6.2 Способи побудови формул чисельного інтегрування. Квадратурна формула Гауса

Способи побудови формул чисельного інтегрування

Постановка задачі. Нехай необхідно знайти наближене значення $I_n(f)$ визначеного інтеграла $I(f)=\int_a^b f(x)\,dx$, де $f(x)$ – задана функція.

В основі ***чисельних наближених методів*** розв'язування цієї задачі лежить подання визначеного інтеграла як границі інтегральної суми

$$I(f)=\int_a^b f(x)\,dx=\lim_{\max \Delta x_k \to 0} \sum_{k=1}^{n} f(\xi_k)h_k ,$$

де $h_k = x_k - x_{k-1} = \text{var}$ – нерівномірний крок сітки (розбиття) $\omega_n = \{x_k : a = x_0 < \ldots < x_{k-1} < x_k < \ldots < x_n = b\}$; $\xi_k \in [x_{k-1}; x_k]$, $k=\overline{1,n}$, причому точки x_k і ξ_k вибираються довільно.

Якщо наближення $I_n(f)$ до інтеграла $I(f)$ будувати у вигляді аналогічної суми, тобто лінійної комбінації скінченного числа значень підінтегральної функції $f(x)$, то дістанемо ***квадратурну формулу***

$$\boxed{I(f)\approx I_n(f)=\sum_{k=0}^{n} c_k f(x_k)},$$

де x_k, $k=\overline{0,n}$ – ***вузли***; c_k, $k=\overline{0,n}$ – ***ваги*** (***коефіцієнти***).

Методи ***чисельного інтегрування*** різняться способами вибору вузлів x_k і ваг c_k, $k=\overline{0,n}$, а також наближень для значень підінтегральної функції у вузлах $f(x_k)$. Вибрані значення повинні, по-перше, мінімізувати (у певному смислі) ***похибку*** (***залишковий член***) $R_n(f)=I(f)-I_n(f)$ квадратурної формули, а по-друге, забезпечити достатню швидкість збіжності обчислювальної процедури.

Зафіксуємо число вузлів n і будемо підбирати ваги так, щоб квадратурна формула була точною для многочленів якнайвищого степеня m. Квадратурна формула має ***m-й порядок алгебраїчної точності***, якщо вона дає точний результат для всіх поліномів $P_m(x)$ m-го степеня, тобто $R_n(P_m)=0$ та існує такий многочлен $P_{m+1}(x)$ ($m+1$)-го степеня, обчислення якого здійснюється з відмінною від нуля похибкою $R_n(P_{m+1})\neq 0$. Указані умови можна подати в більш зручній для перевірки формі:

$$R_n(x^i)=0,\ \ i=\overline{0,m};\quad R_n(x^{m+1})\neq 0.$$

Нехай вузли утворюють сітку Δ_n зі сталим кроком h. Тоді похибка $R_n(f)$ залежить від h і її можна подати у вигляді $R_n(f)=O(h^r)$, тобто $\left|R_n(f)\right|<Ch^r$, де $C>0$ і C не залежить від h. Показник степеня r називається ***порядком точності за кроком*** h квадратурної формули. Квадратурна формула повинна бути такою, щоб для довільної інтегровної на відрізку $[a;b]$ функції $f(x)$ при $n\to\infty$ наближене значення $I_n(f)$ інтеграла збігалося до його точного $I(f)$. Тобто, щоб виконувалася умова $r>0$.

Основні підходи до побудови квадратурних формул:

1) Наближено замінити підінтегральну функцію $f(x)$ інтерполяційним многочленом $f(x)\approx P_m(x)$ по деяких вузлах x_k, $k=\overline{0,m}$, а потім проінтегрувати одержаний поліном. Ці вузли, як правило, фіксовані, причому частина з них може лежати поза відрізком інтегрування $[a;b]$. Даний спосіб приводить до квадратурних формул ***інтерполяційного типу***.

2) Зафіксувати число вузлів $n+1$, а потім підібрати розміщення вузлів x_k, $k=\overline{0,n}$ і значення коефіцієнтів c_k, $k=\overline{0,n}$ з умови $R_n(x^i)=0$, $i=\overline{0,m}$ так, щоб формула мала найвищий m-й порядок алгебраїчної точності ($m<2n$).

