

Министерство образования Российской Федерации
Владимирский государственный университет
Кафедра автоматических и мехатронных систем

ПРОГРАММИРОВАНИЕ И ОСНОВЫ АЛГОРИТМИЗАЦИИ

Конспект лекций

. Составитель: Новикова Н.А.

Владимир 2003

УДК 519.67

Программирование и основы алгоритмизации. Конспект лекций.
/ Сост. Новикова Н. А. Владимир, 2003. 34с.

Разработан в соответствии с Государственным образовательным стандартом Министерства образования Российской Федерации по специальности 210200 "Автоматизация технологических процессов и производств".

Включает содержание раздела "Численные методы" дисциплины Программирование и основы алгоритмизации.

Подготовлен для студентов специальности 210200 дневной формы обучения, а также ориентирован на студентов заочной формы обучения и студентов Центра реабилитации инвалидов.

Библиогр. 8 назв.

УДК 519.67

Владимирский государственный
университет, 2003

$$\begin{aligned}
x_i^{(0)} &= \beta_i; \\
x_i^{(k+1)} &= \beta_i + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} x_j^{(k)}; \\
(\alpha_{ii} &= 0, \quad i = \overline{1, n}, \quad k = 0, 1, \dots).
\end{aligned}
\tag{4}$$

Систему (1) к виду (3) можно привести и так, чтобы диагональные элементы a_{ii} не равнялись нулю. Например, $3x_1 - 4x_2 = 1$ можно преобразовать как $3x_1 = x_1 + 2x_1$, тогда получим: $x_1 = 1 - 2x_1 + 4x_2$.

Метод последовательных приближений, определяемых формулой (4), носит название метода *итерации*. Процесс итерации (4) хорошо сходится, т.е. число приближений, необходимых для получения корней системы (1) с заданной точностью невелико, если элементы матрицы α малы по абсолютной величине.

При применении метода итерации нет необходимости за нулевое приближение $x^{(0)}$ принимать столбец свободных членов, начальный вектор может быть произвольным. Сходимость процесса итерации определяется только матрицей α . Целесообразнее за компоненты начального вектора $x^{(0)}$ принимать приближенные значения корней системы (1), выбранные из физических соображений или грубой прикидкой. Сходящийся процесс итерации обладает свойством самоисправляемости, то есть отдельная ошибка в вычислениях не отразится на окончательном результате, так как ошибочное приближение можно рассматривать, как новый начальный вектор.

Достаточное условие сходимости процесса итерации:

Если сумма модулей коэффициентов строк или сумма модулей коэффициентов столбцов приведенной системы (3) меньше единицы, то процесс итерации сходится к единственному решению независимо от выбора начального вектора

$$\sum_{j=1}^n |\alpha_{ij}| < 1; \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad \text{или} \quad \sum_{i=1}^n |\alpha_{ij}| < 1 \quad (j=1, 2, \dots, n).$$

С л е д с т в и е.

Для системы (1) $\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = b_i (i=1, 2, \dots, n)$ процесс итерации сходится

при выполнении неравенства $|a_{ii}| > \sum_{j=1}^n |a_{ij}| \quad (i=1, 2, \dots, n)$.

Т. е. модули диагональных коэффициентов для каждого уравнения системы (1) должны быть больше суммы модулей всех остальных коэффи-

циентов (не считая свободных членов). Это можно сделать путем элементарных преобразований матрицы системы (уравнений).

П о г р е ш н о с т и

Если все коэффициенты и свободные члены исходной системы заданы точно, то результат может быть получен с любым заранее заданным числом m верных десятичных знаков. При этом в значениях выражений необходимо удерживать $m+1$ десятичных знаков и последовательные приближения вычислять до их совпадения, после чего необходимо округлить результат на один знак. Если коэффициенты и свободные члены являются приближенными числами с p знаками, то решение необходимо производить с точностью до $m=p$ знаков.

1.2 Метод Зейделя

Метод Зейделя представляет собой модификацию метода итерации. Идея метода в том, что при вычислении $(k+1)$ -го приближения неизвестного x_i учитываются уже найденные ранее $(k+1)$ -е приближения неизвестных x_1, x_2, \dots, x_{i-1} .

Пусть дана приведенная линейная система: $x_i = \beta_i + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} x_j$.

Выберем произвольно начальные приближения корней $x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}$ и подставим их в первое уравнение системы, получим первое приближение для x_1

$$x_1^{(1)} = \beta_1 + \alpha_{11}x_1^{(0)} + \alpha_{12}x_2^{(0)} + \dots + \alpha_{1n}x_n^{(0)} .$$

Полученное первое приближение $x_1^{(1)}$ и остальные начальные приближения $x_2^{(0)}, x_3^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}$ подставим во второе уравнение, получим первое приближение для x_2

$$x_2^{(1)} = \beta_2 + \alpha_{21}x_1^{(1)} + \alpha_{22}x_2^{(0)} + \dots + \alpha_{2n}x_n^{(0)} .$$

Первые приближения $x_1^{(1)}, x_2^{(1)}$ и остальные начальные приближения $x_3^{(0)} \dots x_n^{(0)}$ подставим в третье уравнение системы, получим

$$x_3^{(1)} = \beta_3 + \alpha_{31}x_1^{(1)} + \alpha_{32}x_2^{(1)} + \alpha_{33}x_3^{(0)} + \dots + \alpha_{3n}x_n^{(0)} ,$$

и так далее до n - го уравнения.

Таким образом, делается первая итерация. Аналогично строятся вторая, третья и последующие итерации. Полагая, что k -е приближения корней известны, строим $(k+1)$ -е приближения по следующим формулам:

$$\begin{aligned}
x_1^{(k+1)} &= \beta_1 + \sum_{j=1}^n \alpha_{1j} x_j^{(k)}; \\
x_2^{(k+1)} &= \beta_2 + \alpha_{21} x_1^{(k+1)} + \sum_{j=2}^n \alpha_{2j} x_j^{(k)}; \\
&\dots\dots\dots \\
x_i^{(k+1)} &= \beta_i + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i}^n \alpha_{ij} x_j^{(k)}; \\
&\dots\dots\dots \\
x_n^{(k+1)} &= \beta_n + \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_{nj} x_j^{(k+1)} + \alpha_{nn} x_n^{(k)}. \quad (k=1,2,\dots).
\end{aligned}$$

Условия сходимости, приведенные выше для метода итерации, остаются верными и для метода Зейделя. Обычно метод Зейделя дает лучшую сходимость, чем метод итерации, но приводит к более громоздким вычислениям.

1.3 Метод релаксации

Пусть имеем систему линейных уравнений

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = b_i \quad (i=1,2,\dots,n) .$$

Преобразуем систему следующим образом: перенесем свободные члены в левую часть и разделим первое уравнение на $-a_{11}$, второе уравнение разделим на $-a_{22}$ и так далее. То есть, разделим каждую строку на диагональный коэффициент, взятый с противоположным знаком. Тогда получим систему, приготовленную к релаксации,

$$\begin{aligned}
-x_1 + b_{12}x_2 + \dots + b_{1n}x_n + c_1 &= 0; \\
b_{21}x_1 - x_2 + \dots + b_{2n}x_n + c_2 &= 0; \\
\dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots \quad \dots & \\
b_{n1}x_1 + b_{n2}x_2 + \dots - x_n + c_n &= 0.
\end{aligned} \tag{2}$$

Другая форма записи:

$$c_i - x_i + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n b_{ij} x_j = 0 ,$$

$$\text{где } b_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}} \quad (i \neq j); \quad c_i = \frac{b_i}{a_{ii}}.$$

Выберем начальные приближения $x^{(0)} = [x_1^{(0)} \ x_2^{(0)} \ x_n^{(0)}]$.

