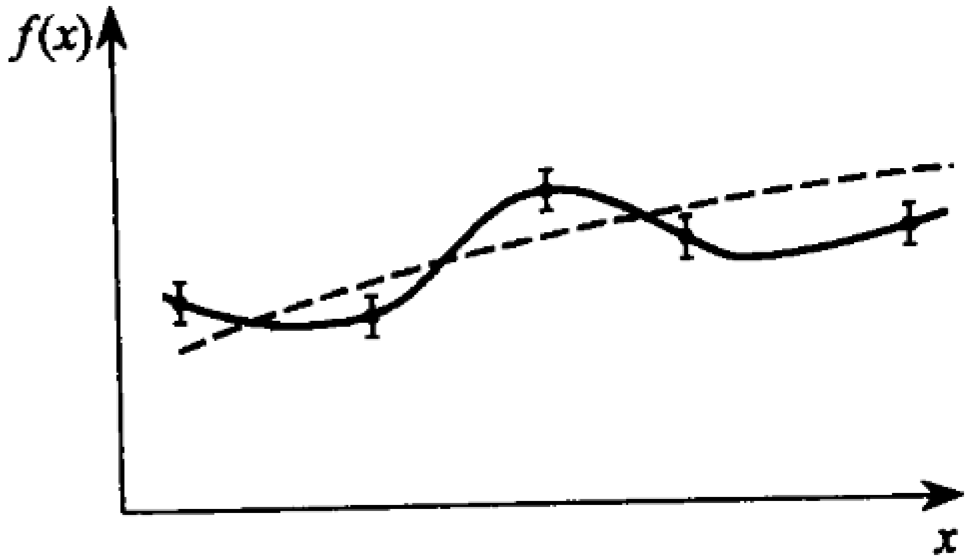
ПРИБЛИЖЕНИЕ ФУНКЦИЙ (аппроксимация)

Во многих задачах возникает проблема замены некоторой функции, заданной аналитически или таблично, другой, близкой к первой, но более простой и удобной при вычислениях. Другая задача — восстановление функции на некотором отрезке по заданным на этом отрезке значениям функции в дискретном множестве точек.

В общем случае при постановке задачи приближения необходимо ответить на следующие вопросы:

1. Какой класс приближающих функций необходимо выбрать.
2. Какой выбрать критерий близости исходной и приближающей функции. В качестве критерия можно выбрать, например, точное совпадение приближаемой и приближающей функций в узловых точках (интерполяция); минимум суммы квадратов отклонения в узловых точках (метод наименьших квадратов) или другие.
3. Указать правило, позволяющее получить значение функции в промежутках между узлами, в частности, ответить на вопросы, какие узлы использовать для построения приближающей функции и как их расположить.

Пример



Среднеквадратичное приближение – пунктир.
Интерполяция - сплошная линия.

ИНТЕРПОЛЯЦИЯ

Пусть на отрезке $[a, b]$ заданы $(n + 1)$ несовпадающих точек
$a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$
и $(n + 1)$ значений функции $f_i = f(x_i)$, $i = 0,\ldots,n$.

В задаче интерполяции требуется по табличным значениям (x_i, f_i) построить функцию $\varphi(x)$, такую, что значения $\varphi(x)$ легко вычисляются при любом $x \in [a, b]$ и при этом $\varphi(x_i) = f(x_i)$.

Наиболее распространен способ линейной интерполяции, в случае которой приближающая функция ищется в виде линейной комбинации некоторых базисных функций $\varphi_i(x)$:

$$\varphi(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i(x)$$

Интерполяционный многочлен

В качестве базисных функций можно выбрать любую линейно независимую систему функций, но чаще всего выбираются степенные функции 1, x, x^2,…, x^n. Это объясняется тем, что многочлены легко вычисляются и теория интерполяции многочленами хорошо разработана. Приближающую функцию в этом случае ищем в виде многочлена степени n:

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i$$

Для определения значений коэффициентов a_i требуется решить систему уравнений $P(x_i)=f_i$; $i=0,\ldots,n$:

$$\begin{cases} a_0 + a_1 x_0 + \ldots + a_n x_0^n = f_0 \\ a_0 + a_1 x_1 + \ldots + a_n x_1^n = f_1 \\ \ldots \\ a_0 + a_1 x_n + \ldots + a_n x_n^n = f_n \end{cases}$$

Определитель этой системы является ненулевым определителем Вандермонда:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_0 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^n \end{vmatrix} = \prod_{j>i\geq 0}^{n} (x_j - x_i) \neq 0$$

Таким образом, решение системы существует и единственно, а это означает, что для таблицы значений функции (x_i, f_i), $i=0,\ldots,n$ существует единственный интерполяционный многочлен степени n.

