Численное интегрирование и дифференцирование

Тема 5

Квадратурные формулы численного интегрирования

$$\int f(x)dx = F(x) + C$$

$$\int_a^b f(x)dx = F(x)\Big|_a^b = F(b) - F(a)$$

где $F(x)$ – первообразная функции $f(x)$:

$$F(x)' = f(x)$$

Постановка задачи численного интегрирования

Вычислить определенный интеграл:

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

при условии, что пределы интегрирования ***a*** и ***b*** конечны и ***f*(*x*)** является *интегрируемой* функцией на всем интервале $x \in [a,b]$.

Аналитический метод решения состоит в использовании формулы *Ньютона-Лейбница*:

$$\int_a^b f(x)dx = F(x)\Big|_a^b = F(b) - F(a)$$

где *F(x)* – первообразная функции ***f*(*x*)** .

Постановка задачи численного интегрирования

«Недостатки» формулы Ньютона-Лейбница:

На практике редко удается вычислить ***точно*** определенный интеграл по формуле Ньютона-Лейбница, так как

- первообразную функцию не всегда удается выразить через элементарные функции;

- ее нахождение связано с необходимостью выполнения весьма сложных преобразований;

- *подынтегральная функция задана таблицей экспериментально полученных значений.*

В этих случаях используются *методы численного интегрирования.*

Постановка задачи численного интегрирования

Задача численного интегрирования состоит в нахождении *приближенного значения интеграла* по заданным или вычисляемым в процессе значениям функции.

Приближенное вычисление определенного интеграла основано на замене интеграла конечной суммой по формуле:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k),$$

называемой ***квадратурной формулой***,

где $\boldsymbol{C_k}$ - *коэффициенты (или веса) квадратурной формулы,* точки отрезка интегрирования $\boldsymbol{x_k}$- *узлы квадратурной формулы.*

Постановка задачи численного интегрирования

Разность R_n между точным и приближенным значениями интеграла называется *погрешностью квадратурной формулы.*

Определение. Квадратурная формула *точна для многочленов степени* ***m***, если при замене ***f(x)*** на произвольный алгебраический многочлен $P_m(x)$ степени ***m*** приближенное равенство становится точным:

$$\int_a^b P_m(x)dx = \sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k).$$

Простейшие квадратурные формулы

1. *Простейшие квадратурные* формулы могут быть получены на основании непосредственного определения интеграла

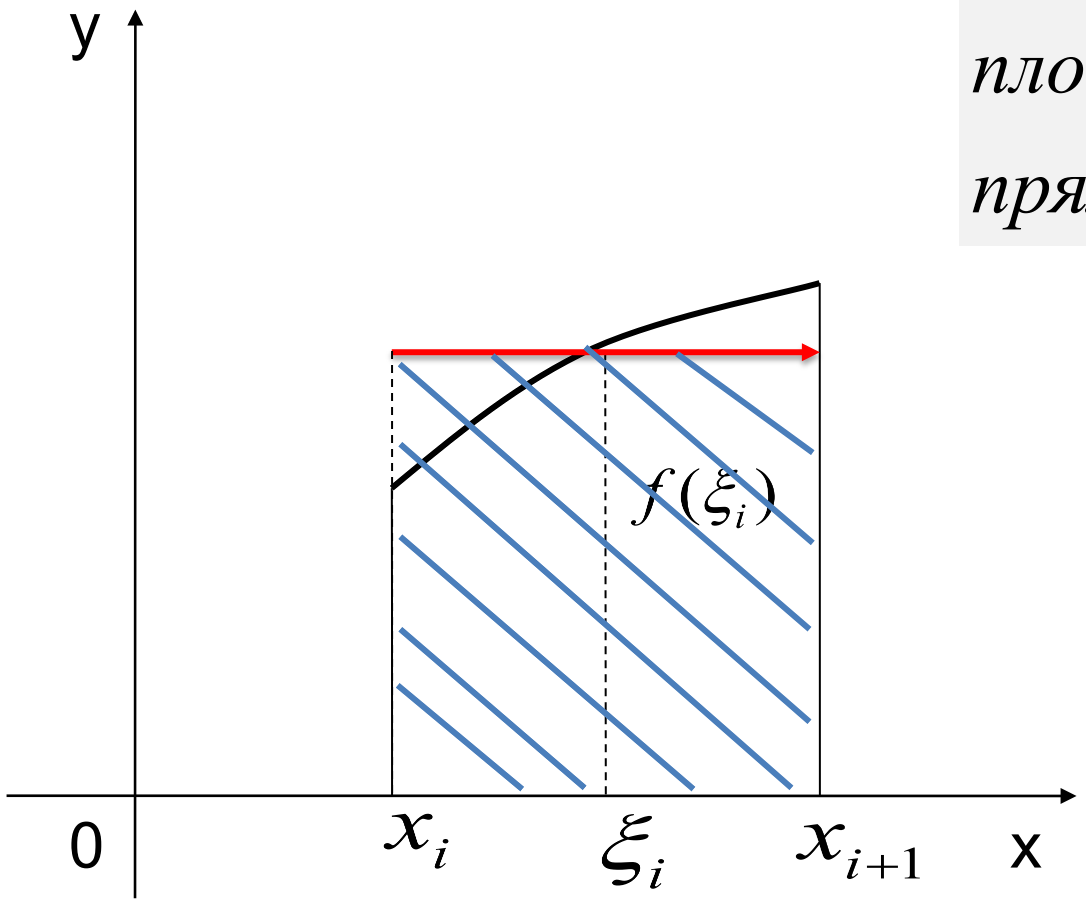
$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty}\sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)\Delta x_i$$

как *предела последовательности интегральных сумм* при неограниченном возрастании ***n*** .