Подставляя их в систему (2) получим невязки

$$R_1^{(0)} = c_1 - x_1^{(0)} + \sum_{j=2}^n b_{1j} x_j^{(0)},$$

$$R_2^{(0)} = c_2 - x_2^{(0)} + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n b_{2j} x_j^{(0)},$$

... ..

$$R_n^{(0)} = c_n - x_n^{(0)} + \sum_{j=1}^{n-1} b_{nj} x_j^{(0)}$$

$$R_i^{k+1} = c_i - x_i^k + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq 2}}^n b_{ij} x_j^k$$

Если одной из неизвестных $x_s^{(0)}$ дать приращение $\Delta x_s^{(0)}$, то соответствующая невязка $R_s^{(0)}$ уменьшится на величину $\Delta x_s^{(0)}$, а все остальные невязки $R_i^{(0)}$ ($i \neq s$) увеличатся на величину $b_{is} \Delta x_s^{(0)}$. Таким образом, чтобы обратить очередную невязку $R_s^{(0)}$ в ноль, достаточно величине $x_s^{(0)}$ дать приращение равное величине s-й невязки $\Delta x_s^{(0)} = R_s^{(0)}$. Тогда получим

$$R_s^{(1)} = 0; \quad R_i^{(1)} = R_i^{(0)} + b_{is} \Delta x_s^{(0)} \quad \text{при } i \neq s, i=1, 2, \dots, n.$$

Или на (k+1)-м шаге

$$R_s^{(k+1)} = 0; \quad R_i^{(k+1)} = R_i^{(k)} + b_{is} \Delta x_s^k \quad \text{при } i \neq s, i=1, 2, \dots, n.$$

Метод релаксации (в переводе: метод ослабления) в его простейшей форме заключается в том, что на каждом шаге обращают в нуль максимальную по модулю невязку путем изменения значения соответствующей компоненты приближения. Процесс заканчивается, когда все невязки последней преобразованной системы будут равны нулю с заданной точностью.

2. Интерполирование функций

Однозначное соответствие величины y совокупности независимых переменных x_1, x_2, \dots, x_n называется функциональной зависимостью $y=f(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Если независимая переменная одна, то $y=f(x)$. Функциональная зависимость может быть задана тремя способами: аналитически; графически; таблично.

Основные характеристики таблиц

1. Объём таблицы - характеризуется начальным и конечным значениями аргумента.

2. Почти для всех табулируемых функций значения аргумента в таблице образуют арифметическую прогрессию, разность которой h называют шагом таблицы или шагом задания функции.

3. Количество знаков табулируемой функции. В таблицы вносят только верные знаки числового значения функции.

4. Разности соседних, приведённых в таблице, значений функций называются *табличными разностями*

5. Если аргументов функции несколько, то таблица характеризуется количеством входов.

На практике часто необходимо вычислить значения функции $y=f(x)$ в точках x , отличных от значений аргумента, фиксированных в таблице. Кроме этого бывает, что аналитическое выражение или алгоритм вычисления функции $y=f(x)$ известны, но вычисления являются сложными, трудоёмкими или невозможными. Задача соединения табличных точек заданной функции некоторой кривой называется *интерполированием функции*.

Пусть на отрезке $[a, b]$ задана некоторая функция $y=f(x)$ своими $n+1$ значениями $y_0 = f(x_0), y_1 = f(x_1), \dots, y_n = f(x_n)$ в точках x_0, x_1, \dots, x_n , которые называются *узлами интерполяции*. Требуется найти аналитическое выражение $F(x)$ функции, совпадающей в узлах интерполяции со значениями функции $f(x)$, т. е. чтобы $y_0 = F(x_0) = f(x_0), y_1 = F(x_1) = f(x_1), \dots, y_n = F(x_n) = f(x_n)$. Полученную интерполяционную формулу $y=F(x)$ обычно используют для приближенного вычисления значений функции в точках x , отличных от узлов интерполяции. Если аргумент x , для которого определяется приближённое значение функции, принадлежит заданному отрезку $[x_0, x_n]$, то операция вычисления значения функции называется *интерполированием в узком смысле*. Если аргумент x находится за пределами отрезка $[x_0, x_n]$, то определение значения функции называется *экстраполированием*.

Геометрически задача интерполирования для функции одной переменной означает построение кривой, проходящей через точки плоскости с координатами $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$. Однако, ясно, что через данные

точки можно провести бесчисленное множество различных кривых. Т. е. задача отыскания функции $F(x)$ по конечному числу значений не определена. Эта задача становится однозначной, если в качестве интерполирующей функции $F(x)$, заданной $n+1$ значением выбрать многочлен степени не выше n , такой что $F_n(x_0) = y_0, F_n(x_1) = y_1, \dots, F_n(x_n) = y_n$. Многочлен $F_n(x)$, удовлетворяющий этим условиям, называется *интерполяционным*, а соответствующие ему формулы – *интерполяционными формулами*. Если $F(x)$ выбирается в классе степенных функций, интерполяция называется *параболической*. Используют и другие виды интерполяции. Так если интерполируемая функция периодическая, то в качестве $F(x)$ выбирают тригонометрические функции.

Задачи при интерполяции:

- выбор наиболее удобного способа построения интерполяционной функции;
- оценка погрешности интерполяции;
- оптимальный выбор узлов интерполяции для получения минимальной погрешности.

2.1 Линейная интерполяция

В основе её лежит аппроксимация кривой на участке между точками (x_k, y_k) и (x_{k+1}, y_{k+1}) прямой, проходящей через те же точки.

Уравнение прямой можно записать в виде

$$\frac{y - y_k}{x - x_k} = \frac{y_{k+1} - y_k}{x_{k+1} - x_k} \quad \text{или}$$

$$y = \frac{y_k(x - x_{k+1}) - y_{k+1}(x - x_k)}{x_k - x_{k+1}} = \frac{y_{k+1}(x - x_k) - y_k(x - x_{k+1})}{x_{k+1} - x_k}.$$

Таким образом, зная два табличных значения y_k и y_{k+1} при соответствующих x_k и x_{k+1} , с помощью указанных формул можно найти значение функции $y(x)$ при любом x в интервале $[x_k, x_{k+1}]$ в случае интерполяции и за пределами интервала в случае экстраполяции.

Обычно полагают, что, используя большее число соседних точек и аппроксимируя истинную кривую более сложной линией, можно уточнить полученный результат.

Далее рассмотрим методы нахождения единственного многочлена n -ой степени $P_n(x)$, аппроксимирующего функцию $f(x)$ кривой, проходящей через все $n+1$ заданные в таблице точки (x_i, y_i) , где $i=0, 1, \dots, n$. Т. е. многочлена $P_n(x)$, удовлетворяющего условиям: $P_n(x_i) = y_i$ при $i=0, 1, \dots, n$. Методы отыскания такого многочлена делятся на три группы: методы Лагранжа; разностные методы; итерационные методы.

-

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & x_0^3 \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^3 \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^3 \dots & x_2^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & x_n^3 \dots & x_n^n \end{vmatrix}$$

Если x_0, x_1, \dots, x_n различны, то $\Delta \neq 0$, следовательно система имеет единственное решение. Тогда интерполяционный многочлен $L_n(x)$ можно представить в виде

$$L_n(x) = \frac{\Delta_0}{\Delta} + \frac{\Delta_1}{\Delta} x + \frac{\Delta_2}{\Delta} x^2 + \dots + \frac{\Delta_n}{\Delta} x^n.$$

Теперь перейдем к решению общей задачи: отысканию полинома $L_n(x)$, удовлетворяющего указанным выше условиям. Перепишем интерполяционный многочлен следующим образом :

$$L_n(x) = y_0 Q_0(x) + y_1 Q_1(x) + \dots + y_n Q_n(x), \quad (2)$$

где $Q_0(x), Q_1(x), Q_n(x)$ - многочлены степени n относительно x , которые должны удовлетворять условиям: $Q_i(x_i) = \begin{cases} 0, & \text{если } i \neq j \\ 1, & \text{если } i = j \end{cases}$

Т.е. при $x=x_0$, $Q_0(x_0)$ должен равняться 1, а все остальные $Q_i(x_0)$ ($i=1, 2, \dots, n$) должны равняться 0, и т.д. Такой многочлен имеет вид

$$Q_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} \quad (3)$$

В точках $x_0, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n$ многочлен $Q_i(x) = 0$, а в точке x_i $Q_i(x_i) = 1$. Подставляя (3) в (2) получим

$$L_n(x) = y_0 \frac{(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)\dots(x_0-x_n)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)} + \dots + y_n \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})} \quad (4)$$

Этот многочлен называется *интерполяционным многочленом Лагранжа*. В сокращённом виде его можно записать

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n y_i \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}. \quad (5)$$

Сравнение (1) и (5) показывает, что вычисление коэффициентов по системе уравнений (1) удобно выполнять при небольшом числе узлов интерполяции, а выражение (5) целесообразно использовать при большом числе узлов.

