Министерство образования и науки Российской Федерации.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский государственный технический университет»

Факультет Автоматики и вычислительной техники Кафедра Вычислительной техники

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА Численные методы интегрирования и дифференцирования

Методические указания к лабораторной работе для студентов II курса дневного отделения АВТФ Образовательные программы: 09.03.01 «Информатика и ВТ»; 09.03.04 «Программная инженерия»; 12.03.01 «Приборостроение»

Содержание

1 Описание лабораторной работы	3
1.1 Задание «Численное дифференцирование»	3
1.2 Задание «Численное интегрирование»	3
2 Варианты контрольных заданий	
3 Краткая теория к лабораторной работе	7
3.1. Численное дифференцирование	
3.1.1 Аппроксимация производных.	7
3.1.2 Использование интерполяционных полиномов	8
3.1.3 Погрешность численного дифференцирования	9
3. 2. Численное интегрирование	
3.2.1 Классификация методов.	11
3.2.2 Интерполяционные методы Ньютона-Котеса	13
3.2.2.1 Методы прямоугольников	13
3.2.2.2 Метод трапеций	14
3.2.2.3 Метод Симпсона (метод парабол)	15
3.2.3 Погрешность формул Ньютона-Котеса.	16
3.2.4 Вычисление интеграла с заданной точностью.	18
3.2.5 Особые случаи численного интегрирования	18
3.2.6 Вычисление интегралов от быстроосциллирующих функций	19
4 Вопросы самоконтроля	21
Литература	21
Приложение	21
Примеры выполнения задания лабораторной работы и способы применения средств Math	
для решения задач численного дифференцирования и интегрирования функций	22
П1. Файл: ЛабРаб 6 Примеры ЧислДифф.xmcd	22
П2. Файл: ЛР6 Пример ВычислЭкспер ЧислДифф.хmcd	22
П3. Файл: ЛабРаб 6 Примеры ЧислИнтегр.xmcd	
П4. Файл: ЛР 6 Примеры и графики Формул интегр (Компенсация).xmcd	22
П5. Файл: Пример ВычИнтегр на осн Интерполяции).xmcd	22
П6. Файл: Примеры ЧислДифф на ОснИнтерпол.xmcd	22

1 Описание лабораторной работы

1.1 Задание «Численное дифференцирование»

Цель: Научится применять численные методы дифференцирования функций, заданных аналитическим выражением и таблично; исследовать точность различных аппроксимирующих формул, выбирать способы и параметры алгоритмов для достижения результатов требуемого качества.

Задание 1.1.1. Вычислить в указанных точках приближенные значения первой и второй производных функции, заданной таблично, используя:

- а) левые и правые разностные отношения (3.4) и (3.5);
- б) центральное разностное отношение (3.7);
- в) приближенное соотношение (3.8) для второй производной.

Пояснения. Табличные значения функций и точки (a, b, c), в которых нужно вычислить производные, приведены в таблице 1.

Задание 1.1.2. Построить графики первой и второй производных функции, заданной аналитическим выражением, используя приближенные соотношения (3.5), (3.7) и (3.8) и точные выражения для соответствующих производных. Исследовать поведение погрешности формул численного дифференцирования от значения шага h.

Пояснения. Для функции, заданной аналитическим выражением, приближенные формулы (3.5), (3.7) и (3.8) можно записать следующим образом:

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}, \frac{df}{dx} \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},$$
$$\frac{d^2f}{dx^2} \approx \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2},$$

где h — малое приращение аргумента (шаг). Используя приведенные формулы, постройте графики первой и второй производных для разных значений h, например, 0.5, 0.1 и 0.01. Исходные данные для выполнения задания приведены в таблице 2.

Для исследования зависимости погрешностей формул численного дифференцирования от значения шага h, можно определить функции O1(h) = |p1(x) - g(x,h)| и O2(h) = |p1(x) - u(x,h)| и построить их графики в интервале изменения h от 10^{-15} до 1 при некотором фиксированном значении аргумента **х**. По графикам определите оптимальное значение шага дифференцирования.

Примечание: Для построение графиков погрешностей определите переменную диапазон i:=0..15 и вектор $h_i:=10^{-i.}$ Постройте графики $O1(h_i)$ и $O2(h_i)$ от h_i . Для обеих осей выберите логарифмический масштаб.

1.2 Задание «Численное интегрирование»

Цель: Научится применять численные методы интегрирования для вычисления определенных интегралов от функций, заданных аналитическим выражением и таблично; оценить точность различных методов Ньютона-Котеса при фиксированном шаге интегрирования; составить программы для вычисления определенных интегралов с заданной точностью в соответствии с вариантами подынтегральных функций контрольных задания из таблицы 3.

Задание 1.2.1. Составить программы для вычисления определенного интеграла, например, методом средних прямоугольников, методом трапеций и методом Симпсона.

Пояснения. Исходными данными для программы являются: подынтегральная функция f(x), пределы интегрирования (a, b) и шаг интегрирования (a, b) и шаг

Для проверки программы вычислите любой табличный интеграл и сравните полученное значение с точным значением этого интеграла. Расчеты проведите с разным шагом интегрирования (например, для n=1, 2, 4, 10, 50, 100). Результаты тестирования программ представьте в виде таблицы 1, например,

Таблица 1

Подынтегральная	егральная Пределы Точное			Приближенное значение				
функция	интегрирования значение интеграла	интегрирования	значение интеграла		n	Метод прямоугольников	Метод трапеций	Метод парабол
			1			_		
			2					
			100					

Проанализируйте полученный данные и сделайте вывод о точности различных методов при одинаковом шаге интегрирования.

Задание 1.2.2. Численно найти приближенное значение определенного интеграла с заданной точностью.

Пояснения. Используя составленные ранее подпрограммы, напишите программу для вычисления определенного интеграла с заданной точностью одним из трех методов. Результаты расчетов представьте в виде таблицы 2:

Таблина 2

Подынтегральная	Пределы	Точность	Конечное	Приближенное
функция	интегрирования	ТОЧНОСТВ	n	значение
		10-1		
		10-3		
		10 ⁻⁵		
		10-8		

Вычисления начните при количестве интервалов интегрирования n равном 2. Исходные данные (интегралы, точность) приведены в приложении к работе (таблица 4).

Задание 1.2.3.

а) Составить программу для вычисления определенного интеграла от функции, заданной таблично (значения аргумента могут быть заданы с любым, в том числе, непостоянным шагом).

Пояснения. Исходные данные содержаться в текстовом файле в виде пар значений (x, y), количество которых может быть произвольным, но для определенности не более 100. Для вычисления интеграла используйте метод трапеций. Программа должна организовать чтение значений аргумента и функции и запись их в соответствующие массивы. После чего в цикле

следует вычислить интегральную сумму (по формуле метода трапеций). Пределы интегрирования определяются начальным и конечным значениями аргумента в таблице.

