Вычислительные методы

Лекция 5:
Численное интегрирование

Сивцева Вера Исаевна

СВФУ
СЕВЕРО-ВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.К. АММОСОВА

Постановка задачи

Для заданной функции $f(x)$ вычислить значение определенного интеграла

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

Желательно, чтобы метод численного интегрирования обладал следующими свойствами:

- *Универсальность.* Функция $f(x)$ может быть задана в виде «черного ящика», как способ вычисления $f(x)$ по данному x.

- *Экономичность.* Количество вычислений функции $f(x)$ по возможности должно быть сведено к минимуму.

- *Хорошая обусловленность.* Неустранимые погрешности Δf в значениях $f(x)$ не должны приводить к значительной итоговой ошибке ΔI.

Приложения

Численное интегрирование может применяться для

- интегрирования функций, известных только в некоторых точках, например, полученных в результате измерений;
- интегрирования сложных выражений, не имеющих элементарных первообразных, либо имеющих слишком громоздкие выражения для них;
- построения методов численного решения уравнений в обыкновенных и частных производных (методы конечных элементов, интегро-интерполяционные методы).

Сеточные функции

Методы, основанные на определении интеграла

Вспомним, как определяется определенный интеграл Римана.

Рассмотрим на отрезке интегрирования $[a, b]$ сетку $a = x_0, x_1, \ldots, x_N = b$.

Возьмем от каждого отрезка по одной точке-представителю $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$ и составим интегральную сумму

$$S_N = \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i$$

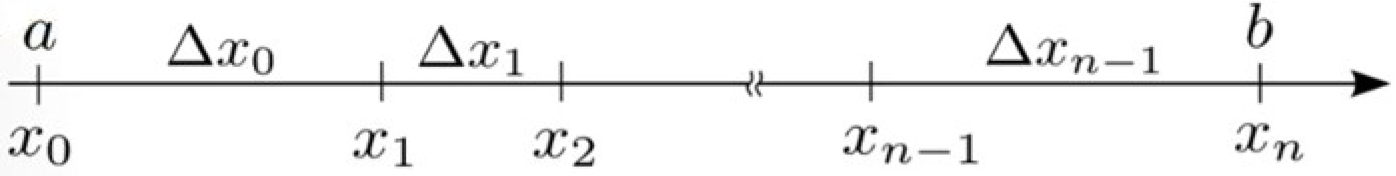
Суммы Римана

Методы, основанные на определении интеграла

Значение интеграла определяется как предел при $\max \Delta x_i \to 0$

значений интегральных сумм

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{max\Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i$$



Формула прямоугольников

Возьмем в качестве приближенного значения интеграла значение некоторой интегральной суммы:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i$$

