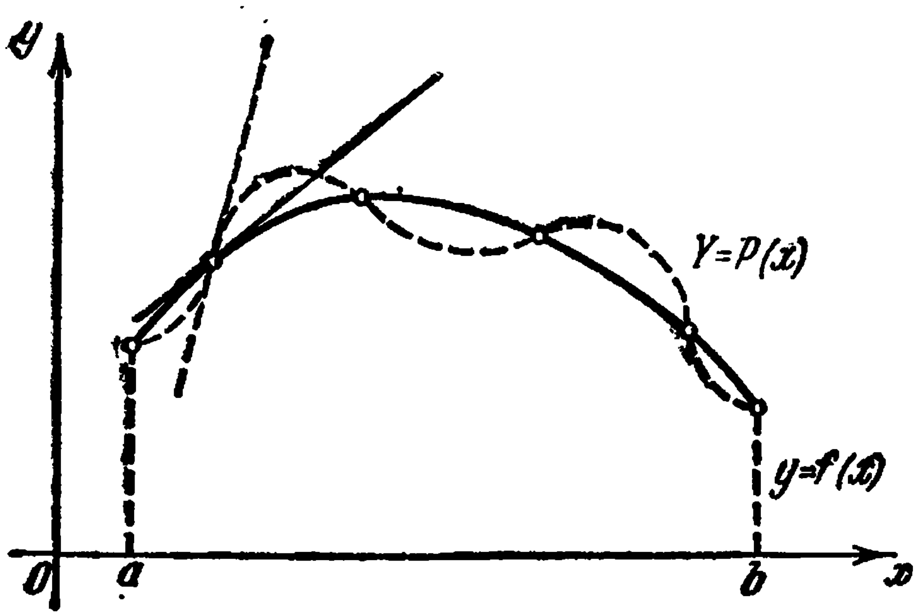
Алгоритмы численного дифференцирования и интегрирования

Численное дифферинцирование
Постановка задачи

x_0	x_1	x_2	x_3	…	…	…	…	…	x_n
$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	…	…	…	…	…	$f(x_n)$



$$f'(x) = P'(x)$$

$$a \leqslant x \leqslant b.$$

Приближенное дифференцирование на основе интерполяционного полинома Ньютона

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

где

$$q = \frac{x - x_0}{h} \quad \text{и} \quad h = x_{i+1} - x_i \quad (i = 0,\ 1,\ \ldots).$$

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

Приближенное дифференцирование на основе интерполяционного полинома Ньютона

$$y'(x_0) = \frac{1}{h}\left(\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \frac{\Delta^5 y_0}{5} - \dots\right)$$

$$y''(x_0) = \frac{1}{h^2}\left(\Delta^2 y_0 - \Delta^3 y_0 + \frac{11}{12}\Delta^4 y_0 - \frac{5}{6}\Delta^5 y_0 + \dots\right)$$

Недостаток

использование односторонних значений функции при $x > x_0$

Приближенное дифференцирование (безразностные формулы – Лагранж)

$$f(x)=\frac{(-1)^n t(t-1)\dots(t-n)}{n!}\sum_{i=0}^{n}\frac{(-1)^i C_n^i y_i}{t-i}+$$
$$+h^{n+1}t(t-1)\dots(t-n)f(x;x_0;\dots;x_n)$$

$$hf'(x)=\sum_{i=0}^{n}(-1)^{n+i}\frac{C_n^i y_i}{n!}\frac{d}{dt}\left[\frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-i}\right]+$$
$$+h^{n+1}f(x;x_0;x_1;\dots;x_n)\frac{d}{dt}[t(t-1)\dots(t-n)]+$$
$$+h^{n+2}f(x;x;x_0;x_1;\dots;x_n)t(t-1)\dots(t-n).$$

Конечные безразностные выражения

$n = 2$ (три точки):

$$y_0' = \frac{1}{2h}[-3y_0 + 4y_1 - y_2] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi);$$

$$y_1' = \frac{1}{2h}[y_2 - y_0] - \frac{h^2}{6} f'''(\xi);$$

$$y_2' = \frac{1}{2h}[y_0 - 4y_1 + 3y_2] + \frac{h^2}{3} f'''(\xi).$$

Конечные безразностные выражения

$n = 3$ (четыре точки):

$$y'_0 = \frac{1}{6h}[-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3] - \frac{h^3}{4} f^{(IV)}(\xi);$$

$$y'_1 = \frac{1}{6h}[-2y_0 - 3y_1 + 6y_2 - y_3] + \frac{h^3}{12} f^{(IV)}(\xi);$$

$$y'_2 = \frac{1}{6h}[y_0 - 6y_1 + 3y_2 + 2y_3] - \frac{h^3}{12} f^{(IV)}(\xi);$$

$$y'_3 = \frac{1}{6h}[-2y_0 + 9y_1 - 18y_2 + 11y_3] + \frac{h^3}{4} f^{(IV)}(\xi).$$

Конечные безразностные выражения

$n = 4$ (пять точек):

$$y'_0 = \frac{1}{12h}[-25y_0 + 48y_1 - 36y_2 + 16y_3 - 3y_4] + \frac{h^4}{5} f^{(V)}(\xi);$$

$$y'_1 = \frac{1}{12h}[-3y_0 - 10y_1 + 18y_2 - 6y_3 + y_4] - \frac{h^4}{20} f^{(V)}(\xi);$$

$$y'_2 = \frac{1}{12h}[y_0 - 8y_1 + 8y_3 - y_4] + \frac{h^4}{30} f^{(V)}(\xi);$$

$$y'_3 = \frac{1}{12h}[-y_0 + 6y_1 - 18y_2 + 10y_3 + 3y_4] + \frac{h^4}{20} f^{(V)}(\xi);$$

$$y'_4 = \frac{1}{12h}[3y_0 - 16y_1 + 36y_2 - 48y_3 + 25y_4] + \frac{h^4}{5} f^{(V)}(\xi).$$

Конечные безразностные выражения

$n = 2$ (три точки):

$$y_0'' = \frac{1}{h^2}[y_0 - 2y_1 + y_2] - hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6} f^{(IV)}(\xi_2);$$

$$y_1'' = \frac{1}{h^2}[y_0 - 2y_1 + y_2] - \frac{h^2}{12} f^{(IV)}(\xi);$$

$$y_2'' = \frac{1}{h^2}[y_0 - 2y_1 + y_2] + hf'''(\xi_1) - \frac{h^2}{6} f^{(IV)}(\xi_2).$$

Конечные безразностные выражения

$n = 3$ (четыре точки):

$$y_0'' = \frac{1}{6h^2}\left[12y_0 - 30y_1 + 24y_2 - 6y_3\right] + \frac{11}{12}h^2 f^{(\mathrm{IV})}(\xi_1) - \frac{h^3}{10} f^{(\mathrm{V})}(\xi_2);$$

$$y_1'' = \frac{1}{6h^2}\left[6y_0 - 12y_1 + 6y_2\right] - \frac{1}{12}h^2 f^{(\mathrm{IV})}(\xi_1) - \frac{h^3}{30} f^{(\mathrm{V})}(\xi_2);$$

$$y_2'' = \frac{1}{6h^2}\left[6y_1 - 12y_2 + 6y_3\right] - \frac{1}{12}h^2 f^{(\mathrm{IV})}(\xi_1) - \frac{h^3}{30} f^{(\mathrm{V})}(\xi_2);$$

$$y_3'' = \frac{1}{6h^2}\left[-6y_0 + 24y_1 - 30y_2 + 12y_3\right] + \frac{11}{12}h^2 f^{(\mathrm{IV})}(\xi_1) - \frac{h^3}{10} f^{(\mathrm{V})}(\xi_2).$$

Конечные безразностные выражения

$n = 4$ (пять точек):