Результаты расчетов представьте в виде таблицы 3:

Таблица 3

$x_{ m min}$	$x_{ m max}$	n	Значение интеграла

б) Вычислить этот же интеграл с помощью пакета Mathcad. Для этого воспользуйтесь сеткой значений подынтегральной функции y(x), которую определите с помощью функции кусочно-линейной интерполяции linterp. Сравните результаты расчетов со значением интеграла, полученным в предыдущем задании.

Задание 1.2.4. Используя встроенные в Mathcad возможности программирования написать собственную программу-функцию, реализующую метод Симпсона для численного интегрирования функций, заданных аналитически.

Пояснение. В качестве примера приведена программа, иллюстрирующая реализацию метода трапеций. Функция trapez имеет четыре параметра: f — интегрируемая функция, которая должна быть определена, a, b — пределы интегрирования, n — количество отрезков разбиения интегрирования.

В приложении к отчету о выполненной лабораторной работе необходимо обязательно представить распечатки документа Mathcad с выполненными заданиями и демонстрационным материалом по описанию вычислительного процесса и анализу результатов вычислении.

2 Варианты контрольных заданий

Таблиц											<u>`аблиц</u> а 4
Вариант	x_0	\mathcal{X}_{1}	x_2	x_3	y_0	y_1	y_2	y_3	а	b	C
1	0.2	0.4	0.6	0.8	12.2	8.7	4.6	6.7	0.33	0.48	0.7
2	1.0	1.5	2.0	2.5	0.52	0.31	0.38	0.89	1.3	1.7	2.2
3	0.0	0.1	0.2	0.3	0.0	1.45	18.3	17.6	0.05	0.18	0.22
4	0	2	4	6	-2.5	0.17	2.5	0.3	0.5	2.5	5.5
5	0.1	0.3	0.5	0.7	23.4	17.8	0.4	8.9	0.25	0.35	0.6
6	1	2	3	4	0.06	0.11	1.78	0.09	1.3	2.5	3.8
7	0.5	1.0	1.5	2.0	4.5	3.7	1.8	1.1	0.76	1.3	1.8
8	0.0	0.3	0.6	0.9	0.0	12.3	13.1	12.2	0.25	0.4	0.7
9	1.2	1.4	1.6	1.8	3.5	1.3	1.1	2.9	1.25	1.55	1.7
10	0.0	2.5	5.0	7.5	0.01	0.27	0.89	0.56	1.5	3.8	6.1
11	0.2	0.4	0.6	0.8	2.2	0.87	0.46	0.67	0.3	0.41	0.72
12	1.0	1.5	2.0	2.5	0.43	0.28	0.16	0.76	1.45	1.68	2.1
13	0.0	0.1	0.2	0.3	0.22	1.57	12.6	14.1	0.04	0.16	0.27

14	0	2	4	6	0.2	0.76	1.6	0.9	1.2	2.3	5.1
15	0.1	0.3	0.5	0.7	13.3	7.4	1.2	3.9	0.22	0.32	0.62
16	1	2	3	4	0.2	1.2	4.7	0.8	1.4	2.6	3.2
17	0.5	1.0	1.5	2.0	3.2	4.5	2.6	1.4	0.76	1.2	1.6
18	0.0	0.3	0.6	0.9	0.3	2.3	3.6	2.7	0.22	0.45	0.8
19	1.3	1.6	1.9	2.2	1.4	0.7	2.6	1.6	1.5	1.8	2.0
20	0.0	2.4	4.8	7.2	1.06	0.01	-0.2	0.06	1.0	3.0	5.0

