Вычислительная математика. Численное дифференцирование и численное интегрирование

МФТИ

Численное дифференцирование

Основная задача

Численное дифференцирование

Основная задача

- Дана процедура вычисления $f(x)$.
  Нужно вычислить значение d-й производной в точке $f^{(d)}(x_0)$.

Численное дифференцирование

Основная задача

- Дана процедура вычисления $f(x)$.
  Нужно вычислить значение d-й производной в точке $f^{(d)}(x_0)$.
- Даны точки $x_1, \ldots, x_n$ и значения гладкой функции в этих точках $f_k = f(x_k)$.
  Нужно найти значения $f^{(d)}(x)$ или $f^{(d)}(x_k), k = 1, \ldots, n$

Пример

$$f'(x) \approx \hat{f}' = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} =$$

Пример

$$f'(x) \approx \hat{f}' = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} =$$

$$\frac{f(x) + f'(x)h + f''(x)h^2/2 + O(h^3) - f(x)}{h} =$$

Пример

$$f'(x) \approx \hat{f}' = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} =$$

$$\frac{f(x) + f'(x)h + f''(x)h^2/2 + O(h^3) - f(x)}{h} =$$

$$f'(x) + f''(x)\frac{h}{2} + \mathcal{O}(h^2) =$$

Пример

$$f'(x) \approx \hat{f}' = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} =$$

$$\frac{f(x) + f'(x)h + f''(x)h^2/2 + O(h^3) - f(x)}{h} =$$

$$f'(x) + f''(x)\frac{h}{2} + \mathcal{O}(h^2) =$$

$$f'(x) + f''(\xi)\frac{h}{2} = f'(x) + \mathcal{O}(h)$$

Пример

$$f'(x) \approx \hat{f}' = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} =$$

$$\frac{f(x) + f'(x)h + f''(x)h^2/2 + O(h^3) - f(x)}{h} =$$

$$f'(x) + f''(x)\frac{h}{2} + \mathcal{O}(h^2) =$$

$$f'(x) + f''(\xi)\frac{h}{2} = f'(x) + \mathcal{O}(h)$$

- В точной арифметике:

$$|f'(x) - \hat{f}'| \leq E(h) = \frac{M_2}{2}h,\, M_2 = \max_x |f''|$$

Пример (2)

Пример (2)

- В машинной арифметике:

Пример (2)

- В машинной арифметике:

$$\hat{f}' = \frac{f(x+h)(1+\epsilon_1) - f(x)(1+\epsilon_2)}{h} =$$

Пример (2)

- В машинной арифметике:

$$\hat{f}' = \frac{f(x+h)(1+\epsilon_1) - f(x)(1+\epsilon_2)}{h} =$$

$$f'(x) + f''(\xi)\frac{h}{2} + \frac{\epsilon_1 f(x+h) - \epsilon_2 f(x)}{h}, \ |\epsilon_k| \leq \epsilon$$

Пример (2)

- В машинной арифметике:

$$
\hat{f}' = \frac{f(x+h)(1+\epsilon_1) - f(x)(1+\epsilon_2)}{h} =
$$

$$
f'(x) + f''(\xi)\frac{h}{2} + \frac{\epsilon_1 f(x+h) - \epsilon_2 f(x)}{h}, \quad |\epsilon_k| \le \epsilon
$$

$$
|f'(x) - \hat{f}'| \le \frac{M_2}{2}h + \left|\frac{\epsilon_1 f(x+h) - \epsilon_2 f(x)}{h}\right| \le
$$

Пример (2)

- В машинной арифметике:

$$\hat{f}' = \frac{f(x+h)(1+\epsilon_1) - f(x)(1+\epsilon_2)}{h} =$$

$$f'(x) + f''(\xi)\frac{h}{2} + \frac{\epsilon_1 f(x+h) - \epsilon_2 f(x)}{h}, \ |\epsilon_k| \le \epsilon$$

$$|f'(x) - \hat{f}'| \le \frac{M_2}{2}h + \left|\frac{\epsilon_1 f(x+h) - \epsilon_2 f(x)}{h}\right| \le$$

$$\frac{M_2}{2}h + \frac{2M_0\epsilon}{h} = E(h)$$

Пример (2)

