3.4. Численное дифференцирование

Пусть в некоторой точке x^* требуется вычислить производные первого, второго и т.д. порядков от дискретно заданной функции (3.1):

x_i	x_0	x_1	…	x_n
y_i	y_0	y_1	…	y_n

При этом возможны два случая: а) точка $x^* \in (x_{i-1}, x_i)$, $i = \overline{1,n}$ и б) точка $x^* = x_i$, $i = \overline{0,n}$, т.е. совпадает с одним из узлов заданной таблицы.

Тогда *в первом случае* заданная таблица сглаживается какой-либо функцией $\varphi(x)$, являющейся глобальным (локальным) интерполяционным полиномом, или полиномом, полученным по МНК с некоторой погрешностью $R_n(x)$, в результате чего имеют место следующие равенства

$$
\begin{aligned}
&y(x) = \varphi(x) + R_n(x), \quad y(x^*) = \varphi(x^*) + R_n(x^*);\\
&y'(x) = \varphi'(x) + R_n'(x), \quad y'(x^*) = \varphi'(x^*) + R_n'(x^*);\\
&y''(x) = \varphi''(x) + R_n''(x), \quad y''(x^*) = \varphi''(x^*) + R_n''(x^*)\\
&\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots
\end{aligned}
\qquad (3.22)
$$

Следует отметить, что процедура численного дифференцирования является *некорректной* в том смысле, что близость искомой функции $y(x)$ и сглаживающей функции $\varphi(x)$ не гарантирует близости их производных (рис. 3.8). Более того, они могут иметь в одной и той же точке x^* производные различных знаков. Тем не менее, формулы (3.22) широко используются на практике.

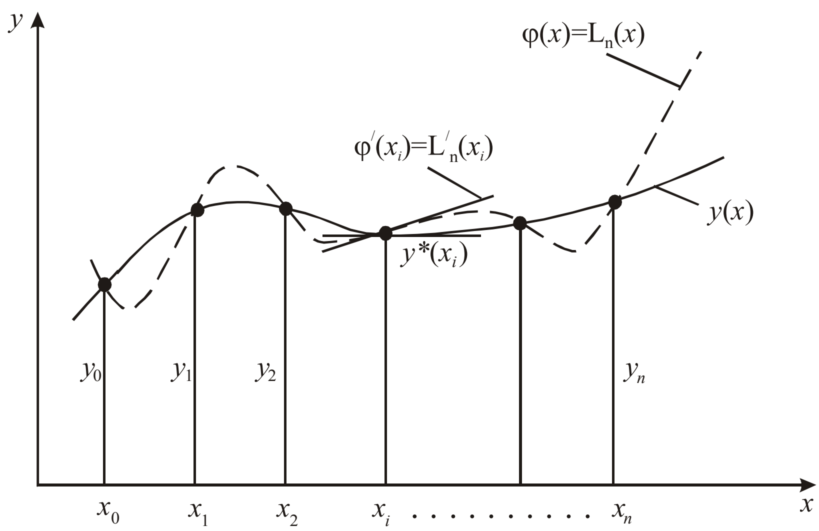

Рис. 3.8. К понятию некорректности численного дифференцирования

Во *втором случае* ($x^* = x_i, \quad i = \overline{0,n}$) используется аппарат разложения функций в ряд Тейлора, для чего функция в точке x^* должна иметь достаточное число производных. С этой целью предполагается, что заданная таблица (3.1) является сеточной функцией для некоторой функции $y(x)$, имеющей в точке x^* производные до четвертого порядка включительно, т.е. что $y_i = y(x_i)$.

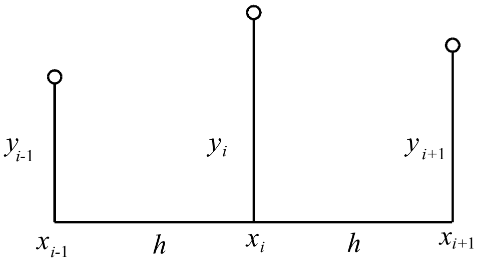

Рис. 3.9. Численное дифференцирование с помощью отношения конечных разностей

Пусть внутренний узел $x^* = x_i, \quad i = \overline{1, n-1}$ окружают узлы x_{i-1}, x_{i+1} (рис. 3.9), причем $x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = h$. Тогда, разлагая значения y_{i-1}, y_{i+1} *на точной функции* $y(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_i до производной четвертого порядка включительно, получим

$$y_{i-1} = y(x_i - h) = y_i - y_i' h + y_i'' \frac{h^2}{2} - y_i''' \frac{h^3}{6} + y^{IV}(\xi)\frac{h^4}{24}, \ \xi \in [x_{i-1}, x_i], \tag{3.23}$$

$$y_{i+1} = y(x_i + h) = y_i + y_i' h + y_i'' \frac{h^2}{2} + y_i''' \frac{h^3}{6} + y^{IV}(\xi)\frac{h^4}{24}, \ \xi \in [x_i, x_{i+1}] \tag{3.24}$$

