Численное интегрирование функций.

Пусть функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a,b]$ и известна её первообразная $F(x)$, тогда определённый интеграл от этой функции в пределах от a до b может быть вычислен по формуле Ньютона-Лейбница

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a) \qquad (1)$$

где $F'(x) = f(x)$

Если подынтегральная функция

1. задана таблично

   или

2. вычисление первообразной является трудно выполнимой (или не выполнимой задачей),

то вычисление осуществляется численными методами.

Численное вычисление однократного интеграла называется *механической квадратурой,* двойного – *механической кубатурой*. Соответствующие формулы называются *квадратурными* и *кубатурными* формулами.

Основным инструментом численного интегрирования является представление подынтегральной функции интерполирующим полиномом. Такая аппроксимация позволяет приближённо заменить определённый интеграл конечной суммой

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} a_i y_i \qquad (2)$$

где y_i - значения функции в узлах интерполяции, a_i - числовые коэффициенты. Это выражение называется квадратурной формулой, а правая часть – квадратурной суммой. В зависимости от способа вычисления этой суммы получаются различные численные методы - методы прямоугольников, трапеций, парабол, сплайнов и др.

Квадратурную сумму можно вычислить как

$$\sum_{i=0}^{n} a_i y_i = \sum_{i=1}^{n} \sigma_i \qquad (3)$$

где $\sigma_i = f(\xi_i)\Delta x_i$ - приближённое значение площади элементарной криволинейной трапеции, соответствующей элементарному отрезку $[x_{i-1}, x_i]$.

В качестве точек ξ_i можно выбрать левые точки $\xi_i = x_{i-1}$ или правые точки $\xi_i = x_i$ элементарного интервала $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$. Обозначая $y_i = f(x_i)$ и $\Delta x_i = h_i$ получаем формулы метода прямоугольников для левых и правых сумм

$$\int_a^b f(x)dx \approx h_1 y_0 + h_2 y_1 + ... + h_n y_{n-1} \qquad (4)$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx h_1 y_1 + h_2 y_2 + ... + h_n y_n \qquad (5)$$

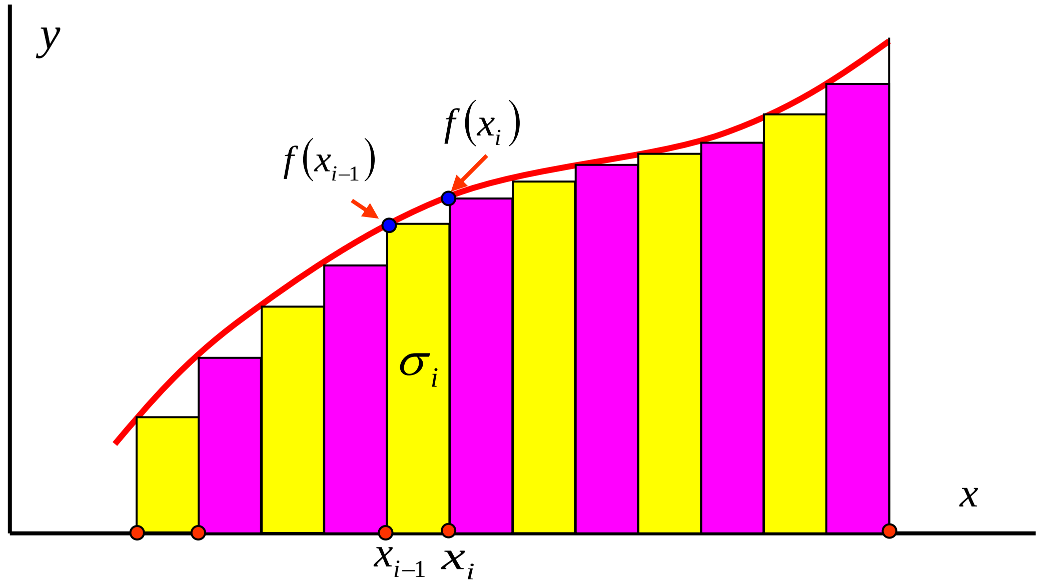


Рис.1. Левые суммы.