Любая интегральная сумма, соответствующая некоторому *разбиению области интегрирования* ***[a,b]*** на ***n*** частей и *некоторому выбору точек* $\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n$ на участках разбиения, *может рассматриваться как приближенное значение определенного интеграла:*

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

Геометрическая интерпретация интегральной суммы



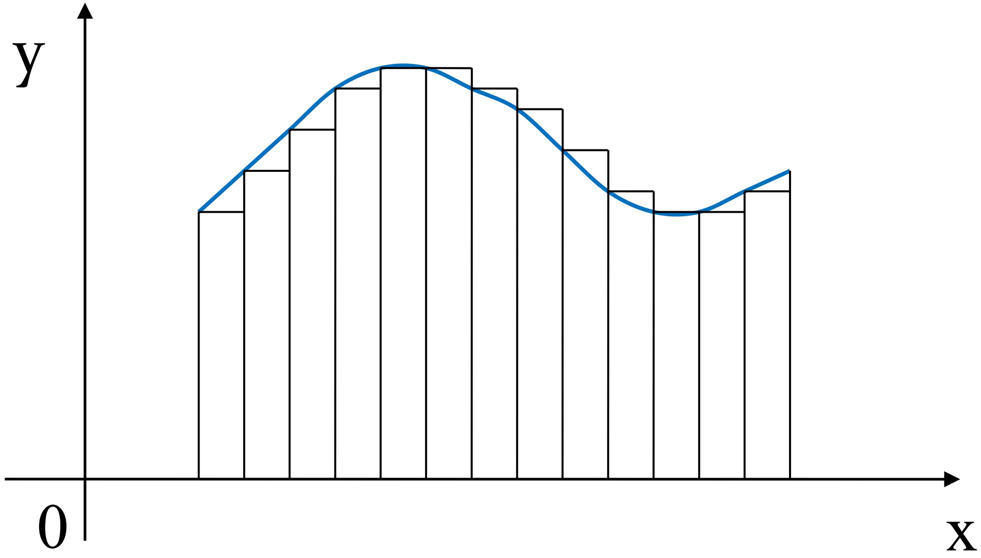
$f(\xi_i)(x_{i+1} - x_i) =$ *площади прямоуглльника*

Геометрическая интерпретация интегральной суммы

1. [a, b] разбивается на n отрезков длиной Δx_i.

2. Произведение $f(\xi_i)\Delta x_i$ численно равно *площади прямоугольника* с основанием Δx_i и высотой $f(\xi_i)$

3. *Интегральная сумма* равна *сумме площадей всех прямоугольников* = площади ступенчатой фигуры.



Простейшие квадратурные формулы

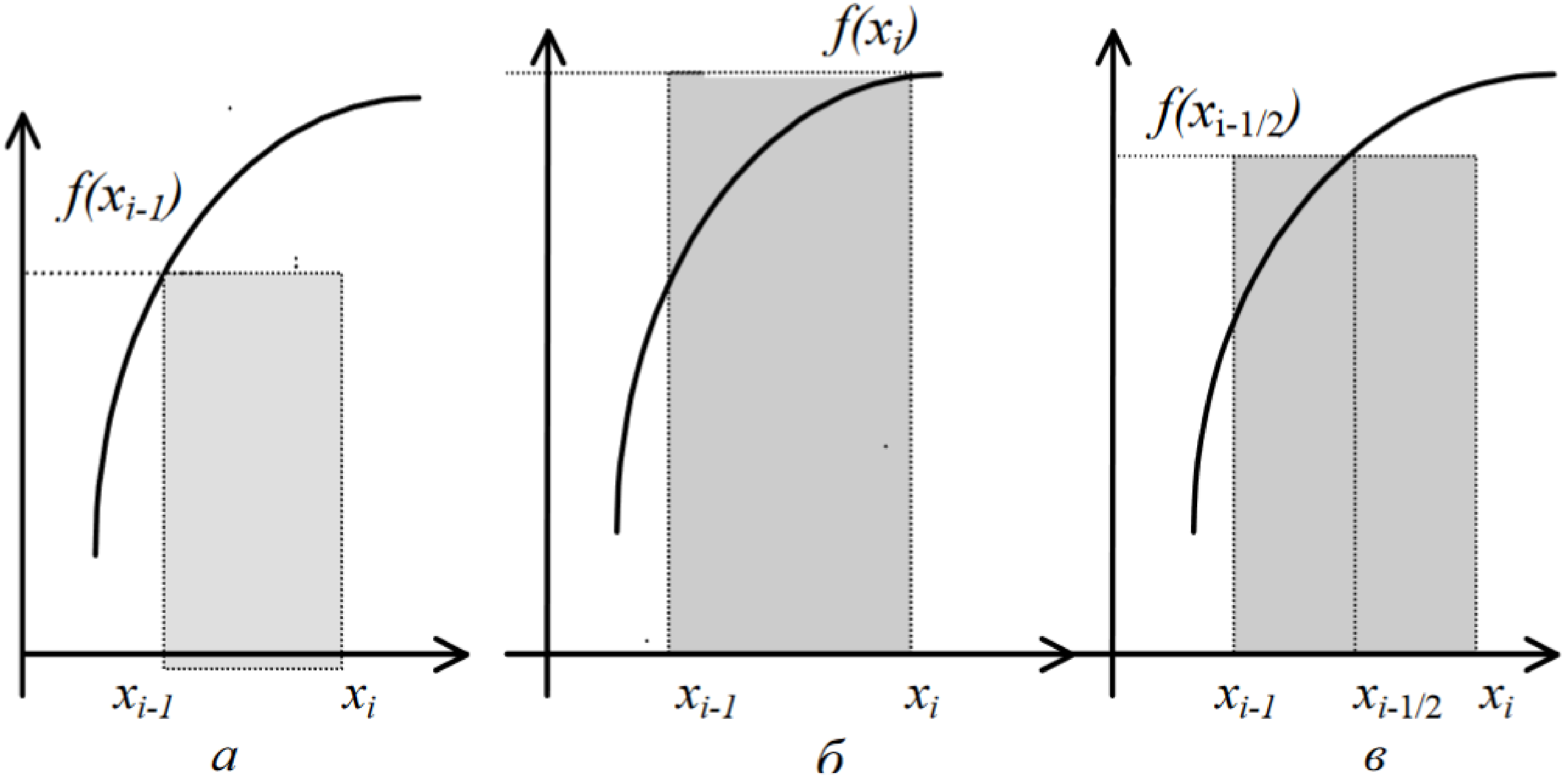
Простейшие квадратурные формулы – *составные формулы прямоугольников*, получаются при разбиении области интегрирования *[a,b]* на ***n*** *равных частей* и определенном выборе точек ξ_i на участках разбиения:

$\xi_i = x_i$ - *начало отрезка*;

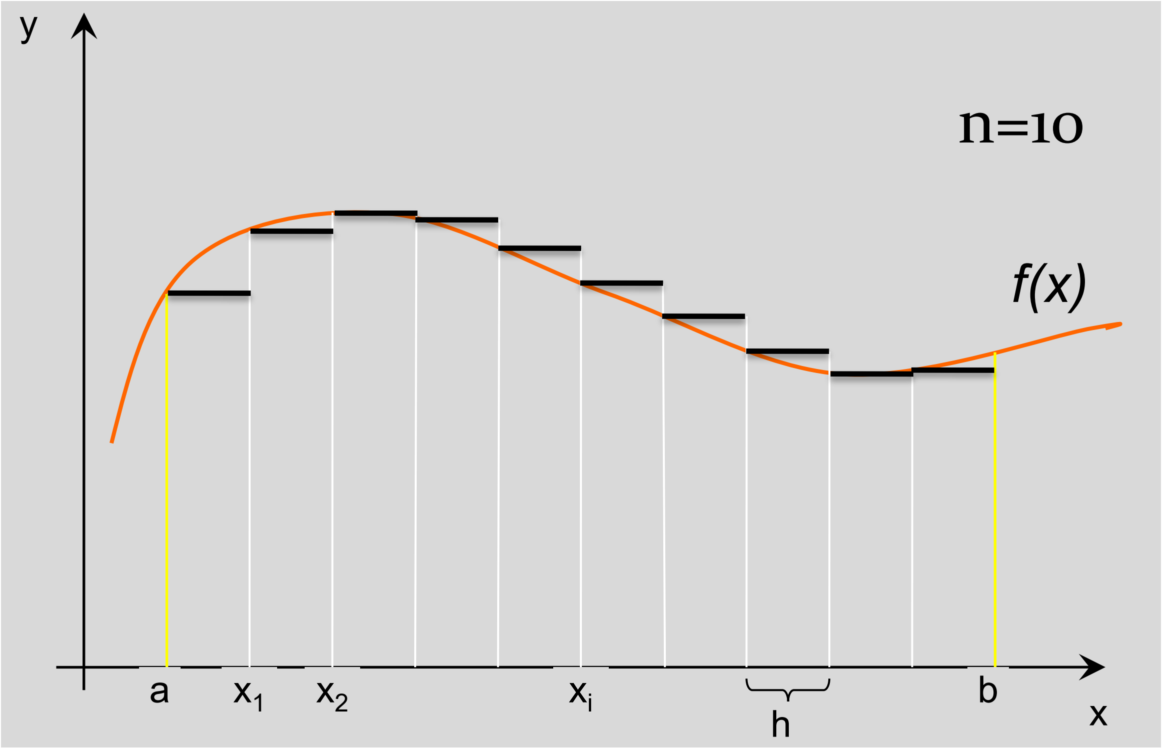
$\xi_i = x_{i+1}$ - *конец отрезка;*

$\xi_i = (x_i + x_{i+1})/2 = x_{i+1/2}$ - *середина отрезка*.

