрыв первого рода (скачок), то интеграл вычисляют численно для каждого участка непрерывности отдельно и результат складывают. Например, в случае одной точки разрыва $x = c$ $(a < c < b)$ имеем

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx$$

Для вычисления каждого из интегралов в правой части можно использовать любой из рассмотренных выше методов.

Методы Монте-Карло
(Методы статистических испытаний)



На отрезке интегрирования $[a, b]$ выберем n случайных точек $x_1, x_2, \dots, x_n$, являющихся значениями случайной величины x с равномерным распределением на данном отрезке.

Для каждой точки вычислим площадь прямоугольника, одна сторона которого равна $b - a$, а вторая равна значению функции в данной точке $f(x_i)$. Тогда

$$S_i = \frac{(b-a)}{f(x_i)}$$

Вследствие случайности узла x_i, значение площадей S_i также будет носить случайный характер. В качестве приближенного значения интеграла можно принять результат усреднения площадей S_i.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{S_1 + S_2 + \ \dots + S_n}{n} = \frac{b-a}{n}\sum_{i=1}^{n} f(x_i)$$

Погрешность вычисления интеграла будет уменьшаться с ростом числа испытаний n по закону $\varepsilon \sim n^{-1/2}$.

Полученная формула формально совпадает с формулой правых прямоугольников, но отличие состоит в том, что расположение узлов интегрирования расположены не регулярно, а носит случайный характер.

Рассмотреть самостоятельно и законспектировать

Вычисление интегралов от быстроосциллирующих функций

Задачи.

Вычислить значение интеграла по формулам левых, правых, средних прямоугольников, по формуле трапеций и формуле Симпсона

$$\int_{-1}^{2}(3-x^2)(1-x)dx$$

на интервале $[2,-1]$ для $n = 10$ (Точное значение интеграла 5,25)