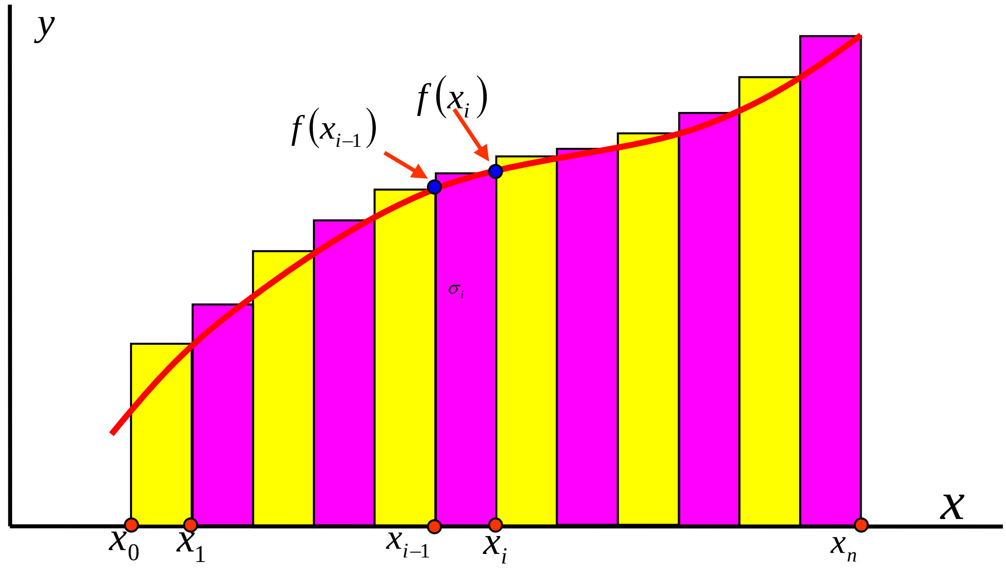


Рис.2. Правые суммы.

Более точным приближение метода прямоугольников является приближение с использованием средних значений функции в элементарных прямоугольниках (в полуцелых узлах).

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1/2})h_i \qquad (6)$$

$$x_{i-1/2} = (x_{i-1} + x_i)/2 = x_{i-1} + h_i/2 \qquad i = 1,2,\ldots n$$

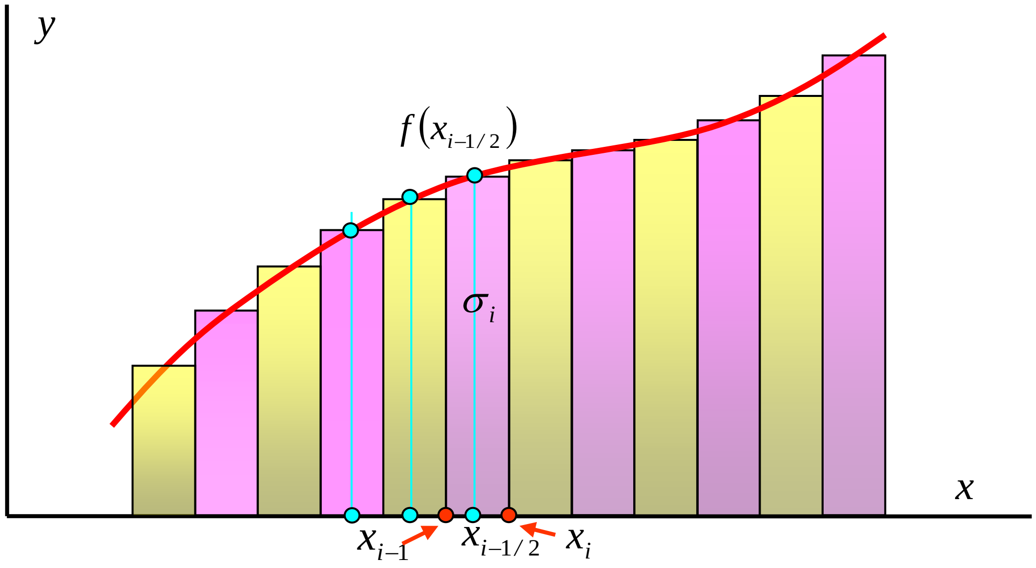


Рис.2. Центральные суммы.

