Лекция 13

6. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть на множестве $\Omega = [a,b]$ заданы:

а) сетка $\Omega_n = \left\{x_i,\ i = \overline{0,n}\right\}$, определяемая $n+1$ точкой $x_0, x_1, \ldots, x_n$, а на сетке задана сеточная функция $y_i = f(x_i),\ i = \overline{0,n}$:

$$y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \ldots, y_n = f(x_n),$$

где $x_i \in [a,b] = [x_0, x_n]$ - в общем случае неравноотстоящие узлы (неравномерная сетка), определяемые шагами $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$ ($h_{i+1} = \mathrm{var}$), $i = \overline{0,n-1}$. При $h_{i+1} = h = \mathrm{const}$ узлы являются равноотстоящими (равномерная сетка). Как и ранее будем использовать обозначение $f_i = f(x_i)$;

б) точки x_j сетки Ω_n, в которых требуется найти значения производных;

в) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно h.

Требуется с заданным порядком точности (аппроксимации) вычислить значения производных $\hat{f}^{(p)}(x)\Big|_{x=x_j}$ в точках x_j сетки, где $p-$ порядок производной.

Иначе требуется получить аппроксимационный оператор $\hat{f}^{(p)}(x_j)$, удовлетворяющий условию $\left|f^{(p)}(x_j) - \hat{f}^{(p)}(x_j)\right| \le C\,h^t$, где $C = \mathrm{const}$, не зависящая от величины шага h.

Заметим, что символом «^» здесь и далее обозначаются операторы дифференцирования.

Замечания.

1. Если задана точка $x^* \in [a,b]$, не совпадающая ни с одним из узлов сетки, то решается либо задача интерполяции заданной сеточной функции, либо задача сглаживания методом наименьших квадратов. Полученная функция дифференцируется необходимое число раз и затем вычисляется значение производной в точке x^*.

2. Процедура численного дифференцирования является некорректной, поскольку погрешность округления, возникающая при вычислении разностных отношений, как правило, намного превосходит погрешность в задании значений функции и может даже неограниченно возрастать при стремлении шага сетки к нулю, однако методы численного дифференцирования широко применяются на практике.

МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ

А. ПРИМЕНЕНИЕ ДВУХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

Выберем *двухточечный шаблон* $Ш_{2,i} = (x_i, x_{i+1})$ на неравномерной сетке Ω_n.

Формулы для вычисления первой производной имеют вид:

- *в левой точке шаблона*

$$\hat{f}'_{i,v} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} \qquad \left(\frac{h_{i+1}}{2} M_{2,i}\right);$$

- *в правой точке шаблона*

$$\hat{f}'_{i+1,v} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} \qquad \left(\frac{h_{i+1}}{2} M_{2,i}\right),$$

где $h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$, $M_{2,i} = \max\limits_{x \in Ш_{2,i}} \left|f''(x)\right|$.

З а м е ч а н и я.

1. С помощью разложения функций по формуле Тейлора можно показать, что $f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_{i+1}} - \frac{h_{i+1}}{2} f''(\xi)$, где $\xi \in (x_i, x_{i+1})$. Так как справедлива оценка $\left| -\frac{h_{i+1}}{2} f''(\xi) \right| \le \frac{h_{i+1}}{2} \max\limits_{[x_i, x_{i+1}]} \left| f''(x) \right| = \frac{h_{i+1} \cdot M_{2,i}}{2}$, то отсюда следует формула в левой точке шаблона. В скобках справа от аппроксимационных операторов здесь и далее указываются правые части оценок их погрешностей.

2. Формулы справедливы и для равномерной, и для неравномерной сеток. Они аппроксимируют производную с первым порядком аппроксимации.

2. Нижние индексы v и c, относящиеся к аппроксимационным операторам, указывают на тип шаблона – *нерегулярный* ($h_{i+1} = \text{var}$), характеризующий неравномерную сетку, и *регулярный* ($h_{i+1} = \text{const}$)), характеризующий равномерную сетку.

4. Далее в тексте оценочная константа $M_{p,i} = \max\limits_{x \in Ш_{p,i}} \left| f^{(p)}(x) \right|$ для краткости будет, как правило, использоваться без дополнительного ее описания. В нижнем индексе этой константы всюду указывается p – порядок производной.

Б. ПРИМЕНЕНИЕ ТРЕХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

На равномерной сетке Ω_n выбираем *трехточечный* (двухшаговый) *шаблон* $Ш_{3,i} = (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, характеризующийся шагом $h = \text{const}$.

Формулы для подсчета первой производной:

- *в левой крайней точке*

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{2h}\left(-3f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{3} M_{3,i}\right);$$

- *в центральной точке*

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{2h}\left(f_{i+1} - f_{i-1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{6} M_{3,i}\right);$$

- *в правой крайней точке*

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{2h}\left(f_{i-1} - 4f_i + 3f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{3} M_{3,i}\right),$$

где $M_{3,i} = \max\limits_{x \in Ш_{3,i}} \left|f'''(x)\right|$.

Формула для подсчета второй производной имеет вид:

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{12} M_{4,i}\right).$$

Пример 1. Дана сеточная функция (табл. 1), являющаяся сеточным представлением формульной функции $y(x) = \dfrac{1}{x}$.