- В машинной арифметике:

$$\hat{f}' = \frac{f(x+h)(1+\epsilon_1) - f(x)(1+\epsilon_2)}{h} =$$

$$f'(x) + f''(\xi)\frac{h}{2} + \frac{\epsilon_1 f(x+h) - \epsilon_2 f(x)}{h}, \ |\epsilon_k| \leq \epsilon$$

$$|f'(x) - \hat{f}'| \leq \frac{M_2}{2}h + \left|\frac{\epsilon_1 f(x+h) - \epsilon_2 f(x)}{h}\right| \leq$$

$$\frac{M_2}{2}h + \frac{2M_0\epsilon}{h} = E(h)$$

- Точка минимума - оптимальный шаг:

$$E'(h) = 0 = \frac{M_2}{2} - \frac{2M_0\epsilon}{h^2}, \quad h^* = \left(\frac{4M_0\epsilon}{M_2}\right)^{1/2}$$

Пример расчета

Повышение порядка, метод неопределенных коэффициентов

Повышение порядка, метод неопределенных коэффициентов

- Даны точки $x_1, \ldots, x_n$ и точка x:

$$\hat{f}' = \sum_{k=1}^{n} a_k f(x_k)$$

Повышение порядка, метод неопределенных коэффициентов

- Даны точки $x_1, \ldots, x_n$ и точка x:

$$\hat{f}' = \sum_{k=1}^{n} a_k f(x_k)$$

- Нужно подобрать a_k так, чтобы занулить как можно больше членов в разложении ошибки

$$f'(x) - \hat{f}' =$$

$$f'(x) - \sum_{k=1}^{n} a_k \left(f(x) + f'(x)(x_k - x) + \frac{f''(x)}{2}(x_k - x)^2 + \ldots \right)$$

Метод неопределенных коэффициентов

$$f'(x) - \sum_{k=1}^{n} a_k \left(f(x) + f'(x)(x_k - x) + \frac{f''(x)}{2}(x_k - x)^2 + \dots \right)$$

Метод неопределенных коэффициентов

$$f'(x) - \sum_{k=1}^{n} a_k \left(f(x) + f'(x)(x_k - x) + \frac{f''(x)}{2}(x_k - x)^2 + \dots \right)$$

Занулим коэффициенты при $f(x)$, $f'(x)$, $f''(x), \dots$:

Метод неопределенных коэффициентов

$$f'(x) - \sum_{k=1}^{n} a_k \left(f(x) + f'(x)(x_k - x) + \frac{f''(x)}{2}(x_k - x)^2 + \dots \right)$$

Занулим коэффициенты при $f(x)$, $f'(x)$, $f''(x), \dots$:

$$\sum_{k=1}^{n} a_k = 0,\ \sum_{k=1}^{n} a_k(x_k - x) = 1,\ \sum_{k=1}^{n} a_k \frac{(x_k - x)^2}{2!} = 0$$

Метод неопределенных коэффициентов

$$f'(x) - \sum_{k=1}^{n} a_k \left(f(x) + f'(x)(x_k - x) + \frac{f''(x)}{2}(x_k - x)^2 + \ldots \right)$$

Занулим коэффициенты при $f(x)$, $f'(x)$, $f''(x), \ldots$:

$$\sum_{k=1}^{n} a_k = 0,\ \sum_{k=1}^{n} a_k (x_k - x) = 1,\ \sum_{k=1}^{n} a_k \frac{(x_k - x)^2}{2!} = 0$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ \frac{(x_1 - x)}{1!} & \frac{(x_2 - x)}{1!} & \ldots & \frac{(x_n - x)}{1!} \\ \ldots & & & \\ \frac{(x_1 - x)^{n-1}}{(n-1)!} & \frac{(x_2 - x)^{n-1}}{(n-1)!} & \ldots & \frac{(x_n - x)^{n-1}}{(n-1)!} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Вид ошибки