Интерполяционный многочлен в форме Лагранжа

Будем искать интерполяционный многочлен в виде $L(x)=\sum_{i=0}^{n} f_i l_i(x)$,

где многочлен $l_i(x)$ представляет собой многочлен степени n, удовлетворяющий условию $l_i(x_j)=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}$

Условие равенства нулю означает, что все x_j за исключением x_i являются корнями многочлена l_i и по теореме о разложении многочлена по корням: $l_i(x)=C_i(x-x_0)...(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})...(x-x_n)$

Найдем C_i исходя из условия равенства единице при $i=j$:

$$C_i=\frac{1}{(x_i-x_0)...(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})...(x_i-x_n)}$$

Таким образом, интерполяционный многочлен в форме Лагранжа будет выглядеть так:

$$L(x)=\sum_{i=0}^{n} f_i \prod_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{n} \frac{x-x_j}{x_i-x_j}=\sum_{i=0}^{n} f_i \frac{(x-x_0)\ldots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\ldots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\ldots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\ldots(x_i-x_n)}$$

Пример

По таблице:

x	-1	0	1	2
y	4	2	0	1

построим интерполяционный многочлен в форме Лагранжа:

$$L(x)=4\frac{x(x-1)(x-2)}{(-1)(-2)(-3)}+2\frac{(x+1)(x-1)(x-2)}{(1)(-1)(-2)}$$

$$+1\frac{(x+1)x(x-1)}{(3)(2)(1)}$$

Интерполяционный многочлен в форме Ньютона

Основное преимущество формы записи интерполяционного многочлена Ньютона в сравнении с формой Лагранжа заключается в отсутствии необходимости перестраивать весь многочлен при добавлении новой точки в таблицу.

Для вывода интерполяционного многочлена в форме Ньютона понадобится понятие о разделенных разностях.

Разделенные разности

Разделенные разности ***нулевого*** порядка совпадают со значениями функции.

Разделенные разности ***первого*** порядка определяются соотношениями:

$$f(x_i;x_j)=\frac{f(x_i)-f(x_j)}{x_i-x_j}$$

Разделенные разности ***второго*** порядка определяются через разделенные разности первого порядка:

$$f(x_i;x_j;x_k)=\frac{f(x_i;x_j)-f(x_j;x_k)}{x_i-x_k}$$

Разделенная разность ***порядка n*** определяется соотношением:

$$f(x_i;x_j;x_k;...;x_n)=\frac{f(x_i;x_j;x_k;...;x_{n-1})-f(x_j;x_k;...;x_n)}{x_i-x_n}$$

Если функция задана таблицей значений в четырех точках: x_0, x_1, x_2, x_3 , то разделенные разности удобно вычислять в следующем порядке:

$f(x_0)$ $f(x_1)$ $f(x_2)$ $f(x_3)$	$f(x_0;x_1)$ $f(x_1;x_2)$ $f(x_2;x_3)$	$f(x_0;x_1;x_2)$ $f(x_1;x_2;x_3)$	$f(x_0;x_1;x_2;x_3)$

Разделенные разности более высоких порядков равны нулю.

Вывод формулы интерполяционного многочлена в форме Ньютона:

1. $f(x;x_0)=\dfrac{f(x)-f(x_0)}{x-x_0} \Rightarrow f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f(x;x_0)$

2. $f(x;x_0;x_1)=\dfrac{f(x;x_0)-f(x_0;x_1)}{x-x_1} \Rightarrow f(x;x_0)=f(x_0;x_1)+(x-x_1)f(x;x_0;x_1)$

подставляя 2 в 1 получаем:

3. $f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f(x_0;x_1)+(x-x_0)(x-x_1)f(x;x_0;x_1)$

Продолжая дальше в итоге получим:

$$f(x)=f(x_0)+(x-x_0)f(x_0;x_1)+(x-x_0)(x-x_1)f(x;x_0;x_1)+...+$$
$$+(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)f(x_0;x_1;...;x_n)$$

Сглаживание методом наименьших квадратов

При проведении некоторых экспериментальных исследований наблюдаются частые и резкие изменения значений измеряемых величин. Чтобы избежать трудностей в изучении таких процессов и управлении ими, используют ***сглаживание***.

Применять сглаживание нужно осмотрительно. В некоторых случаях резко выделяющиеся точки могут характеризовать существенные качественные изменения, происходящие в исследуемом объекте. Сглаживая экспериментальные данные, можно легко утратить информацию о таких явлениях.

Сущность метода наименьших квадратов, для табличной функции состоит в том, чтобы отыскать такую аналитическую зависимость из некоторого класса функций, для которой сумма квадратов отклонений по всем точкам таблицы была бы минимальной.

Пусть связь между аргументами x_i и значениями функции f_i (i=0,…,n) приближенно описывается выражением:

$y = p(x, a_0, ..., a_k)$ с числовыми параметрами $a_0, ..., a_k$.

Требуется определить такие значения этих параметров, при которых сумма квадратов отклонений

$\sum_{i=0}^{n} (p(x_i, a_0, ..., a_k) - y_i)^2$ будет наименьшей.

Для многочлена k-й степени $P_k(x) = a_k x^k + \ldots + a_1 x + a_0$ сумма квадратов отклонений представляет собой неотрицательную функцию переменных $a_0, \ldots, a_k$

$$F(a_0, \ldots, a_k) = \sum_{i=0}^{n} (a_k x_i^k + \ldots + a_1 x_i + a_0 - y_i)^2$$

Требующиеся нам наилучшие коэффициенты многочлена должны давать минимум функции F.