Таблица 1

i	0	1	2	3	4	5
x_i	1	1,2	1,4	1,6	1,8	2,0
f_i	1,000000	0,83333333	0,7142857	0,6250000	0,5555555	0,500000

Заданы также порядок $t = 2$ относительно шага h, который необходимо обеспечить при решении задачи, и точка $x_j = 1{,}4$.

Требуется вычислить значение первой производной $f'(1{,}4)$ и второй производной $f''(1{,}4)$ с помощью различных шаблонов и соответствующих формул.

□ Воспользуемся вышеприведенной методикой.

1. Так как шаг задания сеточной функции постоянный $h = x_{i+1} - x_i = 0{,}2$, точка $x_j = 1{,}4$ находится внутри сетки Ω_n, то для вычисления производной в этой точке выбирается формула, имеющая второй порядок аппроксимации относительно шага h. При этом центральная точка шаблона совпадает с точкой $x_j = 1{,}4$.

2. Выберем трехточечный шаблон $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1{,}2;\, 1{,}4;\, 1{,}6)$, в котором $x_i = 1{,}4$ ($i = 2$); $x_{i-1} = 1{,}2$ ($i - 1 = 1$); $x_{i+1} = 1{,}6$ ($i + 1 = 3$). В данном шаблоне центральная точка $x_i = 1{,}4$, что соответствует центральному типу аппроксимационной формулы.

3. Подсчитаем искомое значение производной по формуле:

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = \frac{0{,}6250000 - 0{,}8333333}{2 \cdot 0{,}2}\ .$$

Для вычисления первой производной можно было использовать и другие формулы. При выборе шаблона $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1{,}4;\, 1{,}6;\, 1{,}8)$ имеем

$$f'(1{,}4) = \hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{2h}\left(-3f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}\right) = \frac{1}{2h}\left[-3f(1{,}4) + 4f(1{,}6) - f(1{,}8)\right] =$$

$$= \frac{1}{2 \cdot 0{,}2}\left[-3 \cdot 0{,}7142857 + 4 \cdot 0{,}625 - 0{,}5555\right] = -0{,}496017.$$

Фактическая абсолютная погрешность составляет $\left|-0{,}496017 - 0{,}510204\right| \cong 0{,}0142$, относительная погрешность равна 2,78%.

Если выбрать шаблон $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1;\, 1{,}2;\, 1{,}4)$, то получаем

$$f'(1{,}4) \cong \hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{2h}\left(f_{i-1} - 4f_i + 3f_{i+1}\right) = \frac{1}{2 \cdot 0{,}2}\left[f(1) - 4f(1{,}2) + 3f(1{,}4)\right] =$$

$$= \frac{1}{0{,}4}\left[1{,}0 - 4 \cdot 0{,}83333 + 3 \cdot 0{,}7142857\right] = -0{,}476187.$$

Фактическая абсолютная погрешность равна $\left|-0{,}476187 - 0{,}510204\right| \cong 0{,}03401$, относительная погрешность составляет 6,66%.

Для вычисления второй производной можно взять формулу на шаблоне $Ш_{3,i} = \left(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right) = (1{,}2;\, 1{,}4;\, 1{,}6)$:

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) = \frac{1}{0{,}2^2}\left[f(1{,}2) - 2 \cdot f(1{,}4) + f(1{,}6)\right] =$$

$$= \frac{1}{0{,}04}\left[0{,}8333 - 2 \cdot 0{,}7142857 + 0{,}625\right] = 0{,}743965.$$

Точное значение $f''(1{,}4) = \frac{2}{1{,}4^3} = 0{,}7288629$. Фактическая абсолютная погрешность равна 0,0151, относительная погрешность 2,07%. ■

В. ПРИМЕНЕНИЕ ЧЕТЫРЕХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

На равномерной сетке Ω_n выбираем *четырехточечный* (трехшаговый) *шаблон* $Ш_{4,i} = \left(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\right)$ с шагом h.

Формулы для вычисления первой производной с третьим порядком аппроксимации имеют вид:

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{6h}\left(-11f_{i-2} + 18f_{i-1} - 9f_i + 2f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{4}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{6h}\left(-2f_{i-2} - 3f_{i-1} + 6f_i - f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{6h}\left(f_{i-2} - 6f_{i-1} + 3f_i + 2f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{12}M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{6h}\left(-2f_{i-2} + 9f_{i-1} - 18f_i + 11f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^3}{4}M_{4,i}\right).$$

Формулы для вычисления вторых производных со вторым порядком аппроксимации имеют вид:

$$\hat{f}''_{i-2,c} = \frac{1}{h^2}\left(2f_{i-2} - 5f_{i-1} + 4f_i - f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{11h^2}{12} M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-2} - 2f_{i-1} + f_i\right) \qquad \left(\frac{h^2}{12} M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{h^2}\left(f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{h^2}{12} M_{4,i}\right),$$

$$\hat{f}''_{i+1,c} = \frac{1}{h^2}\left(-f_{i-2} + 4f_{i-1} - 5f_i + 2f_{i+1}\right) \qquad \left(\frac{11h^2}{12} M_{4,i}\right).$$

Г. ПРИМЕНЕНИЕ ПЯТИТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

На равномерной сетке Ω_n выбираем *пятиточечный* (четырехшаговый) *шаблон* $Ш_{5,i} = \left(x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}\right)$ с шагом h.