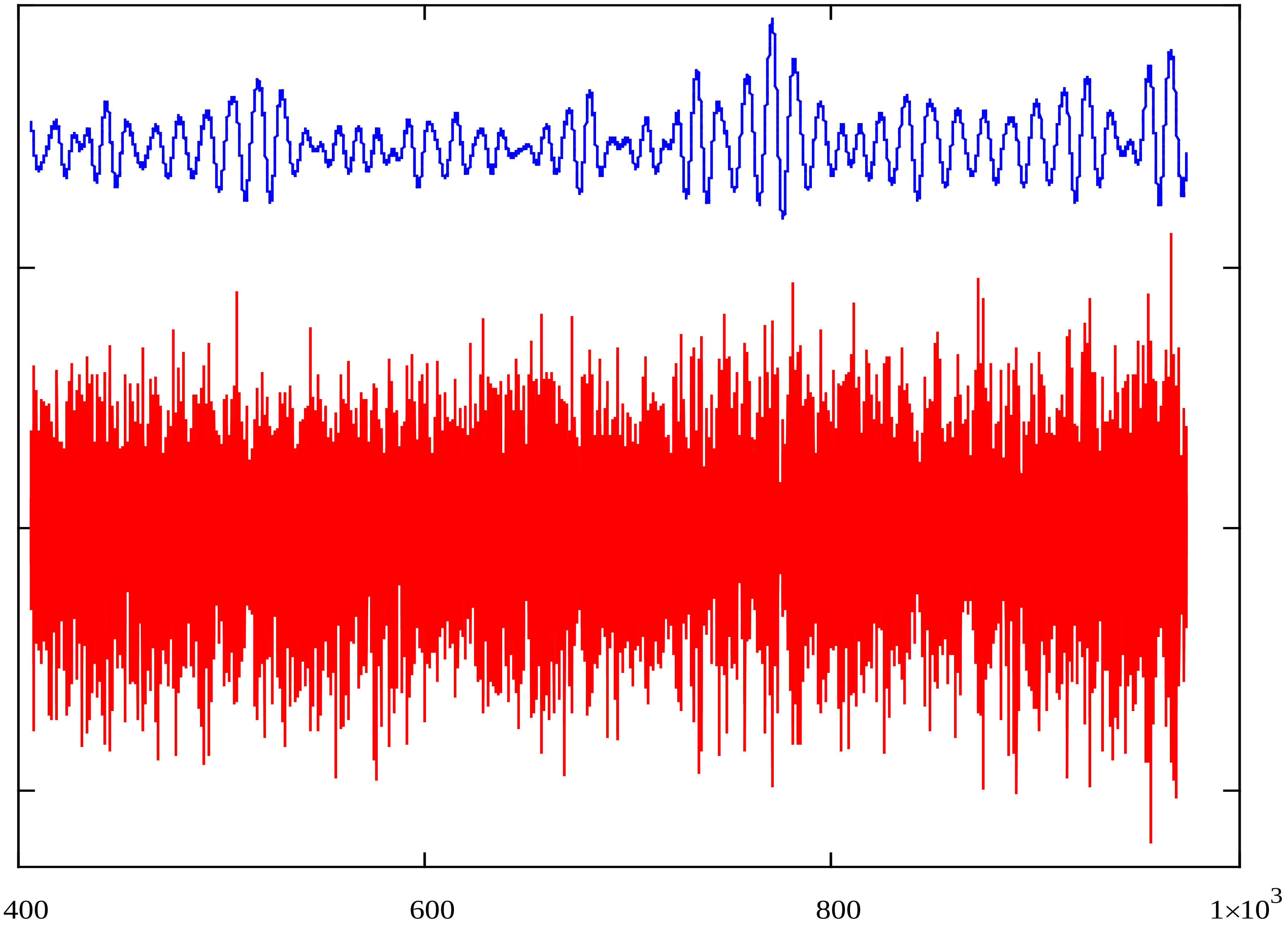
$$y_0'' = \frac{1}{24h^2}[70y_0 - 208y_1 + 228y_2 - 112y_3 + 22y_4] - \frac{5}{6}h^3 f^{(V)}(\xi_1) + \frac{h^4}{15} f^{(VI)}(\xi_2);$$

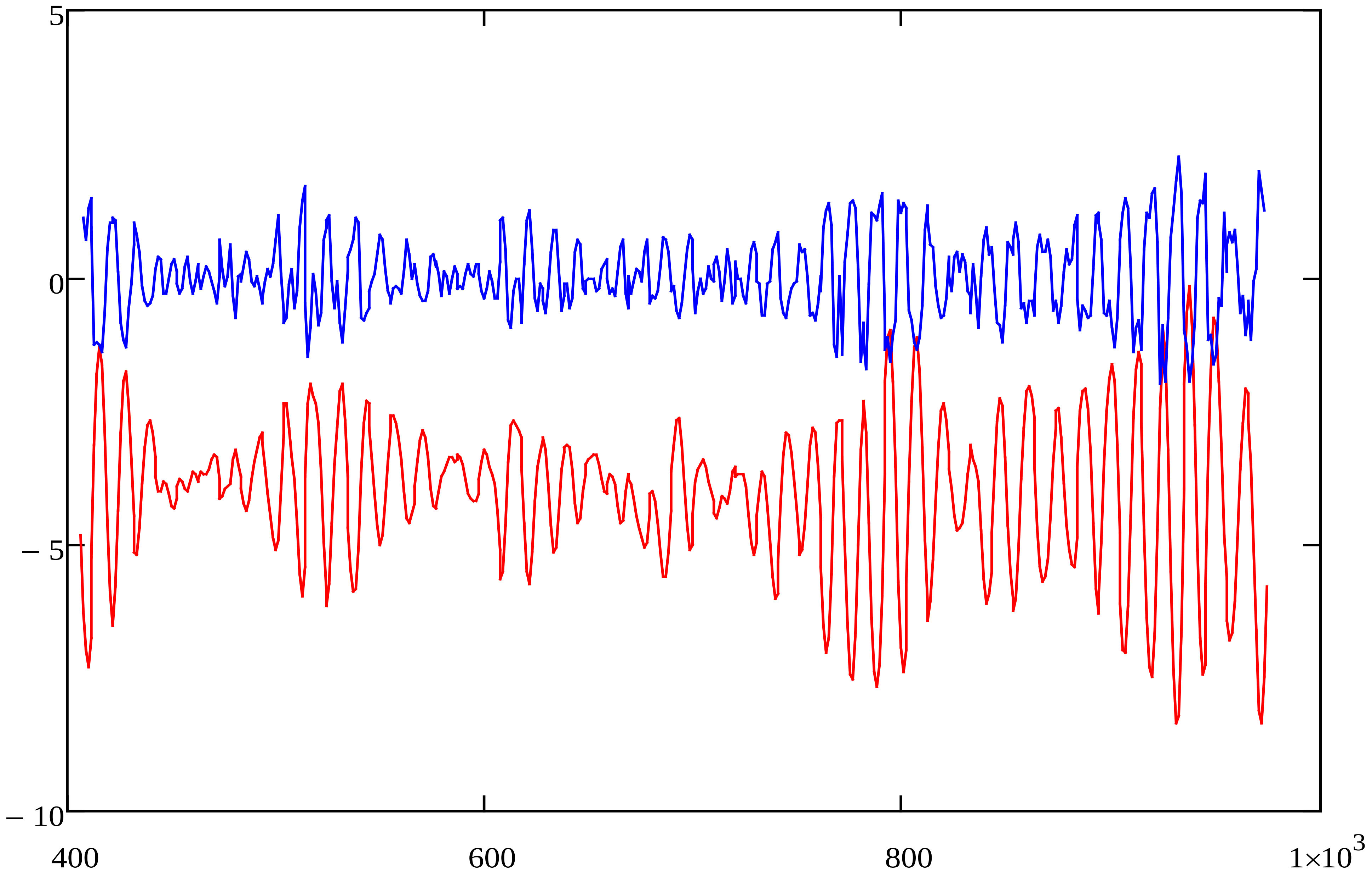
$$y_1'' = \frac{1}{24h^2}[22y_0 - 40y_1 + 12y_2 + 8y_3 - 2y_4] + \frac{1}{12}h^3 f^{(V)}(\xi_1) - \frac{h^4}{60} f^{(VI)}(\xi_2);$$

