МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Уфимский государственный авиационный технический университет» (ФГБОУ ВО «УГАТУ»)

УГАТУ

Численное интегрирование

Старший преподаватель кафедры ВВТиС
А.А. Гайнетдинова

Уфа, 2020

Цель

- получить навык приближённого вычисления определённых интегралов

Задачи

- изучить теоретические основы различных методов численного интегрирования;
- реализовать программно выбранные методы численного интегрирования;
- применить программы для вычисления заданного интеграла;
- провести анализ полученных результатов.

Определение квадратурной формулы

Рассмотрим задачу приближенного вычисления определенного интеграла

$$J[f] = \int_a^b f(x)\,dx\,, f(x) \text{ – заданная функция.} \qquad (1)$$

Для численного вычисления разобьем отрезок $[a, b]$:

$$x_0 = a < x_1 < x_2 < \cdots < x_{N-1} < x_N = b$$

Тогда интеграл (1) можно записать в следующем виде:

$$J[f] = \sum_{i=1}^{N} J_i[f], \qquad J_i[f] = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx.$$

Отобразим отрезок $[x_{i-1}, x_i]$ в $[0,1]$ с помощью замены: $x = x_{i-1} + (x_i - x_{i-1})s,\ \ s \in [0,1]$.
Обозначив $x_i - x_{i-1}$ за h_i, получим $f(x) = f(x_{i-1} + h_i s) = g_i(s)$,

$$J_i[f] = h_i \int_0^1 g_i(s)\,ds\,.$$

Рассмотрим интеграл

$$I[g] = \int_0^1 g(s)\,ds\,,$$

где $g(s)$ слабо меняется на $[0,1]$. Рассмотрим сетку узлов на $[0,1]$:

$$0 \le s_0 < s_1 < \cdots < s_{N-1} < s_N \le 1$$

Выражение

$$I[g] \approx S_m[g] = \sum_{k=0}^{m} c_k g(s_k)$$

называется *квадратурной формулой*, или *квадратурой*. Здесь c_k – *веса* квадратуры, а $\{s_i\}_{i=0}^{m}$ – *шаблон* квадратуры.

Формулы Ньютона – Котеса

Формула прямоугольников (формула среднего)

Положим $m = 0, s_0 = \frac{1}{2}$. Решив СЛАУ, получим $c_0 = 1$.

$$I[g] = \int_0^1 g(s)\,ds \approx S_0[g] = g\left(\frac{1}{2}\right)$$

Перейдя обратно к отрезку $[x_{i-1}, x_i]$, получим $g_i(s) = f(x_{i-1} + h_i s)$

$$g_i\left(\frac{1}{2}\right) = f\left(x_{i-1} + \frac{h_i}{2}\right) = f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$$

$$J_i[f] = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \approx h_i\, f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$$

$$\mathrm{J}[f] = \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} h_i f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$$

Если сетка равномерная, т.е. $h_i = h$, то

$$\mathrm{J}[f] = h \sum_{i=1}^{N} f\left(\frac{x_{i-1} + x_i}{2}\right)$$

– составная формула *центральных прямоугольников.*

Формулы Ньютона – Котеса

Формула трапеций

Положим $m = 1, s_0 = 0, s_1 = 1$. Решив СЛАУ, получаем веса $c_0 = c_1 = \frac{1}{2}$.

$$I[g] = \int_0^1 g(s)\,ds \approx S_1[g] = \frac{g(0) + g(1)}{2}$$

$$g_i(0) = f(x_{i-1}), g_i(1) = f(x_i).$$

$$J_i[f] = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \approx h_i \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}$$

$$\mathrm{J}[f] = \int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{N} h_i \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}$$

Для равномерной сетки имеет место следующая составная формула *трапеций*:

$$\mathrm{J}[f] = \int_a^b f(x)\,dx \approx h\frac{f(a) + f(b)}{2} + h\sum_{i=1}^{N-1} f(x_i).$$

Формулы Ньютона – Котеса

Формула Симпсона (формула парабол)

Положим $m = 2, s_0 = 0, s_1 = \frac{1}{2}, s_2 = 1.$

Как и в предыдущих двух методах, находим веса: $c_0 = c_2 = \frac{1}{6}, c_1 = \frac{2}{3}.$

$$I[g] = \int_0^1 g(s)\,ds \approx S_2[g] = \frac{g(0) + 4g\left(\frac{1}{2}\right) + g(1)}{6}$$

$$J_i[f] = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx \approx \frac{h_i}{6}\left[f(x_{i-1}) + 4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right) + f(x_i)\right]$$

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

Пусть $h_i = 2h, h = x_{i-1} + \frac{h_i}{2} - x_i$, и $n = 2N$. Тогда

$$J[f] \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4\sum_{i=1}^{N} f(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{N-1} f(x_{2i}) + f(x_n)\right]$$

– составная формула *Симпсона (парабол).*

Повышение порядка точности

Формулы Рунге

Предположим, что $D_N[f] = J[f] - S_N[f] = A_p h^p + O(h^q), q > p,$ – асимптотическое разложение погрешности при $h \to 0$. Найдем A_p.

