7. Приближенное представление функций, дифференцирование, интегрирование.

Приближенное представление функций (аппроксимация, интерполяция)

На практике часто приходится прибегать к замене функций их приближенными представлениями. Представим схематически некоторые ситуации, в которых возникает данная необходимость.

1. Входящая в задачу функция слишком сложна, и это делает невозможным решение задачи. В этом случае функция заменяется более простой, приближенной функцией, для которой задача упрощается. Полученный при этом результат и принимают за приближенное решение исходной задачи.

Если первообразная не выражается через элементарные функции, то подынтегральную функцию можно заменить на приближенную и вычислить интеграл.

2. Функция $f(x)$ задана таблично для некоторых значений аргумента: $f(x_i) = y_i$, $i=1,2,\dots, n$, а для решения задачи требуется вычисление ее значений при значениях аргументов, отличных от имеющихся в таблице. При аналогичных условиях, требуется вычислить производную или интеграл от $f(x)$. По таблице находится приближенное аналитическое выражение для функции, и вычисляются необходимые величины.

В общем виде задачу о приближенном значении функции можно описать так: имеется множество функций F и в нем выделено подмножество H более простых функций, которые используются для приближенного представления функций из F. Для каждой функции $f \in F$ нужно выделить функцию $h_f \in H$, которая была бы для нее «достаточно хорошим» приближением.

Функция h_f должна быть найдена так, чтобы замена функции f на функцию h_f не привела к большой погрешности в окончательном результате вычислений. Для оценки приближения обычно вводится в множестве F числовая мера $\rho=(f,g)\geq 0$ близости двух функций: чем меньше это значение, тем в определенном смысле ближе функции f и g.

Например, если необходимо оценить близость значений функции в заданных точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, то можно использовать меры:

$$\rho_1(f,g) = \sum_{i=0}^{n} \left| f(x_1) - g(x_1) \right|,$$

$$\rho_2(f,g) = \sum_{i=0}^{n} \left| f(x_1) - g(x_1) \right|^2.$$

Если необходимо оценить близость графиков функций на всем отрезке, то можно использовать меру:

$$\rho_0(f,g) = \max_{a \le x \le b} \left| f(x) - g(x) \right|$$

Если нас интересует лишь близость значений интегралов от функций, то используется мера

$$\hat{\rho}_1(f,g) = \int_a^b \left| f(x) - g(x) \right| dx \quad \text{или} \quad \hat{\rho}_2(f,g) = \int_a^b \left| f(x) - g(x) \right|^2 dx$$

Если введена мера близости $\rho=(f,g)$, то возникает задача о наилучшем приближении: для данной функции $f \in F$ найти функцию $h_f \in H$, для которой мера близости принимает наименьшее возможное значение:

$$\rho(f, h_f) = \min_{h \in H} \rho(f,h)$$

Численное дифференцирование

Численное дифференцирование (ЧД) – метод нахождения производных функции $f(x)$, заданной значениями в узловых точках x_i на отрезке $[a,b]$.

В отличие от задачи численного интегрирования (ЧИ) задача ЧД не является столь актуальной в связи с отсутствием принципиальных трудностей с аналитическим нахождением производных.

ЧД применяется в следующих случаях:

• при незнании аналитического вида функции $f(x)$;

• при сильном усложнении вида функции при ее аналитическом дифференцировании (что затрудняет нахождение ее значений с высокой точностью);

•при стремлении получения значений производных с помощью однотипных вычислительных процессов без привлечения аналитических выкладок.

Наиболее часто требуется вычислить первую и вторую производные функции $f(x)$ в определенных точках.

2 основных способа получения формул ЧД:

• метод неопределенных коэффициентов (наиболее употребителен в многомерном случае, когда не всегда просто выписывается интерполяционный многочлен);

•дифференцирование интерполяционных формул (используется для получения простейших формул ЧД).

Метод неопределенных коэффициентов

Предположим, что формулы ЧД для производных k-го порядка имеют вид

$$f^{(k)}(x) \approx \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i), \qquad (1)$$

Где x_i – узловые точки (узлы), n – количество узловых точек, c_i – некоторые коэффициенты.

