ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ ФУНКЦИЙ ОДНОЙ ПЕРЕМЕННОЙ

Во многих случаях применение формулы Ньютона-Лейбница для вычисления определенного интеграла затруднительно или невозможно из-за того, что первообразная оказывается слишком сложной или вообще не может быть выражена через элементарные функции. Кроме того, подынтегральная функция в задачах моделирования часто задается в табличной форме и об аналитическом представлении первообразной речь вообще не идет. В этой ситуации проблема разрешается использованием численных методов. Вначале рассмотрим интегрирование функций с использованием формул Гаусса, обладающих наивысшей алгебраической точностью. Затем приведем другие часто используемые в вычислительной практике формулы (трапеций, средних, Симпсона).

5.1. Квадратурная формула Гаусса

Пусть интеграл вычисляется на стандартном интервале $[-1; 1]$. Задача состоит в том, чтобы подобрать точки $t_1, t_2, \ldots, t_n$ и коэффициенты $A_1, A_2, \ldots, A_n$ так, чтобы квадратурная формула

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \sum_{i=1}^{n} A_i f(t_i) \qquad (5.1)$$

была точной для всех полиномов наивысшей возможной степени. Из приведенного ниже способа нахождения узлов t_i и коэффициентов A_i следует, что эта наивысшая степень равна $N = 2n-1$.

Запишем полином в виде $f(t) = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k t^k$ Легко показать, что для того, чтобы формула (5.1) была точна для полинома, необходимо и достаточно, чтобы она была точна для степенных функций t^k при $k = 0,1,2,\ldots,2n-1$. Действительно, полагая, что согласно (5.1)

$$\int_{-1}^{1} t^k\,dt = \sum_{i=1}^{n} A_i t_i^k \qquad k = 0,1,2,\ldots,2n-1 \tag{5.2}$$

получим последовательно

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \int_{-1}^{1}\sum_{k=0}^{2n-1} a_k t^k dt = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k \int_{-1}^{1} t^k dt = \sum_{k=0}^{2n-1} a_k \sum_{i=1}^{n} A_i t_i^k = \sum_{i=1}^{n} A_i \sum_{k=0}^{2n-1} a_k t_i^k = \sum_{i=1}^{n} A_i f(t_i)\ ,$$

т.е. на самом деле из условия справедливости (5.2) пришли к формуле (5.1).

Таким образом, система (5.2) дает $2n$ соотношений для определения $2n$ неизвестных A_i и t_i . При этом

$$\int_{-1}^{1} t^k dt = \frac{1-(-1)^{k+1}}{k+1} = \begin{cases} \dfrac{2}{k+1} & ,\ \textit{при}\,k\ \textit{четном} \\ 0 & ,\ \textit{при}\ k\ \textit{нечетном} \end{cases}$$

Итак, согласно (5.2) коэффициенты A_i и узлы t_i находятся из системы $2n$ уравнений

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{n} A_i = 2, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} A_i t_i = 0, \\ \sum\limits_{i=1}^{n} A_i t_i^2 = \dfrac{2}{3}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \sum\limits_{i=1}^{n} A_i t_i^{2n-1} = 0. \end{cases} \tag{5.3}$$

Система (5.3) нелинейная, и ее решение найти довольно трудно. Рассмотрим следующий прием нахождения A_i и t_i. Для этого нам понадобятся полиномы Лежандра, которые определяются по формуле

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}[(x^2-1)^n]\ , \quad n = 0,1,2,\ldots$$

Используя данную формулу, выпишем в качестве примера первые 4 полинома Лежандра $P_0(x), P_1(x), P_2(x), P_3(x)$

$$P_0(x) = 1,$$

$$P_1(x) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x).$$

Полиномы Лежандра обладают рядом полезных свойств:

1) $P_n(1) = 1, P_n(-1) = (-1)^n$, $\quad n = 0,1,2,...$;

2) $\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x) dx = \delta_{mn} N_m, \; N_m = \dfrac{2}{2m+1}$;

3) полином Лежандра $P_n(x)$ имеет n различных и действительных корней, расположенных на интервале $[-1;1]$. (5.4)

4) Справедливо рекуррентное соотношение

$$P_m(x) = \frac{1}{m}\left[(2m-1)\, x\, P_{m-1}(x) - (m-1)\, P_{m-2}(x)\right] \quad . \tag{5.5}$$

Теперь перейдем к рассмотрению упомянутого выше удобного способа решения нелинейной системы (5.3).