Интерполяционная формула Лагранжа упрощается, если узлы интерполяции *равноотстоящие*, т.е. $h=x_{i+1} - x_i=const$, где h – шаг интерполяции.

Введём обозначение: $q = \frac{(x - x_0)}{h}$. Тогда имеем

$$\begin{aligned} x - x_0 &= qh; \\ x - x_1 &= qh - h = h(q - 1); \\ &\dots \vdots \\ x - x_i &= qh - ih = h(q - i); \\ &\dots \\ x - x_n &= qh - nh = h(q - n). \end{aligned}$$

Используя введенные обозначения, получим

$$Q_i(q) = \frac{q(q-1)\dots[q-(i-1)][q-(i+1)]\dots(q-n)h^n}{ih(i-1)h\dots h(-h)\dots[-(n-i)h]}$$

Заметим, что часть произведения в знаменателе равна, $ih(i-1)h\dots h = i!h^i$, а другая часть $-h\dots[-(n-i)h] = (-1)^{n-i}(n-i)!h^{n-i}$.

Умножив числитель и знаменатель правой части равенства на $(-1)^{n-i}(q-i)$ получим:

$$Q_i(q) = \frac{q(q-1)\dots(q-n)(-1)^{n-i}}{(q-i)!(n-i)!} = (-1)^{n-i} \frac{C_n^i q(q-1)\dots(q-n)}{(q-i)n!},$$

где $C_n^i = \frac{n!}{(n-i)!i!}$.

Тогда интерполяционный многочлен Лагранжа для равноотстоящих узлов можно записать в виде:

$$L_n(x) = \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{n!} \sum_{i=0}^n (-1)^{n-i} \frac{C_n^i}{q-i} y_i.$$

2.3 Конечные разности

Табулирование функций в большинстве случаев производится для равноотстоящих значений аргумента, т.е. для $x_i=x_0+ih$, где $i=1,2\dots n$; h - шаг интерполяции. Для интерполяции функций, заданных в равноотстоящих узлах, введем понятие *конечной разности*.

Конечной разностью первого порядка называется разность между значениями функции в соседних узлах интерполяции. Конечные разности в точках x_0, x_1, \dots, x_{n-1} определяется как:

$$\begin{aligned} y_0 &= f(x_0), \quad y_1 = f(x_1) \quad \dots \quad y_n = f(x_n); \\ \Delta y_1 &= \Delta f(x_1) = y_2 - y_1 = f(x_2) - f(x_1); \\ &\dots \end{aligned}$$

$$\Delta y_{n-1} = \Delta f(x_{n-1}) = y_n - y_{n-1} = f(x_n) - f(x_{n-1}).$$

В общем виде:

$$\Delta y_i = y_{i+1} - y_i \quad \text{или}$$

$$\Delta y = \Delta f(x) = f(x + \Delta x) - f(x).$$

Из конечных разностей первого порядка образуются конечные разности второго порядка:

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i.$$

Конечную разность n -ого порядка можно определить следующим образом:

$$\Delta^n y = \Delta(\Delta^{n-1} y).$$

Получим общую формулу конечных разностей.

Первая конечная разность: $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$.

Вторая конечная разность:

$$\Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i = y_{i+2} - y_{i+1} - y_{i+1} + y_i = y_{i+2} - 2y_{i+1} + y_i.$$

Третья конечная разность:

$$\Delta^3 y_i = \Delta(\Delta^2 y_i) = \Delta y_{i+2} - 2\Delta y_{i+1} + \Delta y_i =$$

$$y_{i+3} - y_{i+2} - 2y_{i+2} + 2y_{i+1} + y_{i+1} - y_i = y_{i+3} - 3y_{i+2} + 3y_{i+1} - y_i$$

Конечная разность n -ого порядка:

$$\Delta^n y_i = y_{i+1} - C_n^1 y_{n+i-1} + C_n^2 y_{n+i-2} - \dots + (-1)^m C_n^m y_{n+i-m} + \dots + (-1)^n y_i,$$

$$\text{где } C_n^m = \frac{n!}{m!(n-m)!}.$$

Свойства конечных разностей.

1. Конечная разность $\Delta^n u$ суммы или разности функций $u = y + g$ есть сумма или разность конечных разностей этих функций: $\Delta^n u = \Delta^n (y + g) = \Delta^n y + \Delta^n g$

2. При умножении функции на постоянный множитель конечные разности умножаются на тот же множитель.

3. Конечная разность m -го порядка от конечной разности n -го порядка равна конечной разности $(m+n)$ -ого порядка: $\Delta^m(\Delta^n y) = \Delta^{m+n} y$.

4. Конечные разности n -го порядка от многочлена степени n постоянны, а конечные разности $(n+1)$ -ого порядка от данного многочлена равны нулю.

Первая интерполяционная формула Ньютона

Интерполяцию для значений функции в начале таблицы удобно проводить, пользуясь первой интерполяционной формулой Ньютона. Пусть

функция $f(x)$ задана в равноотстоящих узлах интерполяции $x_0, x_1 = x_0 + h, \dots, x_n = x_0 + nh$. Требуется построить интерполяционный многочлен n -ой степени такой, что $P_n(x_0) = y_0, P_n(x_1) = y_1, \dots, P_n(x_n) = y_n$

В силу единственности многочлена степени n построенного по $n+1$ значениям функции $f(x)$, многочлен $P_n(x)$ является разновидностью записи интерполяционного многочлена Лагранжа. Будем искать многочлен $P_n(x)$ в виде:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + a_3(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) + \dots + a_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}) \quad (1)$$

В этом выражении неизвестны коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_n . Для того чтобы найти a_0 , положим, $x = x_0$ при этом, $P_n(x_0) = y_0$. Тогда из (1) следует:

$$a_0 = y_0.$$

Чтобы найти a_2 составим первую конечную разность для многочлена $P_n(x)$ в точке x_0 :

$$\Delta P_n(x) = P_n(x+h) - P_n(x).$$

Производя подстановку, получим

$$\Delta P_n(x) = ha_1 + 2ha_2(x - x_0) + 3ha_3(x - x_0)(x - x_1) + \dots + nha_n(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1}).$$

Вычислим значения первой конечной разности в точке x_0 . При подстановке $x = x_0$ все члены кроме первого обращаются в нуль и следовательно

$$\Delta P_n(x_0) = a_1 h,$$

но т. к. $\Delta P_n(x_0) = f(x_1) - f(x_0) = y_1 - y_0 = \Delta y_0$, следовательно, $\Delta y_0 = a_1 h$ и

$$a_1 = \frac{\Delta y_0}{h}.$$

Для определения коэффициента a_2 , составим конечную разность второго порядка

$$\Delta^2 P_n(x) = \Delta P_n(x+h) - \Delta P_n(x).$$

Проведя несложные преобразования, получим

$$\Delta^2 P_n(x) = 2!h^2 a_2 + 2 \cdot 3h^2 a_3(x - x_0) + \dots + (n-1)nh^2 a_n(x - x_0)\dots(x - x_{n-3}).$$

Подставляя $x = x_0$, получим

$$\Delta^2 P_n(x) = \Delta^2 y = 2!h^2 a_2, \quad \text{отсюда}$$

$$a_2 = \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}.$$

Вычисляя конечные разности более высоких порядков и полагая $x = x_0$, получим

$$a_i = \frac{\Delta^i y_0}{i!h^i},$$

где $(i = 0, 1, 2, \dots, n)$, $0! = 1$, $\Delta^0 y = y$.