3) Якщо відомий клас F функцій, для яких призначена квадратурна формула, то при фіксованому n вибір вузлів x_k, $k=\overline{0,n}$ і коефіцієнтів c_k, $k=\overline{0,n}$ можна здійснювати з умови досягнення найменшого значення величини $\overline{R}_n = \sup\limits_{f\in F} R_n(f)$ – точної верхньої грані значень похибок $R_n(f)$ для всіх функцій f даного класу F. Цей спосіб приводить до квадратурних формул ***найвищої точності для даного класу функцій***.

4) Якщо відрізок інтегрування $[a;b]$ розбити на окремі частини (наприклад, рівномірно), а потім на кожній ділянці використати деяку формулу (невисокого порядку точності), одержану одним з вказаних вище способів, то дістанемо квадратурну формулу ***складеного типу***.

Використовувані на практиці методи чисельного інтегрування можна згрупувати в залежності від способу апроксимації підінтегральної функції.

Методи Ньютона-Котеса засновані на поліноміальній апроксимації (інтерполяції) підінтегральної функції. Методи цього класу відрізняються один від одного ступенем використовуваного полінома, від якого залежить кількість вузлів, де необхідно обчислювати функцію *f(x)*. Відрізок інтегрування розбивається, як правило, на відрізки рівної довжини, величина яких визначається як $h=(b-a)/n$ і називається кроком інтегрування.

Сплайнові методи базуються на апроксимації підінтегральної функції сплайнами. Методи розрізняються за типом вибраних сплайнів. Такі методи є сенс використовувати в задачах, де алгоритми сплайнової апроксимації застосовуються для обробки даних.

Методи найвищої алгебраїчної точності використовують нерівномірно розташовані вузли, розташовані так, щоб забезпечити мінімальну похибку інтегрування при заданій кількості вузлів. Методи розрізняються способом вибору вузлів. Найбільш широке застосування отримали методи Гаусса, в яких вузли інтегрування вибираються як корні поліномів Лежандра.

У методах Монте-Карло вузли вибираються за допомогою генератора випадкових чисел, результат в підсумку носить ймовірний характер. Методи виявляються особливо ефективні при обчисленні кратних інтегралів.

Похибка чисельного інтегрування, також як і при чисельному диференціюванні, має два основних джерела:

1. *Похибка апроксимації* – через наближену заміну підінтегральної функції апроксимуючої функцією. Зменшується зі збільшенням кількості відрізків розбиття інтервалу інтегрування *n* за рахунок більш точної апроксимації підінтегральної функції.

2. *Похибки неточності в обчисленні підінтегральної функції* у вузлових точках і помилки округлення зростають з ростом *n* і з деякого значення n^* починають переважати над похибкою апроксимації. Тому не слід вибирати надмірно велике значення *n*.

Отримання формул для обчислення наближеного значення інтеграла в методах Ньютона-Котеса полягає в апроксимації підінтегральної функції, на кожному частковому відрізку інтегрування (x_{i-1}, x_i), інтервалу інтегрування *(a, b)*, інтерполяційним поліномом.

До інтерполяційних методів Ньютона-Котеса можна віднести наступні методи:

- методи прямокутників (правих, лівих, середніх);
- метод трапецій;
- метод Сімпсона (метод парабол).

Формули Ньютона – Котеса

Квадратурними формулами інтерполяційного типу називають квадратурні формули, які отримують заміною підінтегральної функції $f(x)$ інтерполяційним многочленом відразу на всьому відрізку інтегрування $[a,b]$, а не розбиваючи відрізок $[a,b]$ на часткові відрізки.

Формулами Ньютона – Котеса називають квадратурні формули інтерполяційного типу, побудовані на рівномірній сітці, коли $x_k - x_{k-1} = h$, $k = \overline{0,n}$.

Для виведення формул Ньютона – Котеса інтеграл зображується у вигляді

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + \Delta, \tag{1}$$

де x_i – вузли інтерполяції; A_i – коефіцієнти, які залежать від вигляду формули; Δ – похибка квадратурної формули.

Замінюючи в (1) підінтегральну функцію відповідним інтерполяційним поліномом Лагранжа для n рівновіддалених вузлів з кроком $h = \dfrac{b-a}{n}$, можна одержати таку формулу для розрахунку коефіцієнтів A_i при довільній кількості вузлів.

$$A_i = \frac{b-a}{n} \frac{(-1)^{n-1}}{i!(n-1)!} \int_0^n \frac{q(q-1)...(q-n)}{(q-i)} dq, \tag{2}$$

де $q = \dfrac{x-a}{h}$ – приведена змінна.

