Тема 7. Численное дифференцирование и интегрирование.

7.1. Численное дифференцирование.

7.1.1. Постановка задачи. Примеры. Функция $y = f(x)$ задана таблицей $y_i = f(x_i)$ в равноотстоящих узлах $x_i = x_0 + ih \quad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$. Тогда, выбрав какое-либо множество из N+1 узлов и заменив функцию интерполяционным многочленом $P_N(x)$, можно вычислять $f'(x) \approx P_N^{'}(x)$.

1-ый интерполяционный многочлен Ньютона на узлах $x_0, \dots, x_4$:

$$y(x) \approx y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)(q-3)}{4!}\Delta^3 y_0, \quad q = \frac{x - x_0}{h},$$

$$y'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3q^2 - 6q + 2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{2q^3 - 9q^2 + 11q - 3}{12}\Delta^4 y_0\right)$$

2-ой интерполяционный многочлен Ньютона на узлах $x_0, \dots, x_4$:

$$y(x) \approx y_4 + q\Delta y_3 + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_2 + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_1 + \frac{q(q+1)(q+2)(q+3)}{4!}\Delta^4 y_0, \quad q = \frac{x - x_4}{h},$$

$$y'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_3 + \frac{2q+1}{2}\Delta^2 y_2 + \frac{3q^2 + 6q + 2}{6}\Delta^3 y_1 + \frac{2q^3 + 9q^2 + 11q + 3}{12}\Delta^4 y_0\right).$$

Интерполяционный многочлен Стирлинга на узлах $x_{-2}, \dots, x_2$:

$$y(x) \approx y_0 + q\frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2} + \frac{q^2}{2!}\Delta^2 y_{-1} + \frac{q(q^2 - 1^2)}{3!}\frac{\Delta^3 y_{-2} + \Delta^3 y_{-1}}{2} + \frac{q^2(q^2 - 1^2)}{4!}\Delta^4 y_{-2}, \quad q = \frac{x - x_0}{h},$$

$$y'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2} + q\Delta^2 y_{-1} + \frac{3q^2 - 1}{6}\cdot\frac{\Delta^3 y_{-2} + \Delta^3 y_{-1}}{2} + \frac{2q^3 - q}{12}\Delta^4 y_{-2}\right).$$

Обычно производные тоже ищут в узлах сетки. Тогда формулы упрощаются.

Первая и вторая формулы Ньютона в узлах для вычисления производных на краях таблицы:

$$y'(x_0) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 - \frac{1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{1}{3}\Delta^3 y_0 - \dots + \frac{(-1)^N}{N}\Delta^N y_0\right),$$

$$y'(x_0) \approx \frac{1}{h}\left(\Delta y_{-1} + \frac{1}{2}\Delta^2 y_{-2} + \frac{1}{3}\Delta^3 y_{-3} + \dots + \frac{1}{N}\Delta^N y_{-N}\right).$$

Формула Стирлинга в узлах для вычисления производных в середине таблицы:

$$y'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2} - \frac{1}{6}\cdot\frac{\Delta^3 y_{-2} + \Delta^3 y_{-1}}{2} + \frac{1}{30}\cdot\frac{\Delta^5 y_{-3} + \Delta^5 y_{-2}}{2} - \dots\right).$$

В вычислениях на компьютере удобно перейти от разностей к значениям самой функции:

$$y'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2}\right) = \frac{y_1 - y_{-1}}{2h}, \quad y'(x) \approx \frac{1}{h}\left(\frac{\Delta y_{-1} + \Delta y_0}{2} - \frac{1}{6}\cdot\frac{\Delta^3 y_{-2} + \Delta^3 y_{-1}}{2}\right) = \frac{y_{-2} - 8y_{-1} + 8y_1 - y_2}{12h}.$$

Производные более высоких порядков находят аналогично дифференцированием интерполяционного многочлена. С ростом порядка производной резко падает точность численного дифференцирования.

7.1.2. **Погрешности численного дифференцирования**:

а) ***погрешности усечения***, вызванные заменой функции на интерполяционный многочлен;

б) ***погрешности округления***, вызванные неточным заданием значений функции.