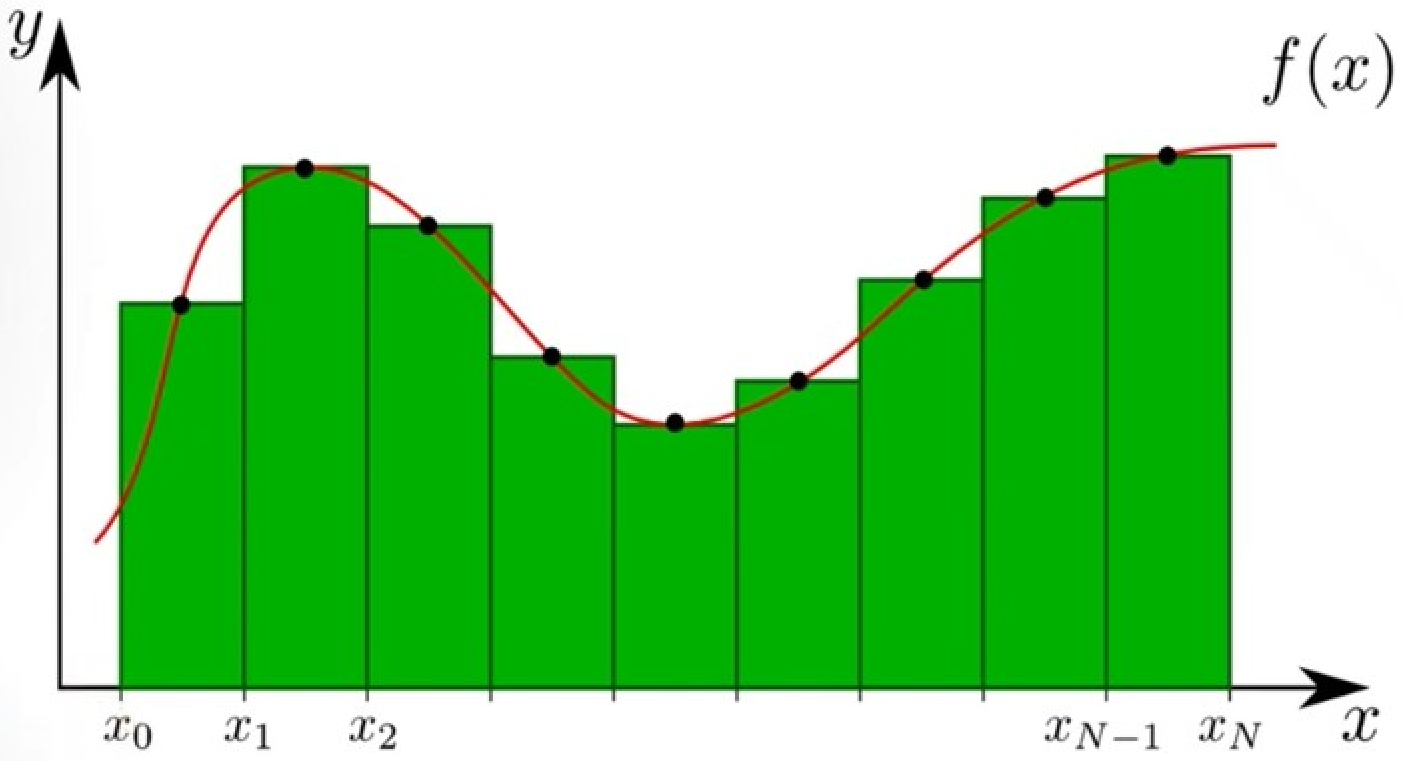
Возьмем в качестве ξ_i середину отрезка $[x_{i-1}, x_i]$:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} f(\frac{x_{i-1} + x_i}{2})\Delta x_i$$

Методы численного интегрирования называют **квадратурными формулами** или просто **квадратурами**.

Данный метод называется формулой **средней точки** или формулой средних **прямоугольников**.

Формула средних прямоугольников



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

Формулы односторонних прямоугольников

Выбор в качестве ξ_i средней точки интервала не принципиален, можно взять, например, левый или правый конец интервала.

Соответствующие формулы называются формулами **левых** *и* **правых прямоугольников**.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_{i-1})\Delta x$$

Формулы односторонних прямоугольников

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\Delta x$$

Составные квадратурные формулы

Построенные формулы прямоугольников являются **составными** квадратурными формулами.

Квадратурная формула называется составной, если является результатом применения некоторой **элементарной** квадратурной формулы к каждому интервалу $[x_{i-1}, x_i]$.

Элементарная квадратура

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

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1})$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx (x_i - x_{i-1}) f(x_i)$$

Составные квадратурные формулы

Составная квадратура

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

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

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\Delta x_i$$

Будем дальше строить только **элементарные** квадратурные формулы, составные получаются из них тривиально.

Приближение подынтегральной функции

Пусть подынтегральная функция $f(x)$ хорошо приближается некоторой просто интегрируемой функцией $P(x)$. Тогда

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

В качестве функции $P(x)$ могут выступать

- многочлены;
- тригонометрические многочлены;
- экспоненциальные многочлены и тому подобные.

Остановимся на случае, когда $P(x)$ - многочлен. Тогда задача приближения $f(x)$ с помощью функции $P(x)$ может быть решена, например, с помощью алгебраической интерполяции.

