№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

К численному (приближенному) дифференцированию чаще всего прибегают, когда приходится вычислять производные от функций, заданных таблично, или, когда непосредственное дифференцирование затруднено.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Вычисление производной по ее определению

По определению производная функции равна:

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Переходя от бесконечно малых разностей к конечным, получаем приближенную формулу численного дифференцирования:

$$f'(x) \approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Замена бесконечно малых приращений конечными является причиной возникновения ошибки. Для оценки ее величины разложим функцию $f(x)$ в точке $x+\Delta x$ в ряд Тэйлора:

$$f(x+\Delta x)=f(x)+\frac{f'(x)}{1!}\Delta x+\frac{f''(x)}{2!}(\Delta x)^2+$$

$$+\frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^3+\ldots++\frac{f^{(n)}(x)}{n!}(\Delta x)^n+\ldots$$

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

№3

Подставив правую часть в $f'(x) \approx \dfrac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$ и приведя подобные члены, получим:

$$f'(x) \approx f'(x) + \frac{f''(x)}{2!}\Delta x + \ldots$$

Отсюда видно, что все члены, начиная со второго, определяют отличие значения производной от ее точного значения. Так как основной член погрешности $\sim \Delta x$, говорят, что приближенная формула имеет первый порядок точности по Δx.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

№3

Можно вычислять производную, используя симметричную разностную схему:

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

Для оценки точности данной формулы воспользуемся разложением в ряд Тейлора:

$$f'(x) \approx \frac{1}{2\Delta x}\left(f(x) + \frac{f'(x)}{1!}\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}(\Delta x)^2 + \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^3 + \ldots \right) -$$

$$- \frac{1}{2\Delta x}\left(f(x) - \frac{f'(x)}{1!}\Delta x + \frac{f''(x)}{2!}(\Delta x)^2 - \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^3 + \ldots \right).$$

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Раскрыв скобки и приведя подобные члены, получаем:

$$f'(x) \approx f'(x) + \frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^2 + \ldots$$

Отсюда видно, что основной член погрешности равен $\frac{f'''(x)}{3!}(\Delta x)^2$; а так как данный член $\sim (\Delta x)^2$, говорят, что эта формула имеет второй порядок по Δx.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

№3

Значение производной в точке x_0 можно получить следующим образом:

1. задаем начальное приращение Δx, например, $\Delta x = 0,1;$
2. вычисляем значение производной в точке x_0 :

$$f1 := \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x};$$

3. изменяем $\Delta x = \Delta x / a$, где a — некоторое число, большее единицы, как правило, $a = 10$.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

№3

4. вычисляем значение производной

$$f2 := \frac{f(x_0 + \Delta x) - f(x_0)}{\Delta x};$$

5. проверяем условие $|f1 - f2| < \varepsilon.$

Если условие истинно, то производная $f'(x_0)$ найдена с требуемой точностью ε.

Иначе полагаем $f1 := f2;$ переходим на №3

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Пример

Вычислить производную функции $f(x) = x^2$ в точке $x = 2$ с точностью $\varepsilon = 0{,}005.$

Решение

Задаем начальное приращение $\Delta x = 0{,}1.$

Вычисляем $f1 := \dfrac{f(x+\Delta) - f(x)}{\Delta} = \dfrac{2.1^2 - 2^2}{0.1} = 4.1;$

Изменяем приращение $\Delta x = 0.1/10 = 0.01.$

Вычисляем $f2 := \dfrac{2.01^2 - 2^2}{0.01} = \dfrac{4.0401 - 4}{0.01} = 4.01;$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Проверяем условие окончания вычислений:

$|f1 - f2| < 0.005$: $|4.1 - 4.01| = 0.09 > 0.005.$

Точность не достигнута, поэтому $f1 := 4.01.$

Изменяем приращение $\Delta x = 0.01/10 = 0.001.$

Вычисляем $f2 := \dfrac{2.001^2 - 2^2}{0.01} = \dfrac{4.0401 - 4}{0.01} = 4.001;$