Таблица 5

ВариантФункцияВариантФункция1 $\sin(x)e^{-0.5x}\sqrt{a^2+b^2}$, $x \in [0,2\pi]$ 11 $\frac{x^2}{x^2+1}$, $x \in [0,3]$ 2 $e^{-x^2/5}$, $x \in [-5,5]$ 12 $x\sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 3 $\sin^2(0.5x) \cdot \sqrt{x}$, $x \in [0,10]$ 13 $\frac{x}{5^x}$, $x \in [0,5]$ 4 $\frac{x}{x^2+1}$, $x \in [0,10]$ 14 $x+\sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 5 $\frac{x^3}{e^x}$, $x \in [0,8]$ 15 $\frac{\cos x}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ 6 $\frac{\sin x}{x}$, $x \in [2,10]$ 16 $\frac{1}{x^4+1}$, $x \in [0,4]$ 7 $(x-5)^2 \arctan x$, $x \in [0,6]$ 17 $\sqrt{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 8 $\frac{\sin x}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ 18 $x-\arcsin x$, $x \in [-0.5,0.5]$ 9 $\sqrt[3]{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^2 x$, $x \in [0,2\pi]$ 10 $\frac{\sqrt{x}-1}{x^2+1}$, $x \in [0,10]$ 20 $\sin(\cos x)$, $x \in [0,2\pi]$				таолица .
2 $e^{-x^2/5}$, $x \in [-5,5]$ 12 $x \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 3 $\sin^2(0.5x) \cdot \sqrt{x}$, $x \in [0,10]$ 13 $\frac{x}{5^x}$, $x \in [0,5]$ 4 $\frac{x}{x^2+1}$, $x \in [0,10]$ 14 $x + \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 5 $\frac{x^3}{e^x}$, $x \in [0,8]$ 15 $\frac{\cos x}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ 6 $\frac{\sin x}{x}$, $x \in [2,10]$ 16 $\frac{1}{x^4+1}$, $x \in [0,4]$ 7 $(x-5)^2 \arctan x$, $x \in [0,6]$ 17 $\sqrt{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 8 $\frac{\sin x}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ 18 $x - \arcsin x$, $x \in [-0.5,0.5]$ 9 $\sqrt[3]{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^2 x$, $x \in [0,2\pi]$	Вариант	Функция	Вариант	Функция
3 $\sin^{2}(0.5x) \cdot \sqrt{x}$, $x \in [0,10]$ 13 $\frac{x}{5^{x}}$, $x \in [0,5]$ 4 $\frac{x}{x^{2}+1}$, $x \in [0,10]$ 14 $x + \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 5 $\frac{x^{3}}{e^{x}}$, $x \in [0,8]$ 15 $\frac{\cos x}{1+x^{2}}$, $x \in [-5,5]$ 6 $\frac{\sin x}{x}$, $x \in [2,10]$ 16 $\frac{1}{x^{4}+1}$, $x \in [0,4]$ 7 $(x-5)^{2} \arctan x$, $x \in [0,6]$ 17 $\sqrt{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 8 $\frac{\sin x}{1+x^{2}}$, $x \in [-5,5]$ 18 $x - \arcsin x$, $x \in [-0.5,0.5]$ 9 $\sqrt[3]{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^{2} x$, $x \in [0,2\pi]$	1	$\sin(x)e^{-0.5x}\sqrt{a^2+b^2}$, $x \in [0,2\pi]$	11	$\frac{x^2}{x^2+1}$, $x \in [0,3]$
4 $\frac{x}{x^2+1}$, $x \in [0,10]$ 14 $x + \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 5 $\frac{x^3}{e^x}$, $x \in [0,8]$ 15 $\frac{\cos x}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ 6 $\frac{\sin x}{x}$, $x \in [2,10]$ 16 $\frac{1}{x^4+1}$, $x \in [0,4]$ 7 $(x-5)^2 \arctan x$, $x \in [0,6]$ 17 $\sqrt{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 8 $\frac{\sin x}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ 18 $x - \arcsin x$, $x \in [-0.5,0.5]$ 9 $\sqrt[3]{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^2 x$, $x \in [0,2\pi]$	2	$e^{-x^2/5}, x \in [-5,5]$	12	$x\sin x, \ x \in [0, 2\pi]$
5 $\frac{x^{3}}{e^{x}}, x \in [0,8]$ 15 $\frac{\cos x}{1+x^{2}}, x \in [-5,5]$ 6 $\frac{\sin x}{x}, x \in [2,10]$ 16 $\frac{1}{x^{4}+1}, x \in [0,4]$ 7 $(x-5)^{2} \arctan x, x \in [0,6]$ 17 $\sqrt{x} \sin x, x \in [0,2\pi]$ 8 $\frac{\sin x}{1+x^{2}}, x \in [-5,5]$ 18 $x-\arcsin x, x \in [-0.5,0.5]$ 9 $\sqrt[3]{x} \sin x, x \in [0,2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^{2} x, x \in [0,2\pi]$	3	$\sin^2(0.5x) \cdot \sqrt{x} , \ x \in [0, 10]$	13	$\frac{x}{5^x}, \ x \in [0,5]$
$ \frac{\sin x}{x}, x \in [2,10] \qquad 16 \qquad \frac{1}{x^4 + 1}, x \in [0,4] 7 \qquad (x-5)^2 \arctan x, x \in [0,6] \qquad 17 \qquad \sqrt{x} \sin x, x \in [0,2\pi] 8 \qquad \frac{\sin x}{1+x^2}, x \in [-5,5] \qquad 18 \qquad x-\arcsin x, x \in [-0.5,0.5] 9 \qquad \sqrt[3]{x} \sin x, x \in [0,2\pi] \qquad 19 \qquad \frac{x}{2} + \sin^2 x, x \in [0,2\pi] $	4	$\frac{x}{x^2+1}$, $x \in [0,10]$	14	$x + \sin x, \ x \in [0, 2\pi]$
7 $(x-5)^2 \arctan x, x \in [0,6]$ 17 $\sqrt{x} \sin x, x \in [0,2\pi]$ 8 $\frac{\sin x}{1+x^2}, x \in [-5,5]$ 18 $x-\arcsin x, x \in [-0.5,0.5]$ 9 $\sqrt[3]{x} \sin x, x \in [0,2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^2 x, x \in [0,2\pi]$	5	$\frac{x^3}{e^x}, \ x \in [0,8]$	15	$\frac{\cos x}{1+x^2}, \ x \in [-5,5]$
8 $\frac{\sin x}{1+x^2}$, $x \in [-5,5]$ 18 $x - \arcsin x$, $x \in [-0.5,0.5]$ 9 $\sqrt[3]{x} \sin x$, $x \in [0,2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^2 x$, $x \in [0,2\pi]$	6	$\frac{\sin x}{x}$, $x \in [2,10]$	16	$\frac{1}{x^4+1}$, $x \in [0,4]$
9 $\sqrt[3]{x} \sin x, \ x \in [0, 2\pi]$ 19 $\frac{x}{2} + \sin^2 x, \ x \in [0, 2\pi]$	7	$(x-5)^2 \arctan x, x \in [0,6]$	17	$\sqrt{x}\sin x, \ x \in [0, 2\pi]$
	8	$\frac{\sin x}{1+x^2}, \ x \in [-5,5]$	18	$x - \arcsin x, \ x \in [-0.5, 0.5]$
10 $\frac{\sqrt{x-1}}{x^2+1}$, $x \in [0,10]$ 20 $\sin(\cos x)$, $x \in [0,2\pi]$	9	$\sqrt[3]{x}\sin x, \ x \in [0, 2\pi]$	19	$\frac{x}{2} + \sin^2 x , \ x \in [0, 2\pi]$
N 11	10	$\frac{\sqrt{x}-1}{x^2+1}, \ x \in [0,10]$	20	$\sin(\cos x), x \in [0, 2\pi]$

Таблица 3

№	Интеграл	ε	Метод	№	Интеграл	ε	Метод
1	$\int_{0}^{1} \sqrt{1+x} dx$	10-6	средних прямоугольник ов	11	$\int_{0}^{1} Cos(x^{2} + x) dx$	10-6	трапеций
2	$\int_{0}^{1} x^2 \sqrt{1 - x^3} dx$	10-5	трапеций	12	$\int_{0}^{\pi/3} x Sin(x^3) dx$	10-8	Симпсона
3	$\int_{0}^{1} \left(e^{x}-1\right)^{2} e^{x} dx$	10-8	Симпсона	13	$\int_{0}^{\pi} Sin(Cos(2x+1)) dx$	^x 10 ⁻⁶	средних прямоугольни ков

4	$\int_{1}^{e} \frac{dx}{x\sqrt{1-\ln\left(x\right)}}$	10-5	средних прямоугольник ов	14	$\int_{0}^{\pi/4} \ln\left(1 + Cosx\right) dx$	10 ⁻⁵	трапеций
5	$\int_{2}^{5} \frac{\cos^{2} x}{\ln x} dx$	10-8	трапеций	15	$\int_{0}^{\pi/3} \ln\left(1 + \sqrt{Sinx}\right) dx$	^x 10 ⁻⁸	Симпсона
6	$\int_{0}^{\pi/2} x \cdot Cosx \cdot dx$	10-6	Симпсона	16	$\int_{0.1}^{2} \frac{Sinx}{\sqrt{x}} dx$	10 ⁻⁵	средних прямоугольни ков
7	$\int_{0}^{1} Cos(xe^{-3x}) dx$	10-5	средних прямоугольник ов	17	$\int_{0}^{\pi/4} x^{3} Cos(x^{2}) dx$	10-8	трапеций
8	$\int_{1}^{2} x^{-1} \ln\left(1+x\right) dx$	10-8	трапеций	18	$\int_{0}^{1} chx^{2} dx$	10-6	Симпсона
9	$\int_{1}^{2} x^{-1} e^{x} dx$	10-8	Симпсона	19	$\int_{\pi/2}^{\pi} \sqrt{x} e^{-x} dx$	10 ⁻⁵	средних прямоугольни ков
10	$\int_{1}^{2} sh(x^{2}) dx$	10 ⁻⁵	средних прямоугольник ов	20	$\int_{0.1}^{2} \frac{Cos\left(x^{2}\right)}{x+x^{3}} dx$	10-8	трапеций

3 Краткая теория к лабораторной работе

3.1. Численное дифференцирование

3.1.1 Аппроксимация производных.