Подставив коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_n в выражение (1) получим *первую интерполяционную формулу Ньютона*:

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{1!h} (x - x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2} (x - x_0)(x - x_1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n} (x - x_0)\dots(x - x_{n-1}). \quad (2)$$

На практике формула Ньютона используется в другом виде. Вводится коэффициент $q = \frac{x - x_0}{h}$, где h - шаг интерполирования, q равен числу шагов. Тогда

$$P_n(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \dots + q(q-1)\dots\frac{q-n+1}{n!}\Delta^n y_0. \quad (3)$$

Формулу (3) удобно использовать в начале отрезка интерполирования $[a, b]$, когда q мало.

Если за число шагов интерполяции принять $n=1$, то из (3) получим формулу линейного интерполирования

$$P(x) = y_0 + q\Delta y_0.$$

При $n = 2$ - формулу параболического, или квадратичного интерполирования:

$$P_2(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2}\Delta^2 y_0.$$

Первая интерполяционная формула Ньютона используется для интерполирования в начале отрезка $[a, b]$, т.е. для интерполирования вперед и экстраполирования назад. При интерполировании вперед $q = \frac{x - x_0}{h} > 0$.

При экстраполировании назад $q = \frac{x - x_0}{h} < 0$.

Вторая интерполяционная формула Ньютона

Для интерполирования в конце таблицы обычно применяют вторую интерполяционную формулу Ньютона. Пусть на отрезке $[a, b]$ дано $n+1$ различных значений аргумента, $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, которым соответствуют значения функции y_0, y_1, \dots, y_n , шаг интерполяции постоянен и равен h т.е. $x_{i+1} = x_i + h$. Построим интерполяционный многочлен:

$$P_n(x) = a_0 + a_1(x - x_n) + a_2(x - x_n)(x - x_{n-1}) + a_3(x - x_n)(x - x_{n-1})(x - x_{n-2}) + \dots + a_n(x - x_n)(x - x_{n-1})\dots(x - x_1) \quad (1)$$

В многочлене неизвестны коэффициенты $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$. Их необходимо определить так, чтобы выполнялись равенства:

$$P_n(x_0) = y_0, \dots, P_n(x_1) = y_1, \dots, P_n(x_n) = y_n.$$

Положив $x = x_n$ в равенстве (1) получим $a_0 = y_n$.

Из выражения первой конечной разности найдем a_1 :

$$\Delta P_n(x) = 1ha_1 + 2ha_2(x - x_{n-1}) + 3ha_3(x - x_{n-2})(x - x_{n-1}) + \dots + nha_n(x - x_n)(x - x_{n-1})\dots(x - x_1)$$

Полагая $x = x_{n-1}$, получим $a_1 = \frac{\Delta y_{n-1}}{h}$.

Из выражения второй конечной разности найдем a_2

$$\Delta P_n(x) = 2!h^2 a_2 + 2 \cdot 3h^2 a_3(x - x_{n-2}) + \dots + n(n-1)h^2 a_n(x - x_1) \dots (x - x_{n-2})$$

Полагая, что $x = x_{n-2}$ получим

$$\Delta P_n(x_{n-2}) = \Delta^2 y_{n-2} = 2!h^2 a_2, \quad \text{тогда}$$

$$a_2 = \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2} \quad \text{и т.д.}$$

$$a_i = \frac{\Delta^i y_{n-i}}{i!h^i}.$$

Подставив значения a_i в формулу (1) получим *вторую интерполяционную формулу Ньютона*

$$\Delta P_n(x) = y_n + \frac{\Delta y_{n-1}}{1!h}(x - x_n) + \frac{\Delta^2 y_{n-2}}{2!h^2}(x - x_n)(x - x_{n-1}) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x - x_n) \dots (x - x_1).$$

Положив, $q = \frac{x - x_n}{h}$ получим

$$\frac{x - x_{n-1}}{h} = \frac{x - x_n + h}{h} = q + 1,$$

$$\frac{x - x_{n-2}}{h} = q + 2, \dots$$

Тогда вторую интерполяционную формулу Ньютона можно записать в виде

$$P_n(x) = y_n + q\Delta y_{n-1} + \frac{q(q+1)}{2!}\Delta^2 y_{n-2} + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!}\Delta^3 y_{n-3} + \dots + \frac{q(q+1)\dots(q+n-1)}{n!}\Delta^n y_0.$$

Вторая интерполяционная формула Ньютона используется при интерполяции в конце таблицы, т.е. для интерполирования назад, когда $q = \frac{x - x_n}{h} < 0$, и для экстраполирования вперед, когда $q = \frac{x - x_n}{h} > 0$.

Единственность интерполяционного многочлена

Мы рассмотрели параболическое интерполирование, когда в качестве интерполяционной функции выбирается многочлен степени не выше n для функции, заданной в $n+1$ узлах интерполяции. Многочлен $F(x)$ степени n есть единственное разложение в классе степенных функций. Действительно, если существует еще один интерполяционный многочлен $\tilde{F}(x)$ степени n , принимающий в узлах интерполяции заданные значения, то разность этих многочленов обращалась бы в нуль в $n+1$ узлах интерполяции. Но разность $F(x) - \tilde{F}(x)$ является многочленом степени не выше n , следовательно, этот многочлен тождественно равен нулю.

И так если функция $f(x)$ задана $n+1$ значениями $y_0 = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$... $y_n = f(x_n)$ в несовпадающих узлах интерполяции, то это означает, что существует единственный многочлен $F(x)$ степени n , принимающий в узлах интерполяции заданные значения $y_0 = F(x_0)$, $y_1 = F(x_1)$... $y_n = F(x_n)$. Формулы Ньютона и Лагранжа являются

различными формами записи одного и того же многочлена n -ой степени. Покажем это на примере линейного интерполирования.

В случае линейной интерполяции значение функции в точке, отличной от узлов интерполяции, определяется по двум известным значениям табулируемой функции $y_i = f(x_i)$, $y_{i+1} = f(x_{i+1})$ в узлах x_i и x_{i+1} между которыми, расположено значение аргумента x .

Интерполяционная формула Лагранжа для линейной интерполяции примет вид

$$L_1(x) = y_0 \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} + y_1 \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}, \quad (2)$$

а первая интерполяционная формула Ньютона

$$P_1(x) = y_i + \frac{\Delta y_i}{h}(x - x_i) \quad (3)$$

где $\Delta y_i = y_{i+1} - y_i$, $h = x_{i+1} - x_i$

Получим из формулы (3) формулу (2)

$$\begin{aligned} P_1(x) &= y_0 + \frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0}(x - x_0) = \frac{y_0(x_1 - x_0) + (y_1 - y_0)(x - x_0)}{x_1 - x_0} = \\ &= \frac{y_0(x_1 - x_0) + y_1(x - x_0) - y_0(x - x_0)}{x_1 - x_0} = \frac{y_0(x_1 - x) + y_1(x - x_0)}{x_1 - x_0} = y_0 \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} + \frac{x - x_0}{x_1 - x_0}, \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

3. Численное интегрирование функций

Пусть задана функция $f(x)$ непрерывная на отрезке $[a, b]$ и известна ее первообразная $F(x)$, определенный интеграл от этой функции в пределах от a до b определяется по формуле Ньютона-Лейбница:

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

$$F'(x) = f(x)$$

Если подынтегральная функция $f(x)$ задана таблично или ее первообразная не существует в классе элементарных функций, тогда сама первообразная теряет практический смысл. В этих случаях применяют численные методы вычисления определенных интегралов.

Задачей численного интегрирования является вычисление значений определенного интеграла на основании значений подынтегральной функции. Численное вычисление однократного интеграла называется квадратурой, двойного - кубатурой, а соответствующие формулы называются квадратурными и кубатурными формулами.

Численное интегрирование заключается в том, что данную функцию $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ заменяют интерполирующей или аппроксимирующей функцией $\varphi(x)$ простого вида, а затем приближенно полагают, что

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \varphi(x)dx$$

при этом $\varphi(x)$ должна быть такова, чтобы интеграл вычислялся непосредственно.