Погрешность не достигнута $|4.01 - 4.001| = 0.009;$

$\Rightarrow \quad f1 := 4.001; \quad \Delta x = 0.001/10 = 0.0001.$

$f2 := \dfrac{2.0001^2 - 2^2}{0.01} = 4.0001; \quad |4.001 - 4.0001| = 0.0009;$

$0.0009 < 0.005, \quad \Rightarrow \quad f'(x) \approx 4.0001$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Формула вычисления производной второго порядка:

$$f''(x) = \frac{d^2 f}{dx^2} \approx$$

$$\frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Формулы численного дифференцирования функции многих переменных

В этом случае все аргументы функции становятся константами, кроме аргумента, по которому проводится дифференцирование. Пусть дана функция $f(x_1, x_2, ..., x_n)$, тогда производная по x_i вычисляется по формуле:

$$\frac{\partial f(x_1,...x_n)}{\partial x_i} \approx \frac{f(x_1,...,x_i+\Delta x_i,...x_n)-f(x_1,...x_i,...x_n)}{\Delta x_i}$$

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Или, используя центральную разность,

$$\frac{\partial f(x_1,...x_n)}{\partial x_i} =$$

$$= \frac{f(x_1,...x_i + \Delta x_i ... x_n) - f(x_1,...x_i - \Delta x_i ... x_n)}{2\Delta x_i}$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Вычисление частной производной второго порядка

На практике используют также формулы вычисления частных производных высоких порядков. Ниже приведены формулы для случая функции двух переменных $f(x, y)$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} = \frac{f(x + \Delta x, y) - 2f(x, y) + f(x - \Delta x, y)}{(\Delta x)^2}$$

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} = \frac{f(x, y + \Delta y) - 2f(x, y) + f(x, y - \Delta y)}{(\Delta y)^2}$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

$$\frac{\partial^2 f(x,y)}{\partial x \partial y} = [f(x+\Delta x,\ y+\Delta y) - f(x+\Delta x,\ y-\Delta y) -$$

$$- f(x-\Delta x,\ y+\Delta y) + f(x-\Delta x,\ y-\Delta y)] \cdot \frac{1}{4\Delta x \Delta y}$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Конечно-разностные аппроксимации производных

Пусть отрезок $[a, b]$ разбит на $n \quad (\geq 2)$ частей точками $\{x_i\}$:

$$x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \ldots < x_n .$$

Далее, пусть на этом отрезке определена функция $y_i = f(x_i) \quad (i = 0, 1, 2, \ldots, n)$. Тогда выражения для первой производной функции в точке x_i с помощью отношения конечных разностей запишем следующим образом:

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

№3

а) аппроксимация с помощью разностей вперед (правых разностей)

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} \quad (i = 0, 1, \ldots, n-1);$$

б) аппроксимация с помощью разностей назад (левых разностей)

$$y'(x_i) \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \quad (i = 1, 2, \ldots, n);$$

в) аппроксимация с помощью центральных разностей

$$y'(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \quad (i = 1, \ldots, n-1).$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Приближенное значение производной второго порядка в точке x_i :

$$y''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{(x_{i+1} - x_{i-1})^2} \quad (i = 1, 2, ..., \cdots n-1).$$

Погрешность аппроксимации имеет порядок $0(h^2)$.

Естественно, что представление с помощью конечных разностей позволяет вычислять значения второй производной только во внутренних точках отрезка.

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

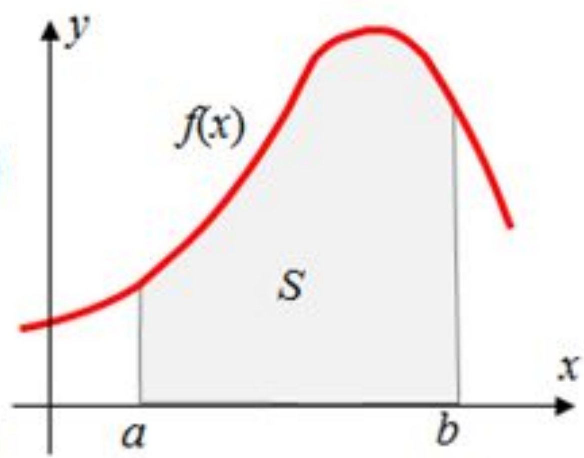
Численные методы интегрирования

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

В ряде задач возникает необходимость вычисления определенного интеграла от некоторой функции:

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



Геометрический смысл интеграла заключается в том, что если $f(x) > 0$ на отрезке $[a, b]$, то интеграл $\int_a^b f(x)dx$ численно равен площади фигуры, ограниченной графиком функции $y = f(x)$ отрезком оси абсцисс, прямыми $x = a$ и $x = b$.

