

9.6 Чисельне інтегрування

В багатьох задачах, що пов'язані з аналізом, ідентифікацією, оцінюванням якості систем виникає необхідність обчислення певних інтегралів.

Якщо функція $f(x)$ неперервна на відрізку $[a, b]$ й відома її первісна $F(x)$, то визначений інтеграл від a до b може бути обчислений за формулою Ньютона – Лейбніца

$$I = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a),$$

де $F'(x) = f(x)$.

Графічно інтеграл визначається площею, що обмежується графіком функції $y = f(x)$.

Але часто точно обчислити інтеграл важко через велику складність аналітичних перетворень, а інколи це взагалі неможливо (у випадках невласних інтегралів), чи коли підінтегральна функція задана набором числових даних, наприклад, отриманих з експерименту.

Задача чисельного інтегрування (numerical integration) функції полягає в обчисленні значення визначеного інтеграла на основі ряду значень підінтегральної функції. Формули чисельного інтегрування часто називають квадратурними.

Найбільш відомими методами знаходження визначених інтегралів є:

- формули прямокутників;
- методи Ньютона–Котеса, Гаусса, Чебишева, які основані на використанні так званих квадратурних формул, отриманих заміною $f(x)$ інтерполяційними багаточленами;
- методи Монте–Карло, основані на використанні статистичних моделей.

9.6.1 Формули прямокутників

Ідея методу полягає в розбитті відрізка інтегрування на дрібні частини $[x_{i-1}, x_i]$ і у побудові прямокутників, які спираються на відрізки $[x_{i-1}, x_i]$ й мають висоту $f(\xi_i)$. Якщо розбиття відрізка рівномірне, то $x_i = a + i \cdot h$, де h – крок:

$$h = \frac{(a - b)}{n}, \quad \overline{0, n..}$$

Вважається, що інтеграл дорівнює приблизно сумі площ побудованих прямокутників. *Узагальнена квадратурна формула прямокутників* має вигляд:

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

де точка $\xi_i \in (x_i, x_{i-1})$.

В залежності від вибору ξ_i розрізняють формули лівих, правих й середніх прямокутників.

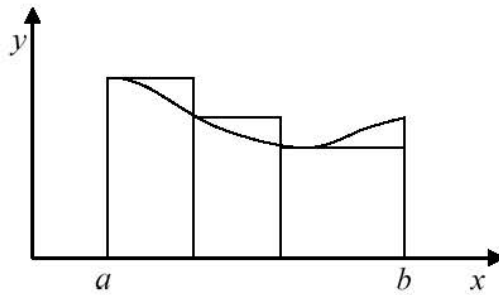
Нехай $\xi_i = x_{i-1}$. **Формула лівих прямокутників**, має вигляд:

$$I \approx \sum_{i=1}^n f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}) \text{ – для нерівновіддалених вузлів,}$$

$$I \approx h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}) \text{ – для рівновіддалених вузлів.}$$

Порядок точності формули – перший.

Геометрична інтерпретація наведена на рис. 9.20.



Нехай $\xi_i = x_i$. **Формула правих прямокутників**, має вигляд:

$$I \approx \sum_{i=1}^n f(x_i)(x_i - x_{i-1}) \text{ – для нерівновіддалених вузлів,}$$

$$I \approx h \sum_{i=1}^n f(x_i) \text{ – для рівновіддалених вузлів.}$$

Порядок точності формули – перший.

Геометрична інтерпретація наведена на рис. 9.21.

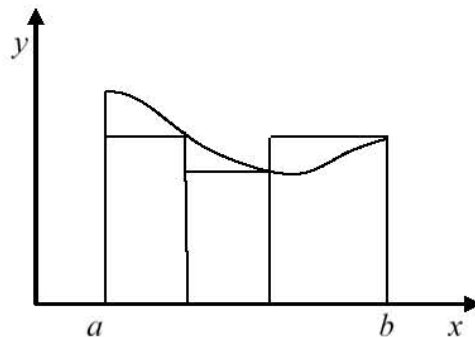


Рисунок 9.21 – Метод правих прямокутників

Нехай $\xi_i = \frac{1}{2}(x_{i-1} + x_i)$, **формула середніх прямокутників** має вигляд:

$$I \approx \sum_{i=1}^n f\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)(x_i - x_{i-1}) \quad \text{– для нерівновіддалених вузлів,}$$

$$I \approx h \sum_{i=1}^n f\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right) \quad \text{– для рівновіддалених вузлів.}$$

Порядок точності формул – другий.