Необходимым условием экстремума дифференцируемой функции многих переменных является равенство нулю ее частных производных по всем переменным, следовательно задача отыскания коэффициентов сводится к решению системы уравнений:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial a_0} = 0, \\ \ldots \\ \dfrac{\partial F}{\partial a_k} = 0 \end{cases}$$

Дифференцируя F по каждой переменной, получаем систему линейных уравнений:

$$\begin{cases} c_0 a_0 + c_1 a_1 + c_2 a_2 + \ldots + c_k a_k = d_0 \\ c_1 a_0 + c_2 a_1 + c_3 a_2 + \ldots + c_{k+1} a_k = d_1 \\ \ldots \\ c_k a_0 + c_{k+1} a_1 + c_{k+2} a_2 + \ldots + c_{2k} a_k = d_k \end{cases}$$

где $c_m = \sum_{i=0}^{n} x_i^m, m = 0, \ldots, 2k;$

$$d_j = \sum_{i=0}^{n} f_i x_i^j, \; j = 0, \ldots, k.$$

Решив полученную систему, определим значения коэффициентов аппроксимирующего многочлена.

Интерполяция сплайнами

Сплайном степени m называется функция $S_m(x)$, обладающая следующими свойствами:

1. функция непрерывна на отрезке $[x_0, x_n]$ вместе со своими производными до некоторого порядка p;

2. на каждом частичном отрезке $[x_i , x_{i+1}]$ функция совпадает с некоторым алгебраическим многочленом степени m .

Разность между степенью сплайна и наивысшим порядком непрерывной на отрезке $[x_0, x_n]$ производной $(m - p)$ называют дефектом сплайна.

Кусочно-линейная функция является сплайном первой степени с дефектом, равным единице.

Кубический сплайн

Для аппроксимации зависимости $y = f(x)$ будем использовать функцию $\varphi(x)$, которая на каждом интервале $[x_{i\text{-}1}, x_i]$ $i = 1,...,n$ принимает значение $\varphi_i(x)$.

$$\varphi_i(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3$$

где a_i , b_i , c_i , d_i - коэффициенты сплайна, определяемые из дополнительных условий:

1. равенство значений $\varphi_i(x)$ и аппроксимируемой функции $f(x)$ в узлах:

$$\varphi_i(x_{i-1}) = y_{i-1},$$

$$\varphi_i(x_i) = y_i$$

2. непрерывность первой и второй производных от сплайнов в узлах:

$$\varphi_i'(x_i) = \varphi_{i+1}'(x_i)$$

$$\varphi_i''(x_i) = \varphi_{i+1}''(x_i)$$

Кроме перечисленных условий, необходимо задать граничные условия, т.е. в точках x_0, x_n :

$$\varphi_1''(x_0) = 0,$$

$$\varphi_n''(x_n) = 0.$$

Построим систему уравнений для определения коэффициентов кубических сплайнов.

Условия равенства $\varphi_i(x)$ и $f(x)$ примут вид:

$$a_i = y_{i-1} \qquad (1)$$

$$a_i + b_i h_i + c_i h_i^2 + d_i h_i^3 = y_i \qquad (2)$$

где $h_i = x_i - x_{i-1}$

Продифференцируем дважды сплайн по переменной x:

$$\varphi'(x) = b_i + 2c_i(x - x_{i-1}) + 3d_i(x - x_{i-1})^2$$

$$\varphi''(x) = 2c_i + 6d_i(x - x_{i-1})$$

и из условий непрерывности производных в точке x_i получим следующие соотношения:

$$b_i + 2c_i h_i + 3d_i h_i^2 = b_{i+1} \qquad (3)$$

$$c_i + 3d_i h_i = c_{i+1} \qquad (4)$$

из граничных условий на основании выражения для второй производной получим, что

$$c_1 = 0 \qquad (5)$$

$$c_n + 3d_n h_n = 0 \qquad (6)$$

Полученные соотношения (1 – 6) представляют собой полную систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов a_i , b_i , c_i , d_i

Прежде чем решать эту систему, ее преобразуют так, чтобы неизвестными была только одна группа коэффициентов c_i , $i = 2,\dots n$, т.к. c_i =0.

В результате преобразований получают систему из (n-1) уравнения:

$$h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_i c_{i+1} = 3\left[\frac{(y_i - y_{i-1})}{h_i} - \frac{(y_{i-1} - y_{i-2})}{h_{i-1}}\right], \quad i = 2,..n$$

При условии постоянного шага т.е. $h_i = h_{i\text{-}1} = h$, для всех $i=2,...n$, систему можно упростить:

$$hc_{i-1} + 4hc_i + hc_{i+1} = \frac{3}{h}\left(y_i - 2y_{i-1} + y_{i-2}\right), \qquad i = 2,..n$$

Коэффициенты b_i и d_i вычисляются после нахождения c_i по следующим формулам, с учетом, что c_{n+1}=0.

$$d_i = \frac{c_{i+1} - c_i}{3h_i} \qquad\qquad b_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - \frac{(c_{i+1} + 2c_i)h_i}{3}$$

Пример вычисления коэффициентов c_i

x_i , i=0,…,4	0	1	2	3	4
f_i , i=0,…,4	1	3	1	4	2

$$h = x_i - x_{i-1} = 1, i = 1, \dots, 4$$

$$c_1 = 0$$

$$\begin{pmatrix} 4h & h & 0 \\ h & 4h & h \\ 0 & h & 4h \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{h}\left(y_2 - 2y_1 + y_0\right) \\ \frac{3}{h}\left(y_3 - 2y_2 + y_1\right) \\ \frac{3}{h}\left(y_4 - 2y_3 + y_2\right) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3(1-6+1) \\ 3(4-2+3) \\ 3(2-8+1) \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} 4c_2 \quad + c_3 \quad\quad &= -12 \\ c_2 \quad + 4c_3 \quad + c_4 &= 15 \\ c_3 \quad + 4c_4 &= -15 \end{aligned}$$

$$c_2 = \text{-}4.554$$
$$c_3 = 6.214$$
$$c_4 = \text{-}5.304$$

Численное дифференцирование

Производная функции есть предел отношения приращения функции к приращению аргумента при стремлении к нулю приращения аргумента.

$$\frac{dy(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta y}{\Delta x}, \quad \text{где} \quad \Delta y = y(x + \Delta x) - y(x)$$

При численном нахождении производной отношение бесконечно малых приращений функций и аргумента заменяют отношением конечных разностей. Очевидно, что чем меньше будет приращение аргумента, тем точнее численное значение производной.