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Численное интегрирование применяется, когда:

- сама подынтегральная функция не задана аналитически, а например, представлена в виде таблицы значений;
- аналитическая запись подынтегральной функции известна, но ее первообразная не выражается через аналитические функции.

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

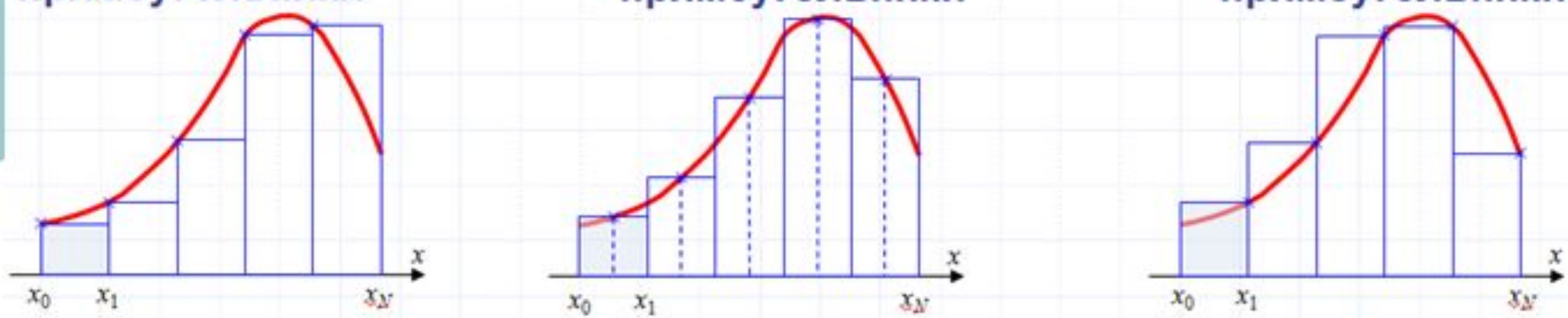
№3

Метод прямоугольников

Интегрируемый интервал $[a, b]$ делится на N равных отрезков длиной $h = \dfrac{b-a}{N}$.

Интеграл вычисляется как сумма площадей вписанных прямоугольников.

Левые прямоугольники | **Средние прямоугольники** | **Правые прямоугольники**



$$I \approx \sum_{j=1}^{N} h \cdot f(x_{j-1})$$

$$I \approx \sum_{j=1}^{N} f(x_{j-0.5}) \cdot h$$

$$x_{j-0.5} = x_j - 0.5h$$

$$I \approx \sum_{j=1}^{N} h \cdot f(x_j)$$

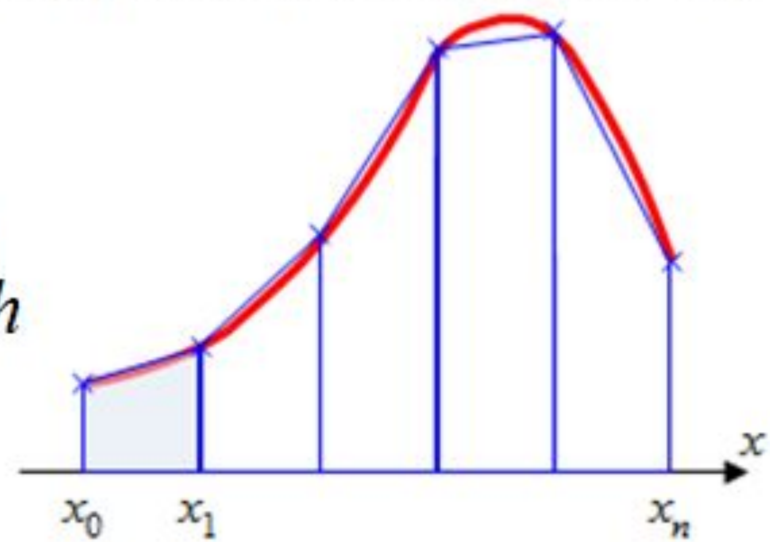
№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Метод трапеций