Интерполяционные квадратурные формулы

Введем на отрезке $[a, b]$ некоторую сетку

$$\Omega_s = \{a \le x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_s \le \mathrm{b}\}$$

Построим на этой сетке интерполяционный многочлен в форме Лагранжа:

$$L_s(x) = \sum_{k=0}^{s} \varphi_k(x) f(x_k)$$

где $\varphi_k(x)$ - это базисные интерполяционные многочлены Лагранжа

$$\varphi_k(x) = \prod_{i \ne k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}$$

Интерполяционные квадратурные формулы

Интегрируя $L_s(x)$ по отрезку $[a, b]$, имеем:

$$\int_a^b L_s(x)dx = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k)$$

$$w_k \equiv \frac{1}{b-a}\int_a^b \varphi_k(x)dx$$

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b L_s(x)dx = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k)$$

$$w_k \equiv \frac{1}{b-a}\int_a^b \varphi_k(x)dx$$

Интерполяционные квадратурные формулы

Утверждение

Величины w_k не зависят от конкретных значений a, b, x_i, а зависят лишь от относительного расположения узлов x_i.

Доказательство

Сделаем замену переменных

$$x = \frac{a+b}{2} + \xi\frac{b-a}{2} \qquad \xi \epsilon [-1, 1]:$$

$$w_k = \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{i\neq k} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} dx = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \prod_{i\neq k} \frac{\xi - \xi_i}{\xi_k - \xi_i} d\xi$$

Интерполяционные квадратурные формулы

Вид квадратурной формулы

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k)$$

является универсальным, и мог быть написан из общих соображений линейности квадратурной формулы по значениям подынтегральной функции (по аналогии с линейностью самого интеграла).

Величины w_k называются **весами квадратурной формулы**. Веса не зависят от конкретного отрезка интегрирования, и могут быть вычислены на некотором «стандартном» отрезке. Обычно используют отрезок $[0, 1]$ или $[-1, 1]$.

Интерполяционные квадратурные формулы

Соответственно x_k называются **узлами квадратурной формулы**.

Они также обычно приводятся для стандартного отрезка, а для конкретного отрезка $[a, b]$ они получаются линейным преобразованием.

$$x = \frac{a+b}{2} + \xi \frac{b-a}{2} \qquad \xi \epsilon [-1, 1]:$$

Формулы Ньютона-Котеса

Изучим случай, когда Ω - равномерная сетка:

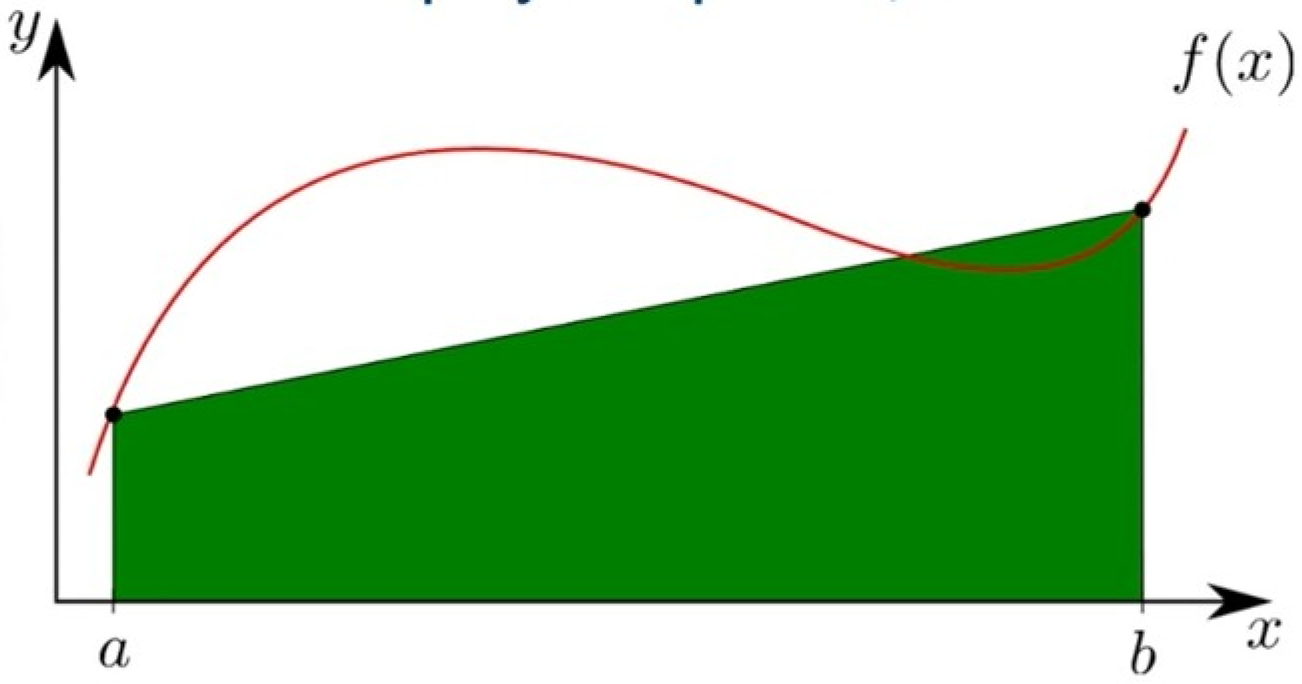
$$x_i = a + \frac{b-a}{s} i, \qquad i = 0, \dots, s$$