Напомним, что *производной* функции y = f(x) называется предел отношения приращения функции Δy к соответствующему приращению аргумента Δx при стремлении Δx к нулю:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$
, $\Delta y = f(x + \Delta x) - f(x)$. (3.1)

Обычно для вычисления производных используют готовые формулы (таблицу производных) и к выражению (3.1) не прибегают. Однако в численных расчетах на компьютере использование этих формул не всегда удобно и возможно. В частности, функция y = f(x) может быть задана в виде таблицы значений (полученных, например, в результате численного расчета). В таких случаях производную приближенно можно найти опираясь на формулу (3.1). Полагая Δx равным некоторому конечному числу, получают приближенное равенство для вычисления производной

$$f'(x) \approx \frac{\Delta y}{\Delta x}$$
. (3.2)

Это соотношение называется аппроксимацией (приближением) производной с помощью конечных разностей (значения Δx и Δy в формуле (3.2) конечны в отличие от их бесконечно малых значений в (3.1)).

Соотношение (3.2) может быть использовано для приближенного вычисления производной от функции, заданной как аналитическим выражением, так и таблично. В

первом случае 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. В случае, когда 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 (3.2) может давать существенную погрешность. Вопросы оценки погрешностей, возникающих при численном дифференцировании, будут рассмотрены ниже.

Сейчас обратимся к рассмотрению более общего подхода к задаче численного дифференцирования функции, заданной таблицей значений, в основе которого лежит использование интерполяционных полиномов.

3.1.2 Использование интерполяционных полиномов.

Пусть в точках $x_0, x_1, ..., x_n$ известны значения функции $y = f(x) : y_0, y_1, ..., y_n$. 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

$$\frac{d^k f(x)}{dx^k} \approx \frac{d^k P_n(x)}{dx^k} \,. \tag{3.3}$$

Однако на практике редко прибегают к аппроксимации функции одним интерполяционным полиномом, т.е. к глобальной интерполяции, в частности, из-за свойственной ей большой погрешности. Как правило, пользуются локальной интерполяцией. При этом в окрестности точки, в которой нужно вычислить производную, функцию интерполируют полиномом невысокой степени (например, n = 1, 2, 3).

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

а) 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) :

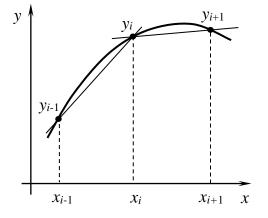


Рис. 1.1.

$$f(x) \approx p_1(x) = y_{i-1} + \frac{y_i - y_{i-1}}{h}(x - x_{i-1})$$

Тогда

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x \sim x_i} \approx \frac{dp_1(x)}{dx} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} .$$

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

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x \sim x} \approx \frac{d\overline{p_1}(x)}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \,.$$
 (3.5)

Мы получили простейшие приближенные формулы для первой производной от функции, заданной таблично. Формулу (3.4) называют левым разностным отношением, а формулу (3.5) – правым разностным отношением. Смысл этих названий нетрудно понять из рисунка 1.1. Заметим, что эти соотношения можно было написать сразу, опираясь на формулу (3.2), полагая, например, $\Delta x = h$ и $\Delta y = y_{i-1} - y_i$, и не привлекая интерполяцию в качестве промежуточного звена. Понятно также, что для получения приближенных формул для второй и высших производных линейного приближения функции недостаточно.

б) Приблизим в рассматриваемой окрестности функцию f(x) интерполяционным полиномом второй степени $p_2(x)$, т.е. параболой, проходящей через значения функции в точках $\{x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\}$:

$$f(x) \approx p_2(x) = y_i + \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}(x - x_i) + \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{2h^2}(x - x_i)^2$$
.

Эта форма записи интерполяционного полинома несколько отличается от ньютоновской и является более компактной.

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

$$\frac{df}{dx}\bigg|_{x \sim x_{i}} \approx \frac{dp_{2}(x)}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + \frac{y_{i-1} - 2y_{i} + y_{i+1}}{h}(x - x_{i}).$$
 (3.6)

Здесь, в отличие от (3.4) и (3.5), приближение зависит от x. В частности, для $x = x_i$ имеем

$$\frac{df}{dx}\bigg|_{x=x_{-}} \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \,. \tag{3.7}$$

Это так называемое *центральное разностное отношение*. По сути оно определяет тангенс угла наклона прямой, проходящей через две табличные точки (x_{i-1}, y_{i-1}) и (x_{i+1}, y_{i+1}) .

Дифференцируя полином $p_2(x)$ два раза, получаем приближенную формулу для второй производной:

$$\left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x \sim x} \approx \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2}.$$
 (3.8)

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 $p_4(x)$ можно получить следующие формулы (*центральные разностные соотношения*) для первой и второй производной:

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

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

3.1.3 Погрешность численного дифференцирования.

Основной источник погрешности, возникающей при численном дифференцировании, связан с аппроксимацией функции f(x). При использовании интерполяционных полиномов для аппроксимации функции f(x) имеем $f(x) = P_n(x) + R_n(x)$, где $R_n(x)$ — ошибка интерполяции. Следовательно, погрешность вычисления производной функции f(x) по формуле (3.3) будет определяться производной от ошибки интерполяции $d^k R_n(x)/dx^k$.

Анализ погрешности формул численного дифференцирования, опирающийся на непосредственно дифференцирование ошибки интерполяции $R_n(x)$ затруднен в силу математических сложностей. Поэтому мы познакомимся с другим подходом к анализу точности формул численного дифференцирования.

Прежде всего заметим, что все рассмотренные нами формулы для приближенного вычисления производной в конкретной точке имеют следующую структуру:

$$\frac{d^k f(x)}{dx^k} \approx \sum_i c_i y_i, \tag{3.9}$$

где c_i — постоянные коэффициенты; суммирование производится по некоторому диапазону табличных данных.

Анализ погрешности формулы (5.9) сводится к следующему. Заменяем все входящие в правую часть (3.9) значения y_i разложением f(x) по формулам Тейлора относительно точки, для которой рассматривается приближение 3.9). После проведения несложных арифметических преобразований в качестве главного члена правой части получаем приближенное значение производной. Остальные члены будут характеризовать погрешность.

В качестве примера рассмотрим оценку погрешности формулы (3.5) для точки $x \in [x_i, x_{i+1}]$. Заменим значения y_i и y_{i+1} по формулам Тейлора относительно точки x:

$$y_{i} = f(x) + f'(x)(x_{i} - x) + \frac{f''(x)}{2}(x_{i} - x)^{2} + \frac{f'''(x)}{6}(x_{i} - x)^{3} + \dots,$$

$$y_{i+1} = f(x) + f'(x)(x_{i+1} - x) + \frac{f''(x)}{2}(x_{i+1} - x)^{2} + \frac{f'''(x)}{6}(x_{i+1} - x)^{3} + \dots.$$

Подставляя эти выражения в правую часть (3.5) получим

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \frac{1}{h} \left\{ f'(x)h + \frac{f''(x)}{2} \left[(x_{i+1} - x)^2 - (x_i - x)^2 \right] + \frac{f'''(x)}{6} \left[(x_{i+1} - x)^3 - (x_i - x)^3 \right] + \dots \right\} =$$

$$= f'(x) + \frac{f''(x)}{2} (x_{i+1} + x_i - 2x) + \frac{f'''(x)}{6h} \left[(x_{i+1} - x)^3 - (x_i - x)^3 \right] + \dots .$$