Для формул Ньютона погрешность усечения $\frac{1}{N+1}h^N\left|f^{(N+1)}(\xi)\right|, \quad \xi \in (x_0, x_N) \vee \xi \in (x_{-N}, x_0)$. Но ей пользоваться нельзя, так как мы об этой производной ничего не знаем! На практике предполагается, что $f(x)$ не является быстро осциллирующей с периодом порядка h. Тогда малость разностей k-го порядка свидетельствует о хорошем приближении f(x). С уменьшением шага h погрешность усечения уменьшается.

Погрешности округления ведут себя хуже. Если абсолютная погрешность вычисления самой функции равна ε, то при вычислении k-тых разностей получаем $2^k\varepsilon$! К тому же погрешность округления обратно пропорциональна шагу сетки h. Поэтому в целом, задача численного дифференцирования неустойчива к ошибкам округления.

7.1.3. Выбор оптимального шага численного дифференцирования.

Для формулы $y'(x) \approx \dfrac{y_1 - y_{-1}}{2h}$, суммарная погрешность оценивается величиной $\dfrac{h^2}{6}M_3 + \dfrac{2\varepsilon}{2h}$, где $M_3 = \max\left|f^{(3)}(\xi)\right|, \quad \xi \in (x_{-1}, x_1)$. Минимум этой погрешности достигается, если $h = \sqrt[3]{3\varepsilon / M_3}$.

7.2. Численное интегрирование в одномерном случае.

7.2.1. Постановка задачи. Вычислить приближенно однократный интеграл от непрерывной и достаточно гладкой функции $u(x)$: $I = \int_a^b u(x)\rho(x)dx$, $\rho(x) > 0$ – весовая функция. Пределы могут быть бесконечными, интеграл может вычисляться от функции с интегрируемой особенностью в конечном числе точек.

7.2.2. Общий вид квадратуры: $I = \int_a^b f(x)\rho(x)dx = \sum_{i=0}^{N} A_i f(x_i) + R_N = I_N + R_N$, I_N – ***квадратура,*** R_N – ***остаточный член***, A_k – ***коэффициенты квадратуры***, x_k – ***узлы квадратуры***.

7.2.3. Квадратурные формулы с равноотстоящими узлами. Если ввести на $[a,b]$ равномерную сетку $\omega = \{x = a + ih, i = 0,...,N, h = (b-a)/N\}$ и вычислить значения $y_i = f(x_i)$ и/или $y_{i+1/2} = f(x_i + 0.5h)$, то можно построить ***квадратуры Ньютона-Котеса***. Примеры для $\rho(x) \equiv 1$:

Формула средних: $I_N = \sum_{i=1}^{N} f(x_i + 0.5h)h, \quad R_N = \dfrac{(b-a)}{24}h^2 f''(\xi), \quad \xi \in (a,b).$

Формула трапеций: $I_N = \sum_{k=1}^{N} \dfrac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}h, \quad R_N = -\dfrac{(b-a)}{12}h^2 f''(\xi), \quad \xi \in (a,b).$

Формула Симпсона: $I_N = I_{2M} = \sum_{i=1}^{M} \dfrac{f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i})}{6}2h, \quad R_N = -\dfrac{(b-a)}{180}h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a,b).$

Вывод формулы порядка *m* осуществляется путем замены $f(x)$ на интерполяционный многочлен степени *m*. Если функция задана таблично, то остаточный член можно вычислить приближенно через среднее значение соответствующей производной: $f^{(m)}(\xi) \approx \overline{\Delta^{(m)}y}$.