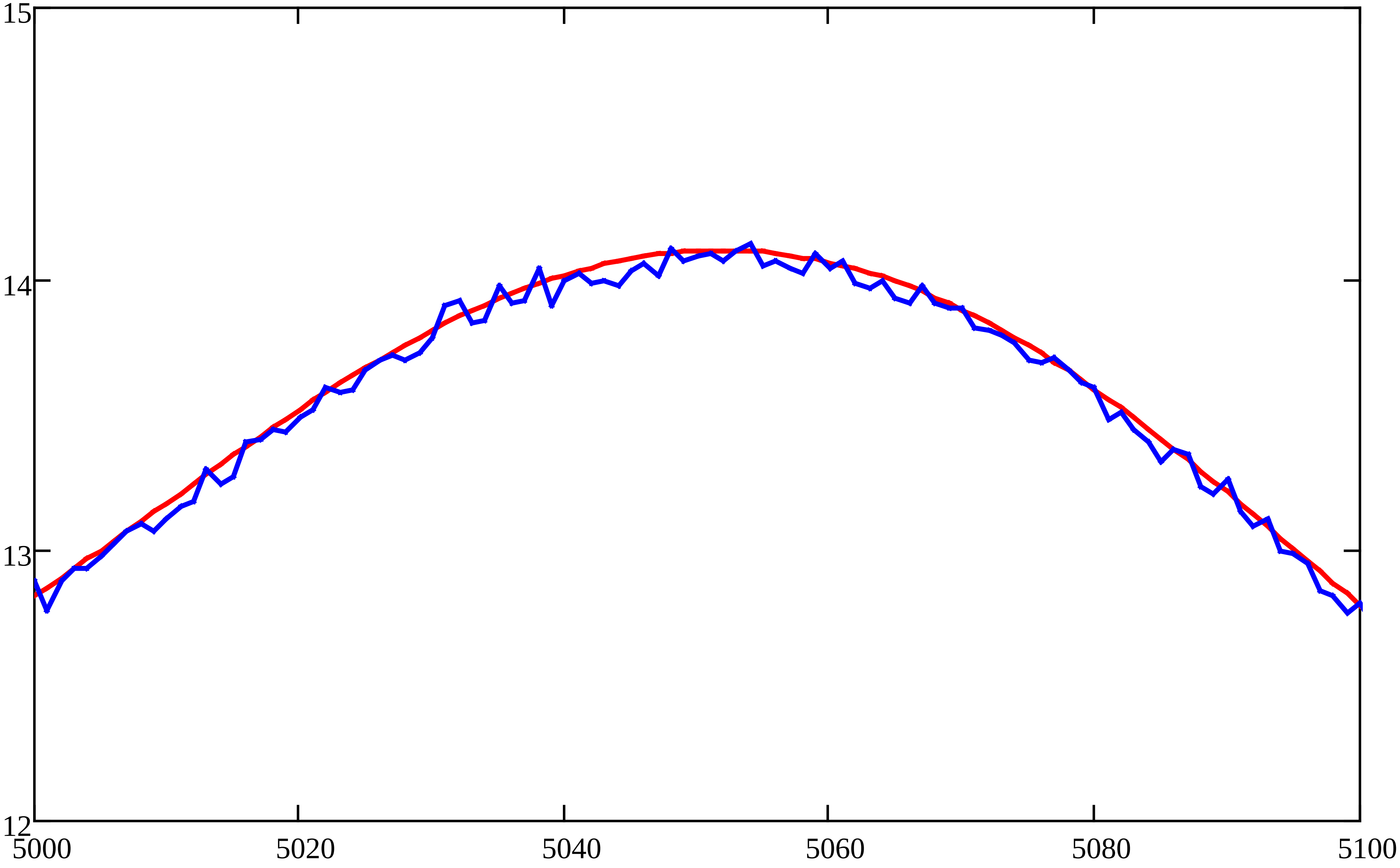
$$y_2'' = \frac{1}{24h^2}[-2y_0 + 32y_1 - 60y_2 + 32y_3 - 2y_4] + \frac{h^4}{90} f^{(VI)}(\xi_1);$$

$$y_3'' = \frac{1}{24h^2}[-2y_0 + 8y_1 + 12y_2 - 40y_3 + 22y_4] - \frac{1}{12}h^3 f^{(V)}(\xi_1) + \frac{h^4}{60} f^{(VI)}(\xi_2);$$

$$y_4'' = \frac{1}{24h^2}[22y_0 - 112y_1 + 228y_2 - 208y_3 + 70y_4] + \frac{5}{6}h^3 f^{(V)}(\xi_1) - \frac{h^4}{15} f^{(VI)}(\xi_2).$$


400
600
800
1×10^3


5
0
− 5
− 10
400
600
800
1×10^3



15
14
13
12
5000
5020
5040
5060
5080
5100

Метод неопределенных коэффициентов

$$y^{(k)}(x_i) = \sum_{i=0}^{n} c_i y_i + R(f)$$

0

$$\begin{aligned}
c_0 + c_1 + \ldots + c_n &= 0, \\
c_0 x_0 + c_1 x_1 + \ldots + c_n x_n &= 0, \\
\ldots\ldots\ldots\ldots&\ldots\ldots \\
c_0 x_0^{k-1} + c_1 x_1^{k-1} + \ldots + c_n x_n^{k-1} &= 0, \\
c_0 x_0^{k} + c_1 x_1^{k} + \ldots + c_n x_n^{k} &= k!, \\
c_0 x_0^{k+1} + c_1 x_1^{k+1} + \ldots + c_n x_n^{k+1} &= (k+1)!\, x_i, \\
\ldots\ldots\ldots\ldots&\ldots\ldots \\
c_0 x_0^{n} + c_1 x_1^{n} + \ldots + c_n x_n^{n} &= n(n-1)\ldots(n-k+1)\, x_i^{n-k}
\end{aligned}$$

Метод неопределенных коэффициентов

$$y^{(k)}(x_i) = \sum_{i=0}^{n} c_i y_i + R(f)$$

0

$$\sum_{m=0}^{n} C_m X_m^p = \begin{cases} 0 & \text{для } p = 0, 1, \ldots, k-1; \\ \dfrac{p!}{(p-k)!} X_i^{p-k} & \text{для } p = k, k-1, \ldots, n. \end{cases}$$