Геометрична інтерпретація наведена на рис. 9.22.

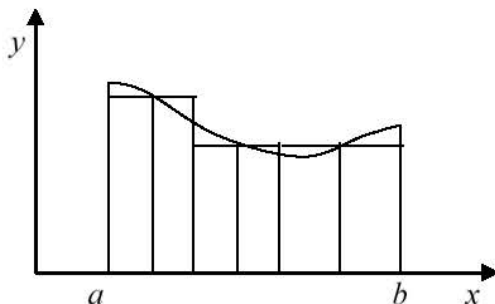


Рисунок 9.22 – Метод середніх прямокутників

Формули лівих та правих прямокутників можуть бути використані як для аналітично заданих функцій, так і для функцій, заданих таблично. Метод середніх прямокутників може використовуватись для пошуку інтегралів тільки від аналітично заданих функцій.

9.6.2 Формули Ньютона–Котеса

Для виведення формул Ньютона–Котеса інтеграл зображується у вигляді

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) + \Delta, \quad (9.26)$$

де x_i – вузли інтерполяції; A_i – коефіцієнти, які залежать від вигляду формули;

Δ – похибка квадратурної формули.

Замінюючи в (9.26) підінтегральну функцію відповідним інтерполяційним поліномом Лагранжа для n рівновіддалених вузлів з кроком $h = \frac{b-a}{n}$, можна одержати таку формулу для розрахунку коефіцієнтів A_i при довільній кількості вузлів.

$$A_i = \frac{b-a}{n} \frac{(-1)^{n-1}}{i!(n-1)!} \int_0^n \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{(q-i)} dq, \quad (9.27)$$

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

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

При цьому формула (9.26) набуває вигляду

$$\int_a^b f(x) dx = (b-a) \sum_{i=0}^n H_i f(x_i) \quad (9.28)$$

і має такі властивості:

$$\sum_{i=0}^n H_i = 1 \quad i \quad H_i = H_{n-i}$$

При $n=1$ і $n=2$ із (9.27) та (9.28) отримаємо формули трапецій і Сімпсона:

$$\int_a^b f(x) dx = h \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1} \right),$$

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{h}{3} (y_0 + y_n + 2(y_2 + y_4 + \dots + y_{n-2}) + 4(y_1 + y_3 + \dots + y_{n-1})).$$

В таблиці 9.6 наведені значення коефіцієнтів для $n = 1, 2, \dots, 8$.

Таблиця 9.6 – Коефіцієнти Котеса

$\begin{matrix} H \\ N \end{matrix}$	H_0	H_1	H_2	H_3	H_4	H_5	H_6	H_7	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	1223	3577	751		17280
8	989	5888	-928	10496	-4540	10496	-928	5888	989	28350

Похибки формул трапецій і Сімпсона визначаються, відповідно, із виразів

$$\Delta = -\frac{h^3}{12}M_2 \quad \text{та} \quad \Delta = -\frac{h^5}{90}M_4,$$

де M_2 і M_4 – максимальні значення другої та четвертої похідних $f(x)$ при $x \in (a, b)$.

Складові формули Ньютона – Котеса отримаємо шляхом комбінації простих формул. Наприклад, для формул трапецій і Сімпсона (для парних n)

$$I = \frac{h}{2} [f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_1) + \dots + f(x_n)],$$

$$I = \frac{h}{3} [f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_1) + 4f(x_1) + \dots + f(x_n)].$$

Причому похибки складових формул будуть, відповідно,

$$\Delta = -n \frac{h^3}{12} M_2 \quad \text{та} \quad \Delta = -n \frac{h^5}{180} M_4.$$

Аналогічно можна отримати складові формули Ньютона–Котеса більш високих порядків.

Для оцінювання похибки на практиці можна користуватись методом Рунге (екстраполяції Річардсона), аналогічно тому, як це робиться для однокрокових методів розв'язання задачі Коші.

9.6.3 Формула Чебишова

Формула (9.28) може бути приведена до вигляду

$$\int_{-1}^1 f(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i f(t_i) \quad (9.29)$$

заміною змінних

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

При виведенні формули Чебишова використовуються такі умови:

- коефіцієнти A_i рівні між собою;
- квадратурна формула (9.29) точна для всіх поліномів до степеня n включно.