Формулы для вычисления первых производных с четвертым порядком имеют вид:

$$\hat{f}'_{i-2,c} = \frac{1}{12h}\left(-25f_{i-2} + 48f_{i-1} - 36f_i + 16f_{i+1} - 3f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{5} M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i-1,c} = \frac{1}{12h}\left(-3f_{i-2} - 10f_{i-1} + 18f_i - 6f_{i+1} + f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{20} M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i,c} = \frac{1}{12h}\left(f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{30} M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i+1,c} = \frac{1}{12h}\left(-f_{i-2} + 6f_{i-1} - 18f_i + 10f_{i+1} + 3f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{20} M_{5,i}\right),$$

$$\hat{f}'_{i+2,c} = \frac{1}{12h}\left(3f_{i-2} - 16f_{i-1} + 36f_i - 48f_{i+1} + 25f_{i+2}\right) \qquad \left(\frac{h^4}{5} M_{5,i}\right).$$

Формулы для вычисления вторых производных с третьим порядком имеют вид:

$$\hat{f}''_{i-2,c} = \frac{1}{12h^2}\left(35f_{i-2} - 104f_{i-1} + 114f_i - 56f_{i+1} + 11f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i-1,c} = \frac{1}{12h^2}\left(11f_{i-2} - 20f_{i-1} + 6f_i + 4f_{i+1} - f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i,c} = \frac{1}{12h^2}\left(-f_{i-2} + 16f_{i-1} - 30f_i + 16f_{i+1} - f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i+1,c} = \frac{1}{12h^2}\left(-f_{i-2} + 4f_{i-1} + 6f_i - 20f_{i+1} + 11f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}''_{i+2,c} = \frac{1}{12h^2}\left(11f_{i-2} - 56f_{i-1} + 114f_i - 104f_{i+1} + 35f_{i+2}\right).$$

Формулы для вычисления третьих производных в точке x_i имеют вид:

$$\hat{f}'''_{i,c} = \frac{1}{h^3}\left(-f_{i-2} + 3f_{i-1} - 3f_i + f_{i+1}\right),$$

$$\hat{f}'''_{i,c} = \frac{1}{h^3}\left(-f_{i-1} + 3f_i - 3f_{i+1} + f_{i+2}\right),$$

$$\hat{f}'''_{i,c} = \frac{1}{2h^3}\left(-f_{i-2} + 2f_{i-1} - 2f_{i+1} + f_{i+2}\right).$$

Первые две формулы аппроксимируют третьи производные с первым порядком, а третья – со вторым.

7. МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a,b]$ и известна ее первообразная $F(x)$, то определенный интеграл от этой функции может быть вычислен по формуле Ньютона–Лейбница

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

где $F'(x) = f(x)$.

Однако во многих случаях возникают большие трудности, связанные с нахождением первообразной, или эта задача не может быть решена элементарными способами. Например, в элементарных функциях не выражается интеграл $\int_1^2 \frac{dx}{\ln x}$.

Кроме того, в вычислительной практике часто требуется находить значения определенных интегралов от сеточных функций, заданных в общем случае на неравномерной сетке $\Omega_n = \{x_0, x_1, ..., x_n\}, x_{i+1} = x_i + h_{i+1}, \quad i = \overline{0, n-1},\ h_{i+1} = x_{i+1} - x_i$.

В связи с этим в численном анализе имеется специальный математический аппарат численного интегрирования, отличный от соответствующего аппарата математического анализа.

Пусть на отрезке $[a,b]$ на равномерной сетке Ω_n ($h_{i+1} = h = \text{const}$) или на неравномерной сетке $\Omega_n = \{x_0, x_1, ..., x_n\}$ ($h_{i+1} = x_{i+1} - x_i = \text{var}$) заданы:

а) сеточная функция $y_i = f(x_i), i = \overline{0,n}$, своими значениями $f_i = f(x_i)$ или сеточное представление формульной функции $y = f(x)$;

б) желаемый порядок t точности (аппроксимации) относительно величины шага h.

Требуется с заданным порядком точности вычислить значение интеграла

$$\hat{I}_a^b \cong I_a^b = \int_a^b f(x)\,dx .$$

Иначе требуется получить аппроксимационный оператор интегрирования $\hat{I}_a^b$, удовлетворяющий условию $\left|\hat{I}_a^b - I_a^b\right| \le C\,h^t$, где $C = \text{const}$, не зависящая от h.

Отметим, что символом «^» здесь и далее обозначаются операторы интегрирования.

Одним из классических методов вычисления определенных интегралов является применение *функциональных квадратурных формул*

$$I_a^b = \int_a^b f(x)dx \cong \sum_{j=1}^{N} q_j f(x_j) \equiv \hat{I}_a^b,$$

где q_j – *весовые коэффициенты*; $x_j, j = \overline{1,N}$,– некоторые точки отрезка $[a,b]$; N – число точек (*узлов квадратурной формулы*).

Квадратурная формула называется *точной* для многочленов степени m, если при замене функции $f(x)$ на произвольный алгебраический многочлен степени не выше m приближенное равенство становится точным. В этом случае говорят, что квадратурная формула обладает *m-свойством*.