Вид ошибки

- Ошибка имеет вид:

$$E = f'(x) - \hat{f}' = -\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(x_k - x)^n + \ldots =$$

$$-\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(\xi_k)}{n!}(x_k - x)^n$$

Вид ошибки

- Ошибка имеет вид:

$$E = f'(x) - \hat{f}' = -\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(x_k - x)^n + \ldots =$$

$$-\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(\xi_k)}{n!}(x_k - x)^n$$

- $h = \max(x_k - x)$: $a_k = O(1/h)$, $E = O(h^{n-1})$,

Вид ошибки

- Ошибка имеет вид:

$$E = f'(x) - \hat{f}' = -\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(x_k - x)^n + \ldots =$$

$$-\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(\xi_k)}{n!}(x_k - x)^n$$

- $h = \max(x_k - x)$: $a_k = O(1/h)$, $E = O(h^{n-1})$,
- Если узлы расположены симметрично относительно x, то $E = O(h^n)$ (следующий член зануляется)

Вид ошибки

- Ошибка имеет вид:

$$E = f'(x) - \hat{f}' = -\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(x)}{n!}(x_k - x)^n + \ldots =$$

$$-\sum_{k=1}^{n} a_k \frac{f^{(n)}(\xi_k)}{n!}(x_k - x)^n$$

- $h = \max(x_k - x)$: $a_k = O(1/h)$, $E = O(h^{n-1})$,
- Если узлы расположены симметрично относительно x, то $E = O(h^n)$ (следующий член зануляется)
- Для производной d по n узлам максимальный порядок: $n - d$ ($n - d + 1$ в некоторых симметричных случаях)

Дифференцирование интерполяционного многочлена

Дифференцирование интерполяционного многочлена

Определение Общая идея

Приблизить функцию *простой* функцией, а простую функцию продифференцировать точно.

Дифференцирование интерполяционного многочлена

Определение Общая идея

Приблизить функцию *простой* функцией, а простую функцию продифференцировать точно.

$$L_{n-1}(x) = \sum_{k=1}^{n} l_k(x) f_k$$

Дифференцирование интерполяционного многочлена

Определение Общая идея

Приблизить функцию *простой* функцией, а простую функцию продифференцировать точно.

$$L_{n-1}(x) = \sum_{k=1}^{n} l_k(x) f_k$$

$$L'_{n-1}(x) = \sum_{k=1}^{n} l'_k(x) f_k$$

Дифференцирование интерполяционного многочлена

Определение Общая идея

Приблизить функцию *простой* функцией, а простую функцию продифференцировать точно.

$$L_{n-1}(x) = \sum_{k=1}^{n} l_k(x) f_k$$

$$L'_{n-1}(x) = \sum_{k=1}^{n} l'_k(x) f_k$$

$$a_k = l'_k(x)$$

Матрицы дифференцирования

Матрицы дифференцирования

- $f = [f_1, \ldots, f_n]$, $w = [w_1, \ldots, w_n] \approx [f'(x_1), \ldots]$

Матрицы дифференцирования

- $f = [f_1, \ldots, f_n]$, $w = [w_1, \ldots, w_n] \approx [f'(x_1), \ldots]$
- Можно ввести дискретный аналог $\frac{d}{dx}$: $w = Df$

Матрицы дифференцирования

- $f = [f_1, \dots, f_n]$, $w = [w_1, \dots, w_n] \approx [f'(x_1), \dots]$
- Можно ввести дискретный аналог $\frac{d}{dx}$: $w = Df$
- Пример:

$$D = \begin{bmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} & 0 & \dots \\ -\frac{1}{2h} & 0 & \frac{1}{2h} & \dots \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \dots & -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \end{bmatrix}$$

Матрицы дифференцирования

- $f = [f_1, \ldots, f_n]$, $w = [w_1, \ldots, w_n] \approx [f'(x_1), \ldots]$
- Можно ввести дискретный аналог $\frac{d}{dx}$: $w = Df$
- Пример:

$$D = \begin{bmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} & 0 & \ldots \\ -\frac{1}{2h} & 0 & \frac{1}{2h} & \ldots \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \ldots & -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \end{bmatrix}$$