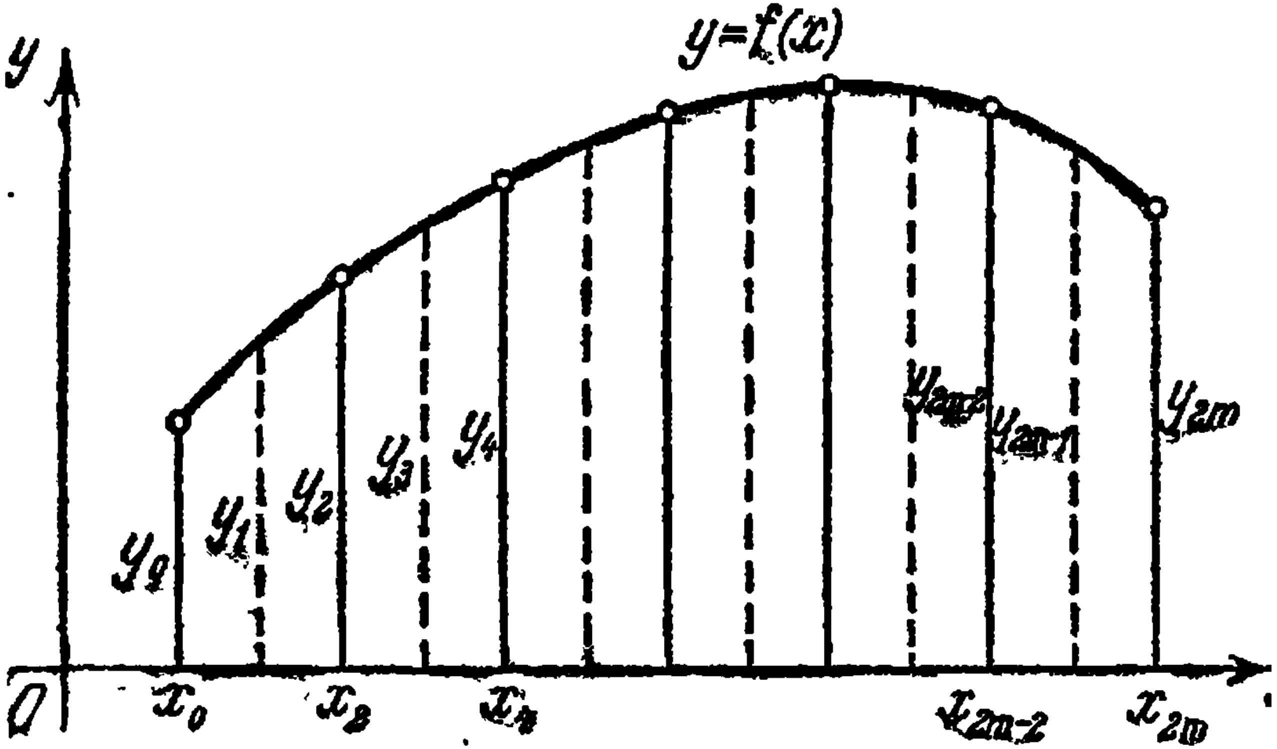
Метод неопределенных коэффициентов

$$Y_1^{(r)} = \sum_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} Y_k^{(r-1)} \frac{\prod\limits_{\substack{0<j<n\\j\neq k,\ j\neq i}} (X_i - X_j)}{\prod\limits_{\substack{0<j<n\\j\neq k}} (X_k - X_j)} + Y_i^{(r-1)} \sum_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} \frac{1}{X_i - X_j}.$$

Здесь $i=0,1,2,\ldots,n$ – номер узла; $r=1,2,3,\ldots,s$ – порядок производной; $Y_i^{(0)}=Y_i=(X_i)$; $Y_i^{(r)}=Y^{(r)}(X_i)$; $i=0,1,2,\ldots,n$; $r=1,2,3,\ldots,s$.

Численное интегрирование
Постановка задачи

x_0	x_1	x_2	x_3	…	…	…	…	…	x_n
$f(x_0)$	$f(x_1)$	$f(x_2)$	$f(x_3)$	…	…	…	…	…	$f(x_n)$



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

где $F'(x) = f(x)$

Численное интегрирование

Желательно, чтобы метод численного интегрирования обладал следующими свойствами:

- *Универсальность.* Функция $f(x)$ может быть задана в виде «черного ящика», как способ вычисления $f(x)$ по данному x.
- *Экономичность.* Количество вычислений функции $f(x)$ по возможности должно быть сведено к минимуму.
- *Хорошая обусловленность.* Неустранимые погрешности Δf в значениях $f(x)$ не должны приводить к значительной итоговой ошибке ΔI.

Численное интегрирование
Приложения

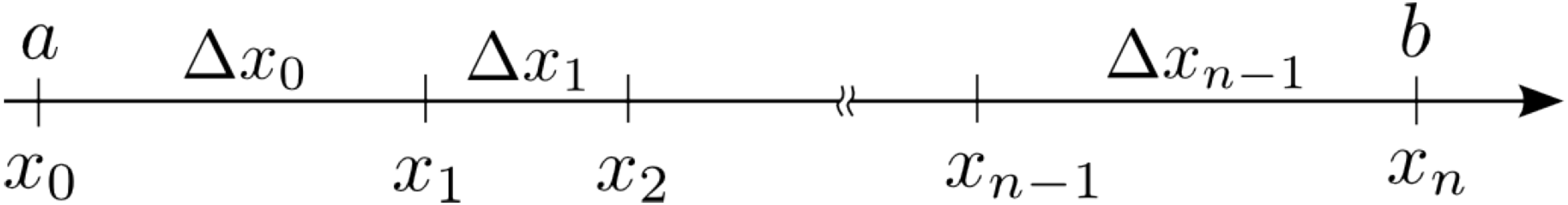
Численное интегрирование может применяться для

- интегрирования функций, известных только в некоторых точках, например, полученных в результате измерений;
- интегрирования сложных выражений, не имеющих элементарных первообразных, либо имеющих слишком громоздкие выражения для них;
- построения методов численного решения уравнений в обыкновенных и частных производных (методы конечных элементов, интегро-интерполяционные методы).

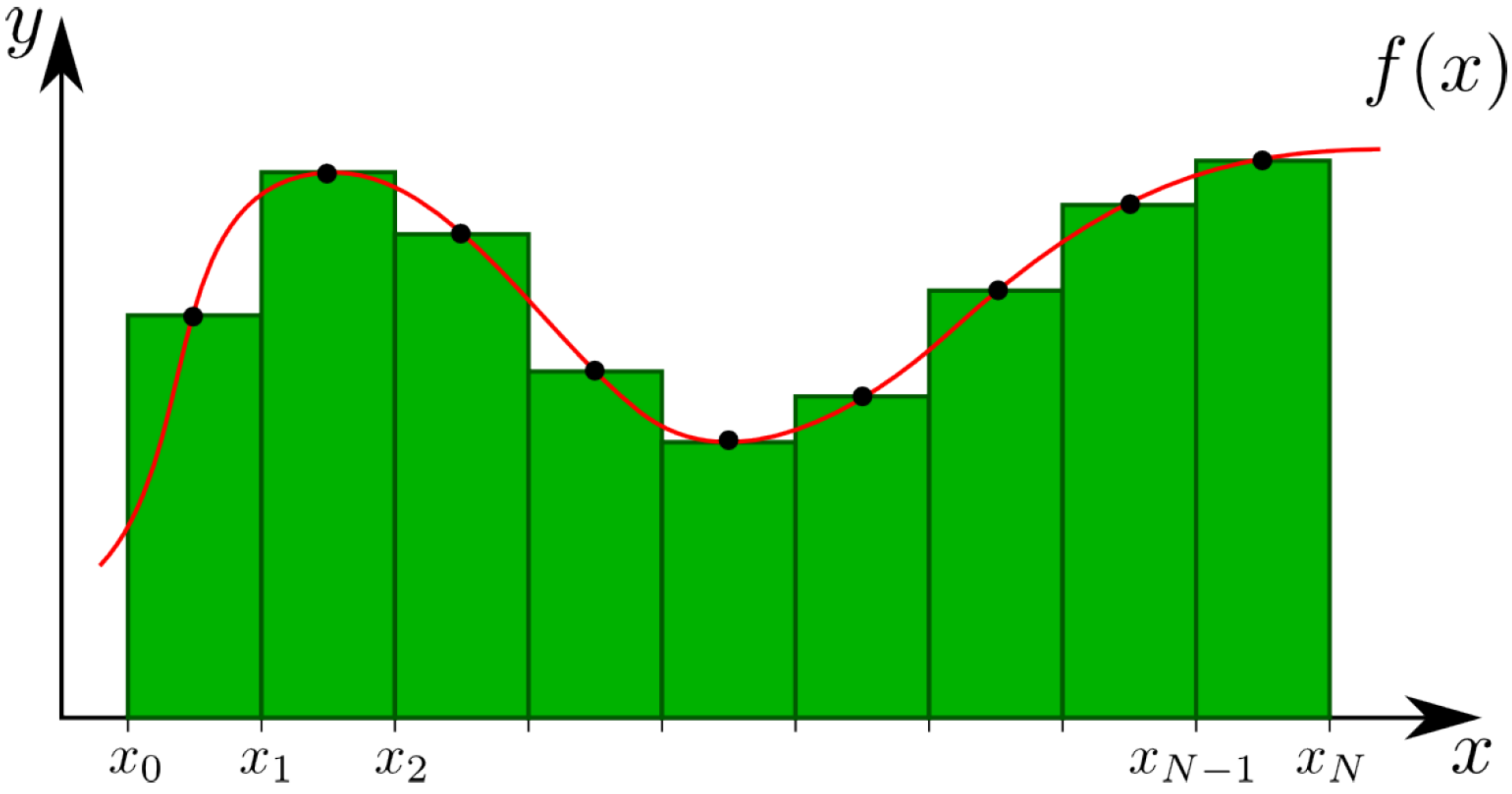
Определение интеграла Римана

$$S_N = \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i$$

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\max \Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i$$