Выразим вначале y_i' из (3.23), а затем из (3.24), разделив предварительно на h и оставляя слагаемые с первой степенью шага h, получим

$$\bar{y}_i' = \frac{y_i - y_{i-1}}{h} + O(h) = \frac{\Delta \bar{y}_i}{h} + O(h), \tag{3.25}$$

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + O(h) = \frac{\Delta y_i}{h} + O(h). \tag{3.26}$$

Вычтем из (3.24) выражение (3.23), разделим полученное соотношение на $2h$, получим следующее значение производной первого порядка в точке x_i (слагаемые с производными четного порядка сокращаются за исключением слагаемого с производной четвертого порядка):

$$\overset{\circ}{y}'_i = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} + O(h^2) = \frac{\Delta \overset{\circ}{y}_i}{2h} + O(h^2), \qquad (3.27)$$

где $\Delta \overset{\circ}{y}_i = y_{i+1} - y_{i-1}$ - центральная разность первого порядка.

Определим *порядок аппроксимации (порядок точности) формулы численного дифференцирования производной как* показатель степени h в главном члене погрешности.

Выражение (3.25) определяет производную первого порядка с помощью отношения конечных разностей *слева*. При этом имеет место первый порядок аппроксимации относительно шага h.

Выражение (3.26) определяет производную первого порядка с помощью отношения конечных разностей *справа*. При этом имеет место первый порядок аппроксимации относительно шага h.

Таким образом, односторонние производные (3.25) и (3.26), имеющие 1-й порядок аппроксимации менее точны, чем центрально-разностная производная (3.27), имеющая второй порядок.

Выражение (3.27) определяет производную первого порядка с помощью отношения *центральных разностей*. В этом случае реализуется второй порядок аппроксимации относительно шага h.

Сложим выражения (3.23) и (3.24), разделим на h^2 (слагаемые с производными нечетного порядка сокращаются), получим

$$y''(x_i) = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + O(h^2) = \frac{\Delta^2 y_i}{h^2} + O(h^2). \qquad (3.28)$$

Выражение (3.28) определяет производную второго порядка в узле x_i с помощью отношения центральных разностей второго порядка. Она имеет второй порядок аппроксимации относительно шага h.

3.4.1. Метод Рунге оценки погрешности и уточнения формул численного дифференцирования

Из формул (3.25)-(3.28) видно, что метод p-го порядка численного дифференцирования совпадает с показателем степени шага h в главном члене погрешности и имеет вид

$$f'(x) = \varphi_h'(x) + h^p \cdot \psi(x) + O(h^{p+1}) + O_1(h^{p+2}) + \ldots, \qquad (3.29)$$

где

$$f'(x) \approx \varphi_h'(x),$$

а остаточный член имеет вид

$$R_p = h^p \psi(x) + O(h^{p+1}) + O_1(h^{p+2}) + \ldots \ .$$

С целью оценки погрешности продифференцируем численно методом p-го порядка функцию $f(x_i) = y_i, i = \overline{0,n}$ с шагом h, получим выражение (3.29). Затем продифференцируем численно функцию тем же методом p-го порядка, с шагом kh $(k = 1/2; 1/4; 1/16; \ldots)$, получим

$$f'(x) = \varphi_{kh}'(x) + (kh)^p \psi(x) + O_2(h^{p+1}) \ . \tag{3.30}$$

Вычитая из (3.30) выражение (3.29) и определяя из полученного равенства $\psi(x)$, находим

$$h^p \psi(x) = \frac{\varphi_h'(x) - \varphi_{kh}'(x)}{k^p - 1} + O_3(h^{p+1}) \ . \tag{3.31}$$

Выражение (3.31) можно использовать для оценки погрешности численного дифференцирования.