При приближенном вычислении интеграла, как правило, отрезок $[a,b]$ представляется в виде объединения l непересекающихся частичных отрезков вида $[x_{i-r}, x_{i+s}]$, которым соответствует шаблон $Ш_{k,i} = \left(x_{i-r},\ldots,x_i,\ldots,x_{i+s}\right)$, где i – номер базового узла сетки; r и s – количество узлов левее и правее узла с номером i; $k = r + s + 1$ – общее число узлов (точек) в шаблоне (рис. 1). На каждом частичном отрезке с номером $j = 1,\ldots,l$ вычисляется интеграл по соответствующей квадратурной формуле

$$I_{i-r}^{i+s,j} = \int_{x_{i-r}}^{x_{i+s}} f(x)dx \cong \hat{I}_{i-r}^{i+s,j} \equiv \hat{I}^j, \quad j = 1,\ldots,l,$$

а затем полученные значения суммируются по всем частичным отрезкам, т.е.

$$\hat{I}_a^b = \sum_{j=0}^{l} \hat{I}^j = \sum_{j=0}^{l} \hat{I}_{i-r}^{i+s,j} .$$

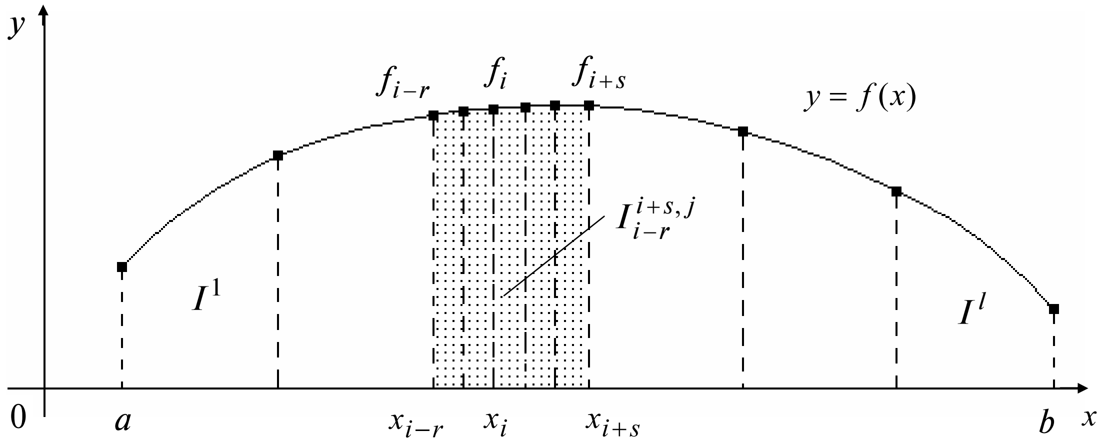

Рис. 1

Далее в силу использования описанного представления проблеме вычисления интеграла на частичном отрезке уделяется основное внимание. По заданной сеточной функции или сеточному представлению формульной функции на частичном отрезке строится интерполяционный многочлен некоторой степени. Значение $\hat{I}_{i-r}^{i+s}$ определяется величиной интеграла от этого многочлена.

Как следует из замечаний, для вычисления интеграла могут использоваться различные частичные отрезки и соответствующие им шаблоны.

А. ПРИМЕНЕНИЕ ДВУХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

Пусть задана сеточная функция $f(x_i)$, $i = \overline{0,n}$, на регулярном шаблоне при $h = \mathrm{const}$. На частичном отрезке $[x_i, x_{i+1}]$, которому соответствует двухточечный шаблон $Ш_{2,i} = (x_i, x_{i+1})$, где $r = 0$, $s = 1$, функция $f(x)$ заменяется тремя способами, порождающими соответствующие методы интегрирования. В каждом методе значение интеграла $I_i^{i+1} = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx$ аппроксимируется величиной $\hat{I}_i^{i+1}$, равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс и получаемой по *одноинтервальной формуле*. Нижние индексы соответствуют названию квадратурной формулы, рядом с формулами приводятся оценки порядка (точности) аппроксимации.

Подчеркнем, что данные формулы справедливы как для регулярного, так и для нерегулярного шаблона, хотя последующее их суммирование по всем частичным отрезкам $[x_i, x_{i+1}]$ традиционно выполняется при $h = \mathrm{const}$.

Искомые интегралы определяются не на частичных отрезках, а на всем отрезке $[a,b]$, и поэтому путем суммирования левых и правых частей одноинтервальных формул получаются так называемые *составные квадратурные формулы*.

А1. Метод прямоугольников (немодифицированный). Функция $f(x)$ заменяется интерполяционным многочленом нулевой степени $L_0(x) = f(x_i)$, построенным по значению функции $f_i = f(x_i)$ в левой точке частичного отрезка (рис. 2,*а*). Величина интеграла на частичном отрезке принимается равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс - площади прямоугольника. В результате получим простейшую одноинтервальную квадратурную формулу второго порядка точности:

$$\hat{I}_{i,\text{пр}}^{i+1} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_0(x)\,dx = h_{i+1} \cdot f_i . \qquad O(h^2)$$

Составная квадратурная формула метода прямоугольников (немодифицированного) на регулярном шаблоне с $h = \text{const}$ имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{пр}}^{b} = h\left(f_0 + f_1 + \ldots + f_{n-1}\right) = h\sum_{i=0}^{n-1} f_i \; .$$

Формула метода прямоугольников (немодифицированного) является точной для многочленов нулевой степени и обладает первым порядком аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b - \hat{I}_{a,\text{пр}}^b\right| \le \frac{M_1}{2}(b-a)h,$$

где $M_1 = \max\limits_{[a,b]} \left|f'(x)\right|$.