Пусть есть два расчета на сетках $h_1 \neq h_2$. Тогда $D_{N_1}[f] = A_p h_1^p + O(h_1^q)$, $D_{N_2}[f] = A_p h_2^p + O(h_2^q)$.

$$D_{N_1}[f] - D_{N_2}[f] = A_p\left(h_1^p - h_2^p\right) + O(h^q), \text{ где } h = \max\{h_1, h_2\}.$$

С другой стороны, $D_{N_1}[f] - D_{N_2}[f] = S_{N_2}[f] - S_{N_1}[f]$ – известно.

Тогда получим оценку главного члена асимптотического разложения: $A_p = \frac{S_{N_2}[f] - S_{N_1}[f]}{h_1^p - h_2^p} + O(h^{q-p})$

Отсюда следует, что
$$D_{N_1}[f] = \frac{S_{N_2}[f] - S_{N_1}[f]}{1-k^p} + O\left(h_1^q\right); \; k = \frac{h_2}{h_1}. \qquad (2)$$

Формула (2) называется *первой формулой Рунге*.

Повысим точность вычисления интеграла $J[f]$:

$$J[f] = S_{N_1}[f] + D_{N_1}[f] = S_{N_1}[f] + \frac{S_{N_2}[f] - S_{N_1}[f]}{1-k^p} + O\left(h_1^q\right). \qquad (3)$$

Формула (3) называется *второй формулой Рунге*.

Из формулы (3) получаем следующее: $J[f] \approx S[f] = \sigma S_{N_1}[f] + (1-\sigma) S_{N_2}[f]; \; \sigma = \frac{k^p}{k^p - 1}$

Правило Ромберга

Правило Ромберга является обобщением метода Рунге для произвольного числа сеток. Пусть

$$D_N[f] = J[f] - S_N[f] = \sum_{m=p}^{p+q-2} A_m h^m + O(h^{p+q-1})$$

Пусть задано q различных сеток. Тогда формула имеет следующий вид:

$$J[f] - S_{N_j}[f] = \sum_{m=p}^{p+l-2} A_m h_j^m + O(h^{p+q-1}), 1 \le j \le q.$$

Получили СЛАУ относительно $J[f]$ и A_m. Отсюда $J[f]$ можно найти по формуле Крамера:

$$J[f] = \begin{vmatrix} S_{N_1}[f] & h_1^p & \dots & h_1^{p+q-2} \\ S_{N_2}[f] & h_2^p & \dots & h_1^{p+q-2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{N_q}[f] & h_q^p & \dots & h_q^{p+q-2} \end{vmatrix} * \begin{vmatrix} 1 & h_1^p & \dots & h_1^{p+q-2} \\ 1 & h_2^p & \dots & h_1^{p+q-2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & h_q^p & \dots & h_q^{p+q-2} \end{vmatrix}^{-1} + O(h^{p+q-1})$$

Повышение порядка точности

Процесс Эйткена

Пусть заданы три равномерные сетки: $h_1 = h, h_2 = kh, h_3 = k^2 h; k \in (0,1)$.

Предположим, что

$$D_N[f] = J[f] - S_N[f] = A_p h^p + O(h^q);\; q > p.$$

Рассмотрим следующее выражение

$$B = \frac{S_{N_1}[f] - S_{N_2}[f]}{S_{N_2}[f] - S_{N_3}[f]}$$

Применяя формулу оценки главного члена асимптотического разложения, получим

$$B \approx \frac{A_p\left(h_1^p - h_2^p\right)}{A_p\left(h_2^p - h_3^p\right)} = \frac{1 - k^p}{k^p(1 - k^p)} = \frac{1}{k^p}.$$

$$\ln(B) = -p\ln(k)$$

$$p = -\frac{\ln(B)}{\ln(k)}$$

– порядок главного члена асимптотического разложения погрешности.