Интерполяционные квадратурные формулы на такой сетке называются формулами **Ньютона-Котеса**.

Некоторые из них имеют свои названия.

Название	Узлы	Веса	Вид
Трапеций	a, b	$1/2$	$(b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$
Симпсона	a, b $\frac{a+b}{2}$	$1/6$ $2/3$	$(b-a)\frac{f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)}{6}$
Правило 3/8	a, b $\frac{2a+b}{3}, \frac{a+2b}{3}$	$1/8$ $3/8$	$\frac{f(a)+3f(\frac{2a+b}{3})+3f(\frac{a+2b}{3})+f(b)}{8/(b-a)}$

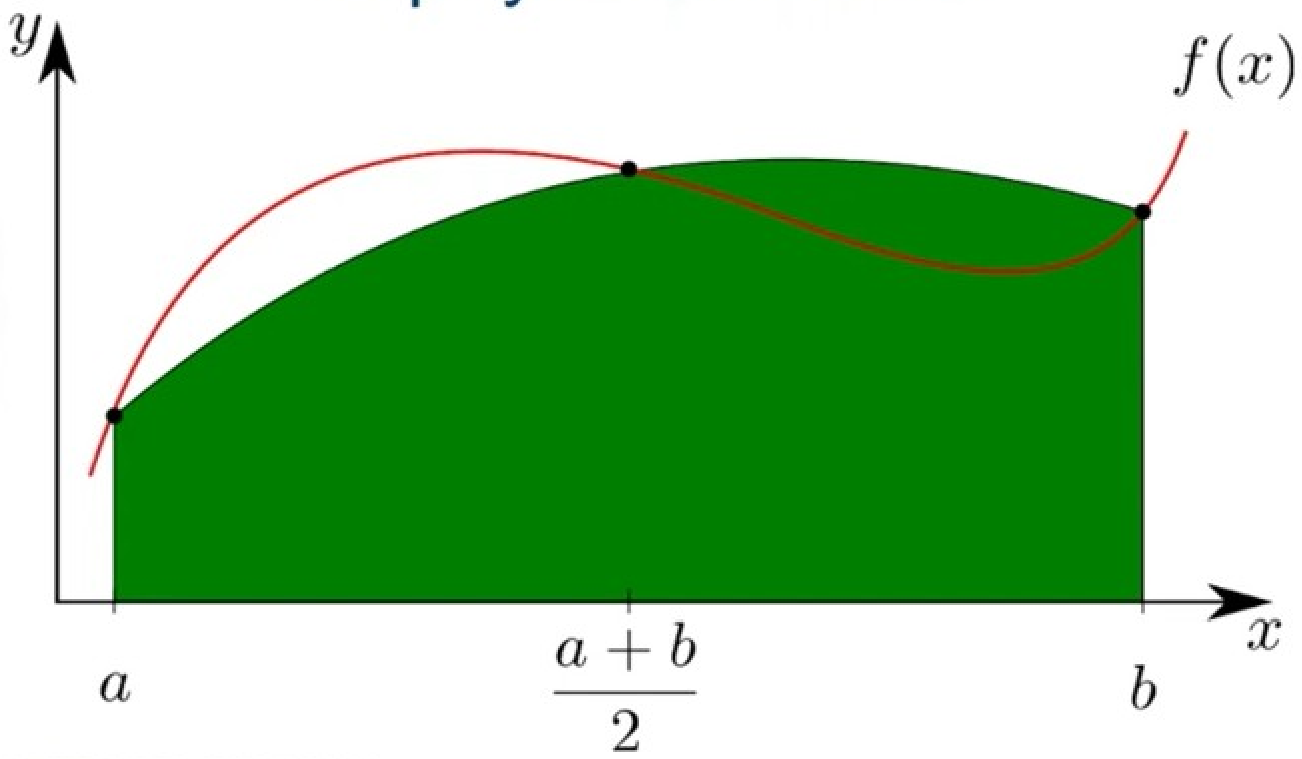
Формула трапеций



Для одного отрезка: $$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$$

Составная формула: $$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}\Delta x_i$$

Формула Симпсона



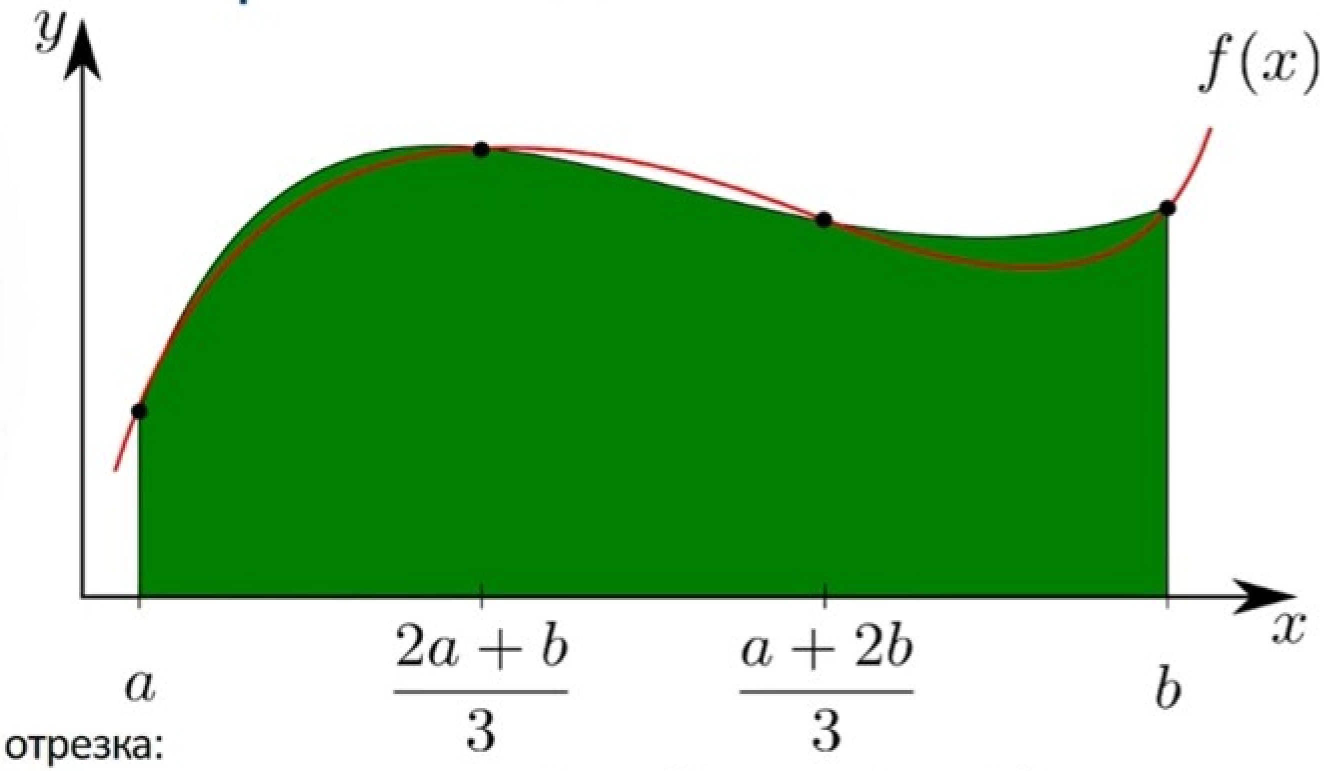
Для одного отрезка:

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6}$$

Составная формула:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1})+4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)+f(x_i)}{6}\Delta x_i$$

Правило 3/8



Для одного отрезка:

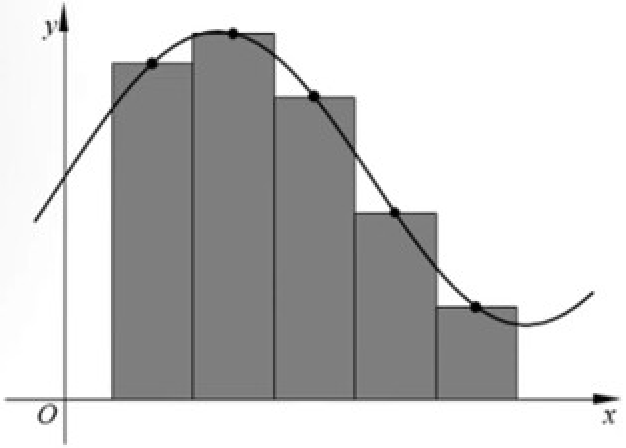
$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{f(a) + 3f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + 3f\left(\frac{a+2b}{3}\right) + f(b)}{8}$$

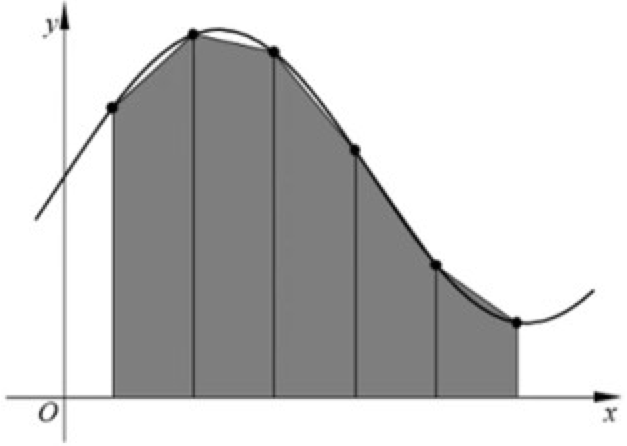
Составная формула:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1}) + 3f\left(\frac{2x_{i-1}+x_i}{3}\right) + 3f\left(\frac{x_{i-1}+2x_i}{3}\right) + f(x_i)}{8}\Delta x_i$$

Что точнее?

Попробуйте угадать, какая из двух квадратурных формул точнее:





Метод средней точки

Метод трапеций

Ошибка
$\sim 1\%$

Ошибка
$\sim 2\%$

Для этого
случая

Правило Рунге

Правило Рунге позволяет просто оценить главный член погрешности вычислении интеграла на мелкой сетке:

$$\varepsilon_{h/2} = \frac{I_{h/2} - I_h}{2^p - 1} + o(h)$$

Использование правила Рунге требует осторожности. Требуется контролировать что **фактический порядок сходимости** численного метода соответствует номинальному p.