- При использовании формул максимального порядка, матрица будет *плотной*: $D = \left[l_j'(x_i) \right]$

Матрицы дифференцирования

- $f = [f_1, \dots, f_n]$, $w = [w_1, \dots, w_n] \approx [f'(x_1), \dots]$
- Можно ввести дискретный аналог $\frac{d}{dx}$: $w = Df$
- Пример:

$$D = \begin{bmatrix} -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} & 0 & \dots \\ -\frac{1}{2h} & 0 & \frac{1}{2h} & \dots \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \dots & -\frac{1}{h} & \frac{1}{h} \end{bmatrix}$$

- При использовании формул максимального порядка, матрица будет *плотной*: $D = \left[l'_j(x_i)\right]$
- Для чебышевских узлов умножение на D можно вычислять с помощью FFT за $O(n \log n)$

Пример расчета

Численное интегрирование

Численное интегрирование

Определение Задача численного интегрирования

Дана процедура вычисления значений $f(x)$. Найти приближенное значение определенного интеграла

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

Численное интегрирование

Определение Задача численного интегрирования

Дана процедура вычисления значений $f(x)$. Найти приближенное значение определенного интеграла

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

Определение Основная идея

Приблизить f *простой* функцией ϕ, а функцию ϕ проинтегрировать точно.

Интерполяционные квадратурные формулы (ф-лы Ньютона-Котеса)

Интерполяционные квадратурные формулы (ф-лы Ньютона-Котеса)

- Отобразим стандартный отрезок $[-1, 1]$ на $[a, b]$:

$$x = x(t) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t$$

  Выберем узлы $t_1, \dots, t_n \in [-1, 1]$, $x_i = x(t_i)$

Интерполяционные квадратурные формулы (ф-лы Ньютона-Котеса)

- Отобразим стандартный отрезок $[-1,1]$ на $[a,b]$:
$$x = x(t) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t$$
Выберем узлы $t_1, \ldots, t_n \in [-1,1]$, $x_i = x(t_i)$
- Построим интерполяционный многочлен:
$$L_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \prod_{j=1,\, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Интерполяционные квадратурные формулы (ф-лы Ньютона-Котеса)

- Отобразим стандартный отрезок $[-1, 1]$ на $[a, b]$:

$$x = x(t) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t$$

Выберем узлы $t_1, \ldots, t_n \in [-1, 1]$, $x_i = x(t_i)$

- Построим интерполяционный многочлен:

$$L_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \prod_{j=1,\ j \neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

- Проинтегрируем по $[a, b]$

$$S(f) = \int_a^b L_{n-1}(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} d_i\, f(x_i),\ d_i = \frac{b-a}{2} \int\limits_{-1}^{1} l_i(t)\, dt$$

Точность квадратурных формул

Точность квадратурных формул

- Если $f \in C^n[a,b]$, то из формулы для ошибки интерполяции получаем:

$$|I(f) - S(f)| \le \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

Точность квадратурных формул

- Если $f \in C^n[a,b]$, то из формулы для ошибки интерполяции получаем:

$$|I(f) - S(f)| \le \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- Говорят, что $S(f)$ имеет алгебраическую точность m, если она точна для многочленов степени $\le m$

Точность квадратурных формул

- Если $f \in C^n[a,b]$, то из формулы для ошибки интерполяции получаем:

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- Говорят, что $S(f)$ имеет алгебраическую точность m, если она точна для многочленов степени $\leq m$
- Формула S для n узлов имеет алгебраическую точность $m \geq n-1 \iff S$ – интерполяционная квадратурная формула.