3.1 Квадратурные формулы Ньютона-Котеса

Пусть для функции $y=f(x)$ требуется вычислить интеграл

$$\int_a^b ydx = \int_a^b f(x)dx \quad (1)$$

Выбрав шаг $h = \frac{b-a}{n}$, разобьем отрезок $[a, b]$ с помощью равноотстоящих точек $x_0 = a$, $x_i = x_0 + ih$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$), $x_n = b$ на n равных частей. Тогда

$$y_i = f(x_i) \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

По заданным значениям x_i , y_i построим полином Лагранжа

$$\begin{aligned} L_n(x) &= y_0 \frac{(x-x_1)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)\dots(x_0-x_n)} + y_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_{n-1})} + \dots + y_n \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})} = \\ &= \sum_{i=0}^n y_i \frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)} \end{aligned} \quad (2)$$

Используем сокращенную запись полинома Лагранжа. Для этого обозначим

$$\Pi_{n+1}(x) = (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_n).$$

Дифференцируя по x получим

$$\Pi_{n+1}'(x_i) = \sum_{j=0}^n (x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\dots(x-x_n).$$

Полагая, $x = x_i$ ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) имеем:

$$\Pi_{n+1}'(x_i) = (x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n).$$

Подставив данное выражение в (2) получим

$$L_n(x) = \Pi_{n+1}(x) \sum_{i=0}^n \frac{y_i}{\Pi_{n+1}'(x_i)(x-x_i)} = \sum_{i=0}^n \frac{\Pi_{n+1}(x)}{\Pi_{n+1}'(x_i)(x-x_i)} y_i \quad (3)$$

Заменяя функцию $f(x)$ на $L_n(x)$, получим

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b \alpha_n(x)dx + R_n[f];$$

где $R_n[f]$ -ошибка квадратурной формулы (остаточный член). Подставив выражение (3) в (1) и отбросив остаточный член, получим

$$\int_a^b ydx = \int_a^b \frac{\Pi_{n+1}(x)}{\Pi_{n+1}'(x_i)(x-x_i)} y_i dx = \sum_{i=0}^n A_i y_i, \quad (4)$$

где

$$A_i = \int_a^b \frac{\Pi_{n+1}(x)}{(x-x_i)\Pi'_{n+1}(x_i)} dx.$$

Если пределы a и b являются узлами интерполирования то квадратурная формула, называется "замкнутого типа", в противном случае – "открытого типа".

Обозначим

$$q = \frac{x-x_0}{h}; \text{ тогда, } x-x_0 = qh.$$

Следовательно:

$$\begin{aligned} x-x_1 &= x-x_0 + x_0-x_1 = qh-h = h(q-1); \\ x-x_2 &= x-x_0 + x_0-x_2 = qh-h = h(q-2); \\ &\dots\dots\dots \\ x-x_n &= h(q-n). \end{aligned}$$

Тогда

$$\Pi'_{n+1}(x_i) = h^{n+1} q(q-1)(q-2)\dots(q-n) = h^{n+1} q_{n+1};$$

где обозначено

$$q_{n+1} = q(q-1)(q-2)\dots(q-n).$$

Так как узлы равноотстоящие, то

$$\Pi'_{n+1}(x_i) = ih(i-1)h(i-2)h\dots(i-i+1)h(i-i-1)h\dots(i-n)h - (n-i) = h^n i! (-1)^{n-i} (n-i)!$$

Тогда

$$A_i = \int_{x_0}^{x_n} \frac{(-1)^{n-i} q^{[n+1]}}{i!(n-i)!(q-i)} dx.$$

Так как, $q = \frac{x-x_0}{h}$; то $dq = \frac{dx}{h}$; $dx = h dq$.

При $x = x_0$: $q = 0$. При $x = x_n$: $q = \frac{x_n-x_0}{h} = n$.

Сделав замену переменных в определенном интеграле, получим:

$$A_i = h \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!} \int_0^n \frac{q^{[n+1]}}{(q-i)} dq.$$

Так как, $h = \frac{b-a}{n}$, то можно записать

$$A_i = (b-a)H_i,$$

где $H_i = \frac{(-1)^{n-i}}{ni!(n-i)!} \int_0^n \frac{q^{[n+1]}}{(q-i)} dq.$ (5)

Коэффициенты H_i – называются коэффициентами Котеса.

Квадратурная формула (4) имеет вид:

$$\int_a^b y dx = (b-a) \sum_{i=0}^n H_i y_i, \quad (6)$$

где $h = \frac{b-a}{n}$ и $y_i = f_i(a + ih)$, $(i = 0, 1, 2, \dots, n)$

3.2 Формула трапеций

Формула трапеций получается из формул Ньютона-Котеса при $n = 1$. Подставляя в (5) $n = 1$, для $i = 0, 1$ получим

$$H_0 = -\int_0^1 \frac{q(q-1)}{q} dq = \frac{1}{2} = -\int_0^1 q dq + \int_0^1 dq = \left. \frac{-q^2}{2} \right|_0^1 + q \Big|_0^1 = -\frac{1}{2} + 1 = \frac{1}{2};$$

$$H_1 = \int_0^1 q dq = \left. \frac{q^2}{2} \right|_0^1 = \frac{1}{2}.$$

Следовательно

$$\int_{x_0}^{x_1} y dx = (x_1 - x_0) \left[\frac{1}{2} y_0 + \frac{1}{2} y_1 \right] = \frac{h}{2} (y_0 + y_1); \quad (1)$$

Выражение (1) есть формула трапеций для приближенного вычисления интеграла.

Остаточный член (ошибка) квадратурной формулы

$$R = \int_{x_0}^{x_1} y dx - \frac{h}{2} (y_0 + y_1)$$

$$\text{Окончательно} \quad R = -\frac{h^3}{12} y''(\xi), \quad (2)$$

где $\xi \in (x_0, x_1)$

Из формулы (2) следует, что если $y''(\xi) > 0$, то формула (1) дает значение интеграла с избытком, если $y''(\xi) < 0$ то с недостатком.

3.3 Формула Симпсона

Получается формул Ньютона-Котеса при $n = 2$.

$$H_0 = \frac{1}{2} * \frac{1}{2} \int_0^2 \frac{q(q-1)(q-2)}{q} dq = \frac{1}{4} \left(\frac{8}{3} - 6 + 4 \right) = \frac{1}{6};$$

$$H_1 = -\frac{1}{2} \int_0^2 q(q-2) dq = \frac{2}{3};$$

$$H_2 = \frac{1}{2} * \frac{1}{2} \int_0^2 q(q-1) dq = \frac{1}{6}.$$

Учитывая, что $x_2 - x_0 = 2h$, получим

$$\int_{x_0}^{x_2} y dx = 2h \left(\frac{1}{6} y_0 + \frac{4}{6} y_1 + \frac{1}{6} y_2 \right) = \frac{h}{3} (y_0 + 4y_1 + y_2) \quad (1)$$

Формула (1) называется формулой Симпсона. Геометрически эта формула получается в результате замены кривой $y = f(x)$ параболой проходящей через 3 узла.

$$\text{Остаточный член } R = \int_{x_0}^{x_2} y dx - \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) \text{ или } R = -\frac{h^5}{90} y'''(\xi),$$

где $\xi \in (x_0, x_2)$

Эта формула является точной для полиномов не только второй, но и третьей степени (т.к. четвертая производная от полинома третьей степени=0), т.е. формула Симпсона обладает повышенной точностью.

3.4 Формулы Ньютона-Котеса высших порядков

При $n = 3$ получим квадратурную формулу Ньютона

$$\int_{x_0}^{x_3} y dx = \frac{3h}{8}(y_0 + 3y_1 + 3y_2 + y_3).$$

Эта формула называется правилом трех высших. Остаточный член формулы $R = -\frac{31,5}{80} y''''(\xi)$,

т.е. при одинаковом шаге формула Ньютона менее точна, чем формула Симпсона. Если рассмотреть формулы Ньютона-Котеса более высших порядков, то видно, что квадратурные формулы с нечетным числом ординат является более точными.

3.5 Общая формула трапеций

Вычислим интеграл $\int_a^b y dx$, для этого разобьем интервал $[a, b]$ на n равных частей $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ и к каждому из них применим формулу трапеций.