А2. Метод прямоугольников (модифицированный). Функция $f(x)$ заменяется интерполяционным многочленом нулевой степени $L_0(x) = f\left(\dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$, построенным по значению функции $f_{i+\frac{1}{2}} = f(x_{i+\frac{1}{2}})$ в середине частичного отрезка $x_{i+\frac{1}{2}} = \dfrac{x_i + x_{i+1}}{2}$ (рис. 2,*б*). Величина интеграла на частичном отрезке принимается равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс - площади прямоугольника. В результате получим простейшую одноинтервальную квадратурную формулу третьего порядка точности:

$$\hat{I}_{i,\text{пр(мод)}}^{i+1} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_0(x)\,dx = \int_{x_i}^{x_{i+1}} f\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)dx = h_{i+1} f_{i+\frac{1}{2}} . \qquad O(h^3)$$

Составная квадратурная формула метода прямоугольников (модифицированного) на регулярном шаблоне с $h = \text{const}$ имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{пр(мод)}}^{b} = h\left(f_{1/2} + f_{3/2} + \ldots + f_{n-\frac{1}{2}}\right) = h\sum_{i=0}^{n-1} f_{i+\frac{1}{2}} \; .$$

Формула метода прямоугольников (модифицированного) является точной для многочленов первой степени и обладает вторым порядком аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b - \hat{I}_{a,\text{пр(мод)}}^b\right| \le \frac{M_2}{24}(b-a)h^2,$$

где $M_2 = \max\limits_{[a,b]} \left|f''(x)\right|$.

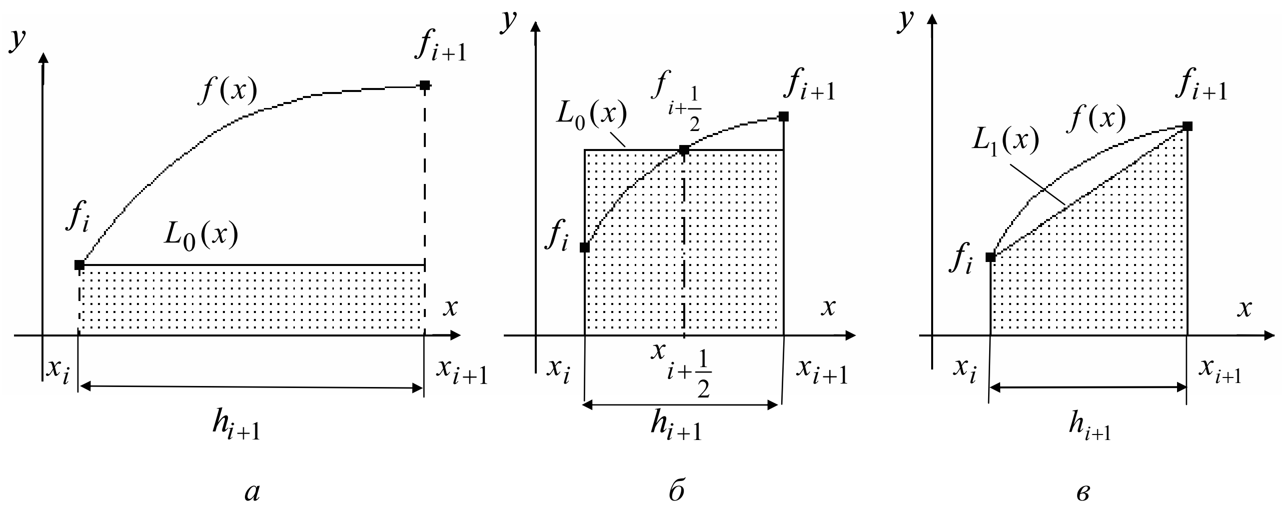

Рис. 2

А3. Метод трапеций. Функция $f(x)$ заменяется интерполяционным многочленом первой степени $L_1(x)$ с узловыми значениями x_i, x_{i+1} (рис. 2,*в*). Величина интеграла на частичном отрезке принимается равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс – площади трапеции (произведению полусуммы оснований на высоту). В результате получим простейшую одноинтервальную квадратурную формулу третьего порядка точности:

$$\hat{I}_{i,\text{тр}}^{i+1} = \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_1(x)\,dx = h_{i+1}\frac{f_i + f_{i+1}}{2}. \qquad O(h^3)$$

Составная квадратурная формула метода трапеций на регулярном шаблоне с $h = \text{const}$ имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{тр}}^{b} = h\left(\frac{f_0+f_1}{2} + \frac{f_1+f_2}{2} + \ldots + \frac{f_{n-1}+f_n}{2}\right) = \frac{h}{2}\left[f_0 + 2\left(f_1+f_2+..+f_{n-1}\right) + f_n\right] =$$

$$= \frac{h}{2}\left(f_0 + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i + f_n\right).$$

Формула метода трапеций является точной для многочленов первой степени и обладает вторым порядком аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b - \hat{I}_{a,\text{тр}}^{b}\right| \le \frac{M_2}{12}(b-a)h^2,$$

где $M_2 = \max\limits_{[a,b]} \left|f''(x)\right|$.