За цих умов формула (9.29) має вигляд:

$$\int_{-1}^1 f(t) dt = \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n f(t_i). \quad (9.30)$$

Для знаходження t_i використовуємо другу умову, згідно з якою формула (9.30) повинна бути точною для функції вигляду

$$f(t) = t^k, k = 1, \dots, n.$$

Після підстановки цих функцій в (9.30) отримаємо систему рівнянь

$$\begin{cases} t_1 + t_2 + \dots + t_n = 0, \\ t_1^2 + t_2^2 + \dots + t_n^2 = \frac{n}{3}, \\ \dots \\ t_1^n + t_2^n + \dots + t_n^n = \frac{n[1 - (-1)^{n+1}]}{2(n+1)}. \end{cases} \quad (9.31)$$

Система рівнянь (9.31) має розв'язок при $n < 8$ та $n = 9$. В цій обмеженій точності і полягає недолік формули Чебишова. Значення t_i для різних n наведені в таблиці 9.7.

Для довільного інтервалу (a, b) формула (9.30) приймає вигляд

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

де

$$x_i = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} t_i.$$

Таблиця 9.7 – Значення абсцис t_i в формулі Чебишова

n	i	t_i
2	1;2	$\mp 0,577350$
3	1;3	$\mp 0,707107$
	2	0
4	1;4	$\mp 0,794654$
	2;3	$\mp 0,187592$
5	1;5	$\mp 0,832498$
	2;4	$\mp 0,3745413$
	3	0

n	i	t_i
6	1;6	$\mp 0,866247$
	2;5	$\mp 0,422519$
	3;4	$\mp 0,266635$
7	1;7	$\mp 0,883862$
	2;6	$\mp 0,529657$
	3;5	$\mp 0,323912$
	4	0

Похибка обчислень за методом Чебишова:

$$\Delta = \int_a^b \frac{\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(x) dx - \frac{b-a}{n(n+1)!} \sum_{i=1}^n \left(x_i - \frac{a+b}{2}\right)^{n+1} f^{(n+1)}(x).$$

9.6.4 Формула Гаусса

Формула Гаусса називається формулою найвищої алгебраїчної точності. Для формули вигляду (9.29) найвища точність може бути досягнута для поліномів степеня $(2n - 1)$, які визначаються $2n$ постійними t_i і A_i ($i = 1, 2, \dots, n$).

Завдання полягає у визначенні коефіцієнтів A_i і абсцис точок t_i .

Для знаходження цих постійних розглянемо виконання формули (9.29) для функцій вигляду

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

Враховуючи, що

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

отримаємо систему рівнянь

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n A_i = 2; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i = 0; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i^2 = 1; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i^{2n-2} = \frac{2}{2n-1}; \\ \sum_{i=1}^n A_i t_i^{2n-1} = 0. \end{cases} \quad (9.32)$$

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

$$f(t) = t^k P_n(t), \quad k = 0, 1, \dots, n-1,$$

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 (9.32), і формула (9.29) приймає вигляд

$$\int_{-1}^1 t^k P_n(t) dt = \sum_{i=1}^n A_i t_i^k P_n(t_i) \quad (9.33)$$

В результаті властивості ортогональності ліва частина виразу (9.33) 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 (9.32) і враховуючи перші n рівнянь, можна визначити коефіцієнти A_i .

Формула (9.29), де t_i – нулі полінома Лежандра $P_n(t)$, а $A_i, i = 1, 2, \dots, n$ визначаються із системи (9.32), називається формулою Гаусса.

Значення t_i, A_i для різних n наведені в таблиці 9.8.

Таблиця 9.8 – Параметри формули Гаусса

n	i	t_i	A_i
1	1	0	2
2	1;2	$\mp 0,57735027$	1
3	1;3	$\mp 0,77459667$	$5/9=0,55555556$
	2	0	$8/9=0,88888889$
4	1;4	$\mp 0,86113631$	0,34785484
	2;3	$\mp 0,33998104$	0,65214516
6	1;6	$\mp 0,93246951$	0,17132450
	2;5	$\mp 0,66120939$	0,36076158
	3;4	$\mp 0,238619119$	0,46791394
7	1;7	$\mp 0,94910791$	0,12948496
	2;6	$\mp 0,74153119$	0,27970540
	3;5	$\mp 0,40584515$	0,38183006
	4	0	0,41795918
8	1;8	$\mp 0,96028986$	0,10122854
	2;7	$\mp 0,79666648$	0,22238104
	3;6	$\mp 0,52553142$	0,31370664
	4;5	$\mp 0,18343464$	0,36268378

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

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

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

Оцінка похибки формули Гаусса з n вузлами визначається зі співвідношення

$$\Delta \leq \frac{(b-a)^{2n+1} (n!)^4 M_{2n}}{2^{2n+1} [(2n)!]^3 (2n+1)}$$

де M_{2n} – максимальне значення $2n$ похідної на відрізку $[a, b]$.