Подставляя (3.31) в (3.30), получаем окончательно

$$f'(x) = \varphi_{kh}'(x) + \frac{\varphi_h'(x) - \varphi_{kh}'(x)}{1 - k^{-p}} + O_4(h^{p+1}) \ . \tag{3.32}$$

Из (3.32) видно, что это уже метод порядка $p+1$, т.е. на порядок точнее.

Пример 3.6. Вычислить производную в точке $x^* = 0{,}5$ от дискретно заданной функции примера 3.1. Оценить погрешность производной.

Р е ш е н и е.

По заданной таблице составляем интерполяционный многочлен $L_2(x) = \frac{2}{3}x^2 + \frac{4}{3}x + 1$ (см. пример 3.1) и погрешность $R_2(x) = \frac{3{,}978}{6}(x - x_0) \times$ $\times (x - x_1)(x - x_2) = \frac{3{,}978}{6}(x+1) \cdot x \cdot (x-1).$

Тогда

$$y(x) = L_2(x) + R_2(x);$$

$$y'(x) = L_2'(x) + R_2'(x);$$

$$y'(x^*) = L_2'(x^*) + R_2'(x^*) = \left(\frac{2}{3}x^2 + \frac{4}{3}x + 1\right)'_{x=x^*} +$$

$$+\frac{3,978}{6}\left[(x+1)x(x-1)\right]'_{x=x^*} = \left(\frac{4}{3}x^* + \frac{4}{3}\right) + \frac{3,978}{6}\left(3x^{*2} - 1\right).$$

$$y'(0,5) = \left(\frac{4}{3}\cdot 0,5 + \frac{4}{3}\right) + \frac{3,978}{6}\left(3\cdot 0,5^2 - 1\right) = 2 - 0,166.$$

То есть $y'(0,5) \approx 2$; $R_2'(0,5) \approx -0,166$.

Точное значение производной первого порядка в точке $x^* = 0,5$ будет $y' = \left(3^x\right)'_{x=x^*} = 3^{x^*}\cdot \ln 3 = 1,9028.$

Аналогично вычисляются и производные 2-го, 3-го и т.д. порядков. В данном примере производная второго порядка постоянна для всего отрезка $[-1;1]$ и равна $y'' \approx 4/3$.

3.5. Численное интегрирование функций

Известно, что для подавляющего большинства функций не удается вычислить первообразные, вследствие чего приходится прибегать к методам приближенного и численного интегрирования функций.

При численном интегрировании по заданной подынтегральной функции строится сеточная функция (3.1):

x_i	x_0	x_1	$\cdots$	x_n
y_i	y_0	y_1	$\cdots$	y_n

Затем эта функция с помощью формул локального интерполирования с контролируемой погрешностью заменяется интерполяционным многочленом, интеграл от которого хорошо вычисляется и сравнительно легко оценивается погрешность.

Пусть на отрезке $x \in [a,b]$ дана непрерывная функция $y = f(x)$, требуется на $x \in [a,b]$ вычислить определенный интеграл:

$$I = \int_a^b f(x)dx \,. \tag{3.33}$$

Заменим данную функцию $f(x)$ на сеточную функцию (3.1). Вместо точного значения интеграла (3.33) будем искать его приближенное значение с помощью суммы

$$I \approx I_h = \sum_{i=0}^{n} A_i h_i \,, \qquad h_i = x_i - x_{i-1},\ i = \overline{1,n},\ x_0 = a,\ x_n = b\,, \tag{3.34}$$

в которой необходимо определить коэффициенты A_i и погрешность формулы (3.34).

3.5.1 Формула прямоугольников численного интегрирования

Наиболее простой (и мало точной) является формула прямоугольников. Она может быть получена на основе определения определенного интеграла, как предела последовательности интегральных сумм:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\max \Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i\,,\ \xi_i \in [x_i, x_{i-1}],\quad \Delta x_i = x_i - x_{i-1}\ .$$

Если в этом определении снять знак предела и положить $\Delta x_i = h_i$, $i = \overline{1,n}$, то появится погрешность R_{np} (за ξ_i можно принять левый или правый конец отрезка Δx_i), то есть

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1})h_i + R_{np} \qquad (3.35)$$

или

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)h_i + R_{np}\ . \qquad (3.36)$$

Формулы (3.35), (3.36) – соответственно *формулы левых и правых прямоугольников численного интегрирования*.

Рассмотрим погрешность R_i формулы левых прямоугольников (3.35) на одном шаге $[x_{i-1}, x_i]$ численного интегрирования.