Составим по узлам интегрирования многочлен n-й степени

$$w_n(x) = \prod_{k=1}^{n} (x - x_k)$$

.

Функция $f(x) = w_n(x) P_m(x)$ при $m \le n-1$ есть многочлен степени не выше $2n-1$. Значит для этой функции формула Гаусса справедлива:

$$\int_{-1}^{1} w_n(x)\,P_m(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} A_i w_n(x_i) P_m(x_i) = 0 \ ,$$

так как $w_n(x_i) = 0$.

Разложим $w_n(x)$ в ряд по ортогональным многочленам Лежандра:

$$w_n(x) = \sum_{k=0}^{n} b_k P_k(x) \ ,$$

$$\int_{-1}^{1} w_n(x)\,P_m(x)\,dx = \int_{-1}^{1} \Big[\sum_{k=0}^{n} b_k P_k(x)\Big] P_m(x) = b_m N_m = 0 \ ,$$

$m \le n-1$,

т.е. все коэффициенты $b_m = 0$ при $m \le n-1$. Значит $w_n(x)$ с точностью до численного множителя совпадает с $P_n(x)$.

Таким образом, узлами формулы Гаусса являются нули многочлена Лежандра степени n**.**

Зная t_i, из линейной теперь системы первых n уравнений (5.3) легко найти коэффициенты A_i $(i = 1,2,\dots,n)$. Определитель этой системы есть определитель Вандермонда.

Формулу $\int_{-1}^{1} f(t)dt = \sum_{i=1}^{n} A_i f(t_1)$, в которой $\mathbf{t_i}$ - нули полинома Лежандра $P_n(t)$, а A_i определяют из (5.3), называют **квадратурной формулой Гаусса**.

Пример. Вывести квадратурную формулу Гаусса для случая трех узлов, т.е. $n = 3$.

1. Ищем корни полинома Лежандра третьей степени

$$P_3(t) = \frac{1}{2}(5t^3 - 3t) = 0 \ .$$

Корни полинома:

$$t_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad t_2 = 0, \quad t_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

2. Из первых трех уравнений (5.3) находим коэффициенты A_i

$$A_1 + A_2 + A_3 = 2 \ ,$$

$$-\sqrt{\frac{3}{5}}A_1 + \sqrt{\frac{3}{5}}A_3 = 0 \ ,$$

$$\frac{3}{5}A_1 + \frac{3}{5}A_3 = \frac{2}{3} \ .$$

Отсюда

$$A_1 = A_3 = \frac{5}{9}, \ A_2 = \frac{8}{9} \ .$$

В итоге формула Гаусса при интегрировании на промежутке $[-1;1]$ имеет вид

$$\int_{-1}^{1} f(t)dt = \frac{1}{9}[5f(-\sqrt{3/5}) + 8f(0) + 5f(\sqrt{3/5})] \ .$$

При вычислении интеграла на произвольном интервале $[a;b]|$, т.е. $\int_a^b f(x)dx$ для применения квадратурной формулы Гаусса необходимо выполнить преобразование переменной

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

Получим

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(\frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}t)\,dt \ ,$$

тогда

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \ , \qquad (5.6)$$

где

$$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} t_i \;, \; i = 1,2,..,n; \qquad (5.7)$$

здесь t_i - нули полинома Лежандра $P_n(t)$, т.е. $P_n(t_i) = 0$.

Погрешность формулы Гаусса с n узлами выражается формулой

$$R_n = \frac{(b-a)^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi) \;.$$

Отсюда, в частности, следует

$$R_3 = \frac{1}{15750} (\frac{b-a}{2})^7 f^{(6)}(\xi) \;,$$

$$R_4 = \frac{1}{3472875} (\frac{b-a}{2})^9 f^{(8)}(\xi)$$

....

$$R_8 = \frac{1}{648984486150} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{13} f^{(12)}(\xi)$$

и т.д.