7.2.4. Выбор шага интегрирования. Для вычисления интеграла с заданной точностью шаг *h* выбирают по оценке остаточного члена: $|R_N| < 0.5\varepsilon$, значения функции округляют с точностью $< 0.5\varepsilon$. Другой прием – вычисление интеграла на вложенных сетках с шагами $h, h/2, h/4$. Если $|I_N - I_{2N}| < \varepsilon$, то $I \approx I_{2N}$, иначе удваиваем число узлов. Начальный шаг $h = \sqrt[m]{\varepsilon}$, где *m* – порядок погрешности квадратуры по h (*m*=2 для формулы трапеций, *m*=4 для формулы Симпсона). ***Правило Рунге***: приближенная погрешность формулы трапеций $\Delta \approx \dfrac{1}{3}|I_N - I_{2N}|$, Симпсона – $\Delta \approx \dfrac{1}{15}|I_N - I_{2N}|$.

7.2.5. Интегралы от разрывных функций. Несобственный интеграл с особенностью в точке $c \in [a,b]$ вычисляется по правилу $I = \int_a^b f(x)dx \approx \int_a^{c-\delta_1} f(x)dx + \int_{c+\delta_2}^{b} f(x)dx \approx I_1 + I_2$, где параметры $\delta_{1,2}$ выбирают из условия $\left|\int_{c-\delta_1}^{c+\delta_2} f(x)dx\right| < 0.5\varepsilon$, а точность квадратур $I_{1,2}$ не превосходит 0.25ε .

Задачи

Задача 7.1. Для функции $y = f(x)$ построить таблицу точных значений в узлах интерполяции $x_i = a + ih \; (i = 0,...,N, h = \dfrac{b-a}{N})$ и составить с помощью интерполяционных формул Ньютона (вблизи концов) и Стирлинга (в середине) таблицу первых производных $y'(x)$ в узлах сетки $\bar{x}_k = \bar{a} + k\bar{h} \; (k = 0,...,M, \bar{h} = \dfrac{\bar{b} - \bar{a}}{M})$, если $\bar{a} = a - 0.75(b-a)$, $\bar{b} = b + 0.75(b-a)$, $M = \dfrac{10}{4}N$. Сравнить результат с точным значением $y'(x)$. **Варианты задания:**

1) $f(x) = x\ln x, \quad a = 0.7, \quad b = 1.2, \quad N = 4$; 2) $f(x) = ch\,x, \quad a = -0.2, \quad b = 0.2, \quad N = 4$;

3) $f(x)=sh\,x,\quad a=0.3,\quad b=0.7,\quad N=4$; 4) $f(x)=\dfrac{1}{\sin x},\quad a=0.4,\quad b=0.8,\quad N=4$;

5) $f(x)=tg^2 x,\quad a=-0.1,\quad b=0.3,\quad N=4$; 6) $f(x)=arctg\,\pi x,\quad a=-0.2,\quad b=0.2,\quad N=4$;

7) $f(x)=\ln(1+\sqrt{x}),\quad a=0.1,\quad b=0.5,\quad N=4$; 8) $f(x)=\ln(1+\sin x),\quad a=-0.1,\quad b=0.3,\quad N=4$.

Задача 7.2. В задаче 7.1 округлить значения функции $y_i=f(x_i)$ до 5-го знака после запятой, вычислить значения первой производной и оценить погрешности усечения и округления в точках $\overline{x}_k$. Сравнить суммарную оценку с реальной погрешностью. **Варианты задания:** те же.

Указание: для формул Ньютона и Стирлинга интерполяционные полиномы на одинаковой системе точек совпадают и погрешность усечения оценивается величиной $\dfrac{1}{N+1}h^N\left|f^{(N+1)}(\xi)\right|$. Погрешности округления можно оценить величиной $\dfrac{(N+1)\varepsilon}{h}$. Суммарная оценка погрешности $\dfrac{h^N}{N+1}\left|f^{(N+1)}(\xi)\right|+\dfrac{(N+1)\varepsilon}{h}$.