Для этого предположим, что первообразная $F(x)$ для подынтегральной функции $f(x)$ (она существует, поскольку $f(x)$- непрерывна на отрезке $x \in [a,b]$) непрерывно дифференцируема. Тогда, разлагая $F(x_i)$ в окрестности узла x_{i-1} в ряд Тейлора до второй производной включительно, и используя равенство $F'(x) = f(x) = y(x)$, получим

$$R_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx - y_{i-1}h = [F(x_i) - F(x_{i-1})] - y_{i-1}h = [F'(x_{i-1})h + F''(\xi)\frac{h^2}{2}] - y_{i-1}h =$$

$$= [y_{i-1}h + y'(\xi)\frac{h^2}{2}] - y_{i-1}h = y'(\xi)\frac{h^2}{2},\quad \xi \in (x_{i-1}, x_i).$$

На всем отрезке $[a,b]$ эту погрешность необходимо просуммировать n раз ($b-a=nh$), получим

$$R_{np} = R_i n = y'(\xi)\frac{(b-a)h}{2},\quad \xi \in (a,b)\,. \qquad (3.37)$$

Поскольку местоположение точки ξ на интервале $x \in (a,b)$ не известно, то на основе погрешности (3.37) можно выписать верхнюю оценку абсолютной погрешности метода прямоугольников и при заданной точности ε метода выписать неравенства

$$\left|R_{np}\right| \le \frac{(b-a)h}{2} M_1 \le \varepsilon, \quad M_1 = \max_{x\in[a,b]}\left|f'(x)\right|,$$

которую можно использовать для верхней оценки шага h численного интегрирования по методу прямоугольников

$$h \le \frac{2\varepsilon}{(b-a)M_1}, \quad M_1 = \max_{x\in[a,b]}\left|f'(x)\right|.$$

Из (3.37) видно, что на каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ формула прямоугольников имеет погрешность, пропорциональную h^2, а на всем отрезке $x \in [a,b]$ - шагу численного интегрирования h. В соответствии с этим *метод прямоугольников является методом первого порядка точности (главный член погрешности пропорционален шагу в первой степени).*

3.5.2. Численное интегрирование с помощью формулы трапеций

Рассмотрим интеграл (3.33) на отрезке $x \in [x_{i-1}, x_i]$ и будем на этом отрезке вычислять его приближенно, заменяя подынтегральную функцию интерполяционным многочленом Лагранжа первой степени, получим

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_1(x)dx + R_i\,, \tag{3.38}$$

где R_i - погрешность, которая подлежит определению (на рис. 3.10 заштрихована), а L_1- интерполяционный многочлен Лагранжа первой степени, проведенный через два узла интерполяции x_{i-1} и x_i

$$L_1(x) = y_{i-1}\frac{x-x_i}{x_{i-1}-x_i} + y_i\frac{x-x_{i-1}}{x_i-x_{i-1}}.$$

Пусть $x_i - x_{i-1} = h = const$, где $i = \overline{1,n}$.

Обозначим $\frac{x-x_{i-1}}{h} = t$, тогда $\frac{x-x_i}{h} = \frac{(x-x_{i-1})-(x_i-x_{i-1})}{h} = t-1$, $dx = hdt$ и многочлен Лагранжа примет вид $L_1(x) = L_1(x_{i-1}+ht) = -y_{i-1}(t-1)+y_i t$. При $x = x_i$ верхний предел $t=1$, при $x = x_{i-1}$ нижний предел $t=0$.

Теперь интеграл в (3.38) от многочлена $L_1(x)$ можно представить в виде

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_1(x)dx = h\int_0^1 [-y_{i-1}(t-1)+y_i t]dt = h[-y_{i-1}(\frac{t^2}{2}-t)+y_i\frac{t^2}{2}]_0^1 = \frac{h}{2}(y_{i-1}+y_i) \quad (3.39)$$

Выражение (3.39) называют формулой трапеций численного интегрирования на отрезке $x \in [x_{i-1}, x_i]$.