Сделаем замечание по поводу отыскания корней полинома Лежандра произвольной степени. Эта процедура выполняется численным методом, например, можно применить метод половинного деления. Сам полином строится по рекуррентной формуле (5.5), а для начала процесса используются полиномы $P_0(t)$ и $P_1(t)$ (выписаны выше). Процедура повторяется до тех пор, пока не будут найдены все n корней полинома. При этом следует учитывать свойство полиномов (5.4), согласно которому все эти корни располагаются на интервале $[-1;\; 1]$, и они все действительны и различны, т.е. кратных корней нет**.**

5.2. Другие формулы численного интегрирования

Ставится задача вычисления определенного интеграла

$$F = \int_a^b f(x)dx \qquad (5.8)$$

При построении нижеприведенных формул численного интегрирования используется общая идея, заключающаяся в том, что подынтегральную функцию $f(x)$ заменяют интерполяционным многочленом, который легко интегрируется. Поскольку коэффициенты полинома линейным образом выражаются через значения интегрируемой функции в узлах, то имеет место соотношение

$$f(x) \approx \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\varphi_i(x) + r(x)\,, \tag{5.9}$$

где n -количество узлов интерполяции на отрезке интегрирования $[a,b]$, $\varphi_i(x)$ - многочлены степени n, x_i - заданные узлы интерполяции, $r(x)$ - остаточный член.

Подставляя (5.9) в (5.8), получают формулу численного интегрирования (она называется квадратурной формулой)

$$\begin{aligned} &F = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + R, \\ &A_i = \int_a^b \varphi_i(x)dx, \quad R = \int_a^b r(x)dx \end{aligned}, \tag{5.10}$$

где A_i -веса квадратурной формулы, а R - погрешность или остаточный член формулы.

Понятно, что формула (5.10) точна для полинома степени n, а следовательно и для всех степеней x от 0 до n, т.е. справедливы соотношения, использованные ранее при получении системы (5.3)

$$\int_a^b x^k dx = \sum_{i=0}^{n} A_i x_i^k \quad \text{при} \quad k = 0,1,2....n. \tag{5.11}$$

При этом

$$\int_a^b x^k dx = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}.$$

Отсюда, задаваясь **количеством** и **расположением** узлов можно, применяя (5.11), вычислить веса квадратурной формулы.

Например, при $n = 0$, $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$ получим $b - a = A_0$, т.е. квадратурная формула имеет вид

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\ f(\frac{a+b}{2}) \qquad (5.12)$$

Эта формула называется формулой средних.

При $n = 1$, $x_0 = a, x_1 = b$ получим формулу трапеций.

При $n = 2$, $x_0 = a$, $x_1 = \dfrac{a+b}{2}$, $x_2 = b$ будет построена формула Симпсона

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{(b-a)}{6}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]. \qquad (5.13)$$

Эту процедуру можно продолжить, получая новые формулы со все большим количеством узлов. Однако можно поступить иначе. Используя интерполяционный полином Лагранжа, т.е. подставляя в (5.9) в качестве функций $\varphi_i(x)$ лагранжевы коэффициенты $L_i^{(n)}(x)$, и проведя интегрирование в формуле (5.10), вычислим A_i

$$A_i = (b-a)H_i,$$

где H_i - коэффициенты Котеса. Существуют таблицы коэффициентов Котеса вплоть до значений n=10

Приведем сводку ряда простейших формул, используемых в практике численного интегрирования, при большом количестве узлов и постоянном расстоянии между узлами (шаге сетки).

Формула трапеций:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + ... + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N)\ ,$$

$$R \approx -\frac{1}{12} h^2 \int_a^b f''(x)\,dx = O(h^2) \ ,$$

$$h = x_i - x_{i-1} = const\,,$$

где R - асимптотическая погрешность формулы; $f_i = f(x_i)$ - значения интегрируемой функции в узлах.

Формула средних:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{i=1}^{N} f(x_{i-1/2}), \quad x_{i-1/2} = \frac{x_{i-1} + x_i}{2} \ ,$$

$$R \approx \frac{1}{24} h^2 \int_a^b f''(x)dx = O(h^2) \ .$$

Формула Симпсона:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \sum_{i=0}^{\frac{N}{2}-1} (f_{2i} + 4 f_{2i+1} + f_{2i+2}) \ ,$$

$$R \approx -\frac{1}{180} h^4 \int_a^b f^{(4)}(x)dx = O(h^4)\,.$$

Отметим, что если подинтегральная функция не имеет соответствующих производных, то указанный теоретический порядок точности не достигается. Так, если на отрезке интегрирования не существуют 3-я и 4-я производные, то порядок точности формулы Симпсона будет только 2-ой, $O(h^2)$.