Точность квадратурных формул

- Если $f \in C^n[a,b]$, то из формулы для ошибки интерполяции получаем:

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- Говорят, что $S(f)$ имеет алгебраическую точность m, если она точна для многочленов степени $\leq m$
- Формула S для n узлов имеет алгебраическую точность $m \geq n-1 \iff S$ – интерполяционная квадратурная формула.
  - $\Leftarrow$ По построению

Точность квадратурных формул

- Если $f \in C^n[a,b]$, то из формулы для ошибки интерполяции получаем:

$$|I(f) - S(f)| \le \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- Говорят, что $S(f)$ имеет алгебраическую точность m, если она точна для многочленов степени $\le m$
- Формула S для n узлов имеет алгебраическую точность $m \ge n - 1 \iff S$ – интерполяционная квадратурная формула.
  - $\Leftarrow$ По построению
  - $\Rightarrow$ Вместо f подставим l_i, для которых формула точна, получим ту же формулу для d_i $\square$

Примеры квадратурных формул

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2} \right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

Примеры квадратурных формул

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- $h = b - a$, $M_m = \|f^{(m)}\|_{C[a,b]}$

Примеры квадратурных формул

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1}\int\limits_{-1}^{+1}\left|\prod_{j=1}^{n}(t-t_j)\right|dt$$

- $h = b - a,\ M_m = \|f^{(m)}\|_{C[a,b]}$
- Формула прямоугольников с центральной точкой:

$$n = 1,\ S(f) = f(\frac{a+b}{2})h, \quad |I(f) - S(f)| \leq \frac{1}{4}M_1 h^2$$

Примеры квадратурных формул

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- $h = b - a,\ M_m = \|f^{(m)}\|_{C[a,b]}$
- Формула прямоугольников с центральной точкой:

$$n = 1,\ S(f) = f(\frac{a+b}{2})h, \quad |I(f) - S(f)| \leq \frac{1}{4} M_1 h^2$$

- Ту же формулу можно получить из эрмитовой интерполяции $t_1 = t_2 = 0$: $H(t) = f(0) + f'(0)t$:

$$f \in C^2 :\ |I(f) - S(f)| \leq \frac{1}{24} M_2 h^3$$

Примеры квадратурных формул (2)

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

Примеры квадратурных формул (2)

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2} \right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- Формула трапеций:

$$n = 2,\ S(f) = \frac{1}{2}(f(a) + f(b))h,\ |I(f) - S(f)| \leq \frac{1}{12} M_2 h^3$$

Примеры квадратурных формул (2)

$$|I(f) - S(f)| \leq \frac{\|f^{(n)}\|_C}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1} \int\limits_{-1}^{+1} \left| \prod_{j=1}^{n} (t - t_j) \right| dt$$

- Формула трапеций:

$$n = 2,\ S(f) = \frac{1}{2}(f(a) + f(b))h,\ |I(f) - S(f)| \leq \frac{1}{12} M_2 h^3$$

- Формула Симпсона: обычная интерполяция по 3-м точкам $-1, 0, +1$ и эрмитова интерполяция с кратным узлом $-1, 0, 0, +1$ дают один и тот же результат:

$$S(f) = \frac{h}{6}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)\right),\ E \leq Ch^5$$

Составные квадратурные формулы

Составные квадратурные формулы

- отрезок $[a, b]$ разбивается на N отрезков длины $h = \frac{b-a}{N}$

Составные квадратурные формулы

- отрезок $[a, b]$ разбивается на N отрезков длины $h = \frac{b-a}{N}$
- на каждом отрезке применяется квадратурная формула, результаты складываются

Составные квадратурные формулы

- отрезок $[a, b]$ разбивается на N отрезков длины $h = \frac{b-a}{N}$
- на каждом отрезке применяется квадратурная формула, результаты складываются
- если квадратурная формула имеет порядок точности p, то для составной формулы получается порядок $p - 1$:

$$E = N\,O(h^p) = \frac{b-a}{h} O(h^p) = O(h^{p-1})$$

Пример расчета по составной формуле

Квадратурные формулы Гаусса-Кристофеля

Квадратурные формулы Гаусса-Кристофеля

- Интерполяционные формулы по *любым* n узлам имеют алгебраическую точность $\geq n-1$

Квадратурные формулы Гаусса-Кристофеля

- Интерполяционные формулы по *любым* n узлам имеют алгебраическую точность $\geq n-1$
- Можно ли подобрать узлы так, чтобы точность была $2n-1$?