Простейшие квадратурные формулы



Метод левых прямоугольников

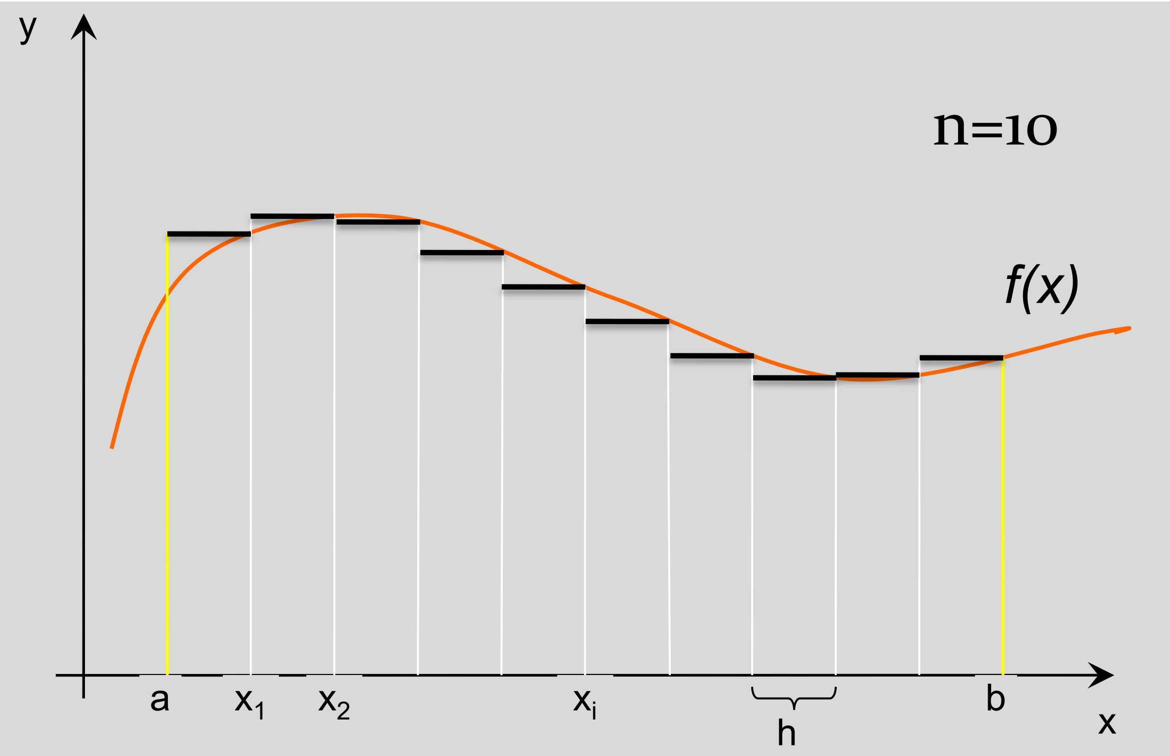


Высота - значение функции в **левой точке** основания каждой полосы.

Формула метода:

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

Метод правых прямоугольников

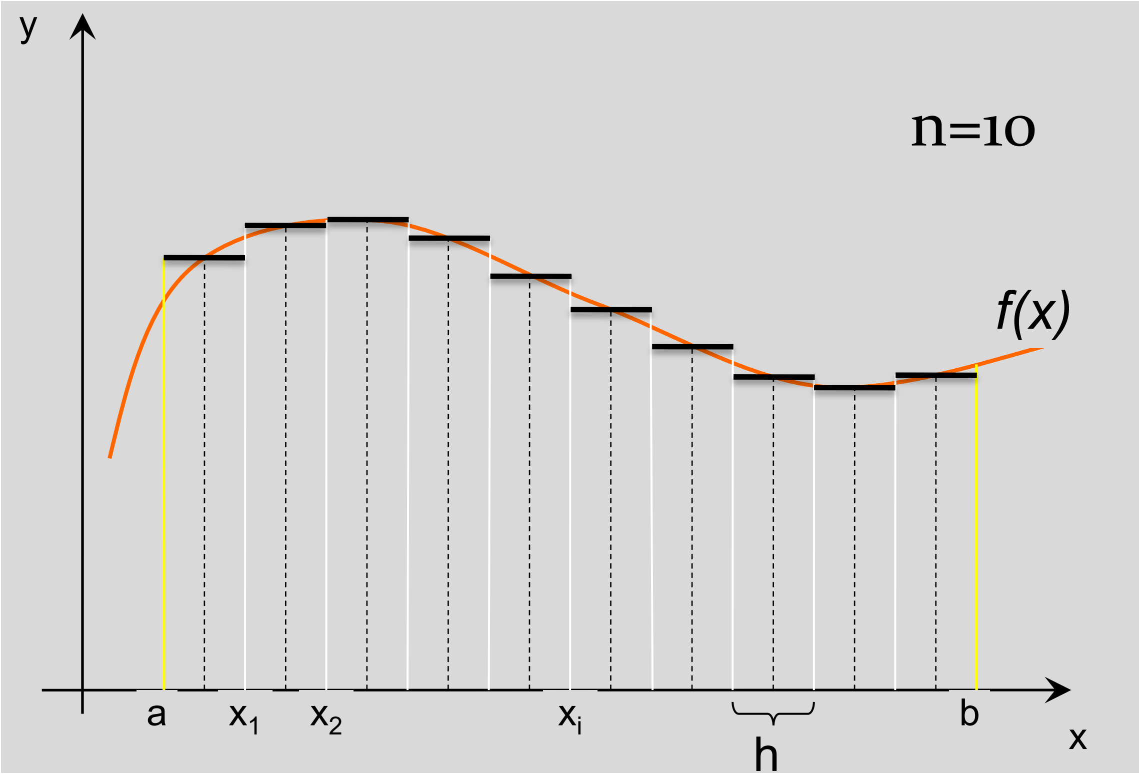


Высота - значение функции в правой точке основания каждой полосы.

Формула метода:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \cdot \sum_{i=1}^{n} f(a + i \cdot h)$$

Метод средних прямоугольников



Высота - значение функции в середине основания каждой полосы.