Первая производная

Приращение аргумента задается тремя способами, откладывая $\Delta x = h$ вправо, влево и в обе стороны от исследуемой точки. Соответственно получается три двухточечных метода численного дифференцирования:

$$\frac{dy(x)}{dx} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y(x+\Delta x) - y(x)}{\Delta x} \quad \text{или} \quad y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_i}{h},$$

$$\frac{dy(x)}{dx} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y(x) - y(x-\Delta x)}{\Delta x} \quad \text{или} \quad y'(x_i) = \frac{y_i - y_{i-1}}{h},$$

$$\frac{dy(x)}{dx} \approx \frac{\Delta y}{\Delta x} = \frac{y(x+\Delta x) - y(x-\Delta x)}{2\Delta x} \quad \text{или} \quad y'(x_i) = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h}.$$

Вторая производная

Вторая производная вычисляется как первая производная от первой производной. Расчетная формула имеет вид:

$$\frac{d^2y(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left(\frac{dy(x)}{dx}\right) \approx \frac{y'_{i+1} - y'_{i-1}}{2h} = \frac{\frac{y_{i+2} - y_i}{2h} - \frac{y_i - y_{i-2}}{2h}}{2h} = \frac{y_{i+2} - 2y_i + y_{i-2}}{4h^2}$$

где $h = x_{i+1} - x_i$,

или $$\frac{d^2y(x)}{dx^2} \approx \frac{y_{i+2} - 2y_i + y_{i-2}}{\tilde{h}^2},$$

где $\tilde{h} = x_{i+2} - x_i$

Численное интегрирование

Задача формулируется как нахождение значения $\int_a^b f(x)dx$,

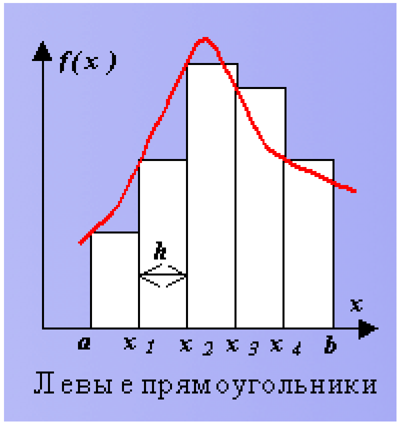
где $f(x)$ некоторая функция, непрерывная на интервале (a,b).

В большинстве существующих методов численного интегрирования для повышения точности исходный интервал (a,b) разбивается на n меньших интервалов $(x_i;\ x_{i+1})$, где $i=0,\ldots n$; $a<x_0<x_1<\ldots<x_n<b$. Интеграл при этом вычисляется как сумма площадей "полосок", получаемых при таком разбиении.

Отличие методов состоит в способе аппроксимации $f(x)$ на отрезке $(x_i;\ x_{i+1})$. В методах **Ньютона-Котеса** для аппроксимации используются полиномы различных степеней. К этой группе относятся методы прямоугольников, трапеций, Симпсона.

Метод прямоугольников

Из геометрических соображений очевидно, что интеграл можно приближенно заменить площадью прямоугольника.



$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1}-x_i)f(x_i)$$

Для равномерного разбиения с шагом $h=x_{i+1}-x_i$ можно записать:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} hf(x_i)$$

В общем случае это можно интерпретировать как замену функции $f(x)$ каждом интервале $(x_i;\ x_{i+1})$ интерполяционным многочленом нулевой степени.

Оценка погрешности

Рассмотрим диапазон интегрирования от x_i до x_i+h, используя разложение $f(x)$ в ряд Тейлора вблизи точки x_i:

$$f(x)\big|_{x=x_i} = f(x_i) + (x-x_i)f'(x_i) + \frac{(x-x_i)^2}{2!}f''(x_i) + \ldots$$

$$\int_{x_i}^{x_i+h} f(x)dx = x\cdot f(x_i)\Big|_{x_i}^{x_i+h} + \frac{(x-x_i)^2}{2}f'(x_i)\Bigg|_{x_i}^{x_i+h} + \frac{(x-x_i)^3}{3\cdot 2!}f''(x_i)\Bigg|_{x_i}^{x_i+h} + \ldots =$$

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

Это означает, что погрешность метода (обозначим её R) можно оценить так:

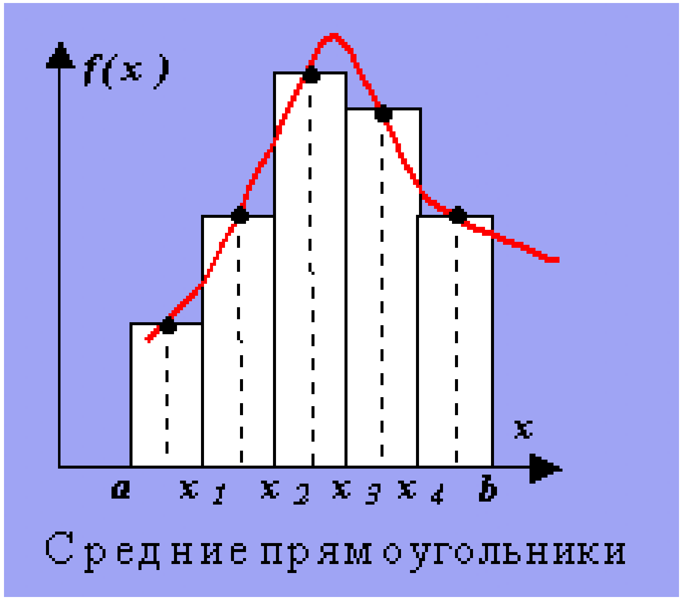
$$R \approx \frac{h^2}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f'(x_i) \approx \frac{h}{2}\int_a^b f'(x)dx \text{ т.е. } R \le \frac{h}{2}M_1(b-a), \text{ где}$$

$$M_1 = \max\left|f'(x)\right|_{(a,b)}$$

Метод средних прямоугольников

Метод прямоугольников можно существенно улучшить, если выбирать для аппроксимации значение $f(x)$ в середине интервала – в точке $(x_i+x_{i+1})/2$, в результате чего расчетная формула примет вид:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} hf\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}\right)$$



Посмотрим на второй член разложения $f(x)$ в ряд Тейлора вблизи точки $\bar{x} = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} = x_i + \frac{h}{2}$ при вычислении интеграла:

$$\int_{x_i}^{x_i+h} (x-\bar{x}) f'(\bar{x}) dx = \frac{(x-\bar{x})^2}{2} f'(\bar{x}) \Bigg|_{x_i}^{x_i+h} = f'(\bar{x}) \left(\frac{(x_i + h - \bar{x})^2}{2} - \frac{(x_i - \bar{x})^2}{2} \right) =$$

$$= f'(\bar{x}) \left(\frac{\left(x_i + h - x_i - \frac{h}{2} \right)^2}{2} - \frac{\left(x_i - x_i - \frac{h}{2} \right)^2}{2} \right) = 0$$

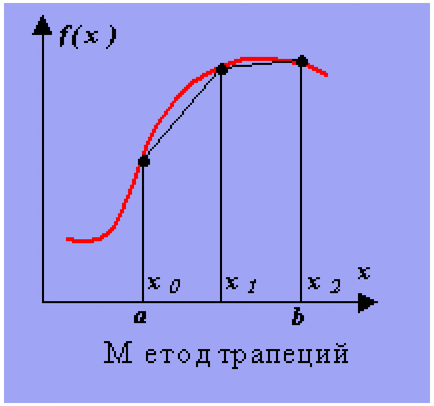
Так как второй член разложения сократился, оценка погрешности изменилась в лучшую строну:

$$R \approx \frac{h^3}{24} \sum_{i=0}^{n-1} f''\left(\frac{x_i + x_{i+1}}{2} \right) \approx \frac{h^2}{24} \int_a^b f''(x) dx$$

$$R \le \frac{h^2}{24} M_2 (b-a), \quad \text{где} \quad M_2 = \max \left| f''(x) \right|_{(a,b)}$$

Метод трапеций

Аппроксимация в этом методе осуществляется полиномом первой степени. Значение интеграла на каждом интервале (x_i; x_{i+1}) вычисляется как площадь прямоугольной трапеции с основаниями равными значениям функции и высотой равной величине шага:



$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left(f(x_i) + f(x_{i+1})\right)$$

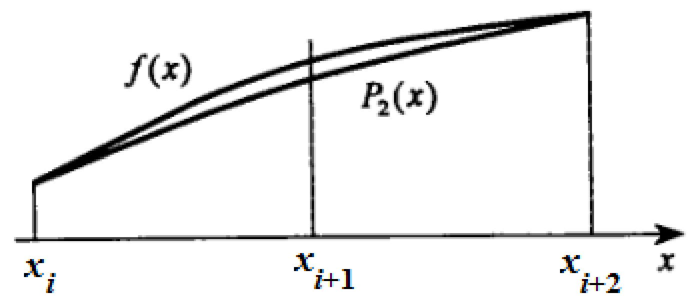
Таким образом $\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n)\right)$

Погрешность метода трапеций в два раза выше, чем у метода средних прямоугольников:

$$R \approx -\frac{h^2}{12}\int_a^b f''(x)dx$$

Метод Симпсона.

Подынтегральная функция $f(x)$ заменяется интерполяционным полиномом второй степени $P_2(x)$ – параболой, проходящей через три точки x_i, x_{i+1}, x_{i+2}.