Следующим методом, использующим линейную интерполяцию, является метод трапеций. График функции $f(x)$ представляется в виде ломанной линии, соединяющей точки (x_i, y_i). Площадь всей фигуры приближённо складывается их суммы площадей прямолинейных трапеций (Рис.3). Площадь каждой трапеции определяется как

$$\sigma_i = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} h_i \qquad i = 1,2,\ldots,n \quad (7)$$

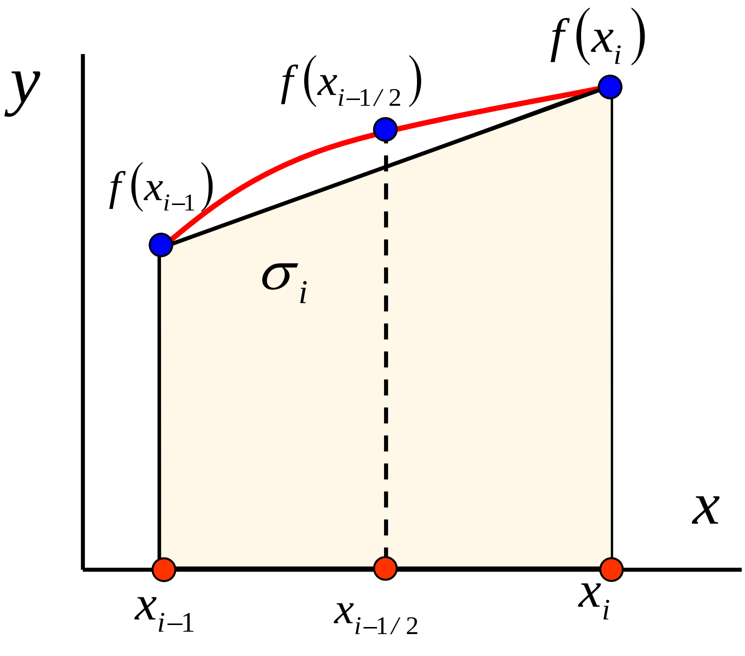


Рис.3. Метод трапеций. Фрагмент – малый интервал.

Таким образом, полная площадь под ломанной кривой (т.е. приближённое значение интеграла запишется как)

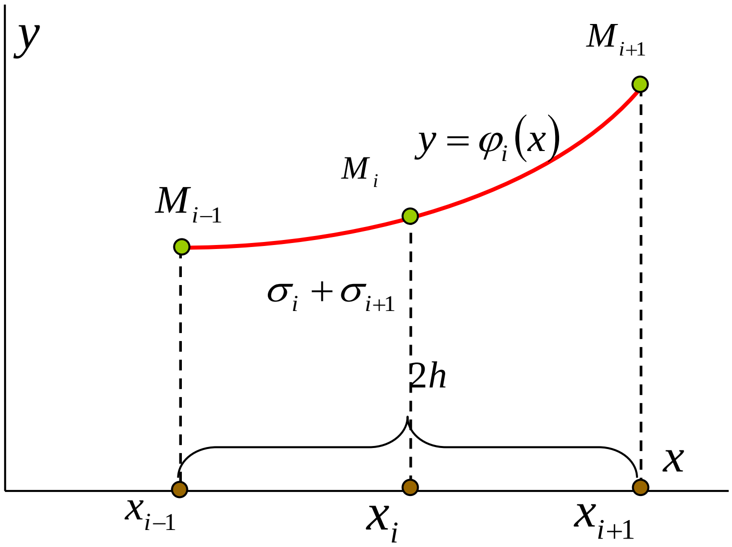
$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_{i-1} + y_i)h_i \quad (8)$$

Для таблицы с равноотстоящими узлами $h_i = h = const \quad (i = 1,2,\ldots,n)$

формулы прямоугольников и трапеций принимают соответственно вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1/2})$$
$$\int f(x)dx \approx h\left(\sum \frac{y_0+y_n}{2}+\sum_{i=1}^{n-1} y_i\right) \qquad (9)$$

Повышение точности вычислений достигается за счёт повышения степени интерполяционных многочленов – квадратичной интерполяции (метод Симпсона) и интерполирование с помощью сплайнов.