Звичайно коефіцієнти $H_i = \dfrac{A_i}{b-a}$ називають коефіцієнтами Котеса.

При цьому формула (1) набуде вигляду

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i), \tag{3}$$

і має такі властивості:

$$\sum_{i=0}^{n} H_i = 1 \text{ і } H_i = H_{n-i}.$$

В таблиці 1 наведені значення коефіцієнтів для n =1,2…,8.

Таблиця 1 – Коефіцієнти Котеса

	$\hat{H}_0$	$\hat{H}_1$	$\hat{H}_2$	$\hat{H}_3$	$\hat{H}_4$	$\hat{H}_5$	$\hat{H}_6$	$\hat{H}_7$	$\hat{H}_8$	**Загальний знаменник N**
1	1	1								2
2	1	4	1							6
3	1	3	3	1						8
4	7	32	12	32	7					90
5	19	75	50	50	75	19				288
6	41	216	27	272	27	216	41			840
7	751	3577	1223	2989	2989	1323	3577	751		17280
8	989	5888	-928	10496	-4540	10496	-928	5888	989	28350

Зауваження. Розглянуті раніше формули прямокутників, трапецій та Сімпсона є частинними випадками квадратурних формул Ньютона – Котеса при $n=0$, $n=1$ та $n=2$ відповідно.

Квадратурна формула Гауса

Квадратурні формули Гауса відрізняються від формул Ньютона - Котеса тим, що в них підлягають визначенню і вузли інтегрування, і вагові коефіцієнти. Формула Гауса називається *формулою найвищої алгебраїчної точності*.

Формула (3) може бути приведена до вигляду

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \sum_{i=1}^{n} A_i f(t_i) \tag{4}$$

заміною змінних

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}t.$$

Для формули вигляду (4) найвища точність може бути досягнута для поліномів степеня $(2n-1)$, які визначаються $2n$ постійними t_i і A_i $(i = 1,2, \ldots, n)$.

Завдання полягає у визначенні коефіцієнтів A_i і абсцис точок t_i.

Для знаходження цих постійних розглянемо виконання формули (4) для функцій вигляду

$$f(t) = t^k, k = 0,1,\ldots,2n-1.$$

Враховуючи, що

$$\int_{-1}^{1} t^k dt = \begin{Bmatrix} 2/(k+1) \\ 0 \end{Bmatrix},$$

отримаємо систему рівнянь

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} A_t = 2; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} A_i t_i = 0; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} A_i t_i^2 = 1; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} A_i t_i^{2n-2} = \dfrac{2}{2n-1}; \\ \sum\limits_{i=1}^{n} A_t t_t^{2n-1} = 0. \end{cases} \tag{5}$$

Ця система нелінійна, і її звичайне розв'язання пов'язане зі значними обчислювальними труднощами. Але якщо використовувати систему для поліномів вигляду

$$f(t)=t^k P_n(t), \qquad k=0,1,\ldots,n-1,$$

де $P_n(t)$ – поліном Лежандра, тоді її можна звести до лінійної відносно коефіцієнтів A_i з заданими точками t_i. Оскільки степені поліномів у співвідношенні не перевищують $2n-1$, повинна виконуватися система (5), і формула (4) приймає вигляд

$$\int_{-1}^{1} t^k P_n(t)dt = \sum_{i=1}^{n} A_i t_i^k P_n(t_i) \qquad (6)$$

В результаті властивості ортогональності ліва частина виразу (6) дорівнює 0, тоді

$$\sum_{i=1}^{n} A_i t_i^k P_n(t_i)=0,$$

що завжди забезпечується при будь-яких значеннях A_i в точках t_i, які відповідають кореням відповідних поліномів Лежандра.

Підставляючи ці значення t_i в систему (5) і враховуючи перші n рівнянь, можна визначити коефіцієнти A_i.

Формула (4), де t_i – нулі полінома Лежандра $P_n(t)$, а A_i, $i=1,2,\ldots,n$ визначаються із системи (5), називається формулою Гаусса.

Значення t_i, A_i для різних n наведені в таблиці 2.

Для довільного інтервалу (a,b) формула методу Гауса приймає вигляд

$$I=\frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i),$$

де $x_i=\dfrac{a+b}{2}+\dfrac{b-a}{2}\,t_i$.