Таким образом, погрешность (ошибка) формулы (3.5) для произвольной точки $X \in [X_i, X_{i+1}]$ будет определяться следующим выражением

$$\Delta = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} - f'(x) =$$

$$= \frac{f''(x)}{2} (x_{i+1} + x_i - 2x) + \frac{f'''(x)}{6h} \left[(x_{i+1} - x)^3 - (x_i - x)^3 \right] + \dots$$

Для точки $x = x_i$ получаем

$$\Delta = \frac{f''(x)}{2}h + \frac{f'''(x)}{6}h^2 + \dots$$
, T.e. $\Delta \sim O(h)$,

следовательно, для $x = x_i$ формула (3.5) является формулой первого порядка точности¹. Можно показать, что для любой точки $x \in [x_i, x_{i+1}]$ формула (5.5) также будет иметь первый порядок точности [2]. Исключение составляет точка $\overline{x} = (x_i + x_{i+1})/2$ — середина интервала $[x_i, x_{i+1}]$, для которой

 $^{^{1}}$ Порядком точности называется степень $m{h}$, которой пропорциональна погрешность.

$$\Delta = \frac{f'''(\bar{x})}{24}h^2 + \dots \quad \text{r.e. } \Delta \sim O(h^2)$$

и, следовательно, в этом случае формула (3.5) является формулой второго порядка точности.

Мы рассмотрели лишь один из источников погрешности численного дифференцирования — погрешность аппроксимации, которая определяется величиной остаточного члена. Как уже отмечалось выше, анализ остаточного члена нетривиален. Отметим, лишь, что погрешность аппроксимации при уменьшении шага h, как правило, уменьшается. Рассмотренный пример, позволяет также сделать вывод о том, что погрешность формул численного дифференцирования зависит от того, в какой точке вычисляется производная.

Другой источник погрешности численного дифференцирования связан с погрешностями вычисления значений функции y_i в узлах и с погрешностями округлений при проведении расчетов на компьютере. Обусловленные этими причинами погрешности, в отличие от погрешности аппроксимации, возрастают с уменьшением шага h. Действительно, если при вычислении значения функции y = f(x) абсолютная погрешность равна d, то при вычислении дробей в (3.4) и (3.5) она составит 2d/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.

3. 2. Численное интегрирование

3.2.1 Классификация методов.

Ставится задача вычислить определенный интеграл вида

$$I = \int_{a}^{b} f(x)dx, \qquad (3.10)$$

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

Во многих случаях, когда подынтегральная функция задана в аналитическом виде, определенный интеграл удается вычислить непосредственно с помощью неопределенного интеграла по формуле Ньютона-Лейбница. Она состоит в том, что определенный интеграл равен приращению первообразной F(x) на отрезке интегрирования:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = F(b) - F(a).$$

Однако на практике этой формулой часто нельзя воспользоваться по двум основным причинам:

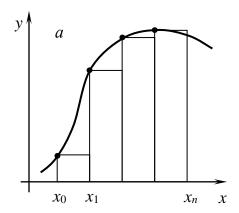
- 1) вид функции f(x) не позволяет аналитически выразить первообразную F(x) через элементарные функции;
 - 2) подынтегральная функция f(x) задана таблично.
 - В этих случаях используют приближенные, методы интегрирования.

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

$$\int_{a}^{b} f(x)dx = \int_{a}^{b} \varphi(x)dx + R,$$
(3.11)

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 $\varphi_i(x)$. Тогда



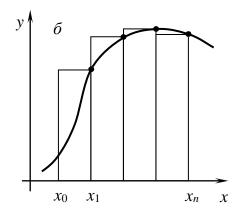


Рис. 1.2. Метолы левых (а) и правых (б) прямоугольников.

приближенное значение интеграла определяется суммой частичных интегралов от функций $\varphi_i(x)$, взятых в пределах от x_{i-1} до x_i :

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} \varphi_{i}(x)dx.$$
 3.12)

Используемые на практике методы численного интегрирования можно сгруппировать в зависимости от способа аппроксимации подынтегральной функции. Ниже приведем краткую характеристику классов наиболее распространенных методов.

Memodы Hьютона-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). В методах Ньютона-Котеса отрезок интегрирования разбивается, как правило, на отрезки равной длины, величина которых определяется как h = (b-a)/n и называется *шагом интегрирования*. Алгоритмы этих методов просты и легко поддаются программной реализации.

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.

В методах 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.

В *методах Монте-Карло* узлы выбираются с помощью генератора случайных чисел, результат в итоге носит вероятностный характер. Методы оказываются особенно эффективны при вычислении кратных интегралов.

Независимо от выбранного метода в процессе численного интегрирования необходимо вычислить приближенное значение интеграла и оценить погрешность R.

Погрешность, возникающая при численном интегрировании, так же как и при численном дифференцировании, имеет два основных источника. Первым источником погрешности является приближенная замена подынтегральной функции аппроксимирующей функцией — погрешность аппроксимации. Как будет показано ниже, погрешность аппроксимации уменьшается с увеличением количества отрезков разбиения интервала интегрирования n за счет более точной аппроксимации подынтегральной функции. Другой источник погрешности — неточности в вычислении подынтегральной функции в узловых точках и ошибки округления. Эта погрешность возрастает с ростом n и с некоторого значения n^* начинает преобладать над погрешностью аппроксимации. Это обстоятельство должно предостеречь от выбора чрезмерно большого числа n.

3.2.2 Интерполяционные методы Ньютона-Котеса.

Способ получения формул для вычисления приближенного значения интеграла в методах Ньютона-Котеса состоит в следующем. Разобьем интервал интегрирования [a,b] на n элементарных отрезков. Точки разбиения $a=x_0,x_1,\ldots,x_n=b$ будем называть y3лами u4 интегрирования, а расстояния между узлами $h_i=x_i-x_{i-1}$ — u6 интегрирования. В частном случае шаг интегрирования может быть постоянным h=(b-a)/n. На каждом частичном отрезке интегрирования $[x_{i-1},x_i]$ будем аппроксимировать подынтегральную функцию интерполяционным полиномом. В этом случае вычисление частичных интегралов в формуле (3.12) не составит труда.

3.2.2.1 Методы прямоугольников.

Рассмотрим сначала простейшие методы из класса методов Ньютона-Котеса, в которых подынтегральную функцию f(x) на отрезке интегрирования $[x_{i-1}, x_i]$ заменяют полиномом нулевой степени, т.е. константой: $f(x) \approx \varphi_i(x) = c_i$. Подставляя $\varphi_i(x)$ в формулу (3.12) и выполняя интегрирование, получаем

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} c_{i} \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} dx = \sum_{i=1}^{n} c_{i} x \Big|_{x_{i-1}}^{x_{i}} = \sum_{i=1}^{n} c_{i} h_{i}.$$
 (3.13)

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

Замечание. К формуле (3.13) можно также придти, если заменить определенный интегральной суммой, непосредственно опираясь на определение понятия определенного интеграла.
 ■

Заметим, что замена подынтегральной функции константой неоднозначна, так как константу c_i можно выбрать равной значению подынтегральной функции в любой точке интервала интегрирования.