Формула метода:

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

Квадратурные формулы интерполяционного типа

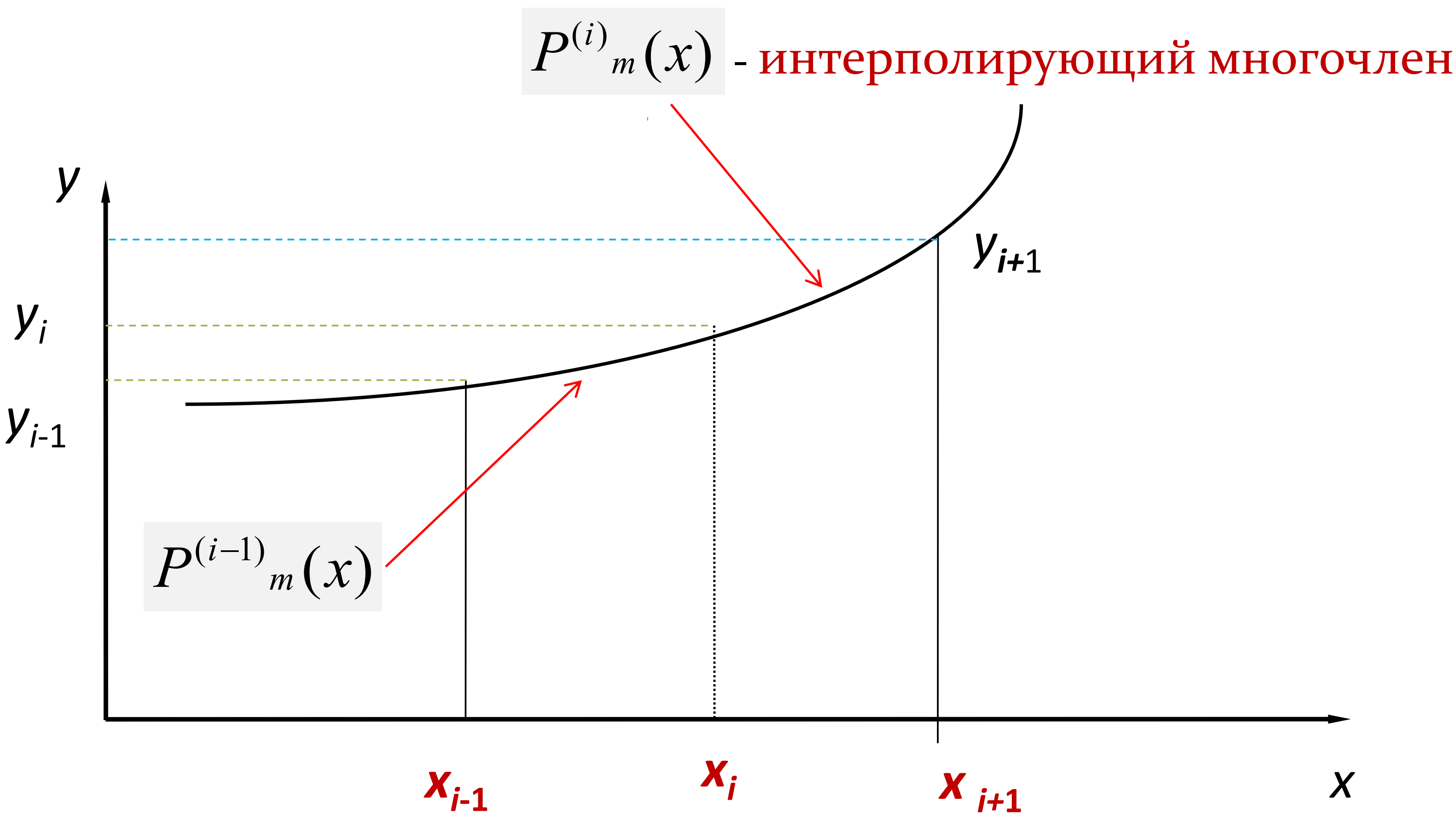
2. Квадратурные формулы *интерполяционного типа* (*формулы Ньютона-Котеса*) получают заменой подынтегральной функции *f(x)* на *[a,b]* *интерполяционным многочленом* $P_m(x)$ с узлами интерполяции в точках разбиения отрезка интегрирования $\boldsymbol{x_0, x_1, x_2, \ldots x_n}$:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_m(x)dx$$

или, точнее,

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

Квадратурные формулы интерполяционного типа



Квадратурные формулы интерполяционного типа

Для получения простых формул используют *полиномы нулевой, первой и второй степени* и, соответственно, получают следующие методы и формулы численного интегрирования:

- **методы прямоугольников;**
- **метод трапеций;**
- **метод Симпсона (парабол).**

Очевидно, что во всех случаях замена функции $f(x)$ интерполирующим полиномом приводит к образованию *погрешности вычисления значения интеграла*. Увеличение числа отрезков разбиения n (уменьшение длины шага интегрирования h) ведет к уменьшению погрешности.

Квадратурные формулы интерполяционного типа

Если в пределах каждого элементарного отрезка $[x_i;\ x_{i+1}]$ подынтегральную функцию $f(x)$ заменять интерполяционным полиномом *нулевой степени*, т.е. постоянной величиной – получаем *методы прямоугольников.*

Если в качестве значения подынтегральной функции берется ее значение в *левом* конце отрезка, то получается *формула левых прямоугольников*.