Таблиця 2 – Квадратурні коефіцієнти Гауса

Кількість вузлів, n	Значення вузлів x_i або t_i	Коефіцієнти $A_i = c_i$
$n=1$	$x_1 = 0{,}5$	$c_1 = 2$
$n=2$	$-x_1 = x_2 = 0{,}577350$	$c_1 = c_2 = 1$
$n=3$	$-x_1 = x_3 = 0{,}774597$, $x_2 = 0$	$c_1 = c_3 = 0{,}555555$, $c_2 = 0{,}888889$
$n=4$	$-x_1 = x_4 = 0{,}861136$ $-x_2 = x_3 = 0{,}339981$	$c_1 = c_4 = 0{,}347855$ $c_2 = c_3 = 0{,}652145$
$n=5$	$-x_1 = x_5 = 0{,}906180$ $-x_2 = x_4 = 0{,}538470$ $x_3 = 0$	$c_1 = c_5 = 0{,}236927$ $c_2 = c_4 = 0{,}478629$ $c_3 = 0{,}568889$
$n=6$	$-x_1 = x_6 = 0{,}932470$ $-x_2 = x_5 = 0{,}661210$ $-x_3 = x_4 = 0{,}238620$	$c_1 = c_6 = 0{,}171324$ $c_2 = c_5 = 0{,}360761$ $c_3 = c_4 = 0{,}467914$
$n=7$	$-x_1 = x_7 = 0{,}949108$ $-x_2 = x_6 = 0{,}741531$ $-x_3 = x_5 = 0{,}405845$ $x_4 = 0$	$c_1 = c_7 = 0{,}129485$ $c_2 = c_6 = 0{,}279705$ $c_3 = c_5 = 0{,}381830$ $c_4 = 0{,}417960$
$n=8$	$-x_1 = x_8 = 0{,}960290$ $-x_2 = x_7 = 0{,}796666$ $-x_3 = x_6 = 0{,}525532$ $-x_4 = x_5 = 0{,}183434$	$c_1 = c_8 = 0{,}101228$ $c_2 = c_7 = 0{,}222381$ $c_3 = c_6 = 0{,}313707$ $c_4 = c_5 = 0{,}362684$

РЕАЛІЗАЦІЯ КВАДРАТУРНОЇ ФОРМУЛИ ГАУСА

1. Для визначення кількості n (як правило, обчислення починають з 2-х) членів у формулі Гауса оцінити похибку за нерівністю

$$|R_n(f)| \le \frac{(n!)^4 (b-a)^{2n+1}}{(2n+1)[(2n)!]^3} \max_{\xi\in[a,b]} \left| f^{(2n)}(\xi) \right|.$$

Якщо одержана таким чином похибка перевищує бажану точність інтегрування, то треба n збільшити на 1.

2. У випадку, коли відрізок інтегрування довільний, але скінчений, заміною $x = (b+a)/2 + z(b-a)/2$ привести його до [-1,1].

3. Обчислити або взяти з таблиць корені поліномів Лежандра (вузли) та вагові коефіцієнти A_i.

4. Обчислити значення функції $f(x_i)$.

5. Обчислити значення інтегралу за формулою (4)

$$I = \int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i).$$

Приклад. За формулою Гауса при $n = 5$ обчислити інтеграл

$$I = \int_{0}^{1} \frac{dx}{1+x^2}.$$

Розв'язання. Зробимо заміну змінної

$$x = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}t.$$

Отримаємо інтеграл

$$I = 2\int_{-1}^{1} \frac{dt}{4+(t+1)^2}$$

Складаємо таблицю значень підінтегральної функції (табл. 3) та за формулою Гауса при $n = 5$ знаходимо

$$I \approx 2\left[A_1 f(t_1) + A_2 f(t_2) + A_3 f(t_3) + A_4 f(t_4) + A_5 f(t_5)\right] = 0{,}78539816.$$

Таблиця 3 – Коефіцієнти для обчислення інтеграла за формулою Гауса

i	t_i	$f(t_i)$	A_i
1	−0,906179846	0,24945107	0,236926885
2	−0,538469310	0,23735995	0,478628670
3	0	0,2	0,568888889
4	0,538469310	0,15706261	0,478628670
5	0,906179846	0,13100114	0,236926885

Для порівняння наведемо точне значення даного інтегралу

$$I = \frac{\pi}{4} = 0,785398163...$$

Отже, в отриманому результаті є вірними всі вісім знаків. Зауважимо, що обчислення даного інтегралу за формулою Сімпсона з кроком $h = 0,1$ дає похибку вже в шостому знаці.