Выбирая константу c_i равную значению подынтегральной функции в левой (рис. 1.2 а) или правой (рис. 1.2 б) границах отрезка $[x_{i-1}, x_i]$ приходим к формулам левых и правых прямоугольников, соответственно:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_{i} f_{i-1} = h_{1} f_{0} + h_{2} f_{1} + \dots + h_{n} f_{n-1} , \qquad (3.14)$$

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_{i} f_{i} = h_{1} f_{1} + h_{2} f_{2} + \dots + h_{n} f_{n}.$$
 (3.15)

В формулах (3.14) и (3.15) введены обозначения $f_{i-1} = f(x_{i-1})$, $f_i = f(x_i)$, которыми мы будем пользоваться и в дальнейшем.

В случае постоянного шага интегрирования формулы (3.14) и (3.15) приобретают вид

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx h \sum_{i=1}^{n} f_{i-1} = h(f_0 + f_1 + \dots + f_{n-1}), \qquad (3.16)$$

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx h \sum_{i=1}^{n} f_{i} = h(f_{1} + f_{2} + \dots + f_{n}).$$
 (3.17)

Наиболее широко на практике используется формула *средних прямоугольников*, в которой значение константы c_i (высота прямоугольника) выбирается равной значению подынтегральной функции в средней точке $\overline{x_i}$ отрезка интегрирования (рис. 1.3):

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} h_{i} f(\overline{x_{i}}), \quad \overline{x_{i}} = x_{i-1} + h_{i} / 2. \quad (3.16)$$

В случае постоянного шага интегрирования, когда $h_i = h$, формула средних прямоугольников (3.16) будет иметь следующий вид

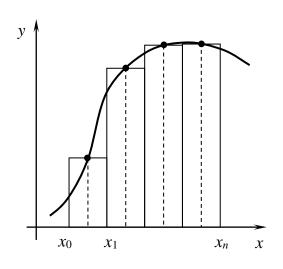


Рис. 1.3. Метод средних прямоугольников.

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx h \sum_{i=1}^{n} f(\overline{x_{i}}), \quad (3.17)$$

где $\bar{x}_i = a + h(i-1/2)$.

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

ightharpoonup 3 амечание. Если подынтегральная функция f(x) задана не аналитическим выражением, а таблично, то формула средних прямоугольников оказывается неприменима (без привлечения дополнительной интерполяции), так как значения функции известны лишь в узловых точках. В этом случае пользуются либо формулами левых или правых прямоугольников, либо используют другие методы. ■

3.2.2.2 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}) и (x_i, f_i) (рис. 1.4):

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

Поставляя это выражение в формулу (3.12) и выполняя интегрирование по частичным отрезкам, приходим к формуле трапеций:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} h_{i}(f_{i-1} + f_{i}).$$
(3.18)

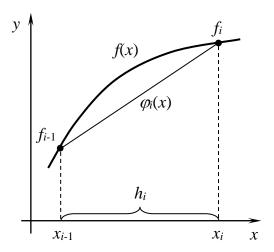


Рис. 1.4. Метод трапеций. Название метода связано с тем, что интеграл по отрезку $[x_{i-1}, x_i]$ заменяется площадью трапеции с основаниями, равными значениям функции f(x) на краях отрезка, и высотой, равной h_i (рис. 1.4).

В случае постоянного шага интегрирования формула трапеций принимает вид

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{h}{2} \sum_{i=1}^{n} (f_{i-1} + f_i) = \frac{h}{2} [f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \dots + 2f_{n-1} + f_n]. \quad (3.19)$$

Для удобства вычислений и оптимизации вычислительных погрешностей формулу (3.19) часто записывают следующим образом:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx h \left(\frac{f_0 + f_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f_i \right).$$
 (3.20)

Замечание. Несмотря на то, что в методе трапеций используется более высокий порядок интерполяции подынтегральной функции (кусочно-линейная интерполяция), по сравнению с методом прямоугольников, который использует интерполяцию нулевого порядка (кусочно-постоянная), точность метода трапеций оказывается ниже точности метода средних прямоугольников. Более высокая точность метода средних прямоугольников объясняется "удачным" выбором узловых точек, в которых вычисляется высота элементарного прямоугольника.
 ■

3.2.2.3 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

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

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

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

$$= \frac{h}{3} (f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}). \tag{3.21}$$

Приближенное значение интеграла на интервале [a,b] получим суммированием частичных интегралов (3.21) по всем отрезкам $[x_{i-1}, x_{i+1}]$:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \frac{h}{3} \sum_{i=1}^{n/2} (f_{2i-2} + 4f_{2i-1} + f_{2i}) =$$

$$= \frac{h}{3} (f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 2f_{n-2} + 4f_{n-1} + f_n). \quad (3.22)$$

Полученное соотношение называется формулой Симпсона или формулой парабол.

Если подынтегральную функции 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

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

$$= \frac{h}{6} \left(f_{0} + 4f_{\frac{1}{2}} + 2f_{1} + 4f_{\frac{3}{2}} + \dots + 2f_{n-1} + 4f_{n-\frac{1}{2}} + f_{n} \right). \quad (3.23)$$

Напомним, что $f_i = f(x_i)$, $f_{i-\frac{1}{2}} = f(x_i - h/2)$.

> Замечание 2. Формулы, используемые для приближенного вычисления интеграла, называются *квадратурными формулами*. Нетрудно заметить, что все полученные нами формулы имеют следующую структуру:

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_{i} f_{j},$$

где f_i — значения подынтегральной функции в узловых точках; A_i — весовые коэффициенты, независящие от функции f(x).

3.2.3 Погрешность формул Ньютона-Котеса.

Рассмотрим подробно один и возможных способов оценки погрешности формул численного интегрирования на примере метода средних прямоугольников. Для этого запишем выражение для интеграла на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, полученное методом средних прямоугольников

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = h f(\overline{x_i}) + R_i,$$
(3.24)

откуда

$$R_{i} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i}} f(x)dx - h f(\overline{x_{i}}).$$
 (3.25)

Для оценки погрешности интегрирования R_i разложим подынтегральную функцию f(x) в ряд Тейлора около средней точки $\overline{x_i}$

$$f(x) = f(\overline{x_i}) + (x - \overline{x_i})f'(\overline{x_i}) + \frac{(x - \overline{x_i})^2}{2}f''(\overline{x_i}) + \dots (3.26)$$

В малой окрестности точки x в разложении (3.26) можно ограничится небольшим количеством членов ряда. Поэтому, подставляя в (3.25) вместо функции f(x) ее тейлоровское разложение (3.26) и интегрируя его почленно, можно вычислить интеграл с любой заданной точностью

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = h f(\overline{x_i}) + \frac{(x - \overline{x_i})^2}{2} \Big|_{x_{i-1}}^{x_i} f'(\overline{x_i}) + \frac{(x - \overline{x_i})^3}{2 \cdot 3} \Big|_{x_{i-1}}^{x_i} f''(\overline{x_i}) + \dots =$$

$$= h f(\overline{x_i}) + \frac{h^3}{24} f''(\overline{x_i}) + \dots$$
(3.27)

При интегрировании и подстановке пределов получаем, что все интегралы от членов ряда (3.26), содержащих нечетные степени $(x-\overline{x_i})$, обращаются в нуль.