Определим коэффициенты c_i, исходя из условия, чтобы формула была точна для многочленов максимально высокой степени.

Возьмем $f(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j x^j.$ Потребуем, чтобы для этой формулы соотношение (1) обратилось в равенство в любой фиксированной точке x из отрезка $[a,b]$:

$$f^{(k)}(x) = \sum_{j=0}^{m} a_j \left(x^j\right)^{(k)} = \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i) = \sum_{i=1}^{n} c_i \left(\sum_{j=0}^{m} a_j x_i^j \right) = \sum_{j=0}^{m} a_j \left(\sum_{i=1}^{n} c_i x_i^j \right). \qquad (2)$$

Чтобы (2) выполнялось для любого многочлена степени m, необходимо и достаточно, чтобы коэффициенты при a_j в обеих частях равенства (2) были равны:

$$\left(x^j\right)^{(k)} = \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ = \sum_{i=1}^{n} c_i x_i^j, \quad j = 0,1,\ldots,m.$$

(3)

(3) - система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) относительно вектора неизвестных c_i, содержащая $(m+1)$ уравнение с n неизвестными.

При $m+1 = n$ основная матрица системы – квадратная, ее определитель – определитель Вандермонда

Определитель Вандермонда не равен 0. Таким образом, всегда можно построить формулу ЧД с n узлами, точную для многочленов степени $m = n$-1.

Кроме того, при $m = n$-1 и определенном расположении узлов иногда оказывается, что (3) будет выполнено и при $j = n$. Как правило, это будет в случае, когда узлы расположены симметрично относительно данной точки x, в которой ищется производная.

При симметрично расположенных узлах справедливо следующее:

если порядок производной k – четное число, то

$c_1 = c_n$, $c_2 = c_{n-1}$,…, т.е. $c_{n+1-k} = c_k$;

если порядок производной k – нечетное число, то

$c_1 = -c_n$, $c_2 = -c_{n-1}$,…, т.е. $c_{n+1-k} = -c_k$.

Свойства симметрии формул ЧД используются для уменьшения числа уравнений, которые нужно решить при построении формулы ЧД.

Формулы – центральные формулы ЧД (центральные конечно-разностные аппроксимации - КРА).

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h},$$

$$f''(x) \approx \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}.$$

Аналогичным способом можно получить односторонние формулы ЧД для 1-й производной: Формулы – правые КРА (формулы вперёд).

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \qquad f'(x) \approx \frac{-f(x+2h) + 4f(x+h) - 3f(x)}{2h}$$

Формулы– левые КРА (формулы назад).

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \qquad f'(x) \approx \frac{3f(x) - 4f(x-h) + f(x-2h)}{2h}$$

Дифференцирование интерполяционных формул

Интерполяционный многочлен Ньютона для неравноотстоящих узлов:

$$f(x) \approx P_n(x) = f(x_0) + f(x_0,x_1)(x-x_0) + f(x_0,x_1,x_2)(x-x_0)(x-x_1) +$$
$$+ \ldots + f(x_0,x_1,\ldots,x_n)(x-x_0)(x-x_1)\cdot\ldots\cdot(x-x_{n-1}),$$

где $f(x_0,x_1,\ldots,x_n)$ – разделенная разность k-го порядка.

Тогда:

$$f(x) \approx P_n(x) = f(x_0) + f(x_0,x_1)\xi_0 + f(x_0,x_1,x_2)\xi_0\xi_1 + +\ldots$$
$$+ f(x_0,x_1,\ldots,x_n)\xi_0\xi_1\cdot\ldots\cdot\xi_{n-1}$$

Где $\xi_i = x - x_i$

Для 1-й производной:

$$f'(x) \approx P_n'(x) = f(x_0,x_1) + f(x_0,x_1,x_2)(\xi_0 + \xi_1) + f(x_0,x_1,x_2,x_3)(\xi_0\xi_1 + \xi_0\xi_2 + \xi_1\xi_2) + \ldots$$