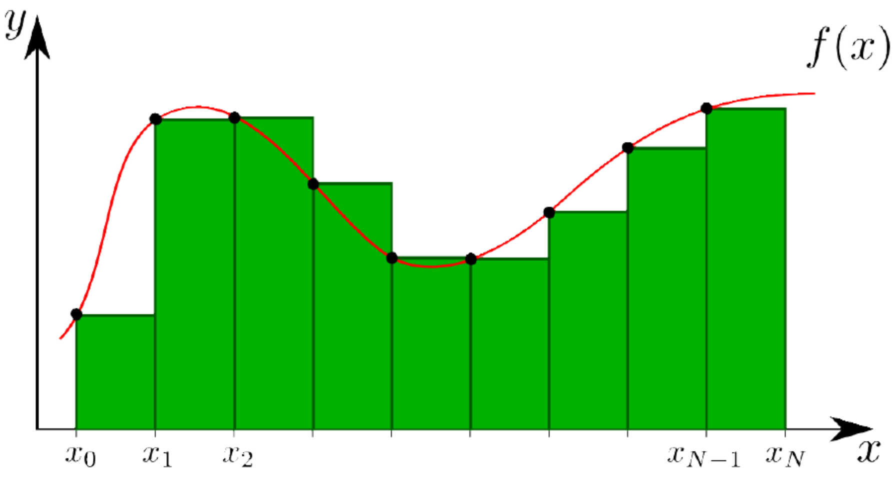
Формулы прямоугольников

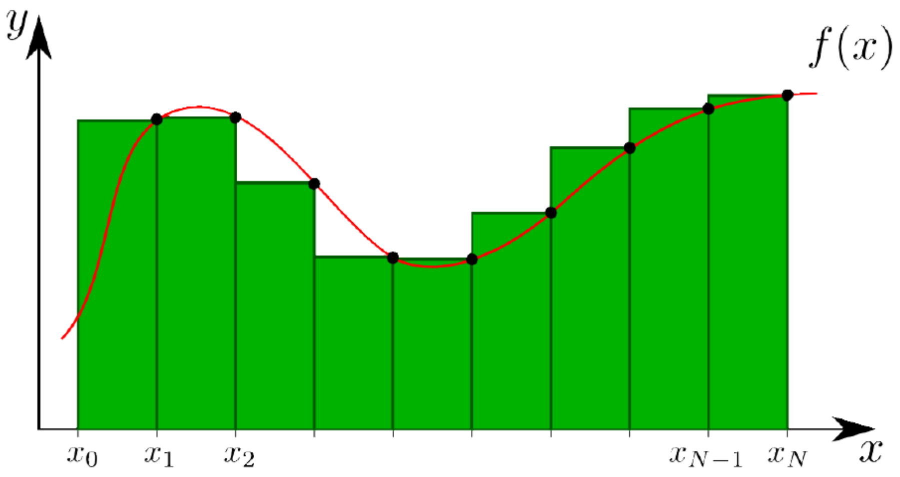


$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)\Delta x_i.$$

Формулы односторонних прямоугольников

Выбор в качестве ξ_i средней точки интервала не принципиален, можно взять, например, левый или правый конец интервала.
Соответствующие формулы называются формулами *левых и правых прямоугольников*.





$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_{i-1})\Delta x_i.$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\Delta x_i.$$

Приближение подынтегральной функции

Пусть подынтегральная функция $f(x)$ хорошо приближается некоторой просто интегрируемой функцией $P(x)$. Тогда

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P(x)dx.$$

$$P_L(x) = \sum_{k=0}^{s} c_k(x) f(x_k),$$

где $c_k(x)$ — это базисные интерполяционные многочлены Лагранжа

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_L(x)dx = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k), \qquad w_k \equiv \frac{1}{b-a}\int_a^b c_k(x)dx$$

Интерполяционные квадратурные формулы

Вид квадратурной формулы

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k)$$

является универсальным, и мог быть написан из общих соображений линейности квадратурной формулы по значениям подынтегральной функции (по аналогии с линейностью самого интеграла).

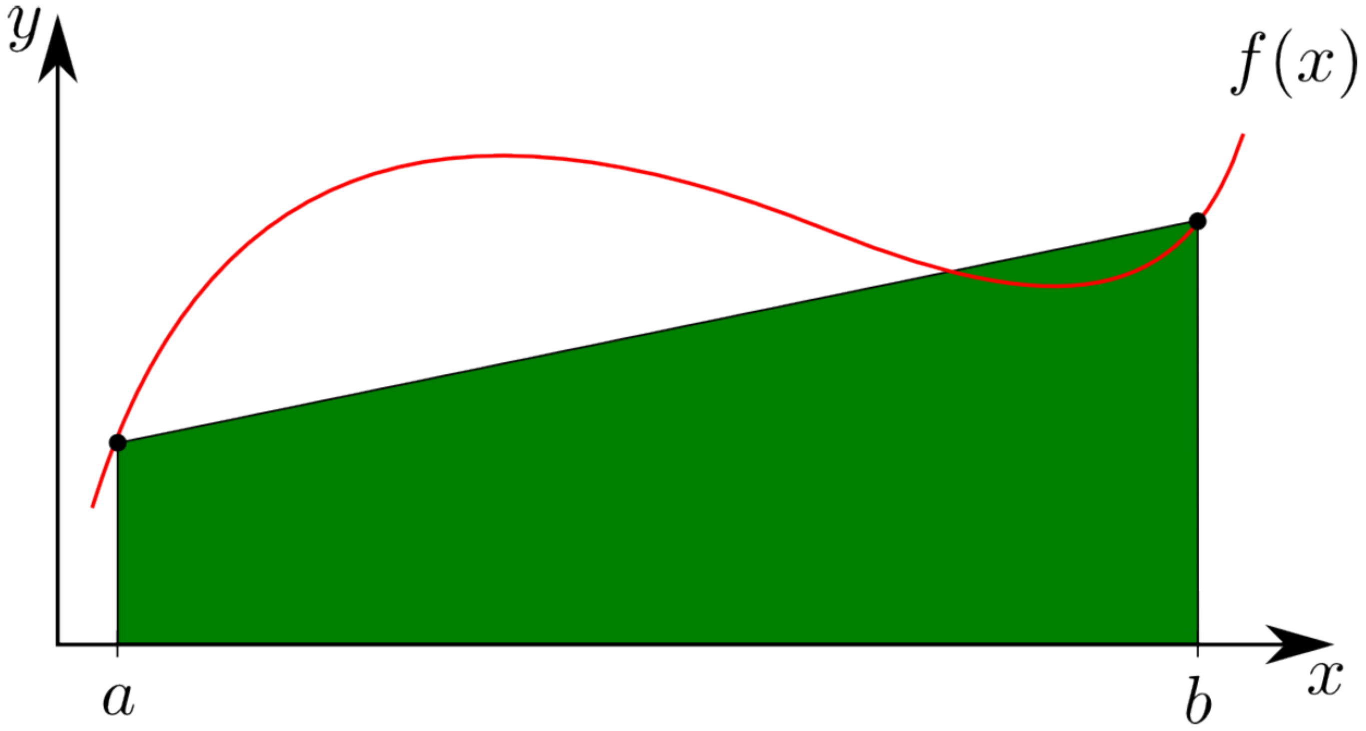
Формулы Ньютона-Котеса

$$x_i = a + \frac{b-a}{s} i, \quad i = 0, \dots, s.$$

Интерполяционные квадратурные формулы на такой сетке называются формулами Ньютона-Котеса. Некоторые из них имеют свои названия.