$$\sum_{i=1}^{n} d_i x_i^k = \int_{-1}^{1} x^k \, dx \; k = 0, \ldots, 2n-1$$

Квадратурные формулы Гаусса-Кристофеля

- Интерполяционные формулы по *любым* n узлам имеют алгебраическую точность $\geq n-1$
- Можно ли подобрать узлы так, чтобы точность была $2n-1$?

$$\sum_{i=1}^{n} d_i x_i^k = \int_{-1}^{1} x^k \, dx \; k = 0, \ldots, 2n-1$$

Теорема Теорема

Для любого числа узлов n существует единственная квадратурная формула с алгебраической точностью $2n-1$.

Доказательство

Доказательство

- $\omega_n = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$

Доказательство

- $\omega_n = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$
- Если существует формула точности $2n$, то
$$I(\omega^2) = \sum_i d_i \omega^2(x_i) = 0 \text{ – противоречие } (I(\omega^2) > 0)$$

Доказательство

- $\omega_n = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$
- Если существует формула точности $2n$, то
$$I(\omega^2) = \sum_i d_i \omega^2(x_i) = 0 \text{ – противоречие } (I(\omega^2) > 0)$$
- Если формула имеет точность $2n - 1$, то
$$I\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = S\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = 0, \ \forall\, r_{n-1} \in \mathcal{P}_{n-1}$$

Доказательство

- $\omega_n = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$
- Если существует формула точности $2n$, то
$$I(\omega^2) = \sum_i d_i \omega^2(x_i) = 0 \text{ – противоречие } (I(\omega^2) > 0)$$
- Если формула имеет точность $2n-1$, то
$$I\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = S\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = 0, \ \forall\, r_{n-1} \in \mathcal{P}_{n-1}$$
- $\Rightarrow \omega_n$ - n-й ортогональный многочлен с корнями x_k

Доказательство

- $\omega_n = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$
- Если существует формула точности $2n$, то
$$I(\omega^2) = \sum_i d_i \omega^2(x_i) = 0 \text{ – противоречие } (I(\omega^2) > 0)$$
- Если формула имеет точность $2n-1$, то
$$I\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = S\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = 0, \ \forall\, r_{n-1} \in \mathcal{P}_{n-1}$$
- $\Rightarrow \omega_n$ - n-й ортогональный многочлен с корнями x_k
- Веса вычисляются по формуле: $d_i = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} l_i(t)\, dt$

Доказательство

- $\omega_n = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$
- Если существует формула точности $2n$, то
$$I(\omega^2) = \sum_i d_i\omega^2(x_i) = 0 \text{ – противоречие } (I(\omega^2) > 0)$$
- Если формула имеет точность $2n-1$, то
$$I\big(\omega_n(x)r_{n-1}(x)\big) = S\big(\omega_n(x)r_{n-1}(x)\big) = 0,\ \forall\, r_{n-1} \in \mathcal{P}_{n-1}$$
- $\Rightarrow \omega_n$ - n-й ортогональный многочлен с корнями x_k
- Веса вычисляются по формуле: $d_i = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} l_i(t)\,dt$
- Докажем, что для $p_{2n-1} = q_{n-1}\omega_n + r_{n-1}$ ф-ла точна:

Доказательство

- $\omega_n = \prod_{j=1}^{n}(x - x_j)$
- Если существует формула точности $2n$, то
$$I(\omega^2) = \sum_i d_i \omega^2(x_i) = 0 \text{ – противоречие } (I(\omega^2) > 0)$$
- Если формула имеет точность $2n-1$, то
$$I\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = S\big(\omega_n(x) r_{n-1}(x)\big) = 0, \ \forall\, r_{n-1} \in \mathcal{P}_{n-1}$$
- $\Rightarrow \omega_n$ - n-й ортогональный многочлен с корнями x_k
- Веса вычисляются по формуле: $d_i = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} l_i(t)\, dt$
- Докажем, что для $p_{2n-1} = q_{n-1}\omega_n + r_{n-1}$ ф-ла точна:
$$\begin{aligned} I(p_{2n-1}) &= I(q_{n-1}\omega_n) + I(r_{n-1}) = \\ &= S(r_{n-1}) = S(q_{n-1}\omega_n) + S(r_{n-1}) = S(p_{2n-1}) \quad \square \end{aligned}$$