Для 2-й производной:

$$f''(x) \approx P_n''(x) = 2f(x_0,x_1,x_2) + 2f(x_0,x_1,x_2,x_3)(\xi_0 + \xi_1 + \xi_2) + \ldots$$

Общая формула имеет вид:

$$f^{(k)}(x) \approx k!\left[f(x_0,x_1,\ldots,x_k) + \left(\sum_{i=0}^{k}\xi_i\right) f(x_0,x_1,\ldots,x_{k+1}) + \left(\sum_{i>j\ge 0}^{i=k+1}\xi_i\xi_j\right) f(x_0,x_1,\ldots,x_{k+2}) + \ldots\right]$$

(10)

Обрывая (10) на некотором числе членов, получаем формулу ЧД.

Если оставить в (10) только первый член, то

- для 1-й производной

$$f'(x) \approx f(x_0,x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0};$$

- для 2-й производной

$$f''(x) \approx 2f(x_0,x_1,x_2) = 2\frac{f(x_1,x_2) - f(x_0,x_1)}{x_2 - x_0} = 2\frac{\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_0}.$$

Последние формулы рассчитаны на произвольную неравномерную сетку.

При использовании равномерной сетки формулы упрощаются.

При $x_{i+1} - x_i = h$ получаем: $f'(x) \approx f(x_0,x_1) = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h}$, что совпадает с полученными ранее формулами (6), (8) при соответствующем выборе x.

$$f''(x) \approx 2\frac{\dfrac{f(x_2) - f(x_1)}{h} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{h}}{2h} = \frac{f(x_2) - 2f(x_1) + f(x_0)}{h^2},$$

что совпадает с полученной ранее формулой $f''(x) \approx \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2}$. при $x = x_1$.

Численное интегрирование

Как и в случае дифференцирования, будем приближать интегралы линейными комбинациями значений функции в некоторых узлах. Будем рассматривать интегралы вида

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

где p(x) — некоторая весовая функция. Приближения в общем виде записываются так: $I(f) \approx \sum c_i f(x_i)$. Один из способов численного интегрирования — приблизить функцию многочленом Лагранжа степени n и проинтегрировать его. Естественно, значение интеграла заведомо будет точным для многочленов степени n. На практике применяются так называемые квадратурные формулы прямоугольников, трапеций и Симпсона (как частные случаи формулы Лагранжа). Они получаются из соображений того, что приближённая формула должна быть точной для многочленов наиболее высокой степени.

3.3.1. Формула прямоугольников

Найдём квадратурную формулу для одного узла. Она должна быть точна на многочленах нулевой степени, и потому имеет вид $K_1(f) = (b-a) \cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right)$.

Погрешность вычислений данной формулы $R(f) \leqslant \|f'\| \cdot \frac{(b-a)}{4}$ и $R(f) \leqslant \|f''\| \cdot \frac{(b-a)^3}{24}$.

3.3.2. Метод трапеций

В этой формуле используется два узла. Формула должна быть точной для многочленов нулевой и первой степеней. Пусть $x_1 = a$, $x_2 = b$. Найдём коэффициенты: $K_2(f) = c_1 f(x_1) + c_2 f(x_2)$. Имеем

$$\begin{cases} b-a = c_1 + c_2, \\ \frac{b^2-a^2}{2} = c_1 a + c_2 b. \end{cases} \tag{16}$$

Отсюда $c_1 = c_2 = \frac{b-a}{2}$.

Погрешность вычислений данной формулы $R(f) = \|f''\| \cdot \frac{(b-a)^3}{12}$.

3.3.3. Метод Симпсона

Абсолютно аналогично получается формула

$$K_3(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a-b}{2}\right) + f(b)\right). \tag{17}$$

Погрешность вычислений данной формулы $R(f) \leqslant \|f'''\| \cdot \frac{(b-a)^4}{192}$ и $R(f) \leqslant \|f^{(4)}\| \cdot \frac{(b-a)^5}{2880}$. Она оказывается точной и для многочленов третьей степени за счёт симметрии узлов.