Название	Узлы	Веса	Вид
Трапеций	a, b	$1/2$	$(b-a)\dfrac{f(a)+f(b)}{2}$
Симпсона	a, b $\frac{a+b}{2}$	$1/6$ $2/3$	$(b-a)\dfrac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6}$
Правило 3/8	a, b $\frac{2a+b}{3}, \frac{a+2b}{3}$	$1/8$ $3/8$	$\dfrac{f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{a+2b}{3}\right)+f(b)}{8/(b-a)}$

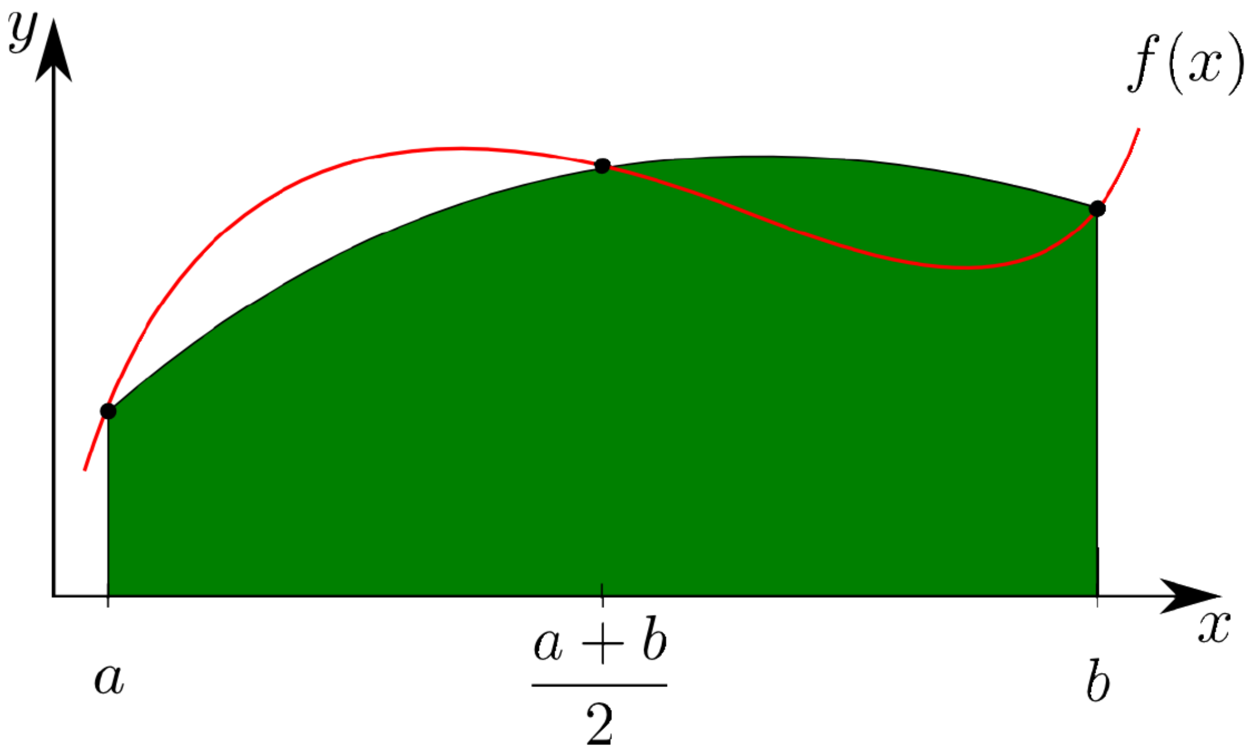
Формула трапеций



Для одного отрезка: $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$

Составная формула: $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}\Delta x_i$

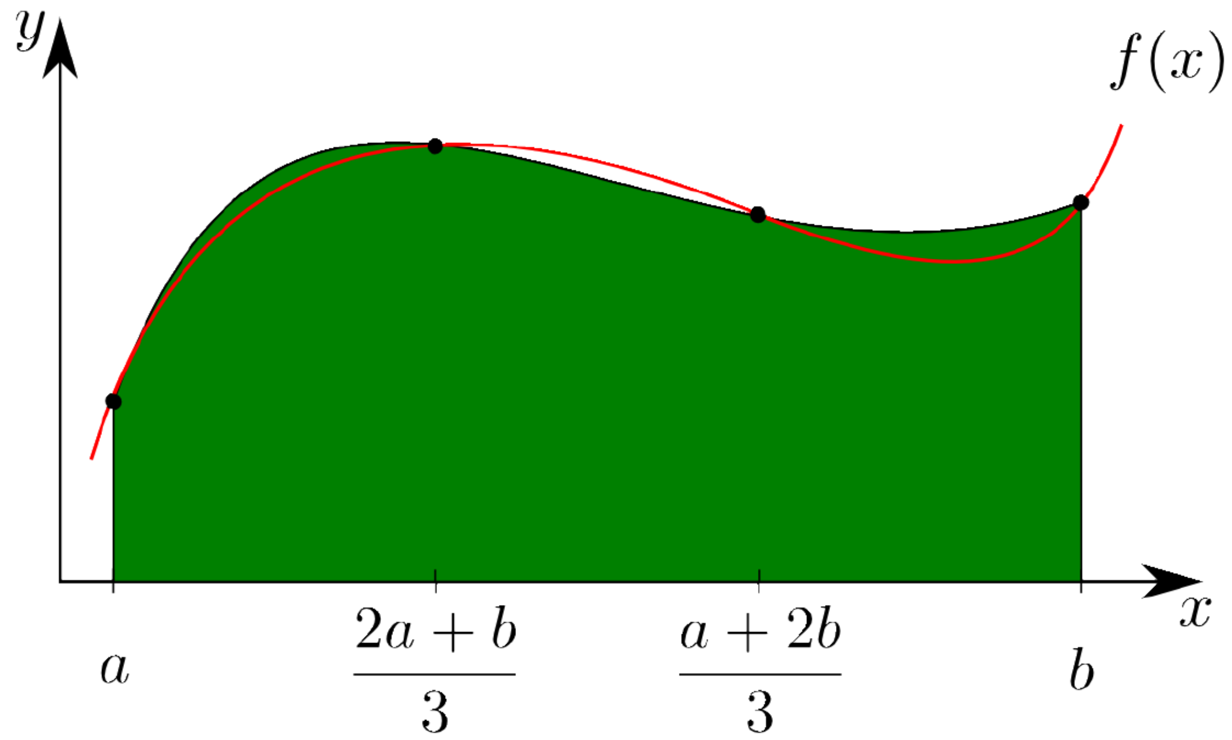
Формула Симпсона



Для одного отрезка: $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\dfrac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6}$

Составная формула: $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} \dfrac{f(x_{i-1})+4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)+f(x_i)}{6}\Delta x_i$

Формула «3/8»