Задача 7.3. Вычислить приближенно интеграл по формуле Симпсона для $N=6$ и оценить остаточный член. **Варианты задания**:

$$1)\ I=\int_0^{1.2}\frac{xdx}{1+x};\quad 2)\ I=\int_0^{1.2}\ln(1+x^2)dx;\quad 3)\ I=\int_0^{1.2}\sin x^2dx;\quad 4)\ I=\int_0^{1.2}\cos x^2dx;$$

$$5)\ I=\int_4^{5.2}\ln x\,dx;\quad 6)\ I=\int_1^{2.2}\frac{dx}{1+x};\quad 7)\ I=\int_2^{3.2}\frac{e^xdx}{1+\ln x};\quad 8)\ I=\int_0^{1.2}\frac{dx}{1+\sin^2 x}.$$

Задача 7.4. Вычислить шаг интегрирования h и минимальное число узлов сетки N по оценке остаточного члена и точности $\varepsilon=10^{-4}$ для формул трапеций и Симпсона. **Варианты задания**:

$$1)\ I=\int_0^1\frac{dx}{1+x^{3/2}};\quad 2)\ I=\int_0^1\frac{dx}{1+x^2};\quad 3)\ I=\int_0^1\frac{dx}{\sqrt{1+x^2}};\quad 4)\ I=\int_0^1\sin x^2dx;$$

$$5)\ I=\int_0^1\ln(1+x^2)dx;\quad 6)\ I=\int_0^1 e^{-x^2}dx;\quad 7)\ I=\int_0^1 e^{-\sin^2 x}dx;\quad 8)\ I=\int_0^1 sh^2x\,dx.$$

Указание: Если соответствующие производные ограничены, то формулы для определения шага таковы:

$$\left|R_N\right|\le\frac{(b-a)}{12}h^2\max\left|f^{(2)}(\xi)\right|,\quad \xi\in(a,b)\quad => \quad h_T\le\sqrt{\frac{12\varepsilon}{\max\left|f^{(2)}(\xi)\right|(b-a)}};$$

$$\left|R_N\right|\le\frac{(b-a)}{180}h^4\max\left|f^{(4)}(\xi)\right|,\quad \xi\in(a,b)\quad => \quad h_S\le\sqrt[4]{\frac{180\varepsilon}{\max\left|f^{(4)}(\xi)\right|(b-a)}}.$$

В противном случае необходимо выделить особенности производных, поделив интегралы на части.

Задача 7.5. Вычислить интегралы по формуле трапеций с точностью $\varepsilon=10^{-4}$ с помощью метода вложенных сеток. **Варианты задания**:

$$1)\ I=\int_0^{\pi/2}\frac{\cos xdx}{1+x};\quad 2)\ I=\int_0^1\frac{dx}{1+x^3};\quad 3)\ I=\int_1^2 x\lg xdx;\quad 4)\ I=\int_1^2\frac{\lg x}{x}dx;$$

$$5)\ I=\int_1^2\frac{\cos x}{x}dx;\quad 6)\ I=\int_0^1\sqrt{x}\cos xdx;\quad 7)\ I=\int_0^{2\pi/3}\frac{\sin x}{\sqrt{1+x}}dx;\quad 8)\ I=\int_0^{\pi/2}\frac{\cos x}{\sqrt{1+x^2}}dx.$$

Указание: число точек стартовой сетки выбираем по формуле $N=\left[\dfrac{b-a}{h}\right],\quad h=\sqrt{\dfrac{12\varepsilon}{(b-a)}}$.

Задача 7.6. Вычислить несобственные интегралы по формуле трапеций с точностью $\varepsilon=10^{-4}$.
Варианты задания:

$$1)\int_1^2\frac{dx}{\sqrt[4]{2+x-x^2}};\quad 2)\int_0^1\frac{xdx}{\sqrt{1-x^2}};\quad 3)\int_0^1\frac{dx}{(1+x)\sqrt{x}};\quad 4)\int_0^1\frac{x^2dx}{\sqrt{1-x^2}};$$

$$5)\int_1^2\frac{dx}{x\sqrt{x^2-1}};\quad 6)\int_0^1\frac{e^{-x}dx}{\sqrt{x}};\quad 7)\int_1^2\frac{e^{-x}dx}{\sqrt{x-1}\sqrt{2-x}};\quad 8)\int_0^1\frac{e^{-x}dx}{\sqrt{\sin x}}.$$