Пример расчета по формуле Гаусса

Формулы Гаусса-Кристофеля с весовой функцией

Формулы Гаусса-Кристофеля с весовой функцией

- Формулы Гаусса можно построить для интегралов вида:

$$I(f) = \int_{-1}^{+1} w(x) f(x)\, dx$$

где $w(x) \geq 0$

Формулы Гаусса-Кристофеля с весовой функцией

- Формулы Гаусса можно построить для интегралов вида:

$$I(f) = \int_{-1}^{+1} w(x) f(x)\, dx$$

где $w(x) \geq 0$

- Весовая функция w порождает скалярное произведение и систему ортогональных многочленов

Формулы Гаусса-Кристофеля с весовой функцией

- Формулы Гаусса можно построить для интегралов вида:

$$I(f) = \int_{-1}^{+1} w(x) f(x)\, dx$$

где $w(x) \geq 0$

- Весовая функция w порождает скалярное произведение и систему ортогональных многочленов
- Весовая функция может иметь особенность:

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}}$$

Правило Рунге

Правило Рунге

- Рассмотрим формулу S_1 алгебраической точности $n-1$ на отрезке длины h, c - середина отрезка

Правило Рунге

- Рассмотрим формулу S_1 алгебраической точности $n-1$ на отрезке длины h, c - середина отрезка
- Разложим $f(x)$ в ряд Тейлора в точке c:

$$I(f) - S_1(f) = \alpha f^{(n)}(c) h^{n+1} + O(h^{n+2})$$

Правило Рунге

- Рассмотрим формулу S_1 алгебраической точности $n-1$ на отрезке длины h, c - середина отрезка
- Разложим $f(x)$ в ряд Тейлора в точке c:

$$I(f) - S_1(f) = \alpha f^{(n)}(c) h^{n+1} + O(h^{n+2})$$

- Пусть S_2 - составная формула по 2-м половинкам того же отрезка, тогда:

$$I(f) - S_2(f) = \alpha f^{(n)}(c) \frac{h^{n+1}}{2^n} + O(h^{n+2})$$

Правило Рунге

- Рассмотрим формулу S_1 алгебраической точности $n-1$ на отрезке длины h, c - середина отрезка
- Разложим $f(x)$ в ряд Тейлора в точке c:

$$I(f) - S_1(f) = \alpha f^{(n)}(c)h^{n+1} + O(h^{n+2})$$

- Пусть S_2 - составная формула по 2-м половинкам того же отрезка, тогда:

$$I(f) - S_2(f) = \alpha f^{(n)}(c)\frac{h^{n+1}}{2^n} + O(h^{n+2})$$

- С точностью до членов $O(h^{n+2})$ получаем:

$$I(f) - S_2(f) \approx \frac{S_2 - S_1}{2^n - 1}$$

Вычисление несобственных интегралов

$$\int_a^b f(x)\,dx, \quad f(x) \to \infty \text{ при } x \to a \quad \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

Вычисление несобственных интегралов

$$\int_a^b f(x)\,dx, \quad f(x) \to \infty \text{ при } x \to a \quad \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

- Замена переменной $x = t^2 \Rightarrow I = 2\int_0^1 \cos t^2\,dt$

Вычисление несобственных интегралов

$$\int_a^b f(x)\,dx, \quad f(x) \to \infty \text{ при } x \to a \quad \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

- Замена переменной $x = t^2 \Rightarrow I = 2\int_0^1 \cos t^2\,dt$
- Интегрирование по частям

$$I = \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx = 2\sqrt{x}\cos x\Big|_0^1 + 2\int_0^1 \sqrt{x}\sin x\,dx$$

Вычисление несобственных интегралов

$$\int_a^b f(x)\,dx, \quad f(x) \to \infty \text{ при } x \to a \quad \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