Полагая, $h = \frac{b-a}{n}$ и обозначив через y_i значения функции в точках x_i , получим:

$$\int_a^b y dx = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \frac{h}{2}(y_1 + y_2) + \frac{h}{2}(y_2 + y_3) + \dots + \frac{h}{2}(y_{n-1} + y_n) \quad \text{или}$$

$$\int_a^b y dx = h\left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2}\right). \quad (1)$$

Графически формула (1) получается заменой графика подинтегральной функции ломаной линией.

$$\text{Остаточный член } R = -\frac{(b-a)h^2}{12} y''(\xi).$$

3.6 Общая формула Симпсона

Разобьем отрезок $[a, b]$ на четное число $n = 2m$ с шагом $h = \frac{b-a}{n} = \frac{b-a}{2m}$. Применим формулу Симпсона к каждому участку удвоенной длины $(2h)$: $[x_0, x_2], [x_2, x_4], \dots, [x_{2m-2}, x_{2m}]$, получим

$$\int_a^b y dx = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) + \frac{h}{3}(y_2 + 4y_3 + y_4) + \dots + \frac{h}{3}(y_{2m-2} + 4y_{2m-1} + y_{2m}).$$

Откуда получаем параболическую формулу Симпсона:

$$\int_a^b y dx = \frac{h}{3}[(y_0 + y_{2m}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{2m-1}) + 2(y_2 + y_n + \dots + y_{2m-2})].$$

$$\text{Остаточный член } R = -\frac{(b-3)h''}{180} y''''(\xi) \quad (2)$$

Если задана допустимая погрешность $E > 0$, то, обозначив, $M = \max |y''''(x)|$ получим $(b-a) \frac{h^4}{180} M < E$, откуда $h < \sqrt[4]{\frac{180E}{(b-a)M}}$.

Обычно оценка погрешности по формуле (2) затруднительна. Тогда применяют двойной пересчет с шагом h и $2h$ и полагают, что совпадающие десятичные знаки принадлежат точному значению интеграла.

3.7 Квадратурная формула Гаусса

Для получения повышенной точности при численном интегрировании пользуются формулой Гаусса:

$$\int_{-1}^{+1} f(x) dx \approx C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + \dots + C_n f(x_n) = \sum_{i=1}^n C_i f(x_i),$$

в которой узлы интерполяции x_1, x_2, \dots, x_n и квадратурные коэффициенты $C_i (i = \overline{1, n})$ не фиксируются. При этом $2n$ неизвестных величин x_i и $C_i (i = \overline{1, n})$ определяются из условия, что формула является точной в случае любого многочлена степени $(2n-1)$, таким образом для любого многочлена $(2n-1)$ -й степени $f(x) = a_0 + a_1 x^2 + a_2 x^2 + \dots + a_{2n-1} x^{2n-1} = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k x^k$ должно выполняться точное равенство

$$\int_{-1}^{+1} f(x) dx = C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + \dots + C_n f(x_n).$$

Для решения этой задачи необходимо и достаточно в качестве точек x_i взять нули соответствующего полинома Лежандра, эти нули действительны, различны, расположены в интервале $(-1;1)$. Полиномы Лагранжа имеют вид

$$F(x) = \frac{1}{n!2^n} * \frac{d^n}{dx^n} [(x^2 - 1)^n], \quad (n=0,1,\dots),$$

а коэффициенты C_i

$$C_i = \frac{2}{(1-x^2)[F'(x_i)]^2} \quad (i=1,2,\dots,n).$$

Для вычисления интеграла общего вида $\int_a^b f(x)dx$ следует произвести замену переменной

$$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} z_i. \text{ Тогда}$$

$$(i=1,2,\dots,n).$$

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} z\right) dz$$

В этом случае формула Гаусса примет вид:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} [C_1 f(x_1) + C_2 f(x_2) + \dots + C_n f(x_n)]$$

$$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} z_i \quad (i=1,\dots,n), \text{ где } z_i \text{ - нули полинома Лежандра.}$$

Неудобство формулы Гаусса состоит в том, что абсциссы x_i и коэффициенты C_i - иррациональные числа (они заранее вычислены и приводятся в справочнике). Этот недостаток искупается высокой точностью при малом числе узлов интегрирования. В тех случаях, когда подынтегральная функция сложна и на вычисление значений в каждом узле интерполирования требуется много времени формула Гаусса особенно эффективна.

Сравнение формул трапеций, Симпсона и Гаусса показывают, что для непрерывных функций и непрерывнодифференцируемых функций формула Гаусса точнее других. Для разрывных функций иногда точнее бывает формула трапеций или прямоугольников.

3.8 Вычисление интегралов методом Монте-Карло

Требуется приближенно вычислить интеграл, $I = \int_a^b f(x)dx$, т.е. найти его оценку. Допустим, $f(x)$ не имеет первообразной в классе элементар-

ных функций. Рассмотрим случайную величину X , распределенную равномерно на интервале $[a, b]$ с плотностью $\varphi(x) = \frac{1}{b-a}$.

Математическое ожидание

$$M[f(x)] = \int_a^b f(x)\varphi(x)dx = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x)dx.$$

Откуда $I = \int_a^b f(x)dx = (b-a)M[f(x)]$.

Заменяв математическое ожидание его оценкой, найдем оценку искомого интеграла:

$$I^* = (b-a) \frac{\sum_{i=1}^n f(x_i)}{n},$$

где x_i – возможные значения случайной величины X .

4. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений

4.1 Метод Эйлера

В основе численных методов решения дифференциального уравнения $y' = f(x, y)$ лежит получение вместо функции $y = F(x)$ таблицы значений этой функции для заданной последовательности аргументов. Величина $h = x_i - x_{i-1}$ называется шагом интегрирования. Метод Эйлера является сравнительно грубым, однако идеи, положенные в его основу являются исходными для других методов.

Пусть дано дифференциальное уравнение

$$y' = f(x, y), \tag{1}$$

с начальными условиями $x_0, y_0 = y(x_0)$. Требуется найти решение уравнения на отрезке $[a, b]$. Выбрав достаточно малый шаг h , построим систему равно отстоящих точек:

$$x_i = x_0 + ih \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n).$$

Уравнение (1) заменим на разностную схему $\frac{\Delta y}{\Delta x} = f(x, y)$.

Для $i+1$ -ой точки получим

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i). \tag{2}$$

Из формулы (2) следует

$$y_{i+1} = y_i + hf(x_i, y_i). \quad (3)$$

Формула (3) определяет метод Эйлера численного интегрирования. Т.е. зная i -ю точку можно получить $i+1$ -ю точку. Ломаная, заменяющая искомую функцию $y = F(x)$, называется ломаной Эйлера. Можно показать, что если правая часть $f(x, y)$ непрерывна, то последовательность ломаных Эйлера при $h \rightarrow 0$ стремится к интегральной кривой $y = y(x)$.

Метод Эйлера имеет малую точность. Это понятно, т.к. по существу метод Эйлера заключается в том, что интеграл дифференциального уравнения (1) на каждом частичном отрезке $[x_i - x_{i+1}]$ представляется двумя членами ряда Тейлора т.е. для этого отрезка погрешность имеет порядок h^2 . Кроме того, в методе Эйлера имеется систематическое накопление погрешности, т.к. при вычислении значений на следующем отрезке исходные данные не являются точными и содержат погрешности, зависящие от неточности предшествующих вычислений.

Другой модификацией метода Эйлера является усовершенствованный метод Эйлера-Коши, при котором сначала определяется «грубое приближение» решения $\tilde{y}_{i+1} = y_i + hf_i$, из которого находят $\tilde{f}_{i+1} = f(x_{i+1}, \tilde{y}_{i+1})$.

Затем приближенно полагают $y_{i+1} = y_i + h \frac{f_i + \tilde{f}_{i+1}}{2} = y_i + \frac{h}{2} [y'(x_i) + y'(x_i + h)]$.

Принцип, на котором основан модифицированный метод Эйлера, можно пояснить иначе. Разложим функцию $y(x)$ в ряд Тейлора в окрестности точки x_0 :

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + hy'(x_0) + \frac{h^2}{2} y''(x_0) + \dots$$

Кажется очевидным, что, сохранив член с h и отбросив члены более высоких порядков, можно повысить точность. Однако, чтобы сохранить член с h^2 надо знать вторую производную $y''(x_0)$. Ее можно аппроксимировать конечной разностью

$$y''(x_0) = \frac{\Delta y'}{\Delta x} = \frac{y'(x_0 + h) - y'(x_0)}{h}.$$

Подставив это выражение в ряд Тейлора и отбросив нелинейные члены, получим

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + \frac{h}{2} [y'(x_0 + h) + y'(x_0)],$$

что совпадает с ранее полученным выражением.