Запишем выражение для $P_2(x)$, воспользовавшись формой Ньютона:

$$P_2(x) = f(x_i) + \frac{x - x_i}{h}\left(f(x_{i+1}) - f(x_i)\right) + \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{2h^2}\left(f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right)$$

Обозначим $z = x - x_i$ тогда

$$P_2(z) = f(x_i) + \frac{z}{h}\left(f(x_{i+1}) - f(x_i)\right) + \frac{z(z-h)}{2h^2}\left(f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right) =$$

$$= f(x_i) + \frac{z}{2h}\left(-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})\right) + \frac{z^2}{2h^2}\left(f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right)$$

Рассчитаем интеграл по данному интервалу:

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} P_2(x)dx = \int_0^{2h} P_2(z)dz =$$

$$= 2hf(x_i) + \frac{(2h)^2}{4h}\left(-3f(x_i) + 4f(x_{i+1}) - f(x_{i+2})\right) + \frac{(2h)^3}{6h^2}\left(f(x_i) - 2f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right) =$$

$$= \frac{h}{3}\left(6f(x_i) - 9f(x_i) + 12f(x_{i+1}) - 3f(x_{i+2}) + 4f(x_i) - 8f(x_{i+1}) + 4f(x_{i+2})\right) =$$

$$= \frac{h}{3}\left(f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\right)$$

С учетом выражения для одного интервала, общая формула примет вид:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + ... + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right)$$

Метод Симпсона имеет четвертый порядок точности относительно шага:

$$R \approx -\frac{h^4}{180}\int_a^b f^{IV}(x)dx$$

Методы более высоких порядков

При аппроксимации подынтегральной кривой многочленом k-й степени требуется как минимум (k+1) точка, а формула для вычисления значения интеграла при минимально возможном n будет иметь следующий вид:

$$\int_{x_0}^{x_k} f(x)dx \approx c_0 h \sum_{i=0}^{k} \omega_i f(x_i)$$

Коэффициенты методов **Ньютона-Котеса:**

k	c_0	ω_0	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	ω_5
1	1/2	1	1	-	-	-	-
2	1/3	1	4	1	-	-	-
3	3/8	1	3	3	1	-	-
4	2/45	7	32	12	32	7	-
5	5/288	19	75	50	50	75	19

При уменьшении шага следует учитывать, что n должно быть кратно k.

Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений

Сформулируем задачу Коши: найти решение дифференциального уравнения $\dfrac{dy}{dx} = f(x, y)$ с начальными условиями (x_0,y_0), т.е. известно значение $y(x_0)=y_{0.}$

При использовании численных методов значения непрерывной функции $y(x)$, являющейся решением уравнения, вычисляются на конечном дискретном множестве значений аргумента: $x_0<x_1<\ldots<x_{N.}$

Методы, которые сводят решение к набору рекуррентных соотношений, позволяющих по предыдущим уже вычисленным значениям $y(x)$ найти следующие называют **ЯВНЫМИ** .

НЕЯВНЫМИ называют методы, в которых для определения значения y_{n+1} требуется решить в общем случае нелинейное, зависящее от вида функции $f(x,y)$ уравнение относительно $y_{n+1.}$

ОДНОШАГОВЫМИ называют методы, в которых для вычисления y_{n+1} требуется знать только одно предыдущее значение – $y_{n.}$

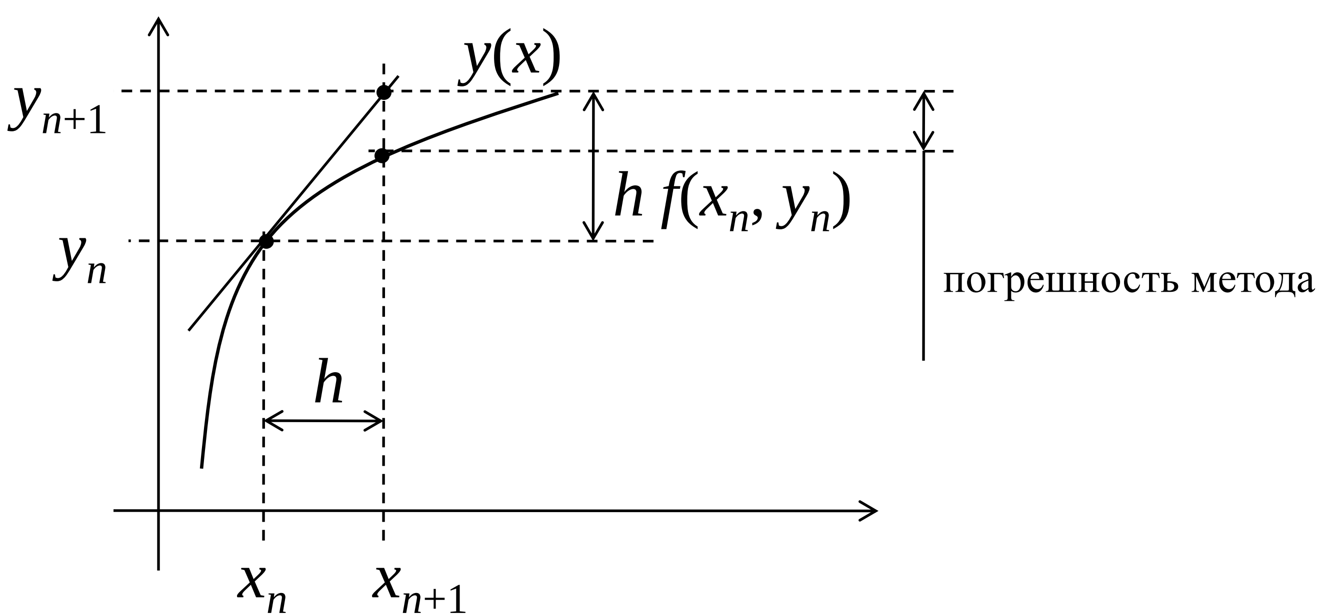
Если для вычисления y_{n+1} требуется знать несколько предыдущих значений y_n, $y_{n\text{-}1},\ldots,$ $y_{n\text{-}m}$, то такие методы называют **МНОГОШАГОВЫМИ**.