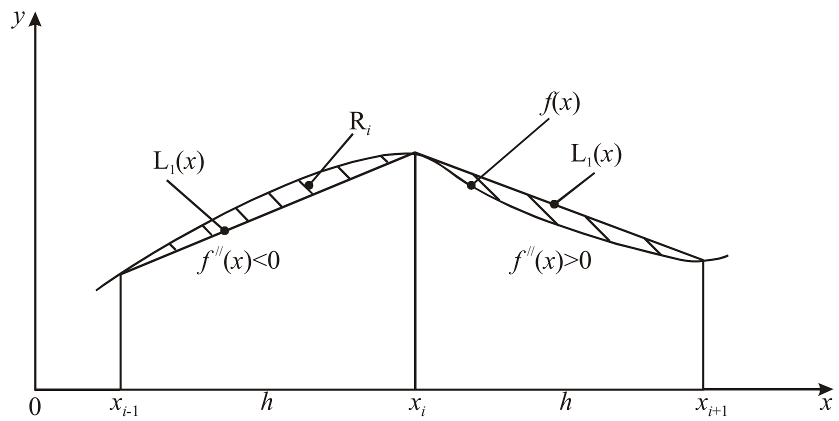

Рис. 3.10. К выводу формулы трапеций

Для всего отрезка $[a,b]$ необходимо сложить выражение (3.39) n раз

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_n)+2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)) = \frac{h}{2}(y_0+y_n+2\sum_{i=1}^{n-1} y_i) \quad (3.40)$$

Выражение (3.40) называют формулой трапеций численного интегрирования для всего отрезка $[a,b]$.

В случае переменного шага метод трапеций используется в следующем виде:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}h_i\,, \quad h_i = x_i - x_{i-1}. \quad (3.41)$$

Погрешность R_i формулы трапеций на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ можно получить, интегрируя погрешность линейной аппроксимации (см. формулу 3.10):

$$R_i = y''(\xi)h^3\left(\frac{1}{6}-\frac{1}{4}\right) = -\frac{h^3}{12}y''(\xi), \quad \text{где } \xi \in (x_{i-1}, x_i). \quad (3.42)$$

Из рисунка 3.11 видно, что если $f''(x) < 0$, то $R_i > 0$, что подтверждается выражением (3.42); если же $f''(x) > 0$, то $R_i < 0$.

На всем отрезке $[a,b]$ погрешность (3.42) необходимо увеличить в n раз

$$R_{тр} \approx -\frac{nh^3}{12}y''(\xi) = -\frac{(nh)h^2}{12}y''(\xi) = -\frac{b-a}{12}h^2 y''(\xi), \; \xi \in (a,b).$$

Таким образом, метод трапеций - *метод второго порядка точности* *относительно шага h (главный член погрешности пропорционален шагу в квадрате).*

Поскольку положение точки ξ на интервале (a,b) не известно, то, выражение для оценки погрешности обычно записывается следующим образом:

$$|R_{mp}| \le \max_{x\in[a,b]}|f''(x)| \ \frac{b-a}{12} h^2, \qquad (3.43)$$

откуда, задавая точность ε численного интегрирования, можно записать следующее неравенство, используемое для определения шага *h* численного интегрирования.

$$h \le \sqrt{\frac{12\cdot\varepsilon}{(b-a)M_2}}, \quad M_2 = \max_{x\in[a,b]}|f''(x)|. \qquad (3.44)$$

Итак, определяющими формулами метода трапеций являются выражения (3.40) (или (3.41)), (3.43), (3.44).

Численное интегрирование по методу трапеций в случае заданной точности ε может быть проведено следующим образом:

1) по формуле (3.44) определяется шаг численного интегрирования *h*; 2) с помощью этого шага составляется сеточная функция $y_i = f(x_i), i=\overline{0,n}$ для подынтегральной функции *f(x)*; 3) вычисляется приближенное значение интеграла по формуле (3.40), шаг *h* в которой гарантирует заданную точность ε. Если точность ε не задана, то выбирая шаг *h* численного интегрирования, можно по формуле (3.43) оценить погрешность R_{mp} формулы трапеций.

Замечание. Наличие максимума абсолютной величины второй производной в выражении для оценки погрешности может приводить к существенному завышению этой величины. В этой связи предпочтительнее использование изложенного ниже метода Рунге оценки погрешности численного интегрирования.