Площадь криволинейной трапеции заменяется площадью многоугольника, составленного из N трапеций.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{j=0}^{N} \frac{f\left(x_j\right)+f\left(x_{j-1}\right)}{2} h$$



$$\int_a^b f(x)dx \approx h \cdot \sum_{j=1}^{N} \frac{f(x_{j-1})+f(x_j)}{2} = h \cdot \left[\frac{1}{2}(f_0 + f_N) + \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i) \right]$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Метод Симпсона (парабол)

Каждый отрезок аппроксимируется параболой

Парабола проходит через три точки: узлы интегрирования x_j и x_{j+1} и середину отрезка $x_{j+0,5}$.

Площадь параболы на отрезке $[x_j,\ x_{j+1}]$

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{6}\left(f_j + 4f_{j+0.5} + f_{j+1}\right)$$

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Тогда интеграл функции на отрезке $[a,b]$:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}\left[f_0 + f_N + 2\cdot\sum_{j=1}^{N-1} f_j + 4\cdot\sum_{j=1.5}^{N-0.5} f_j\right]$$

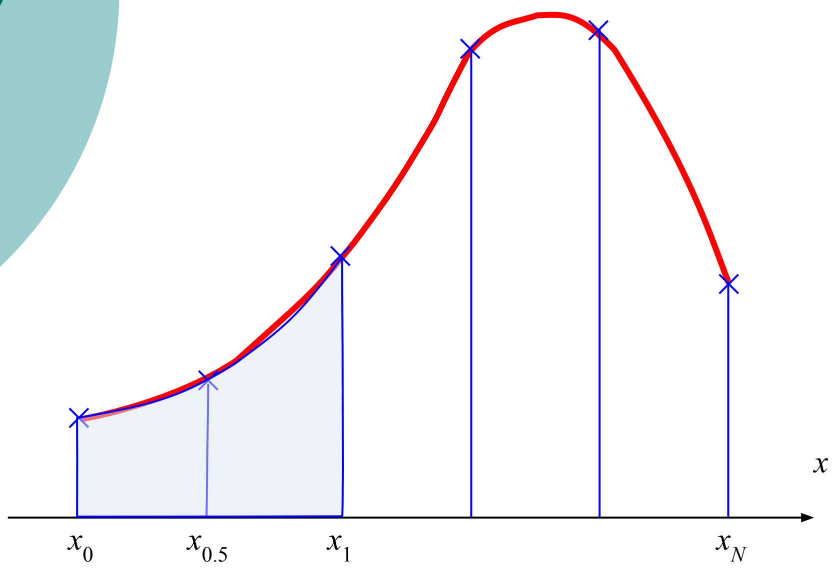
Избавимся от дробных индексов. Разобьем интервал интегрирования на N равных отрезков. Тогда формула Симпсона имеет вид:

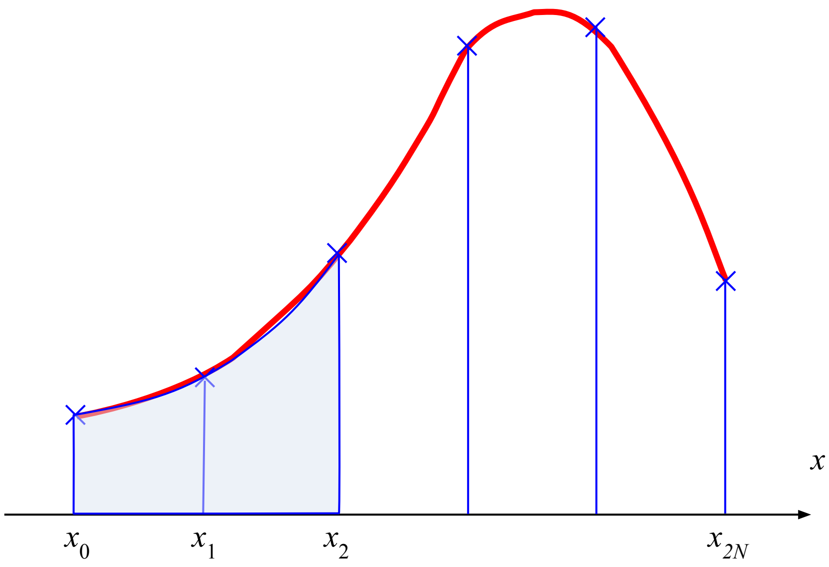
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f_0 + f_{2N} + 2\cdot\sum_{j=2,2}^{2N-2} f_j + 4\cdot\sum_{j=1,2}^{2N-1} f_j\right]$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Геометрическая интерпретация метода Симпсона