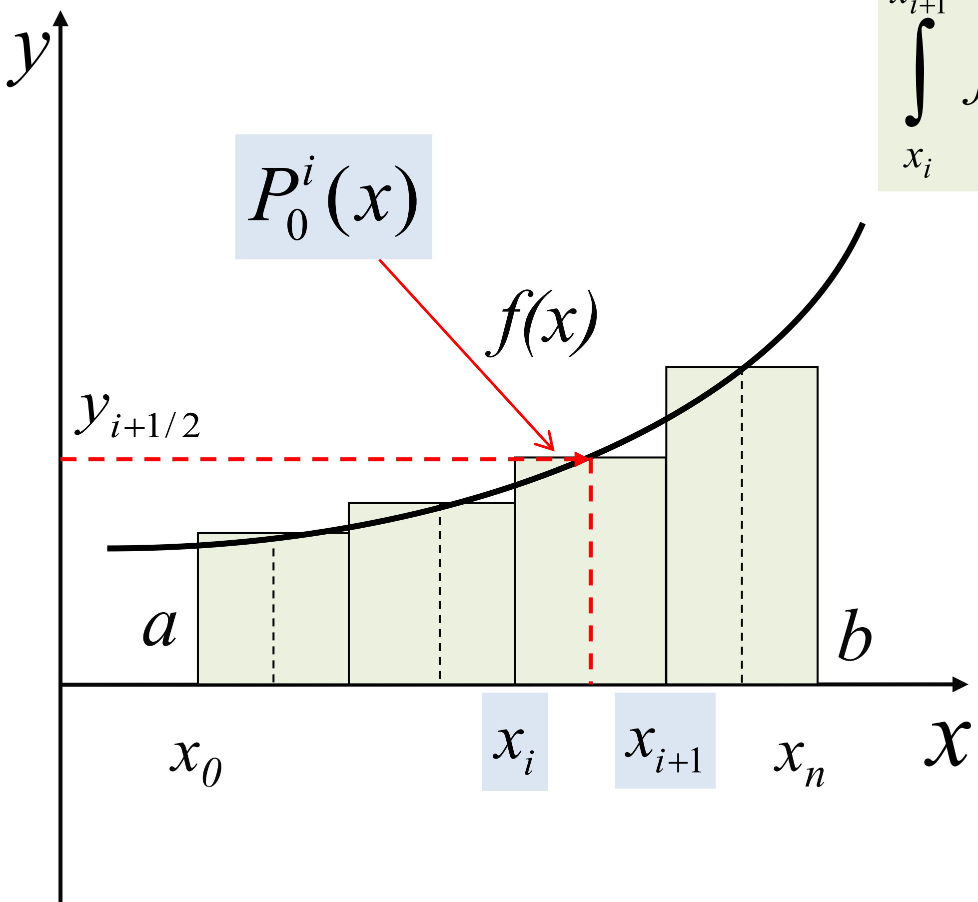
При использовании значения подынтегральной функции в *правом* конце отрезка получается *формула правых прямоугольников*.

Квадратурные формулы интерполяционного типа

При одном и том же числе отрезков разбиения ***n*** большую точность дает ***метод средних прямоугольников,*** в котором используется значение подынтегральной функции в ***середине*** отрезка.

Метод средних прямоугольников

$$P_0^i(x) = f(x_{i+1/2}) = y_{i+1/2}$$



Формула прямоугольников на элементарном отрезке:

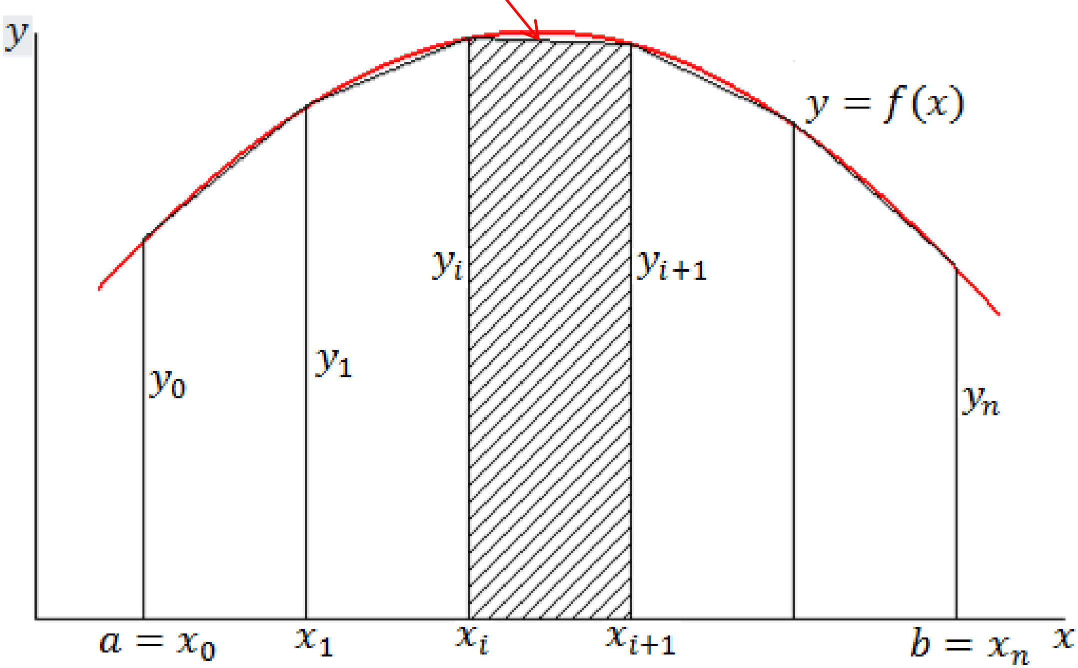
$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} P_0^i(x)dx = h \cdot f_{k+1/2}$$

Составная формула прямоугольников

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{k=0}^{n-1} f_{k+1/2}$$

Метод трапеций

$L^{(i)}{}_1(x)$



$$L_1^i(x) = f(x_i)\frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + f(x_{i+1})\frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_1^i(x)dx$$

Формула трапеций на элементарном отрезке:

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

Метод трапеций

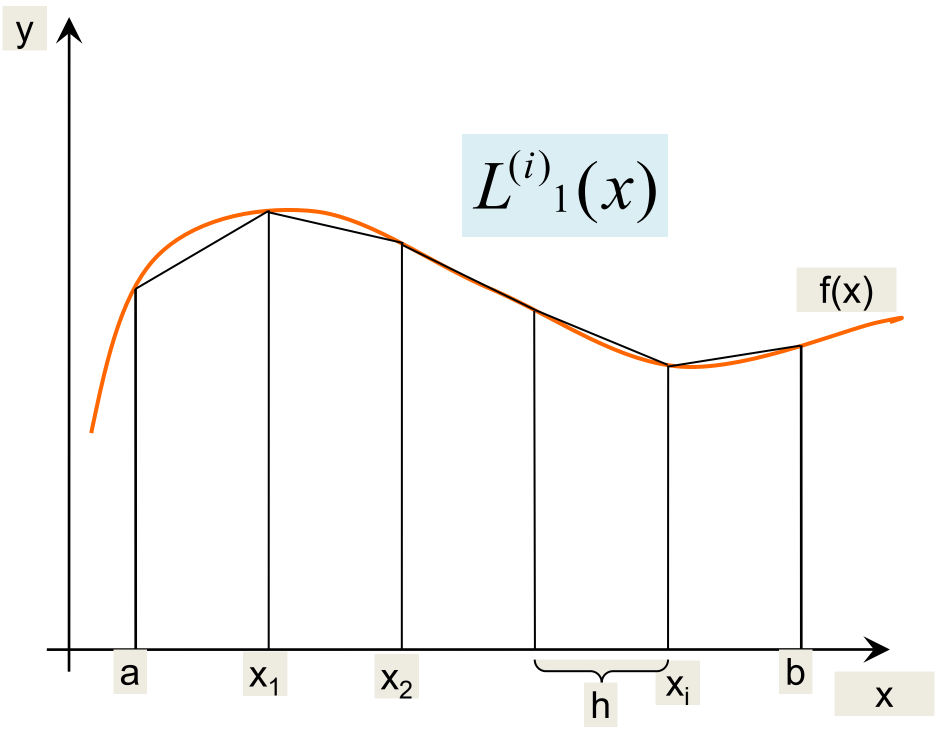


График функции на отрезке *[a,b]* заменяется ломаной линией

Составная формула трапеций:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \cdot \frac{f(a)+f(b)}{2} + h \cdot \sum_{i=1}^{n-1} f(a+i\cdot h)$$

Метод парабол (метод Симпсона)

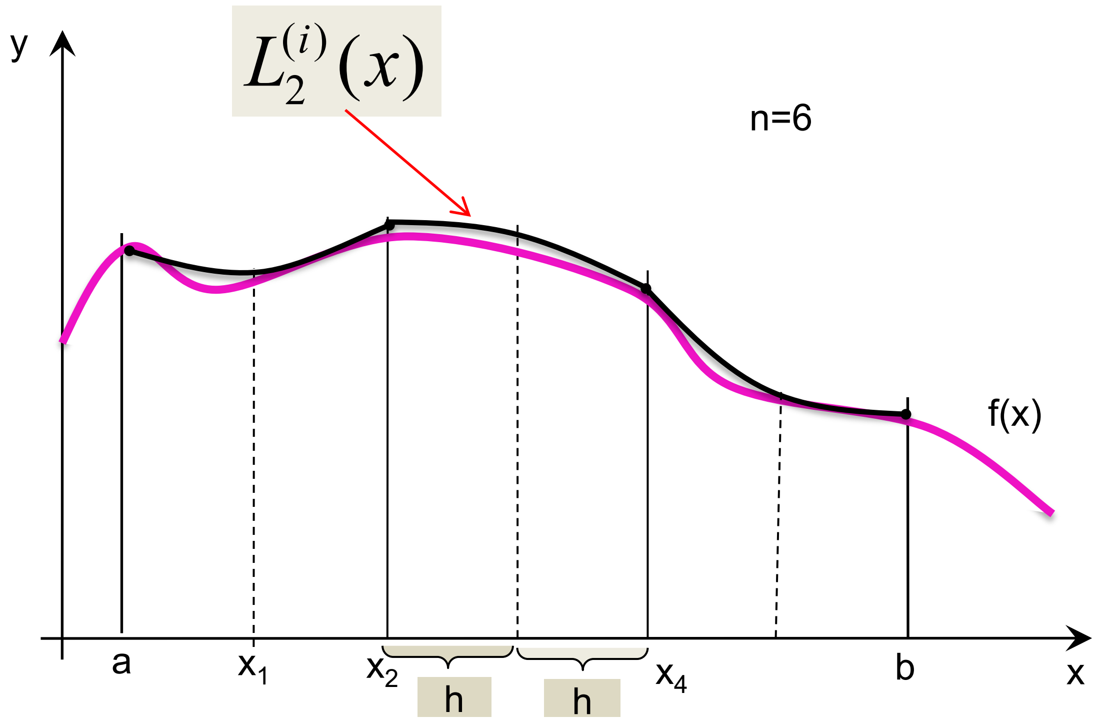
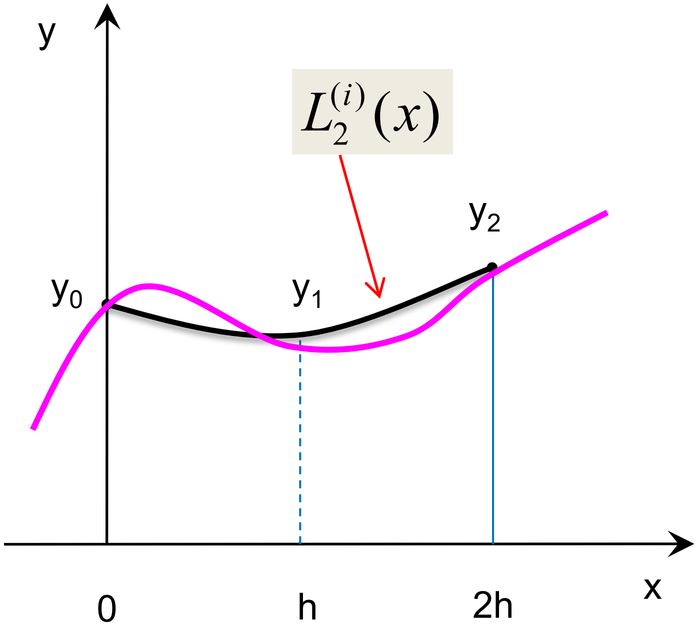