Подставляя полученное соотношение в формулу (3.25), получим

$$R_i = \frac{h^3}{24} f''(\overline{x_i}) + \dots$$

При малой величине шага интегрирования h основной вклад в погрешность R_i будет вносить первое слагаемое, которое называется *главным членом погрешности* R_{0i} вычисления интеграла на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$

$$R_{0i} = \frac{h^3}{24} f''(\overline{x_i}). {(3.28)}$$

Главный член полной погрешности для интеграла на всем интервале [a,b] определиться путем суммирования погрешностей на каждом отрезке $[x_{i-1},x_i]$:

$$R_0 = \sum_{i=1}^n R_{0i} = \frac{h^3}{24} \sum_{i=1}^n f''(\overline{x_i}).$$
 (3.29)

На основании (3.29) можно получить оценку для абсолютного значения погрешности:

$$\begin{split} \left| R_0 \right| & \leq \frac{h^3}{24} \sum_{i=1}^n M_2 = \frac{h^3}{24} n M_2 = \frac{1}{24} (b-a) h^2 M_2 \ , \end{split} \tag{3.30}$$
 где $M_2 = \max_{a \leq x \leq b} \left| f''(x) \right| .$

Формула (3.30) представляет собой теоретическую оценку погрешности вычисления интеграла методом средних прямоугольников, эта оценка является априорной, так как не требует знания значения вычисляемого интеграла. Степень шага h, которой пропорциональна величина R_0 , называется порядком метода интегрирования. Метод средних прямоугольников имеет второй порядок точности.

Аналогично можно получить априорные оценки погрешностей других методов. Приведем здесь лишь окончательные результаты:

- \square методы левых и правый прямоугольников $-|R_0| \le \frac{1}{2}(b-a)hM_1$;
- \square методы средних прямоугольников $|R_0| \le \frac{1}{24}(b-a)h^2M_2$;
- \square метод трапеций $-|R_0| \le \frac{1}{12}(b-a)h^2M_2$;
- \square метод Симпсона (3.22) $|R_0| \le \frac{1}{180}(b-a)h^4M_4$;
- \square метод Симпсона (3.23) $|R_0| \le \frac{1}{2880}(b-a)h^4M_4$.

Методы левых и правых прямоугольников являются методами первого порядка. 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. 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. 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).

3.2.4 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. Пусть вычисления проводились с постоянным шагом h, $I^{(h)}$ вычисленное с шагом h приближенное значение интеграла I. Если затем вычислить приближенное значение $I^{(h/2)}$ с шагом h/2, то в качестве оценки погрешности последнего вычисленного значения можно рассматривать величину

$$|I^{(h/2)} - I| \approx |I^{(h/2)} - I^{(h)}|$$
.

При необходимости вычислить результат с заданной точностью ε вычисления повторяют с последовательно уменьшающимся (вдвое) шагом до тех пор, пока не выполнится условие

$$|I^{(h/2)} - I^{(h)}| \le \varepsilon. \tag{3.30}$$

Можно применить указанное правило для контроля за локальной погрешностью на каждом частичном интервале. При этом длина очередного интервала $h_i = x_i - x_{i-1}$, посредством последовательного уменьшения (или увеличения) начальной длины вдвое, устанавливается такой, чтобы выполнялось неравенство

$$|I_i^{(h/2)} - I_i^{(h)}| \le \varepsilon \frac{h_i}{b - a}.$$
 (3.31)

Тогда в худшем случае ошибка вычисленного значения интеграла на всем интервале интегрирования не будет превосходить сумму локальных погрешностей $\sum_i \varepsilon \, h_i \, / (b-a) = \varepsilon$,

т.е. не будет превосходить заданного уровня погрешности.

Способ вычисления интеграла с автоматическим выбором шага имеет то преимущество, что он "приспосабливается" к особенностям подынтегральной функции: в областях резкого изменения функции шаг уменьшается, а там, где функция меняется слабо, – увеличивается. Такого рода алгоритмы называются адаптивными, т.е. приспосабливающимися. Использование адаптивных алгоритмов позволяет сократить затраты машинного времени без потери точности.

3.2.5 Особые случаи численного интегрирования.

а) Интегрирование разрывных функций. Если подынтегральная функция в некоторых внутренних точках c_i ($i=1,2,\ldots$) 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.

б) Несобственные интегралы. Напомним, что к такому типу интегралов относятся интегралы, которые имеют хотя бы одну бесконечную границу интегрирования или подынтегральную функцию, обращающуюся бесконечность хотя бы в одной точке интервала интегрирования.

Рассмотрим сначала интеграл с бесконечной границей интегрирования, например, интеграл вида

$$\int_{a}^{+\infty} f(x)dx.$$

Один из универсальных способов вычисления такого интеграла состоит в следующем. Представим интеграл в виде суммы двух интегралов:

$$\int_{a}^{+\infty} f(x)dx = \int_{a}^{A} f(x)dx + \int_{A}^{+\infty} f(x)dx,$$

где A — некоторое большое число. Вычисление первого интеграла на конечном отрезке [a,A] не вызывает вопросов. Выбор числа A производят таким образом, чтобы в пределах допустимой погрешности вторым интегралом можно было пренебречь.

В случае, когда подынтегральная функция обращается в бесконечность в некоторой точке x=c (a < c < b), то интеграл приближенно можно представить в виде суммы двух интегралов

$$\int_{a}^{b} f(x)dx \approx \int_{a}^{c-\delta} f(x)dx + \int_{c+\delta}^{a} f(x)dx,$$

где δ — малая величина. На отрезках $[a,c-\delta]$ и $[c+\delta,b]$ подынтегральная функция не содержит особенностей и указанные интегралы могут быть вычислены любым из рассмотренных выше методов.

➤ Замечание. При вычислении несобственных интегралов не стоит забывать о том, что иногда подходящая замена переменной интегрирования позволяет вообще избавится от особенности. Так, например, при вычислении интеграла

$$I = \int_{0}^{1} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx$$

имеется особенность в точке x = 0, где подынтегральная функция обращается в бесконечность. При этом заменой переменной $x = t^2$ приходим к интегралу

$$I=2\int\limits_{0}^{1}\cos t^{2}dt\,,$$

который не имеет особенностей и вычисляется с требуемой точностью по любой квадратурной формуле. ■

3.2.6 Вычисление интегралов от быстроосциллирующих функций.