Заметим, что порядок аппроксимации составных квадратурных формул прямоугольников и трапеций на единицу меньше порядка аппроксимации одноинтервальной формулы.

Б. ПРИМЕНЕНИЕ ТРЕХТОЧЕЧНОГО ШАБЛОНА

Пусть отрезок $[a,b]$ разбит на четное количество одинаковых частичных отрезков, т.е. $n=2k$, где k – число пар. На частичном отрезке $\left[x_{i-1},x_{i+1}\right]$, которому соответствует трехточечный шаблон $Ш_{3,i}=\left(x_{i-1},x_i,x_{i+1}\right)$ (по одной паре отрезков при $r=1$, $s=1$), функция $f(x)$ заменяется параболой (интерполяционным многочленом $L_2(x)$ второй степени), проходящей через три заданные на шаблоне точки. В каждом методе значение интеграла $I_{i-1}^{i+1}=\int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}f(x)dx$ аппроксимируется величиной $\hat{I}_{i-1}^{i+1}$, равной площади между графиком интерполяционного многочлена и осью абсцисс и получаемой по *двухинтервальной формуле*.

Метод парабол. На регулярном шаблоне при $h=\text{const}$, подсчитывая площадь под параболой (рис. 3), можно получить *двухинтервальную квадратурную формулу парабол,* или *формулу Симпсона*:

$$\hat{I}_{i-1,\text{пар}}^{i+1}=\int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}}L_2(x)\,dx=\frac{h}{3}\left(f_{i-1}+4f_i+f_{i+1}\right). \qquad O(h^5)$$

Составная квадратурная формула метода парабол имеет вид

$$\hat{I}_{a,\text{пар}}^{b}=\frac{h}{3}\left[f_0+4\left(f_1+f_3+\ldots+f_{2k-1}\right)+2\left(f_2+f_4+\ldots+f_{2k-2}\right)+f_n\right]=$$

$$=\frac{h}{3}\left[f_0+4\sum_{i=1}^{k}f_{2i-1}+2\sum_{i=1}^{k-1}f_{2i}+f_{2k}\right].$$

Подчеркнем, что в составной квадратурной формуле парабол индекс «k» указывает на число пар отрезков разбиения, которое предполагается четным ($n=2k$). Если это условие не выполняется, то интеграл вычисляется для четного количества отрезков и к полученному значению добавляется величина I_{n-1}^{n}, рассчитанная с порядком $O(h^5)$ по формулам, приведенным далее.

Формула метода парабол является точной для многочленов третьей степени и имеет четвертый порядок аппроксимации. Для нее справедлива оценка:

$$\left|I_a^b-\hat{I}_{a,\text{пар}}^{b}\right|\le\frac{M_4}{180}(b-a)h^4,$$

где $M_4=\max\limits_{[a,b]}\left|f^{(4)}(x)\right|$.

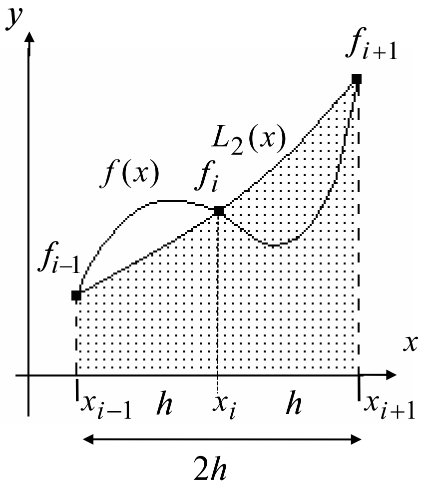

Рис. 3

B. ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОТОЧЕЧНЫХ ШАБЛОНОВ

Рассмотрим применение четырех-, пяти-, семиточечных шаблонов.

B1. Метод Боде. *Четырехинтервальная формула Боде* на пятиточечном шаблоне $Ш_{5,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2})$, где $r = 2$, $s = 2$ (рис. 4,*б*):

$$\hat{I}_{i-2,c}^{i+2} = \frac{2h}{45}(7f_{i-2} + 32f_{i-1} + 12f_i + 32f_{i+1} + 7f_{i+2}) \qquad \left(O(h^7)\right).$$

B2. Метод Уэддля. *Шестиинтервальная формула Уэддля* на семиточечном шаблоне $Ш_{7,i} = (x_{i-3}, x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3})$, где $r = 3$, $s = 3$ (рис. 4,*в*):

$$\hat{I}_{i-3,c}^{i+3} = \frac{3h}{10}(f_{i-3} + 5f_{i-2} + f_{i-1} + 6f_i + f_{i+1} + 5f_{i+2} + f_{i+3}) \qquad \left(O(h^7)\right).$$

B3. Методы Ньютона–Котеса. Приведем два частных случая:

– трехинтервальная формула на четырехточечном шаблоне $Ш_{4,i} = (x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, где $r = 2$, $s = 1$ (формула «трех восьмых», рис. 4,*а*):

$$\hat{I}_{i-2,c}^{i+1} = \frac{3h}{8}(f_{i-2} + 3f_{i-1} + 3f_i + f_{i+1}) \qquad \left(O(h^5)\right);$$

– шестиинтервальная формула на семиточечном шаблоне $Ш_{7,i} = (x_{i-3}, x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}, x_{i+3})$, где $r = 3$, $s = 3$ (рис. 4,*в*):

$$\hat{I}_{i-3,c}^{i+3} = \frac{h}{140}(41f_{i-3} + 216f_{i-2} + 27f_{i-1} + 272f_i + 27f_{i+1} + 216f_{i+2} + 41f_{i+3}) \quad \left(O(h^9)\right).$$

Искомое приближенное значение интеграла $\hat{I}_a^b$ получается суммированием по всем частичным отрезка

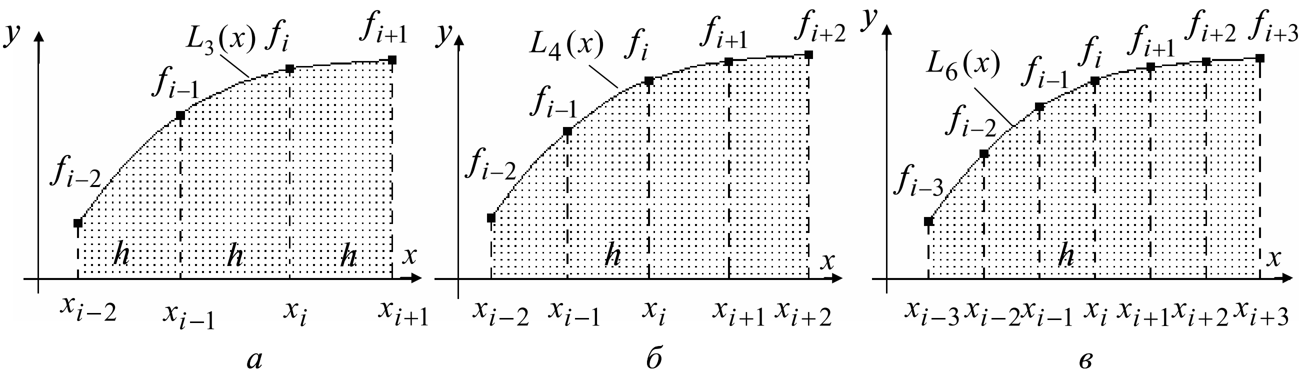

Рис. 4

Методика вычисления определенного интеграла с заданной точностью и априорным нахождением шага интегрирования

Шаг 1. Для правой части формулы оценки погрешностей вычислить константу $M_p = \max\limits_{[a,b]} \left| f^{(p)}(x) \right|$. С этой целью необходимо продифференцировать функцию p раз и вычислить ее максимальное значение на отрезке $[a,b]$, где p – порядок аппроксимации квадратурной формулы.

Шаг 2. Из условия

$$\frac{M_p}{A}(b-a)\cdot h^p \le \varepsilon ,$$

где $\dfrac{M_p}{A}$ – константа, входящая в правую часть оценки погрешностей, определяется величина h: $h \le \sqrt[p]{\dfrac{A\cdot\varepsilon}{M_p(b-a)}}$.

Шаг 3. По значению h вычислить n – количество разбиений отрезка $[a,b]$ и сформировать сеточное представление функции $y = f(x)$, т.е. $y_i = f(x_i)$, $x_0 = a$; $x_1 = a+h$; $x_2 = a+2h$; . . . ; $x_n = a+n\cdot h$ ($i = 0,1,\dots,n$).

Шаг 4. Полученную сеточную функцию подставить в правую часть соответствующей квадратурной формулы и вычислить искомое значение $\hat{I}_a^b$. При этом значение интеграла в силу справедливости оценки удовлетворяет заданной точности ε.

З а м е ч а н и я.

Рассмотренный способ вычисления интегралов, когда с использованием оценок и точности ε предварительно вычисляется шаг интегрирования h, является способом *с априорным определением шага* h.

Пример 2. Вычислить интегралы

$$I_1=\int_0^2 x\,dx\ ,\qquad I_2=\int_0^2 x^2\,dx\,,\qquad I_3=\int_0^2 x^3\,dx\,,\qquad I_4=\int_0^2 x^4\,dx$$

по формулам прямоугольников (модифицированной), трапеций, парабол с шагом $h=1$. Найти оценки погрешностей.

□ Точные значения интегралов:

$$I_1=\int_0^2 x\,dx=\left.\frac{x^2}{2}\right|_0^2=2\,,\qquad I_2=\int_0^2 x^2\,dx=\left.\frac{x^3}{3}\right|_0^2=\frac{8}{3}\,,$$

$$I_3=\int_0^2 x^3\,dx=\left.\frac{x^4}{4}\right|_0^2=4\,,\qquad I_4=\int_0^2 x^4\,dx=\left.\frac{x^5}{5}\right|_0^2=\frac{32}{5}=6{,}4\,.$$

Для формул прямоугольников и трапеций порядок аппроксимации $p=2$, а для формулы парабол $p=4$. В поставленной задаче $a=0,\ b=2$. Сначала получим оценки погрешностей априорным способом.