Рис

Метод Симпсона.

Пусть функция $f(x)$ определена на интервале $[a,b]$, который разобьём на чётное число n равных частей с шагом h. На каждом отрезке $[x_0,x_2],[x_2,x_4],\ldots,[x_{i-1},x_{i+1}],\ldots[x_{n-1},x_n]$ подынтегральную функцию заменим многочленом второй степени

$$f(x) \approx \varphi_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i \quad \text{при} \quad x_{i-1} \le x \le x_{i+1} \qquad (10)$$

Коэффициенты a_i, b_i, c_i можно вычислить из условия прохождения многочлена через узлы табличной функции.

Рассмотрим интерполяционный многочлен второй степени Лагранжа, проходящий через точки $M_{i-1}(x_{i-1},y_{i-1}), M_i(x_i,y_i), M_{i+1}(x_{i+1},y_{i+1})$

$$\varphi_i(x) = \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} y_{i-1} + \\ + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_i)(x_i-x_{i+1})} y_i + \qquad (11) \\ + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} y_{i+1}$$

Учитывая равенства $x_{i+1}-x_i = x_i - x_{i=1} = h$ можно записать сумму площадей σ_i и σ_{i+1} как определенный интеграл

$$\sigma_i + \sigma_{i+1} = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \varphi_i(x) =$$

$$= \frac{1}{2h^2} \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \left[(x - x_i)(x - x_{i+1}) y_{i-1} - 2(x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) y_i + (x - x_{i-1})(x - x_i) y_{i+1}\right] dx = \qquad (12)$$

$$= \frac{h}{3}(y_{i-1} + 4y_i + y_{i+1})$$

Проводя вычисления на всех отрезках $[x_0, x_2],[x_2, x_4],\dots,[x_{i-1}, x_{i+1}],\dots[x_{n-1}, x_n]$, получаем формулу Симпсона

$$\int_a^b f(x) \approx \frac{h}{3}\left[y_0 + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2}) + y_n\right] \qquad (13)$$

Использование сплайнов.

Метод особенно эффективен при строго ограниченном числе узлов. Это связано с необходимостью решать СЛАУ для определения коэффициентов сплайна. При относительно небольшом числе узлов коэффициенты находятся достаточно просто.

Разобьём интервал интегрирования $[a, b]$ на n частей точками x_i с шагом $\Delta x_i = h_i$. На каждом элементарном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ подынтегральную функцию $f(x)$ запишем с помощью кубического сплайна

$$\begin{aligned} &\varphi_i(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3 \\ &x_{i-1} \le x \le x_i \qquad\qquad i = 1,2,\dots n \end{aligned} \qquad (14)$$

Выражение интеграла можно представить в виде

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \varphi(x)dx \qquad (15)$$

Используя выражение $\varphi_i(x)$, интеграл можно записать как

$$I \approx \sum_{i=1}^{n}\left(a_i h_i + \frac{1}{2} b_i h_i^2 + c_i h_i^3 + d_i h_i^4\right) \qquad (16)$$

Из раздела о сплайнах можно использовать выражение коэффициентов a_i, b_i, d_i и тогда

$$I \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_{i-1} + y_i)h_i - \frac{1}{12}\sum_{i=1}^{n}(c_i + c_{i+1})h_i^3 \qquad (17)$$

В отличие от других методов, в которых формулы численного интегрирования можно записать в виде линейных комбинаций табличных значений функции (т.е. в виде квадратурной формулы с постоянными коэффициентами a_i) , при использовании сплайнов такое невозможно, т.к. a_i в этом случае зависят от всех значений y_i.

М.Б. Гаусс ?????

Погрешность численного интегрирования

При вычислении приближённого значения интеграла (2) допускается погрешность

$$R = \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^{n} a_i y_i \qquad (18)$$

Она зависит от величины шага h и её можно записать, как $R = \mathrm{O}(h^r)$. В случае переменного шага можно принять $h = max\, h_i$, $h_i = \Delta x_i$. Показатель степени r называется порядком точности данной квадратурной формулы. Квадратурная формула должна быть такой, чтобы на любом отрезке интегрирования $[a,b]$ функции $f(x)$ при $h \to 0$ или $n \to \infty$ численное значение интеграла сходилось к его точному значению. Это означает, что $r > 0$, т.к. малое значение h в положительной степени стремится к нулю.