Оптимальное распределение узлов формулы трапеций

Пусть вычисляется интеграл

$$I[f] = \int_0^1 f(x)\,dx$$

и подынтегральная функция удовлетворяет условиям $|f''(x)| \le A_l$ на отрезках $[B_{l-1}, B_l], l = \overline{1,q}$, где $0 = B_0 < \cdots < B_q = 1$. Для вычисления интегралов

$$I_l[f] = \int_{B_{l-1}}^{B_l} f(x)\,dx$$

применим составную формулу трапеций с равными отрезками разбиения длины $H_l = {}^{b_l}/_{N_l}$, где

$$b_l = B_l - B_{l-1}, N_l = \left\lceil b_l \sqrt[3]{\frac{A_l}{6\lambda}} \right\rceil,$$

а λ определяется из уравнения

$$\sum_{l=1}^{q} b_l \sqrt[3]{\frac{A_l}{6\lambda}} = N\,.$$

Квадратурная формула Гаусса

Рассмотрим интеграл $$I[f] = \int_a^b f(x)p(x)\,dx, \qquad (4)$$

где $p(x)$ – весовая функция. Пусть $x_j,\ j = \overline{1,N},$ – узлы.

Тогда $$I[f] \approx S_N[f] = \frac{b-a}{2}\sum_{j=1}^{N} c_j f(x_j) \qquad (5)$$

При этом квадратура (5) должна быть точной для многочленов максимально возможной степени. Квадратура (5) для (4) называется *квадратурой Гаусса*.

Пусть H – гильбертово пространство комплекснозначных функций $f(x) \in [a,b]$ таких, что

$$\int_a^b |f(x)|^2 p(x)\,dx < \infty.$$

Предположим, что в H задано скалярное произведение вида

$$(f,g) = \int_a^b f(x)\overline{g(x)}\,p(x)\,dx, \qquad (6)$$

где $\overline{g(x)}$ – комплексное сопряжение к $g(x)$, $p(x) > 0$ на $[a,b]$ и

$$\int_a^b p(x)\,dx < \infty.$$

Многочлены, ортогональные в смысле скалярного произведения (6) с заданным весом $p(x)$ на отрезке $[a,b]$, называются *ортогональными многочленами*.

Пример. Многочлены Лежандра. $[a,b] = [-1,1]$, $p(x) = 1$.

$$L_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

Лемма 1. [1] Любой многочлен $P_n(x)$ из системы ортогональных на $[a,b]$ многочленов вида $P_n(x) = x^n + \sum_{j=0}^{n-1} b_{nj} x^j$ имеет ровно n различных нулей на интервале (a,b).

Лемма 2. Пусть $x_1, \dots x_N$ – нули ортогонального на $[a,b]$ с весом $p(x)$ многочлена $\psi_N(x)$ степени N и квадратура (5) точна для любого многочлена степени $N-1$. Тогда квадратура (5) точна для любого многочлена степени $2N-1$.

Из лемм 1 и 2 следует следующий *алгоритм построения* квадратуры Гаусса.

1) Для интеграла (4) с весовой функцией $p(x)$ определить систему ортогональных многочленов.
2) Для найденного ортогонального многочлена степени N найти все нули, которые будут принадлежать отрезку $[a,b]$. Совокупность этих нулей образует шаблон квадратуры Гаусса.
3) Из решения СЛАУ, вытекающего из требования точности квадратуры для любого многочлена степени $N-1$ найти N весовых коэффициентов.

Интегрирование методом Монте-Карло

Предположим, требуется вычислить определённый интеграл $\int_a^b f(x)\,dx$.

Рассмотрим случайную величину u, равномерно распределенную на отрезке интегрирования $[a,b]$. Тогда $f(u)$ также будет случайной величиной, причем ее математическое ожидание выражается как $\mathrm{M}[f(u)] = \int_a^b f(x)\varphi(x)\,dx$, где $\varphi(x)$ – плотность распределения случайной величины u, равная $\frac{1}{b-a}$ на участке $[a,b]$. Таким образом, искомый интеграл выражается как

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx = (b-a)\mathrm{M}[f(u)],$$

но математическое ожидание величины $f(u)$ можно легко оценить, смоделировав эту случайную величину и посчитав выборочное среднее.

Итак, бросаем N точек, равномерно распределенных на $[a,b]$, для каждой точки u_i вычисляем $f(u_i)$. Затем вычисляем выборочное среднее: $S = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(u_i)$.

В итоге, получаем оценку интеграла: $\int_a^b f(x)\,dx \approx (b-a)S$.

Точность оценки зависит только от количества точек N.

Метод Монте-Карло обычно используют для вычисления кратных интегралов.

Контрольные вопросы

1. Как ставится задача численного интегрирования?
2. Как строятся интерполяционные квадратурные формулы, какова их погрешность (остаточный член)?
3. Как строятся квадратурные формулы Гаусса, какова их погрешность (остаточный член)?
4. Сравните по точности метод прямоугольников и метод Гаусса при одинаковом числе узлов.
5. Какие численные методы называются методами Монте-Карло?
6. Как вычисляются интегралы методом Монте-Карло?
7. Каков порядок погрешности интегрирования методом Монте-Карло?

Литература

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы.
2. Калиткин Н.Н. Численные методы.