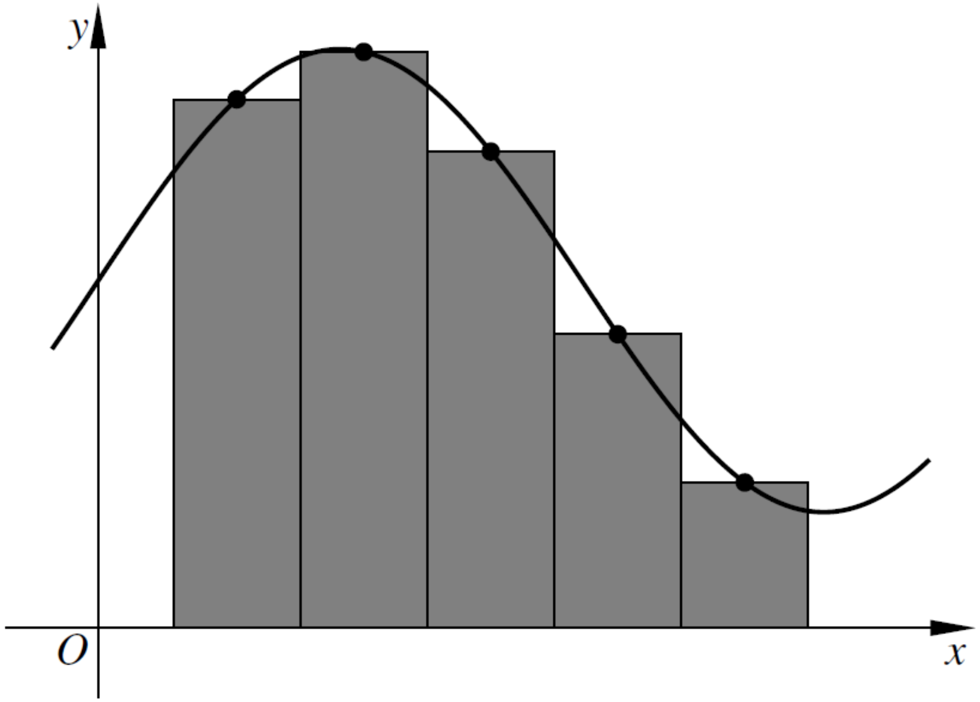


Для одного отрезка: $(b-a)\dfrac{f(a)+3f(\frac{2a+b}{3})+3f(\frac{a+2b}{3})+f(b)}{8}$

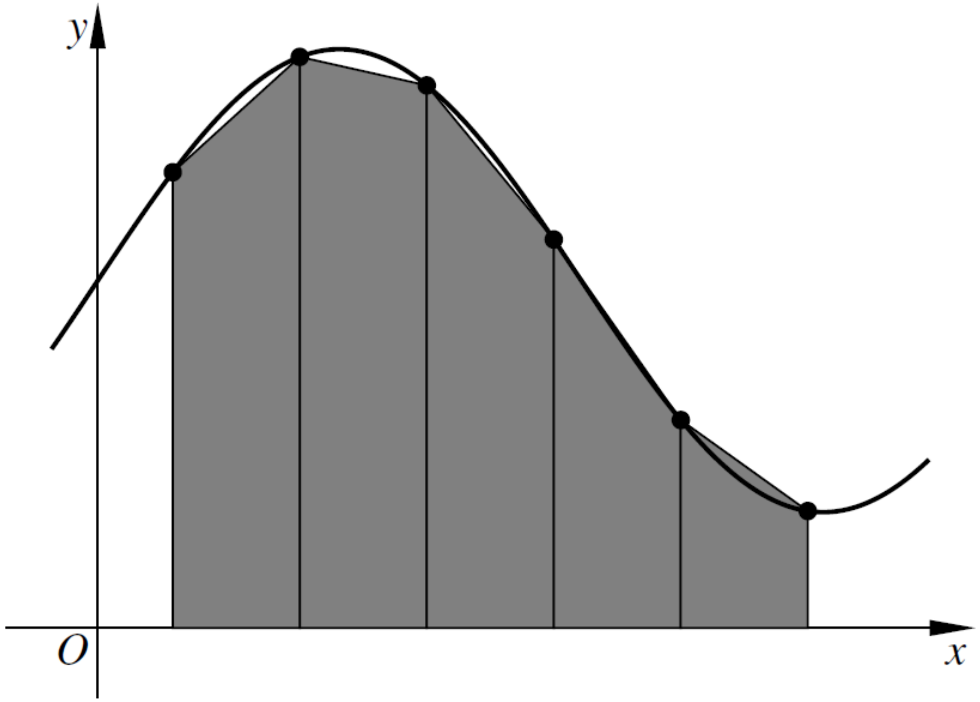
Составная формула: $\displaystyle\sum_{i=1}^{N}\frac{f(x_{i-1})+3f(\frac{2x_{i-1}+x_i}{3})+3f(\frac{x_{i-1}+2x_i}{3})+f(x_i)}{8}\Delta x_i$

Что точнее?

Попробуйте угадать, какая из двух квадратурных формул точнее:



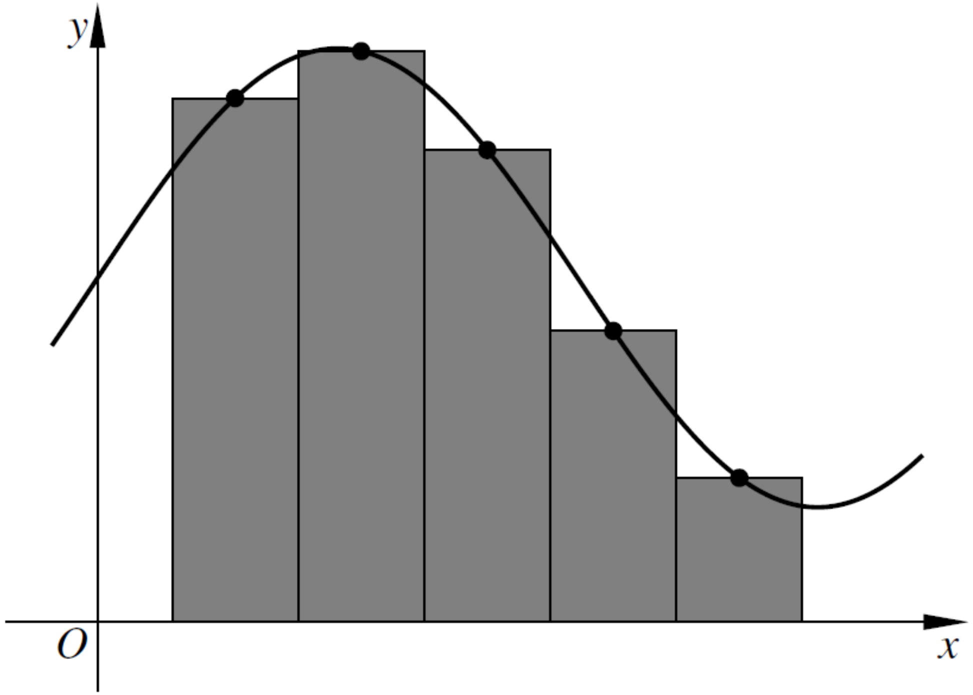
Метод средней точки



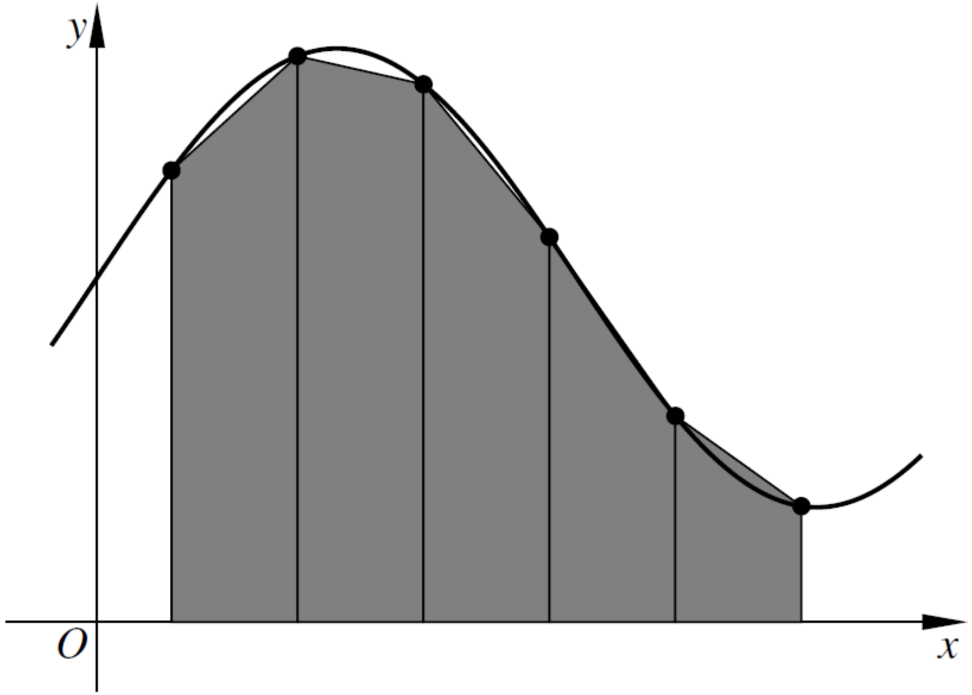
Метод трапеций

Что точнее?