Погрешность интегрирования R на отрезке $[a,b]$ можно представить как сумму погрешностей r_i, допускаемых на каждом отдельном участке $[x_{i-1}, x_i]$.

$$R = \sum_{i=1}^{n} r_i, \quad r_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx - \sigma_i \qquad (19)$$

Функцию $y = f(x)$ разложим в ряд Тейлора на отрезке $[x_{i-1}, x_i]$

$$f(x) = y_{i-1/2} + y'_{i-1/2}(x - x_{i-1/2}) + \frac{1}{2!} y''_{i-1/2}(x - x_{i-1/2})^2 + \frac{1}{3!} y'''_{i-1/2}(x - x_{i-1/2})^3 + O(h_i^4) \quad (20)$$

Это разложение можно оборвать на любом k-ом члене заменив в нём производную $y^{(k)}_{i-1/2}(x)$ на $y^{(k)}(x_*)$, где x_* - некоторая точка отрезка $[x_{i-1}, x_i]$.

Рассмотрим уравнение (20) с первыми тремя членами

$$f(x) = y_{i-1/2} + y'_{i-1/2}(x - x_{i-1/2}) + \frac{1}{2!} y''(x_*)(x - x_{i-1/2})^2$$

Проинтегрировав обе части равенства (20), получим

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = y_{i-1/2}\, x\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} + \frac{1}{2} y'_{i-1/2}(x - x_{i-1/2})^2\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} +$$

$$+ \frac{1}{6} y''_{i-1/2}(x - x_{i-1/2})^3\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} + \frac{1}{24} y'''_{i-1/2}(x - x_{i-1/2})^4\Big|_{x_{i-1}}^{x_i} + O(h_i^5) = \qquad (21)$$

$$= y_{i-1/2} h_i + \frac{h_i^3}{24} y''_{i-1/2} + O(h_i^5)$$

<u>Метод прямоугольников.</u>

Первый член в выражении (21) - $y_{i-1/2} h_i = \sigma_i$, отсюда следует

$$r_i = \frac{h_i^3}{24} y''_{i-1/2} + O(h_i^5) = \frac{h_i^3}{24} f''(x_*) \qquad (22)$$

<u>Метод трапеций</u>

Для метода трапеций $(y_{i-1} + y_i) h_i / 2 = \sigma_i$.

Из уравнения (20) можно выразить y_{i-1} и y_i, заменив $f(x)$ в левой части на $f(x_{i-1}) = y_{i-1}$ и $f(x_i) = y_i$ и положив $x = x_{i-1}$ и $x = x_i$ соответственно.

$$y_{i-1} = y_{i-1/2} + y'_{i-1/2}\left(-\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2!} y''_{i-1/2}\left(-\frac{h}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} y'''_{i-1/2}\left(-\frac{h}{2}\right)^3 + O(h_i^4) \qquad (23)$$

$$y_i = y_{i-1/2} + y'_{i-1/2}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{2!} y''_{i-1/2}\left(\frac{h}{2}\right)^2 + \frac{1}{3!} y'''_{i-1/2}\left(\frac{h}{2}\right)^3 + O(h_i^4) \qquad (24)$$

Сложив выражения (23) и (24) и умножив на $h/2$ получим

$$\sigma_i = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} h_i = y_{i-1/2} h_i + y''_{i-1/2}\left(\frac{h}{2}\right)^3 + O(h_i^5) \qquad (25)$$

Отсюда выразим $y_{i-1/2} h_i$

$$y_{i-1/2} h_i = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} h_i - y''_{i-1/2}\left(\frac{h}{2}\right)^3 + O(h_i^5) \qquad (26)$$

Подставив (26) в (21) получим

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} h_i - \frac{h^3}{12} y''_{i-1/2} + \mathrm{O}(h_i^5) \qquad (27)$$

Следовательно, погрешность составит

$$r_i = -y''_{i-1/2} \frac{h}{12}^3 + \mathrm{O}(h_i^5) = -\frac{h^3}{12} f''(x_*) \qquad (28)$$