Фактический порядок p^* может в силу некоторых обстоятельств (например, недостаточная гладкость $f(x)$) быть меньше номинального порядка сходимости p. Простейший способ контроля   следить за выполнением соотношения

$$p^* = \log_2 \frac{\Delta_h}{\Delta_{h/2}} \approx p$$

Правило Рунге

- Рассмотрим формулу S_1 алгебраической точности $n-1$ на отрезке длины h, c - середина отрезка
- Разложим $f(x)$ в ряд Тейлора в точке c:

$$I(f) - S_1(f) = \alpha f^{(n)}(c)h^{n+1} + O(h^{n+2})$$

- Пусть S_2 - составная формула по 2-м половинкам того же отрезка, тогда:

$$I(f) - S_2(f) = \alpha f^{(n)}(c)\frac{h^{n+1}}{2^n} + O(h^{n+2})$$

- С точностью до членов $O(h^{n+2})$ получаем:

$$I(f) - S_2(f) \approx \frac{S_2 - S_1}{2^n - 1}$$

Степень квадратурной формулы

Будем говорить, что квадратурная формула **имеет алгебраическую степень точности** m, если она точно интегрирует все многочлены степени не более m, а некоторые многочлены степени $m+1$ уже нет. Например, формула средней точки имеет алгебраическую степень 1: она точна для всех линейных функций

$$\int_a^b (\alpha x + \beta) dx = \beta(b-a) + \alpha \frac{b^2 - a^2}{2} = (b-a)\left(\alpha \frac{a+b}{2} + \beta\right)$$

И не точна, например, для $3x^2$

$$\int_a^b 3x^2 dx = b^3 - a^3 =$$

$$= (b-a)(a^2 + ab + b^2) \neq (b-a)\frac{3}{4}(a^2 + ab + b^2)$$

Условия заданной степени

Утверждение

Для того, чтобы квадратурная формула имела алгебраическую степень m необходимо и достаточно, чтобы она точно интегрировала функции $1, x, x^2, \ldots, x^m$.

Доказательство

Достаточность. Пусть

$$P_m(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \cdots + \alpha_m x^m$$

Условия заданной степени

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k)$$

$$w_k \equiv \frac{1}{b-a}\int_a^b \varphi_k(x)dx$$

$$(b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k\, P_m(x) = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k \sum_{r=0}^{m} \alpha_r x^r =$$

$$= \sum_{r=0}^{s} \alpha_r (b-a)\sum_{k=0}^{m} w_k x^r = \sum_{r=0}^{m} \alpha_r \int_a^b x^r dx = \int_a^b P_m(x)dx$$

Необходимость очевидна

Условия заданной степени

Условия из утверждения позволяют строить квадратурные формулы степени m, решая систему уравнений (для простоты взят отрезок $[-1, 1]$):

$$2\sum_{k=0}^{s} w_k = \int_{-1}^{1} dx = 2$$

$$2\sum_{k=0}^{s} x_k w_k = \int_{-1}^{1} x dx = 0$$

$$2\sum_{k=0}^{s} x_k^2 w_k = \int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{2}{3}$$

$$\ldots$$

$$2\sum_{k=0}^{s} x_k^m w_k = \int_{-1}^{1} x^m dx = \frac{1 + (-1)^m}{m + 1}$$

Погрешность интегрирования

Для краткости обозначим

$$I[f] = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k) \quad E[f] = \int_a^b f(x)ax - I[f]$$

Функционал $E[f]$ назовем **остаточным членом квадратуры** или просто, **погрешностью квадратуры**.

Если квадратура имеет алгебраическую степень m, то $E[P_m] \equiv 0$.

Остаточный член квадратурной формулы

Для определения $E[f]$ представим $f(x)$ в виде формулы Тейлора с интегральным остаточным членом:

$$f(x) = f(a) + f'(x-a) + \cdots + \frac{f^{(m)}(a)}{m!}(x-a)^m + R_m(x)$$

$$R_m(x) = \int_a^x \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!}(x-t)^m dt = \int_a^x \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!}(x-t)_+^m dt$$

$$z_+ = \max(z,0) = \begin{cases} 0, z \le 0 \\ z, z > 0 \end{cases}$$

Так как $f(x) - R_m(x)$ является многочленом степени m, он интегрируется квадратурной формулой точно:

$$E[f] = E[R_m]$$

Остаточный член квадратурной формулы

Остаточный член квадратурной формулы совпадает с погрешностью интегрирования остаточного члена формулы Тейлора.

$$R_m(x) = \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!}(x-t)_+^m dt$$

$$E[f] = E[R_m] = \int_a^b R_m(x)dx - (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k R_m(x_k)$$