График функции на отрезке *[a,b]* заменяется участками парабол

Каждая парабола заменяет исходную подынтегральную функцию сразу над двумя полосами. Следовательно, число разбиений должно быть четным

Метод парабол (метод Симпсона)



$$f(x) \approx P_2^{\,i}(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \int_{x_i}^{x_{i+1}} L_2^i(x)dx$$

$$L_2^{(i)}(x) = y_{i-1}\frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} + y_i\frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} + y_{i+1}\frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)}$$

Метод парабол (метод Симпсона)

Формула парабол на элементарном отрезке:

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

Составная формула парабол (Симпсона) [**n=2m**] :

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f_0+4f_1+2f_2+\ldots+2f_{n-2}+4f_{n-1}+f_n)$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f_0+4\sum f_{нечетн.}+2\sum f_{четн.}+f_n)$$

Метод парабол (метод Симпсона)

Квадратурную ***формулу парабол*** (Симпсона) можно записать для каждого элементарного отрезка, используя в качестве узлов начальную, конечную и среднюю точки. Тогда составная *формулу парабол* имеет следующий вид:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6}\left(f(a) + 2\sum_{k=1}^{N-1} f(a+kh) + 4\sum_{k=0}^{N-1} f(a+(k+0.5)h) + f(b) \right)$$

Пример 1: Для оценки *погрешности численного интегрирования* сравним значения интеграла, рассчитанные различными численными методами с истинным значением интеграла, рассчитанным аналитически.

$$\int_{0}^{\pi/4} 10\sin 2x\,dx$$

Точное значение интеграла : $\boldsymbol{I = 5}$

Метод	n=4		n=10		n=50	
	Значение	Погреш-ность, %	Значение,	Погреш-ность, %	Значение,	Погреш-ность, %
Левых прямоуголь-ников	3,953831	20,9234	4,597016	8,0597	4,921049	1,5790
Средних прямоуголь-ников	5,032273	0,6454	5,005144	0,1029	5,000206	0,0041
Трапеций	4,935579	1,2884	4,989714	0,2057	4,999589	0,0082
Симпсона	5,000041	0,0008	5,000001	0,00002	5,000000	$\sim 10^{-7}$
Точное значение					5	

Пример 2. Вычислить значение энтропии воды при нагревании ее от 400 до 500 К по формуле:

$$S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T}$$

Принимаем значение теплоемкости при *v=const*:
C_v=35,0 Дж/моль*К .

Разобьем интервал интегрирования на 10 равных частей.

Шаг интегрирования равен h=(500 – 400) /10 =10.

$$f(T) = \frac{C_v}{T} = \frac{35}{T}$$

T	$f(T_i)$, $i=1,3,\ldots$	$f(T_i)$, $i=2,4,\ldots$	$f(T_0)$ // $f(T_{10})$	$T_{1/2}$	$f(\bar{T}) = \frac{35}{\bar{T}}$
400	–		0.0875	405	0.08642
410	0.08536			415	0.08434
420		0.08333		425	0.08235
430	0.08140			435	0.08046
440		0.07955		445	0.07865
450	0.07778			455	0.07692
460		0.07609		465	0.07527
470	0.07447			475	0.07368
480		0.07292		485	0.07216
490	0.07143			495	0.07071
500			0.0700		
Σ	**0.39044**	**0.31189**	**0.1575**		**0.78096**

Вычислим интеграл, используя данные таблицы:
- по формуле прямоугольников:

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = 10 * 0.78096 = 7.8096$$

- по формуле трапеций:

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = 10\left(\frac{0.1575}{2} + 0.39044 + 0.31189\right) = 7.8108$$

- по формуле Симпсона

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = \frac{10}{3}(0.1575 + 4 * 0.39044 + 2 * 0.31189) = 7.8101$$

Найдем точное значение интеграла:

$$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v dT}{T} = C_v (\ln 500 - \ln 400) = 7.8100242955$$

погрешность вычислений по формуле:

прямоугольников – 0.0004242955

трапеций – -0.0007757045

Симпсона – -0.000142955

Таким образом, наибольшую точность вычислений получили по формуле Симпсона.

Погрешность квадратурных формул

Независимо от выбранного метода, *погрешность обобщенной квадратурной формулы* будет *уменьшаться при увеличении числа разбиений N* за счет более точной аппроксимации подынтегральной функции. Однако при этом будет возрастать *вычислительная погрешность суммирования* частичных интегралов, и, начиная с некоторого N_o, она станет преобладающей.

Это особенность должна предостеречь от выбора чрезмерно большого числа N и привлечь внимание к важности как *априорной*, так и *апостериорной* оценок погрешности интегрирования.

Погрешность квадратурных формул

Зависимость *погрешности численного интегрирования* от *числа разбиений N интервала интегрирования*