Этот метод является методом второго порядка точности, т.к. в нем используется член ряда Тейлора, содержащий h^2 . Ошибка на каждом шаге имеет порядок h^3 . За повышение точности приходится платить дополнительными затратами времени, необходимыми для вычисления y'_{i+1} . Более высокая точность может быть достигнута, если сохранить большее число членов ряда Тейлора. Эта идея лежит в основе метода Рунге-Кутты.

4.3 Метод Рунге-Кутты

Чтобы удержать в ряде Тейлора член n -го порядка, необходимо каким-то образом вычислить n -ю производную зависимой переменной. При использовании модифицированного метода Эйлера для получения второй производной в конечно-разностной форме достаточно знать наклоны кривой на концах интервала. Чтобы вычислить третью производную в конечно-разностном виде, необходимо иметь значения второй производной, по меньшей мере в двух точках. Для этого необходимо дополнительно определить наклон кривой в некоторой промежуточной точке интервала h , т.е. между x_i и x_{i+1} . Очевидно чем выше порядок вычисляемой производной, тем больше дополнительных вычислений потребуется внутри интервала. Метод Рунге-Кутты дает набор формул для расчета координат внутренних точек. Существует много методов Рунге-Кутты. Наиболее распространенным является метод, при котором удерживаются члены до h^4 включительно. Т.е. это метод четвертого порядка точности, для которого ошибка на шаге имеет порядок h^5 .

Расчеты производятся по формулам

$$y_{i+1} = y_i + \frac{k_0 + 2k_1 + 2k_2 + k_3}{6},$$

где коэффициенты k_0, k_1, k_2, k_3 последовательно определяются по формулам:

$$k_0 = hf(x_i, y_i); k_1 = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_0}{2}\right);$$

$$k_2 = hf\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{k_1}{2}\right); k_3 = hf(x_i + h, y_i + k_2).$$

Метод Эйлера и его модификация, по сути, являются методами Рунге-Кутты первого и второго порядка точности. По сравнению с ними метод Рунге-Кутты имеет важное преимущество – высокую точность, которая с лихвой оправдывает дополнительное увеличение объема вычислений. Высокая точность часто позволяет увеличить шаг интегрирования h .

Эффективная оценка погрешности метода на каждом шаге затруднительна. Поэтому при проверке погрешности на каждом шаге применяют

двойной пересчет. А именно, исходя из текущего верного значения $y(x_i)$ (как считается), вычисляют величину $y(x_i+h)$ двумя способами: один раз с шагом h , а другой раз с шагом $2h$. Если расхождение не превышает допустимой погрешности, то считают, что шаг h выбран правильно. В противном случае шаг h уменьшают в два раза. Такую схему легко запрограммировать. Преимуществом метода является возможность на любом шаге изменить h , т.е. возможность применения «переменного шага».

Метод Рунге-Кутты применим также для приближенного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Пусть дана система дифференциальных уравнений, представленная в нормальной форме Коши:

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dx} &= f_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n); \\ \frac{dy_2}{dx} &= f_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n); \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dy_n}{dx} &= f_n(x, y_1, y_2, \dots, y_n); \end{aligned}$$

и начальные условия $x_0, y_{10}, y_{20}, \dots, y_{n0}$

Задав шаг h и введя в рассмотрение

$$\begin{aligned} x_i &= x + ih_0, \\ \bar{y}_i &= \bar{y}_i(x_i), \end{aligned} \text{ найдем коэффициенты}$$

$$\begin{aligned} \bar{k}_0 &= h \bar{f}(x_i, \bar{y}_i); \\ \bar{k}_1 &= h \bar{f}\left(x_i + \frac{h}{2}, \bar{y}_i + \frac{\bar{k}_0}{2}\right); \\ \bar{k}_2 &= h \bar{f}\left(x_i + \frac{h}{2}, \bar{y}_i + \bar{k}_1\right); \\ \bar{k}_3 &= h \bar{f}(x_i + h, \bar{y}_i + \bar{k}_2). \end{aligned}$$

Тогда

$$\bar{y}_{i+1} = \bar{y}_i + \frac{\bar{k}_0 + 2\bar{k}_1 + 2\bar{k}_2 + \bar{k}_3}{6}.$$

Замечание: Метод Рунге-Кутты теоретически обоснован для системы линейных уравнений и нелинейных с непрерывно дифференцируемыми нелинейностями. Однако этот метод хорошо зарекомендовал себя при решении систем нелинейных уравнений с разрывными характеристиками.

шении систем нелинейных уравнений с разрывными характеристиками. В этом случае он тоже дает хорошую сходимость.

Общая характеристика одношаговых методов:

2. В основе всех одношаговых методов лежит разложение в ряд Тейлора, в котором сохраняются члены, содержащие h в степени до k включительно. Целое число k называется порядком метода. Погрешность шага имеет порядок $k+1$.

3. Все одношаговые методы не требуют действительного вычисления производных – вычисляется лишь сама функция (т.е. правая часть уравнений), однако могут потребоваться ее значения в нескольких промежуточных точках. Это, конечно, влечет за собой дополнительные затраты времени.

4. Свойство «самостартования» позволяет легко менять шаг интегрирования

4.4 Методы прогноза и коррекции

В этих методах для вычисления положения новой точки используется информация о нескольких ранее полученных точках. Для этого применяются две формулы, называемые соответственно формулами *прогноза* и *коррекции*. Схемы алгоритмов для всех таких методов примерно одинаковы, а сами методы отличаются лишь формулами. Так как в методах прогноза и коррекции используется информация о нескольких ранее полученных точках, то в отличие от одношаговых методов они не обладают свойством «самостартования». Поэтому прежде чем применять метод прогноза и коррекции, приходится вычислять исходные данные с помощью какого-либо одношагового метода. Часто для этого прибегают к методу Рунге-Кутты.

Вычисления производятся следующим образом.

Сначала по формуле прогноза и исходным значениям переменных определяют значение $y_{i+1}^{(0)}$. Верхний индекс означает, что прогнозируемое значение является одним из последовательности значений y_{i+1} , располагающихся в порядке возрастания точности. По прогнозируемому значению $y_{i+1}^{(0)}$ помощью дифференциального уравнения $y'(x) = f(x, y)$ находят производную $y_{i+1}^{(0)'} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(0)})$, которая затем подставляется в формулу коррекции для вычисления уточненного значения $y_{i+1}^{(j+1)}$. В свою очередь $y_{i+1}^{(j+1)}$ используется для получения более точного значения производной с помощью дифференциального уравнения $y_{i+1}^{(j+1)'} = f(x_{i+1}, y_{i+1}^{(j+1)})$. Если это значение производной недостаточно близко к предыдущему, то оно вводится в формулу коррекции и итерационный процесс продолжается. Если производная изменяется в допустимых пределах, то значение $y_{i+1}^{(j+1)}$ используется для вычисления окончательного значения y_{i+1} . Затем делается следующий шаг, на котором вычисляется y_{i+2} .