В научной и инженерной практике очень часто возникает необходимость вычисления интегралов следующего вида

$$I_1 = \int_a^b f(x) \cos \omega x \, dx, \quad I_2 = \int_a^b f(x) \sin \omega x \, dx.$$
 (3.31)

Предполагается, что f(x) — не сильно меняющаяся на отрезке [a,b] функция, и частота колебаний подынтегральных функций в (3.31) определяется величиной ω . Будем считать, что $\omega >> 1$. Если воспользоваться комплексным представлением результатов $I = I_1 + iI_2$ (i — мнимая единица), то две формулы (5.31) можно объединить в одну:

$$I = \int_{a}^{b} f(x)e^{i\omega x}dx.$$
 (3.32)

Применение рассмотренных ранее квадратурных формул (прямоугольников, трапеций, Симпсона) для вычисления таких интегралов оказывается крайне нерационально, поскольку для получения результата с приемлемой точностью необходимо выбирать очень маленький шаг интегрирования.

Рассмотрим один из возможных подходов к построению квадратурных формул, учитывающих специфику подынтегральной функции.

Как обычно отрезок интегрирования разбивается на n интервалов. При этом узлы интегрирования определяются как $x_0 = a$, $x_k = x_{k-1} + h_k$, $k = 1, 2, \dots, n-1$, $x_n = b$. В частном случае шаг интегрирования может быть постоянным $h_k = h = \mathrm{const} = (b-a)/n$. Искомый интеграл представим в виде суммы интегралов по каждому частичному отрезку:

$$\int_{a}^{b} f(x)e^{i\omega x}dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k}}^{x_{k}} f(x)e^{i\omega x}dx = \sum_{k=1}^{n} J_{k},$$
(3.33)

где

$$J_{k} = \int_{x_{k-1}}^{x_{k}} f(x)e^{i\omega x} dx.$$
 (3.34)

Для вычисления интегралов J_k будем использовать аппроксимацию не всей подынтегральной функции, а только неосциллирующей ее части, т.е. f(x).

Заменим f(x) на отрезке $[x_{k-1},x_k]$ полиномом нулевой степени, т.е. константой. Причем значение константы выберем равным значению функции f(x) в середине отрезка $[x_{k-1},x_k]$: $f(x) \approx f_{k-1/2} = f(x_k - h_k/2)$.

Тогла

$$J_k \approx f_{k-1/2} \int_{x_{k-1}}^{x_k} e^{i\omega x} dx.$$

Интеграл от функции $e^{i\omega x}$ может быть вычислен аналитически:

$$J_k pprox rac{2}{\omega} f_{k-1/2} \exp(i\omega x_{k-1/2}) \sinrac{\omega h_k}{2} = rac{\sinlpha_k}{lpha_k} h_k f_{k-1/2} \exp(i\omega x_{k-1/2}) \,, \quad (3.35)$$
 где $lpha_k = rac{\omega h_k}{2} \,.$

Следовательно, сумма (3.33) может быть записана в виде

$$\int_{a}^{b} f(x)e^{i\omega x}dx \approx \sum_{k=1}^{n} \frac{\sin \alpha_{k}}{\alpha_{k}} h_{k} f_{k-1/2} \exp(i\omega x_{k-1/2}). \tag{3.36}$$

Для случая постоянного шага интегрирования

$$\int_{a}^{b} f(x)e^{i\omega x}dx \approx \frac{\sin\alpha}{\alpha}h\sum_{k=1}^{n} f_{k-1/2}\exp(i\omega x_{k-1/2}), \qquad (3.37)$$

Заметим, что при $\omega \to 0$ формулы (3.36) и (3.37) естественным образом переходят в формулы средних прямоугольников (3.16) и (3.17), полученные нами ранее. По сути, отличие данных результатов от результатов, полученных ранее состоит в единственном множителе $\sin(\alpha)/\alpha$. Оказывается, учет этого множителя позволяет существенно снизить требования к величине шага интегрирования.

Если неосциллирующую часть подынтегральной функции аппроксимировать полином первой или второй степени, то можно получить аналоги формул трапеций и Симпсона для вычисления интегралов от быстроосциллирующих функций.

4 Вопросы самоконтроля.

- 1 Краткая характеристика задач численного дифференцирования и интегрирования.
- 2. Что такое численное дифференцирование? В каких случаях оно применяется?
- 3. В чем особенность задачи численного дифференцирования?
- 4. Почему численное дифференцирование относится к неустойчивым алгоритмам?
- 5. Графическая интерпретация численного дифференцирования и интегрирования.
- 6. Порядок точности приближенных формул дифференцирования и интегрирования
- 7. Приведите основные формулы приближенного дифференцирования.
- 8. Какие способы получения формул численного дифференцирования вы знаете?
- 9. В чем особенность численного дифференцирования с использованием интерполяционных (аппроксимационных) полиномов?
- 10. Каковы основные источники погрешности численного дифференцирования?
- 11. Определение оптимального шага численного дифференцирования.
- 12. От чего зависит точность численного дифференцирования? Как можно управлять ею?
- 13. План экспериментального исследования основных характеристик программ численного интегрирования и дифференцирования.
- 14. Каким образом может быть оценена точность результата численного дифференцирования (интегрирования)?
- 15. В чем состоит идея методов Ньютона-Котеса для приближенного вычисления определенных интегралов?
- 16. Как влияет на точность численного интегрирования величина шага h?
- 17. Можно ли добиться неограниченного уменьшения погрешности интегрирования путем последовательного уменьшения шага?
- 18. Почему метод средних прямоугольников неприменим для численного интегрирования таблично заданных функций?
- 19. Каковы преимущества формулы Симпсона по сравнению с формулой трапеций и следствием чего являются эти преимущества?
- 20. В каком случае формула Симпсона дает точное значение интеграла?
- 21. Какой подход используется на практике для вычисления интеграла с заданной точностью?
- 22. Функции MathCAD численного дифференцирования и интегрирования.

Литература

- 1. Латыпов И.И. Численные методы. Лабораторный практикум: Учебное пособие для студентов физико-математического факультета по основам численных методов. Книга 1.— Бирск: Бирск.гос.соц.-пед.акад., 2007. 94 с.
- **2** Киреев В.И. Численные методы в примерах и задачах: Учеб. пособие/В. И. Киреев, А.В. Пантелеев. 3-е изд. стер. М.: Высш. шк., 2008. 480 с: ил. (5.2 Методы численного дифференцирования стр. 218 245)
- 3. Поршнев С. В., Беленкова И. В.

Численные методы на базе Mathcad. СПб.; БХВ-Петербург, 2005. 464 с: ил.

Приложение.

Примеры выполнения задания лабораторной работы и способы применения средств MathCad для решения задач численного дифференцирования и интегрирования функций.

П1. Файл: ЛабРаб 6 Примеры ЧислДифф.хmcd

П2. Файл: ЛР6 Пример ВычислЭкспер ЧислДифф.хmcd

ПЗ. Файл: ЛабРаб 6 Примеры ЧислИнтегр.xmcd

П4. Файл: ЛР 6 Примеры и графики Формул интегр (Компенсация).xmcd

П5. Файл: Пример ВычИнтегр на осн Интерполяции).xmcd

Пб. Файл: Примеры ЧислДифф на ОснИнтерпол.хmcd