- Замена переменной $x = t^2 \Rightarrow I = 2\int_0^1 \cos t^2\,dt$
- Интегрирование по частям

$$I = \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx = 2\sqrt{x}\cos x\Big|_0^1 + 2\int_0^1 \sqrt{x}\sin x\,dx$$

  - Второй интеграл можно вычислить по квадратурной формуле

Вычисление несобственных интегралов

$$\int_a^b f(x)\,dx, \quad f(x) \to \infty \text{ при } x \to a \qquad \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

- Замена переменной $x = t^2 \Rightarrow I = 2\int_0^1 \cos t^2\,dt$
- Интегрирование по частям

$$I = \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx = 2\sqrt{x}\cos x\Big|_0^1 + 2\int_0^1 \sqrt{x}\sin x\,dx$$

  - Второй интеграл можно вычислить по квадратурной формуле
  - 2-я производная $\sqrt{x}\sin x$ не ограничена, можно ещё раз проинтегрировать по частям

Вычисление несобственных инт-в (2)

Вычисление несобственных инт-в (2)

- Выделение особенности:

Вычисление несобственных инт-в (2)

- Выделение особенности:

$$I = I_1 + I_2 = \int_0^{\delta} \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx + \int_{\delta}^{1} \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

- Выделение особенности:

$$I = I_1 + I_2 = \int_0^\delta \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\, dx + \int_\delta^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\, dx$$

$$I_1 = \int_0^\delta \frac{\sum\limits_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k}}{(2k)!}}{\sqrt{x}}\, dx = \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k \delta^{2k+1/2}}{(2k)!(2k+1/2)} + R$$

Вычисление несобственных инт-в (2)

- Выделение особенности:

$$I = I_1 + I_2 = \int_0^\delta \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx + \int_\delta^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

$$I_1 = \int_0^\delta \frac{\sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k \dfrac{x^{2k}}{(2k)!}}{\sqrt{x}}\,dx = \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k \delta^{2k+1/2}}{(2k)!(2k+1/2)} + R$$

$|R|$ не больше последнего члена частичной суммы

Вычисление несобственных инт-в (2)

- Выделение особенности:

$$I = I_1 + I_2 = \int_0^\delta \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx + \int_\delta^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}\,dx$$

$$I_1 = \int_0^\delta \frac{\sum\limits_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{x^{2k}}{(2k)!}}{\sqrt{x}}\,dx = \sum_{k=0}^{n} \frac{(-1)^k \delta^{2k+1/2}}{(2k)!(2k+1/2)} + R$$

$|R|$ не больше последнего члена частичной суммы

- Использование квадратурных формул для интеграла с весом w:

$$I = \int_0^1 w(x)\,\cos x\,dx,\;\; w(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$$

Заключение

Заключение

- Численное дифференцирование:

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена
  - Метод неопределенных коэффициентов

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена
  - Метод неопределенных коэффициентов
  - Оптимальный шаг

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена
  - Метод неопределенных коэффициентов
  - Оптимальный шаг
- Численное интегрирование

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена
  - Метод неопределенных коэффициентов
  - Оптимальный шаг
- Численное интегрирование
  - Интерполяционные квадратурные ф-лы

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена
  - Метод неопределенных коэффициентов
  - Оптимальный шаг
- Численное интегрирование
  - Интерполяционные квадратурные ф-лы
  - Составные квадратурные ф-лы

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена
  - Метод неопределенных коэффициентов
  - Оптимальный шаг
- Численное интегрирование
  - Интерполяционные квадратурные ф-лы
  - Составные квадратурные ф-лы
  - Квадратурные ф-лы Гаусса-Кристофеля

Заключение

- Численное дифференцирование:
  - Дифференцирование интерполяционного многочлена
  - Метод неопределенных коэффициентов
  - Оптимальный шаг
- Численное интегрирование
  - Интерполяционные квадратурные ф-лы
  - Составные квадратурные ф-лы
  - Квадратурные ф-лы Гаусса-Кристофеля
  - Вычисление несобственных интегралов