№3

Метод Уэддля

Метод базируется на применении к каждому из

N отрезков разбиения $[a, b]$формулы:

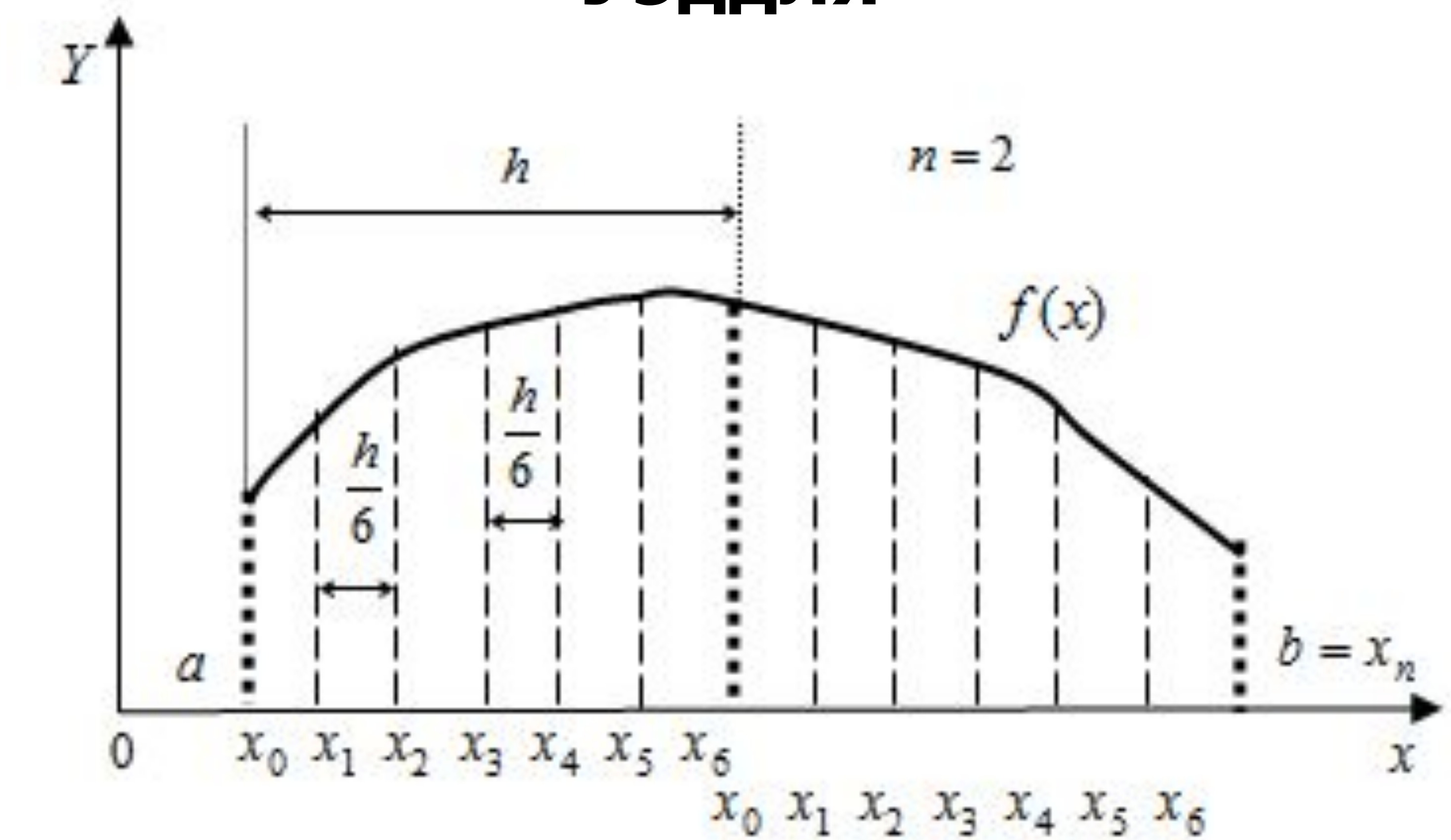
$$\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx \approx \frac{3h}{10}\Big(f(x_0) + 5f(x_1) + f(x_2) +$$