Метод Адамса

Метод разработан Адамсом в 1855г. по заказу известного английско-го артиллериста Башфорта, занимавшегося внешней баллистикой. Впоследствии этот метод был забыт и вновь открыт в начале века норвежским математиком Штермером. Популяризация метода и его дальнейшие усовершенствования связаны с именем А.Н.Крылова. Рассмотрим метод Адамса применительно к уравнению первого порядка

$$y' = f(x, y) \quad (1)$$

$$\text{с начальными условиями: } x_0, y(x_0) = y_0 \quad (2).$$

Пусть x_i – система равноотстоящих значений с шагом h и $y_i = y(x_i)$. Проинтегрируем уравнение (1) на участке $[x_i, x_{i+1}]$

$$y_{i+1} = y_i + \int_{x_i}^{x_{i+1}} y' dx. \quad (3)$$

Для нахождения производной y' воспользуемся второй интерполяционной формулой Ньютона:

$$y' = y'_i + q\Delta y'_{i-1} + \frac{q(q+1)}{2!} \Delta^2 y'_{i-2} + \frac{q(q+1)(q+2)}{3!} \Delta^3 y'_{i-3},$$

где $q=(x-x_i)/h$ или

$$y' = y'_i + q\Delta y'_{i-1} + \frac{q^2 + q}{2!} \Delta^2 y'_{i-2} + \frac{q^3 + 3q^2 + 2q}{3!} \Delta^3 y'_{i-3}. \quad (4)$$

Подставляя выражение (4) в (3) и учитывая, что $dx = h dq$ получим:

$$\Delta y_i = h \int_0^1 (y'_i + q\Delta y'_{i-1} + \frac{q^2 + q}{2!} \Delta^2 y'_{i-2} + \frac{q^3 + 3q^2 + 2q}{3!} \Delta^3 y'_{i-3}) dq.$$

Откуда, выполнив интегрирование, получим экстраполяционную формулу Адамса:

$$\Delta y_i = h y'_i + \frac{1}{2} \Delta (h y'_{i-1}) + \frac{5}{12} \Delta^2 (h y'_{i-2}) + \frac{3}{8} \Delta^3 (h y'_{i-3}) \quad (5)$$

$$y_{i+1} = y_i + \Delta y_i$$

Обозначив $h y'_i = t_i$, получим экстраполяционную формулу Адамса в другом виде, которая используется для прогноза значения y_{i+1} :

$$y_{i+1} = y_i + t_i + \frac{1}{2} \Delta t_{i-1} + \frac{5}{12} \Delta^2 t_{i-2} + \frac{3}{8} \Delta^3 t_{i-3} \quad (6)$$

Полученное значение Δy_i уточняется с учетом вновь полученного значения y_{i+1} , по формуле коррекции:

$$\Delta y_i = t_i + \frac{1}{2} \Delta t_i - \frac{1}{12} \Delta^2 t_{i-1} - \frac{1}{2} \Delta^3 t_{i-2}, \quad (7)$$

которая называется интерполяционной формулой Адамса. Если погрешность больше заданной, то по формуле (7) коррекцией вычисляется новое значение приращения и т.д. Этот итерационный процесс продолжают до тех пор, пока погрешность в $i+1$ -й точке станет меньше заданной. Затем

вычисляют значение y_{i+2} по формуле (6) и уточняют по формуле (7), используя опять тот же итерационный процесс. Как следует из формул (6) и (7) для начала процесса необходимо четыре начальных значения для вычисления $\Delta^3 t_{i-3} = \Delta^3(hy'_{i-3})$, $\Delta^2(hy'_{i-2}) = \Delta^2 t_{i-2}$, $\Delta(hy'_{i-1}) = \Delta t_{i-1}$, $t_i = hy'_i$. Одним начальным значением могут служить начальные условия, а для вычисления 3-х остальных необходимо воспользоваться одним из одношаговых методов, обычно это метод Рунге-Кутты-4.

Для расчетов формулы Адамса удобнее применять в другой форме, выражая y_{i+1} значения не через разности, а непосредственно через значения y' . Тогда экстраполяционная формула (прогноза) Адамса принимает вид

$$y_{i+1} = y_i + h/24(55y'_i - 59y'_{i-1} + 37y'_{i-2} - 9y'_{i-3}) + 251/720h^5 y^{(5)}$$

Интерполяционная формула (коррекции) Адамса:

$$y_{i+1} = y_i + h/24(9y'_{i+1} - 19y'_i - 5y'_{i-1} + y'_{i-2}) + 19/720h^5 y^{(5)}.$$

Последние члены при расчетах не используются, а применяются в качестве оценки погрешности (погрешность имеет 5-й порядок).

Можно предположить, что поскольку величина отбрасываемого члена известна, то ее следует использовать для уточнения скорректированного значения зависимой переменной. Однако, это было бы равноценно использованию системы более высокого порядка точности. Так как внесение поправок в корректирующий член могут отрицательно сказаться на устойчивости счета, то для повышения точности счета следует прибегать к методам более высоких порядков точности.

Метод Хемминга

Это устойчивый метод 4-ого порядка точности.

Формула прогноза:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + 4/3h(2y'_i - y'_{i-1} + 2y'_{i-2}) + 28/90h^5 y^{(5)}.$$

Формула коррекции:

$$y_{i+1} = 1/8[9y_i - y_{i-2} + 3h(y'_{i+1} + 2y'_i - y'_{i-1})] - 1/40h^5 y^{(5)}.$$

Особенностью метода Хемминга является то, что он позволяет оценивать погрешности, вносимые на стадиях прогноза и коррекции и устранять их. Благодаря простоте и устойчивости этот метод является одним из наиболее распространенных методов прогноза и коррекции.

Краткая характеристика методов прогноза и коррекции

1. Не обладают свойством «самостартования». Для получения значений в 3-х дополнительных точках необходимо прибегать к одношаговым методам. Если в процессе решения приходится менять шаг, то временно также необходимо переходить к одношаговому методу.

2. Так как требуется знание о 4-х точках, то соответственно растет требование к объему памяти.

3. Позволяют легко оценить погрешность на шаге.

4. В методе Рунге–Кутты 4-ого порядка точности на каждом шаге приходится вычислять четыре значения функции, в то время как для обеспечения сходимости метода прогноза и коррекции того же порядка точности часто достаточно двух значений функции. Поэтому они требуют почти вдвое меньше машинного времени.

Особенности решения «жестких» задач

Некоторые дифференциальные уравнения не решаются ни одним из рассмотренных методов. Постоянная времени дифференциального уравнения первого порядка – это промежуток времени, по истечении которого величина нестационарной части решения убывает в e^{-1} раз. В общем случае дифференциальное уравнение n -ого порядка имеет n постоянных времени. Если любые две из них сильно отличаются по величине или если одна из постоянных времени достаточно мала по сравнению с интервалом времени, для которого отыскивается решение, то задача называется «жесткой» и ее практически невозможно решить обычными методами. Уменьшение шага вызывает увеличение времени расчетов и накапливание погрешностей округления и усечения, что может привести к получению бессмысленного результата.

Библиографический список

1. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы для инженеров. - М.:Высш.шк.,1994.
2. Волков Е.А. Численные методы. - М.:Наука,1987.
3. Калиткин Н.Н. Численные методы. - М.:Наука,1998.
4. Самарский А.А. Введение в численные методы. -М.:Наука,1992.

5. Тихонов А.Н., Костомаров Д.П. Вводные лекции по прикладной математике. - М.: Наука, 1997.
6. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики - М.: Наука, 1996.
7. Шуп Т. Е. Прикладные численные методы в физике и технике. - М., Высш. шк., 1990.
8. Копченова Н.В., Марон И.А. Вычислительная математика в примерах и задачах. - М., Наука, 1992.

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. Численное решение систем линейных уравнений	3
1.1 Метод итерации	4
1.2 Метод Зейделя.....	5
1.3 Метод релаксации.....	7
2. Интерполирование Функций.....	9
2.1 Линейная интерполяция.....	10
2.2 Интерполяционная формула Лагранжа.....	11
2.3 Конечные разности.....	13
2.4 Первая интерполяционная формула Ньютона.....	14
2.5 Вторая интерполяционная формула Ньютона.....	16
3. Численное интегрирование функций.....	18
3.1 Квадратурные Формулы Ньютона-Котеса.....	19
3.2 Формула трапеций.....	21
3.3 Формула Симпсона.....	22
3.4 Формулы Ньютона-Котеса высших порядков.....	22
3.5 Общая формула трапеций.....	23
3.6 Общая формула Симпсона.....	23
3.7 Квадратурная формула Гаусса.....	24
3.8 Вычисление интегралов методом Монте-Карло.....	25
4. Численное интегрирование обыкновенных дифференциальных уравнений.....	25
4.1 Метод Эйлера.....	25
4.3 Метод Рунге-Кутты.....	27
4.4 Методы прогноза и коррекции.....	29
Библиографический список.....	33