3.5.3. Формула Симпсона численного интегрирования

Разобьем отрезок $[a,b]$ на m пар отрезков $b-a=nh=2mh$, $h = x_i - x_{i-1} = const, i=\overline{1,n}$ и через каждые три узла проведем интерполяционный многочлен $L_2(x)$ (рис. 3.11)

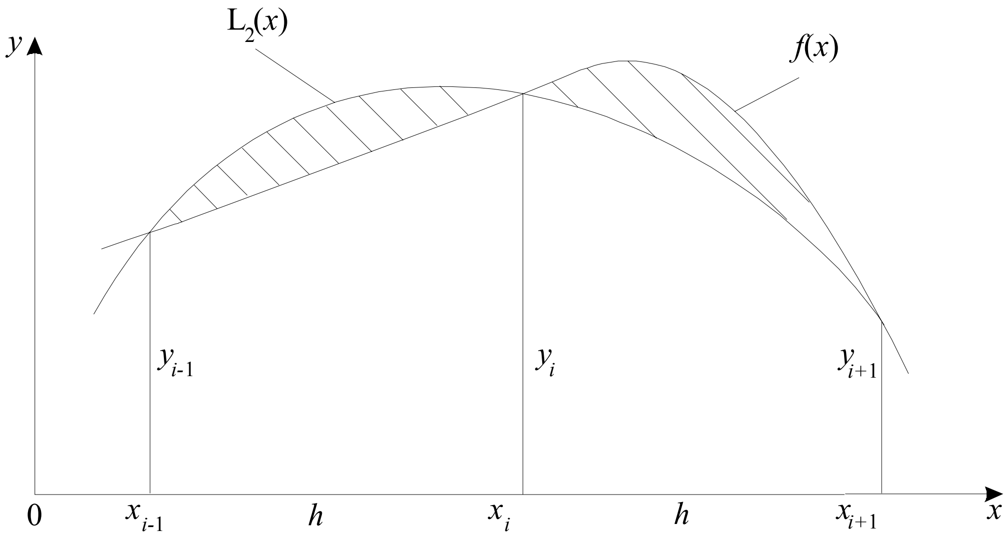

Рис. 3.11. К методу Симпсона численного интегрирования

Тогда

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} L_2(x)dx + R_i,,$$

где

$$L_2(x) = y_{i-1}\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} + y_i\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} + y_{i+1}\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)}.$$

Сделаем замену: $\frac{x-x_{i-1}}{h} = t,\ dx = hdt$, тогда

$$\frac{x-x_i}{h} = \frac{(x-x_{i-1})-(x_i-x_{i-1})}{h} = t-1; \qquad \frac{x-x_{i+1}}{h} = \frac{(x-x_{i-1})-(x_{i+1}-x_{i-1})}{h} = t-2.$$

Слагаемые в $L_2(x)$ примут вид

$$y_{i-1}\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{h\cdot 2h} = (t-1)(t-2)\frac{y_{i-1}}{2}; \qquad y_i\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{-h\cdot h} = -t(t-2)y_i;$$

$$y_{i+1}\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{2h\cdot h} = \frac{t}{2}(t-1)y_{i+1}.$$

При $x = x_{i-1}$: $t = 0$; при $x = x_{i+1}$: $t = 2$.

Тогда

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} L_2(x)dx = h\int_0^2\left[\frac{y_{i-1}}{2}(t-1)(t-2) - y_i t(t-2) + \frac{y_{i+1}t}{2}(t-1)\right]dt = \frac{h}{3}(y_{i-1}+4y_i+y_{i+1}),$$

откуда

$$\int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} L_2(x)dx = \frac{h}{3}(y_{i-1} + 4y_i + y_{i+1}). \qquad (3.45)$$

Выражение (3.45) называют формулой Симпсона численного интегрирования на паре шагов от x_{i-1} до x_{i+1}.

На всем отрезке $[a,b]$ выражение (3.45) необходимо сложить m раз, поскольку имеется m пар отрезков длиной h, получим *формулу Симпсона численного интегрирования*:

$$\int\limits_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + y_n + 4\sum_{i=1}^{m} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}). \qquad (3.46)$$

Погрешность формулы Симпсона на двойном шаге пропорциональна 4-ой производной функции и пятой степени шага h:

$$R_i = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx - \frac{h}{3}(y_{i-1} + 4y_i + y_{i+1}) = -\frac{h^5}{90} y^{IV}(\xi), \quad \xi \in (x_{i-1}, x_{i+1}).$$

Для всего отрезка $[a,b]$ эту погрешность необходимо умножить на m пар отрезков

$$R_c \approx -\frac{mh^5}{90} f^{IV}(\xi) = -\frac{2mh^5}{180} f^{IV}(\xi) = -\frac{nh \cdot h^4}{180} f^{IV}(\xi) = -\frac{(b-a)h^4}{180} f^{IV}(\xi), \; \xi \in (a,b),$$

то есть в формуле Симпсона на всем отрезке [a,b] погрешность пропорциональна четвертой степени шага и, следовательно, метод Симпсона является методом четвертого порядка точности (т.е. главный член погрешности пропорционален четвертой степени шага h).