$$+6f(x_3) + f(x_4) + 5f(x_5) + f(x_6)\Big).$$

№3

ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

Геометрическая интерпретация метода Уэддля



№3

Правило Рунге оценивания погрешности формул интегрирования

Вычисляют величину интеграла I по выбранной формуле при числе интервалов n и $2 \cdot n$ (соответственно I_n и I_{2n}).

$\Delta \approx |I_n - I_{2n}|$ — для формул правых и левых прямоугольников;

$\Delta \approx \dfrac{|I_n - I_{2n}|}{3}$ — для формулы серединных прямоугольников и трапеций;

№3

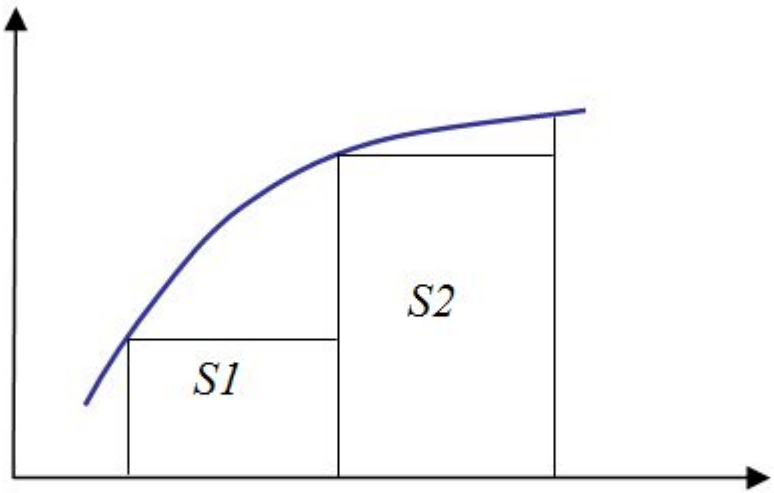
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

$$\Delta \approx \frac{|I_n - I_{2n}|}{15}$$ — для формулы Симпсона;

$$\Delta \approx \frac{|I_n - I_{2n}|}{63}$$ — для формулы Уэддля.

$\Delta \geq \varepsilon$

Если $\Delta \geq \varepsilon$, количество интервалов разбиения увеличивают вдвое, т.е. значения интеграла вычисляются для последовательных значений $n = n, 2n, 4n...$ Вычисления заканчиваются при выполнении условия $\Delta < \varepsilon$.



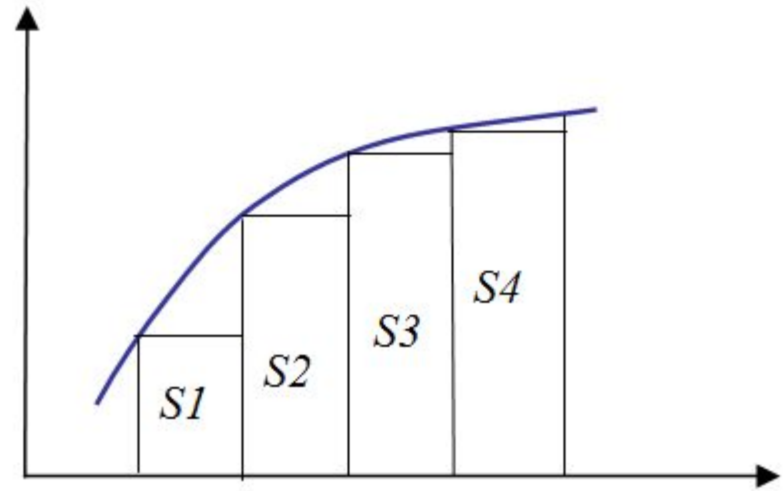


Иллюстрация повышения точности вычисления
интеграла методом левых прямоугольников
при удвоении числа разбиений.