Найдем $M_2=\max\limits_{[0;2]}\left|f''(x)\right|$:

$M_2=0$ для функции $f(x)=x$; $M_2=2$ для функции $f(x)=x^2$;

$M_2=12$ для функции $f(x)=x^3$; $M_2=48$ для функции $f(x)=x^4$.

Найдем $M_4=\max\limits_{[0;2]}\left|f^{(4)}(x)\right|$:

$M_4=0$ для функций $f(x)=x$; $f(x)=x^2$; $f(x)=x^3$;

$M_4=24$ для функции $f(x)=x^4$.

Справедливы оценки:

$$\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{M_2}{24}(b-a)h^2;\qquad \left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{M_2}{12}(b-a)\,h^2;\qquad \left|\varepsilon_{\text{пар}}\right|\le\frac{M_4}{180}(b-a)\,h^4\,.$$

Оценки погрешностей формулы прямоугольников (модифицированной):

$\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|=0$ для $f(x)=x$; $\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{2}{24}\cdot 2\cdot 1^2=0{,}16(6)$ для $f(x)=x^2$;

$\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{12}{24}\cdot 2\cdot 1^2=1$ для $f(x)=x^3$; $\left|\varepsilon_{\text{пр(мод)}}\right|\le\frac{48}{24}\cdot 2\cdot 1^2=8$ для $f(x)=x^4$.

Оценки погрешностей формулы трапеций:

$\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|=0$ для $f(x)=x$; $\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{2}{12}\cdot 2\cdot 1^2=0{,}3(3)$ для $f(x)=x^2$;

$\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{12}{12}\cdot 2\cdot 1^2=2$ для $f(x)=x^3$; $\left|\varepsilon_{\text{тр}}\right|\le\frac{48}{12}\cdot 2\cdot 1^2=8$ для $f(x)=x^4$.

Оценки погрешностей формулы парабол:

$$\left|\varepsilon_{\text{пар}}\right| = 0 \quad \text{для } f(x) = x; \quad f(x) = x^2; \quad f(x) = x^3;$$

$$\left|\varepsilon_{\text{пар}}\right| \le \frac{24}{180} \cdot 2 \cdot 1^2 = 0{,}26(6) \quad \text{для } f(x) = x^4.$$

Таким образом, подтверждается факт, что формулы прямоугольников (модифицированная) и трапеций должны быть точными для многочленов первой степени, а формула парабол – для многочленов не выше третьей степени.

Теперь рассчитаем значения интегралов по соответствующим квадратурным формулам.

При $h = 1$ сеточное представление функций имеет вид

$$f_0 = f(0), \quad f_{\frac{1}{2}} = f\left(\frac{1}{2}\right), \quad f_1 = f(1), \quad f_{\frac{3}{2}} = f\left(\frac{3}{2}\right), \quad f_2 = f(2).$$

По формуле прямоугольников получаем $\hat{I}_{\text{пр(мод)}} = h \cdot \left[f_{\frac{1}{2}} + f_{\frac{3}{2}} \right]$, в частности:

$$\hat{I}_1 = 1 \cdot \left[\frac{1}{2} + \frac{3}{2}\right] = 2 \quad (0); \qquad \hat{I}_2 = 1 \cdot \left[\frac{1}{4} + \frac{9}{4}\right] = 2{,}5 \quad (0{,}16(6));$$

$$\hat{I}_3 = 1 \cdot \left[\frac{1}{8} + \frac{27}{8}\right] = \frac{7}{2} = 3{,}5 \quad (0{,}5); \qquad \hat{I}_4 = 1 \cdot \left[\frac{1}{16} + \frac{81}{16}\right] = \frac{82}{16} = 5{,}125 \quad (1{,}275).$$

Здесь в скобках указана величина фактической ошибки.

По формуле трапеций находим $\hat{I}_{\text{тр}} = \frac{h}{2} \cdot \left[f_0 + 2f_1 + f_2\right]$, в частности:

$$\hat{I}_1 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 2] = 2 \quad (0); \qquad \hat{I}_2 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 4] = 3 \quad (\,0{,}3(3)\,);$$

$$\hat{I}_3 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 8] = 5 \quad (1); \qquad \hat{I}_4 = \frac{1}{2} \cdot [0 + 2 + 16] = 9 \quad (2{,}6).$$

По формуле парабол, учитывая, что $n = 2k = 2$ и, следовательно, $k = 1$, получаем $\hat{I}_{\text{пар}} = \frac{h}{3} \cdot \left[f_0 + 4f_1 + f_2\right]$, в частности:

$$\hat{I}_1 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 2] = 2 \quad (0); \qquad \hat{I}_2 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 4] = \frac{8}{3} \quad (0);$$

$$\hat{I}_3 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 8] = 4 \quad (0); \qquad \hat{I}_4 = \frac{1}{3} \cdot [0 + 4 + 16] = \frac{20}{3} = 6{,}6(6) \quad (0{,}26(6)).$$

Очевидно, полученные фактические погрешности соответствуют вычисленным ранее оценкам. ■