Поскольку положение точки ξ на отрезке $[a,b]$ не известно то целесообразно использовать дать верхнюю оценку погрешности

$$|R_c| \le \frac{(b-a)h^4}{180} M_4, \quad M_4 = \max_{x \in [a,b]} \left| f^{IV}(x) \right|, \qquad (3.47)$$

откуда при заданной точности ε можно получить

$$h \le \sqrt[4]{\frac{180\varepsilon}{(b-a)M_4}}, \quad M_4 = \max_{x \in [a,b]} \left| f^{IV}(x) \right|. \qquad (3.48)$$

Таким образом, определяющими формулами метода Симпсона являются выражения (3.46), (3.47), (3.48), в соответствии с которыми по заданной точности ε из (3.48) находится шаг h численного интегрирования, с его помощью составляется сеточная функция $y_i = f(x_i)$, $i = \overline{0,n}$, $n = 2m$, а затем приближенно вычисляется интеграл по формуле (3.46). Если точность ε не задана, то, задаваясь шагом h, можно по формуле (3.47) вычислить погрешность численного интегрирования. Поскольку такая процедура может быть проведена до вычисления интеграла, она называется априорной оценкой погрешности. Более точной, но требующей большей вычислительной работы, является апостериорная оценка погрешности, рассматриваемая в следующем разделе.

3.5.4. Процедура Рунге оценки погрешности и уточнения формул численного интегрирования

Процедура Рунге позволяет оценить погрешность и повысить на единицу порядок метода путем многократного (в простейшем случае двукратного) просчета с различными шагами.

Пусть используется какой-либо метод численного интегрирования с шагами h и $\frac{h}{2}$. И пусть порядок выбранного метода равен p, тогда

$$I = I_h + \psi h^p + O(h^{p+1}), \tag{3.49}$$

$$I = I_{\frac{h}{2}} + \psi(\frac{h}{2})^p + O_1(h^{p+1}), \tag{3.50}$$

где I - точное значение интеграла; $I_h, I_{\frac{h}{2}}$ - вычисленные значения интеграла с шагом h и $h/2$ соответственно; вторые слагаемые справа - главные члены погрешности метода численного интегрирования порядка p. Для их вычисления вычтем из выражения (3.50) выражение (3.49), получим

$$(I_{\frac{h}{2}} - I_h) + \psi(\frac{h}{2})^p[1 - 2^p] + O(h^{p+1}) = 0,$$

$$\psi(\frac{h}{2})^p = \frac{I_{\frac{h}{2}} - I_h}{2^p - 1} + O(h^{p+1}). \tag{3.51}$$

Выражение (3.51) позволяет провести апостериорную оценку погрешности вычисленного значения определенного интеграла.

Подставим (3.51) в (3.49), получим формулу численного интегрирования уже порядка p+1

$$I = I_{\frac{h}{2}} + \frac{I_{\frac{h}{2}} - I_h}{2^p - 1} + O(h^{p+1}). \qquad (3.52)$$

Таким образом, формула (3.52) - простейшая процедура Рунге уточнения на один порядок формулы численного интегрирования.

Пример 3.8. Методом трапеций с точностью $\varepsilon = 10^{-2}$ и Симпсона с точностью $\varepsilon_1 = 10^{-4}$ вычислить определенный интеграл (вычисляемый точно)

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} = \ln|1+x| \,\Big|_0^1 = \ln 2 = 0{,}69315.$$

Р е ш е н и е.

1) *Метод трапеций.* Исходя из заданной точности $\varepsilon = 10^{-2}$, вычислим шаг численного интегрирования, для чего используется формула (3.44)

$$h \le \sqrt{\frac{12\varepsilon}{(b-a)M_2}}, \quad M_2 = \max_{x\in[0;1]}|f''(x)| = \max_{x\in[0;1]}\left|\frac{2}{(1+x)^3}\right| = 2; \;\; h \le \sqrt{\frac{12\cdot 0{,}01}{(1-0)\cdot 2}} = \sqrt{6}\cdot 0{,}1 = 0{,}2449.$$

Необходимо выбрать такой шаг, который удовлетворяет неравенству $h \le 0{,}2449$ и чтобы на отрезке интегрирования $x \in [0;1]$ он укладывался целое число раз. Принимаем $h = 0{,}2$. Он удовлетворяет обоим этим требованиям.