Попробуйте угадать, какая из двух квадратурных формул точнее:



Метод средней точки
Ошибка $\sim 1\%$



Метод трапеций
Ошибка $\sim 2\%$

Остаточный член квадратурной формулы

$$I[f] = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k), \qquad E[f] = \int_a^b f(x)dx - I[f]$$

Функционал $E[f]$ назовем *остаточным членом квадратуры* или просто, *погрешностью квадратуры*.

Если квадратура имеет алгебраическую степень m, то $E[P_m] \equiv 0$.

$$E[f] = \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!} Q(t)dt,$$

где

$$Q(t) = \int_t^b (x-t)^m dx - (b-a)\sum_{k:\, x_k > t} w_k (x_k - t)^m$$

$$Q\left(\frac{a+b}{2} + \tau\frac{b-a}{2}\right) = \left(\frac{b-a}{2}\right)^{m+1} q(\tau)$$

Остаточные члены стандартных формул

Формула	m	$q(\tau)$	$E[f]$
Левых прямоугольников	0	$1-\tau$	$\frac{f'(\zeta)(b-a)^2}{2}$
Правых прямоугольников	0	$-1-\tau$	$-\frac{f'(\zeta)(b-a)^2}{2}$
Средней точки	1	$\frac{(1-\|\tau\|)^2}{2}$	$\frac{f''(\zeta)(b-a)^3}{24}$
Трапеций	1	$\frac{\tau^2-1}{2}$	$-\frac{f''(\zeta)(b-a)^3}{12}$
Симпсона	3	$\frac{(\|\tau\|-1)^3(1+3\|\tau\|)}{12}$	$-\frac{f^{IV}(\zeta)(b-a)^5}{2880}$
Правило «3/8»	3	$\begin{cases} \frac{9\tau^4-1}{36}, & \|\tau\| \leqslant 1/3 \\ \frac{(\|\tau\|-1)^3\|\tau\|}{4}, & \|\tau\| > 1/3 \end{cases}$	$-\frac{f^{IV}(\zeta)(b-a)^5}{6480}$

Правило Рунге

Сделаем предположение, что в выражении

$$I^* = I_h + E[f] = I_h + (b-a)\frac{f^{(p)}(\zeta)h^p}{C}$$

точка ζ слабо зависит от h:

$$I^* = I_h + ch^p + o(h^p),$$

где c — константа и не зависит от h. Величина

$$\varepsilon_h = ch^p$$

может считаться главным членом ошибки (то есть ошибкой с точностью до бесконечно малой по h поправки).

Правило Рунге

Вычислим интеграл несколько раз на серии сгущающихся сеток с шагами $h, h/2, h/4, \ldots$:

$$
\begin{aligned}
I^* &= I_h + \varepsilon_h + o(h^p) = I_h + ch^p + o(h^p) \\
I^* &= I_{h/2} + \varepsilon_{h/2} + o(h^p) = I_{h/2} + 2^{-p}ch^p + o(h^p) \\
I^* &= I_{h/4} + \varepsilon_{h/4} + o(h^p) = I_{h/4} + 2^{-2p}ch^p + o(h^p) \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

Заметим, что разность приближенных значений интегралов позволяет оценить разность главных членов соответствующих погрешностей:

$$\Delta_{h/2} \equiv I_{h/2} - I_h = \varepsilon_h - \varepsilon_{h/2} + o(h^p) = (2^p - 1)\varepsilon_{h/2} + o(h).$$

Правило Рунге

Правило Рунге позволяет просто оценить главный член погрешности вычислении интеграла на мелкой сетке:

$$\varepsilon_{h/2} = \frac{I_{h/2} - I_h}{2^p - 1} + o(h).$$

Использование правила Рунге требует осторожности. Требуется контролировать что *фактический порядок сходимости* численного метода соответствует номинальному p. Фактический порядок p^* может в силу некоторых обстоятельств (например, недостаточная гладкость $f(x)$) быть меньше номинального порядка сходимости p. Простейший способ контроля — следить за выполнением соотношения

$$p^* \equiv \log_2 \frac{\Delta_h}{\Delta_{h/2}} \approx p.$$

Использование правила Рунге, пример 1

Интегрирование методом Симпсона $p = 4$ функции $\frac{1}{\sqrt{x}}$ на $[1, 9]$.

N	I_h	$\Delta_h = I_h - I_{2h}$	$\varepsilon_h = \Delta_h/(2^4 - 1)$	p^*
40	4.0000010223489	$\star$	$\star$	$\star$
80	4.0000000647720	$-9.57577 \cdot 10^{-7}$	$-6.38385 \cdot 10^{-8}$	$\star$
160	4.0000000040624	$-6.07096 \cdot 10^{-8}$	$-4.04731 \cdot 10^{-9}$	3.98
320	4.0000000002541	$-3.80827 \cdot 10^{-9}$	$-2.53885 \cdot 10^{-10}$	3.99
640	4.0000000000159	$-2.38246 \cdot 10^{-10}$	$-1.58831 \cdot 10^{-11}$	4.00
1280	4.0000000000010	$-1.48832 \cdot 10^{-11}$	$-9.92214 \cdot 10^{-13}$	4.00
2560	4.0000000000001	$-8.91731 \cdot 10^{-13}$	$-5.94487 \cdot 10^{-14}$	4.06
5120	4.0000000000000	$-1.16351 \cdot 10^{-13}$	$-7.75676 \cdot 10^{-15}$	2.94
10240	3.9999999999999	$-1.28342 \cdot 10^{-13}$	$-8.55612 \cdot 10^{-15}$	-0.14

Точное значение $I = \int_1^9 \frac{dx}{\sqrt{x}} = 4.$

Использование правила Рунге, пример 2

Интегрирование методом Симпсона $p = 4$ функции $3 - \sqrt{x}$ на $[0, 9]$.

N	I_h	$\Delta_h = I_{2h} - I_h$	$\varepsilon_h = \Delta_h/(2^4 - 1)$	p^*
40	9.0030633904588	$\star$	$\star$	$\star$
80	9.0010830724831	$-1.98032 \cdot 10^{-3}$	$-1.32021 \cdot 10^{-4}$	$\star$
160	9.0003829239736	$-7.00149 \cdot 10^{-4}$	$-4.66766 \cdot 10^{-5}$	1.50
320	9.0001353840708	$-2.47540 \cdot 10^{-4}$	$-1.65027 \cdot 10^{-5}$	1.50
640	9.0000478654974	$-8.75186 \cdot 10^{-5}$	$-5.83457 \cdot 10^{-6}$	1.50
1280	9.0000169230090	$-3.09425 \cdot 10^{-5}$	$-2.06283 \cdot 10^{-6}$	1.50
2560	9.0000059831870	$-1.09398 \cdot 10^{-5}$	$-7.29321 \cdot 10^{-7}$	1.50
5120	9.0000021153757	$-3.86781 \cdot 10^{-6}$	$-2.57854 \cdot 10^{-7}$	1.50
10240	9.0000007478989	$-1.36748 \cdot 10^{-6}$	$-9.11651 \cdot 10^{-8}$	1.50

Точное значение $I = \int_0^9 3 - \sqrt{x} dx = 9.$