16.2. Правило Рунге практической оценки погрешности

Пусть имеем некоторый вычислительный алгоритм, зависящий от малого параметра (шага) h. Пусть при вычислении с шагом h получили

$$z = z_h + Ch^k + O(h^{k+m}), \tag{16.15}$$

где z – точное значение вычисляемой величины, z_h – приближенное значение, $Ch^k + O(h^{k+m})$ – погрешность, Ch^k – главный член погрешности, $O(h^{k+m})$ – величины более высокого порядка малости, C, k, m – положительные константы, не зависящие от h.

При вычислении с половинным шагом, имеем

$$z = z_{h/2} + C\left(\frac{h}{2}\right)^k + O(h^{k+m}). \tag{16.16}$$

Вычитая из одного равенства другое, получаем

$$z_{h/2} - z_h = C\left(\frac{h}{2}\right)^k (2^k - 1) + O(h^{k+m}),$$

откуда

$$C\left(\frac{h}{2}\right)^k = \frac{z_{h/2} - z_h}{2^k - 1} + O(h^{k+m}).$$

Следовательно, если $C \neq 0$, то с точностью до $O(h^{k+m})$

$$z - z_{h/2} \approx \frac{z_{h/2} - z_h}{2^k - 1}. \tag{16.17}$$

Вычисление приближенного значения погрешности по формуле (16.17) называют **правилом Рунге практической оценки погрешности**.

Умножаем равенство (16.16) на 2^k и из полученного результата вычитаем выражение (16.15). Получаем

$$z(2^k - 1) = 2^k z_{h/2} - z_h + O(h^{k+m}),$$

откуда находим

$$z = z_h^* + O(h^{k+m}),$$

где

$$z_h^* = \frac{2^k z_{h/2} - z_h}{2^k - 1}. \tag{16.18}$$

Величину z^* называют уточненным по Ричардсону приближенным значением величины z (**уточнением по Ричардсону**).

Старшие формулы Ньютона – Котеса

Интервал интегрирования (a, b) разбивается на n равных отрезков длиной h = (b – a)/n.

Для приближенной оценки площади i-ой полоски s_i подинтегральная функция y(x) на интервале (x_i, x_{i+1}) аппроксимируется полиномом степени m.

Ограничение полиномом третьей степени (m = 3) дает третью формулу Ньютона –Котеса, называемую ”правилом трех восьмых”:

$$J = \frac{3}{8}h(y_0 + \quad 3y_1 + 3y_2 + 2y_3 + 3y_4 + 3y_5 + 2y_6 + 3y_7 + \ldots \\ + \quad 3y_{n-4} + 2y_{n-3} + 3y_{n-2} + 3y_{n-1} + y_n). \tag{9}$$

Погрешность расчета по этой формуле оказывается такой же, как и по формуле Симпсона

$$E_3 \sim h^4 \tag{10}$$

Полином четвертой степени дает четвертую формулу Ньютона – Котеса

$$J = \frac{2}{45}h(7y_0 + \quad 32y_1 + 12y_2 + 32y_3 + 14y_4 + 32y_5 + 12y_6 + \ldots \\ + \quad 14y_{n-4} + 32y_{n-3} + 12y_{n-2} + 32y_{n-1} + 7y_n). \tag{11}$$

Погрешность четвертой формулы

$$E_4 \sim h^6 \tag{12}$$

Все формулы Ньютона–Котеса являются квадратурными формулами∗

$$J = \sum_{i=0}^{N} c_i y(x_i) \tag{13}$$

узлы x_i которых расположены эквидистантно, а свободными параметрами, за счет которых достигается точное интегрирование полинома m степени, являются весовые коэффициенты c_i.

В противоположность формулам Ньютона – Котеса в методе Чебышева свободными параметрами являются узлы квадратурной формулы и общий весовой коэффициент, а в методе Лежандра – Гаусса (метод наивысшей алгебраической точности) — и узлы, и весовые коэффициенты.