Для подынтегральной функции $f(x) = (1+x)^{-1}$ с независимой переменной x_i, изменяющейся в соответствии с равенством $x_i = x_0 + ih = 0 + i\cdot 0{,}2,\; i = \overline{0,5}$ составляем сеточную функцию с точностью до второго знака после запятой:

i	0	1	2	3	4	5
x_i	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0
y_i	1,0	0,83	0,71	0,63	0,56	0,5

Используется формула трапеций (3.40) численного интегрирования (n=5).

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} \approx \frac{h}{2}\left(y_0 + y_n + 2\sum_{i=1}^{n-1} y_i\right) = \frac{0{,}2}{2}[1{,}0 + 0{,}5 + 2(0{,}83 + 0{,}71 + 0{,}63 + 0{,}56)] = 0{,}696.$$

Сравнивая это значение с точным, видим, что абсолютная погрешность не превышает заданной точности ε: $|0{,}69315 - 0{,}696| < 0{,}01$.

Таким образом, за приближенное значение определенного интеграла по методу трапеций с точностью $\varepsilon = 0{,}01$ принимается значение

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} \approx 0{,}696.$$

2) *Метод Симпсона*. Исходя из заданной точности $\varepsilon_1 = 10^{-4}$ вычисляется шаг численного интегрирования для метода Симпсона по формуле (3.48)

$$h \le \sqrt[4]{\frac{180\varepsilon}{(b-a)M_4}},\ M_4 = \max_{x\in[0;1]}\left|f^{IV}(x)\right| = \max_{x\in[0;1]}\left|\frac{24}{(1+x)^5}\right| = 24;$$

$$h \le \sqrt[4]{\frac{180\cdot 10^{-4}}{(1-0)\cdot 24}} = 10^{-1}\sqrt[4]{7{,}5} = 0{,}165.$$

Необходимо выбрать такой шаг, чтобы он удовлетворял неравенству $h \le 0{,}165$ и чтобы на отрезке интегрирования $x \in [0;1]$ он укладывался *четное число* раз. Принимаем $h = 0{,}1$. С этим шагом для подынтегральной функции $f(x) = (1+x)^{-1}$ формируется сеточная функция с независимой переменной x_i, изменяющейся по закону $x_i = x_0 + ih = 0 + i\cdot 0{,}1$, $i = \overline{0{,}10}$, $n = 10$, $m = 5$, причем значения сеточной функции вычисляются с точностью до четвертого знака после запятой:

i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	1,0
x_i	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
y_i	1,0	0,9091	0,8333	0,7692	0,7143	0,6667	0,625	0,5882	0,5556	0,5263	0,5

Используется формула Симпсона (3.46) численного интегрирования (n=10, m=5)

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} = \frac{h}{3}\left(y_0 + y_n + 4\sum_{i=1}^{m} y_{2i-1} + 2\sum_{i=1}^{m-1} y_{2i}\right) = \frac{0{,}1}{3}\cdot[1{,}0 + 0{,}5 + 4(y_1 + y_3 + y_5 + y_7 + y_9) +$$

$$+ 2(y_2 + y_4 + y_6 + y_8)] = \frac{0{,}1}{3}[1{,}5 + 4(0{,}9091 + 0{,}7692 + 0{,}6667 + 0{,}5882 + 0{,}5263) +$$

$$+ 2(0{,}8323 + 0{,}7143 + 0{,}625 + 0{,}5556)] = \frac{0{,}1}{3}(1{,}5 + 4\cdot 3{,}4595 + 2\cdot 2{,}7281) = \frac{0{,}1}{3}20{,}7942 =$$

$$= 0{,}69314.$$

Сравнение этого значения с точным значением интеграла показывает, что абсолютная погрешность не превышает заданной точности ε_1:

$$|0{,}69315 - 0{,}69314| < 0{,}0001.$$

Таким образом, за приближенное значение определенного интеграла по методу Симпсона с точностью $\varepsilon_1 = 0{,}0001$ принимается значение

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} \approx 0{,}6931.$$

З а м е ч а н и е. Ясно, что для большинства интегралов от непрерывных функций первообразная не вычисляется (однако она существует) и вычисленное приближенное значение сравнивать не с чем, однако шаг численного интегрирования, вычисленный по заданной точности, гарантирует эту точность вычисления.