Метод Эйлера

Это наиболее простой метод, полученное с помощью него решение в точке x_{n+1} совпадает с разложением $y(x)$ в окрестности этой точки в ряд Тейлора до членов порядка h, где $h = x_{n+1} - x_n$.

Расчетная формула выглядит так: $y_{n+1} = y_n + h\, f(x_n, y_n)$.

Суть метода можно пояснить графически:



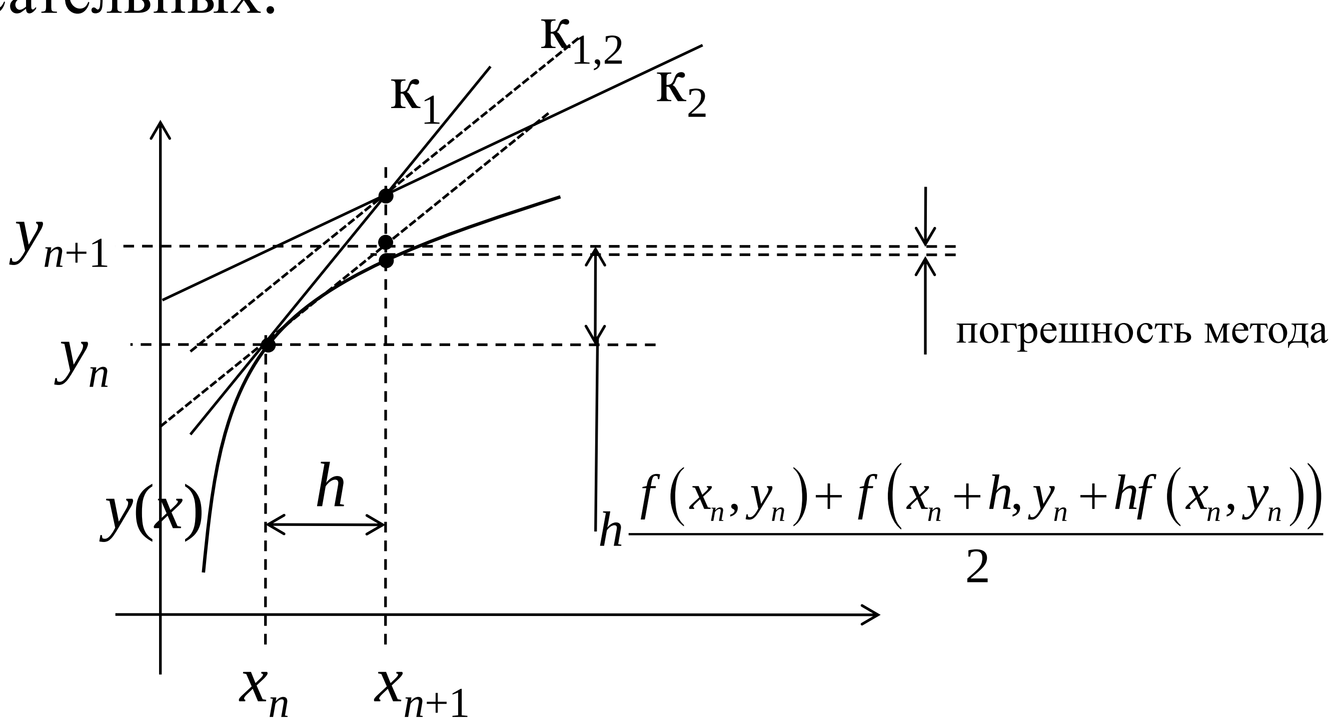
Исправленный метод Эйлера

Это модификация метода Эйлера, увеличивающая порядок точности метода относительно шага до второго.

Расчетная формула выглядит так:

$$y_{n+1} = y_m + h\frac{f(x_n, y_n) + f(x_n + h, y_n + hf(x_n, y_n))}{2}$$

Графически это можно показать как усреднение угла наклона касательных:



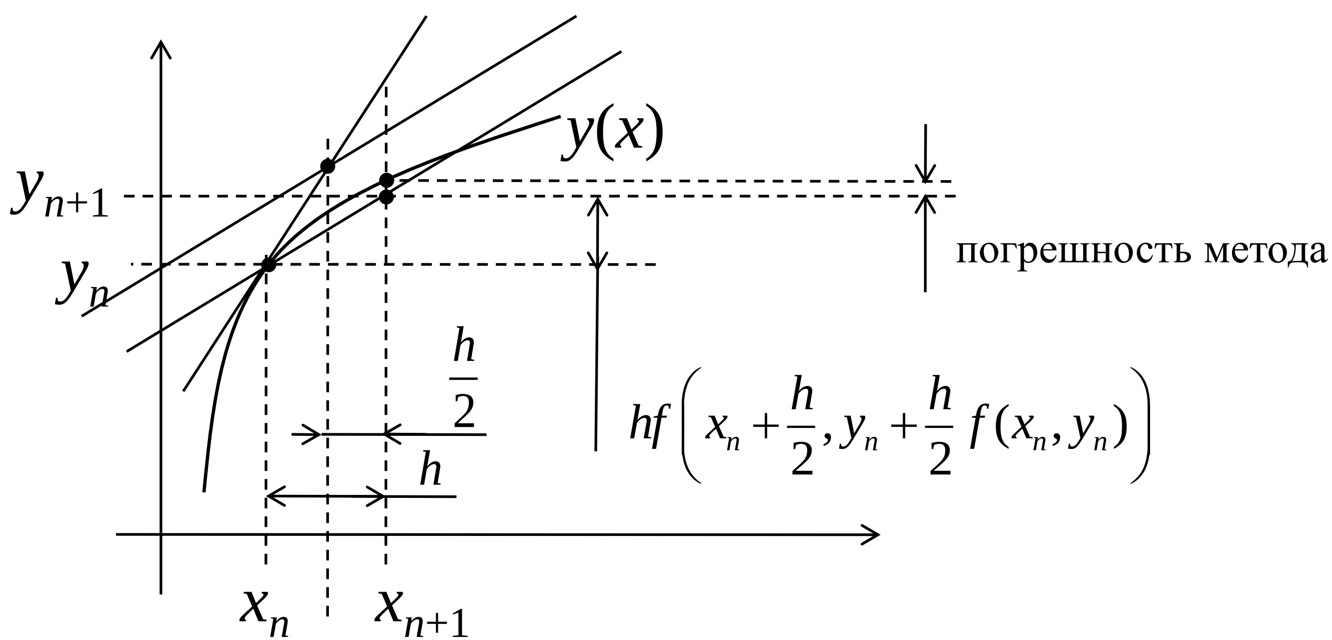
Модифицированный метод Эйлера

Это другая модификация метода Эйлера, также увеличивающая порядок точности метода относительно шага до второго.

Расчетная формула выглядит так:

$$y_{n+1} = y_n + hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)\right)$$

Графически это можно показать как вычисление угла наклона касательной в точке $x_n + \frac{h}{2}$:



Метод Рунге-Кутты четвертого порядка

Перечисленные методы являются частными случаями методов Рунге-Кутты различного порядка точности, это одношаговые явные методы. Наиболее часто на практике применяется метод четвертого порядка.

Его расчетная формула выглядит так:

$$k_1 = f(x_n, y_n),$$

$$k_2 = f(x_n + h/2, y_n + hk_1/2),$$

$$k_3 = f(x_n + h/2, y_n + hk_2/2),$$

$$k_4 = f(x_n + h, y_n + hk_3).$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4).$$

Метод Рунге–Кутты Мерсона

В этой модификации метода присутствует механизм автоматического изменения шага сетки, основанный на контроле точности вычислений.

Алгоритм метода можно записать так:

Шаг 1. Вычисляются k_i:

$$k_1 = hf(x_n, y_n)$$

$$k_2 = hf(x_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{3}k_1)$$

$$k_3 = hf(x_n + \frac{1}{3}h, y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{6}k_2)$$

$$k_4 = hf(x_n + \frac{1}{2}h, y_n + \frac{1}{8}k_1 + \frac{3}{8}k_3)$$

$$k_5 = hf(x_n + h, y_n + \frac{1}{2}k_1 - \frac{3}{2}k_3 + 2k_4)$$

Шаг 2. Находится оценка локальной ошибки

$$\delta_{n,4} = \frac{1}{30}(2k_1 - 9k_3 + 8k_4 - k_5)$$

Шаг 3. Если выполняется неравенство $\left|\delta_{n,4}\right| \geq \varepsilon$,

где ε заданная точность

то шаг уменьшается в 2 раза и управление передается на шаг 1.

Шаг 4. Вычисляется решение $y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}k_1 + \frac{2}{3}k_4 + \frac{1}{6}k_5$

Шаг 5. Если выполняется неравенство $\left|\delta_{n,4}\right| \leq \frac{\varepsilon}{32}$,

то шаг увеличивается в 2 раза.

Шаг 6. Выполняется переход к следующей точке.

Многошаговый метод Адамса

Пусть нам известно приближенное решение в четырех первых точках x_0, x_1, x_2, x_3. Тогда в этих точках $f(x,y)$ можно рассматривать как функцию одного аргумента – x: $f(x,y)=F(x)$.

Заменим $F(x)$ интерполяционным многочленом и вычислим y_{n+1} проинтегрировав его на отрезке $(x_n;x_{n+1})$, для постоянного шага h получим:

$$y_{n+1} = y_n + \int\limits_{x_n}^{x_{n+1}} F(x)dx = \frac{h}{24}\left(55F_n - 59F_{n-1} + 37F_{n-2} - 9F_{n-3}\right)$$

После получения y_{n+1} вычислим $F_{n+1}= f(x_{n+1},y_{n+1})$ и перейдем к следующей точке (n+2).

Для вычисления первых приближений можно воспользоваться одним из одношаговых методов.

Методы Адамса различных порядков

Ниже представлены формулы для методов Адамса от второго до пятого порядков. Метод *k*-го порядка требует предварительного вычисления решения в *k* точках.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}\left(3F_n - F_{n-1}\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}\left(23F_n - 16F_{n-1} + 5F_{n-2}\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{24}\left(55F_n - 59F_{n-1} + 37F_{n-2} - 9F_{n-3}\right)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{720}\left(1901F_n - 2774F_{n-1} + 2616F_{n-2} - 1274F_{n-3} + 251F_{n-4}\right)$$