У випадку, коли підінтегральна функція задана аналітично, може бути поставлена задача про знаходження інтеграла з наперед заданою точністю. Оскільки точність розглянутих вище квадратурних формул залежить від кроку h , то точність результату можна підвищити, зменшуючи крок. Наприклад, можна ділити крок навпіл. В цьому випадку для оцінювання наближення до точного значення інтеграла використовують вже згадуваний метод Рунге:

$$I - I_{h/2} \approx \frac{I_{h/2} - I}{2^p - 1},$$

де I – точне значення інтеграла; I_h – наближене значення, отримане з кроком h ; $I_{h/2}$ – наближене значення, отримане з кроком $h/2$; p – порядок точності квадратурної формули.

Тому для знаходження інтеграла з заданою точністю ε потрібно обрати квадратурну формулу й початковий крок $h=h_0$. Далі розрахувати інтеграл з кроком $h/2$. Зменшувати крок навпіл необхідно до тих пір, поки не виконається умова:

$$|I_{h/2} - I_h| < \varepsilon.$$

Коли ця умова виконана, інтеграл приблизно дорівнює $I_{h/2}$.

9.6.5 Алгоритми застосування чисельних методів

Послідовність застосування формул Ньютона–Котеса.

1. Вибір формули і знаходження (за допомогою таблиці 9.6) коефіцієнтів A_j .
2. Складання алгоритму та програми, причому:
 - у випадку задання дискретних значень $y_i = f(x_i)$ через крок h ці значення підставляються в (9.21);
 - у випадку задання функції $y = f(x)$ значення $y_i = f(x_i)$ обчислюються, причому $x_i = x_0 + ih = a + ih (a \leq x \leq b)$.
3. Оцінювання похибки.

Послідовність застосування методу Гаусса

1. Вибір порядку методу і знаходження (за допомогою таблиці 9.8) коефіцієнтів A_j і значень $t_j (-1 \leq t \leq 1)$.
2. Розбиття інтервалу $a \leq x \leq b$ на I інтервалів (рис. 9.23).
3. Знаходження значень для кожного інтервалу ($j=1, \dots, I$)

$$I = \sum_{j=1}^I I_j.$$

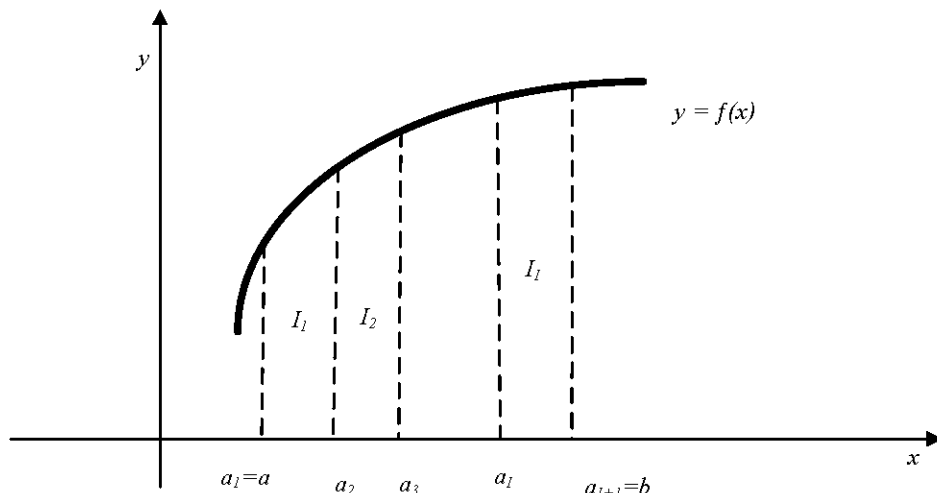


Рисунок 9.23 – Метод Гаусса. Розбивка інтервалу

При цьому значення абсцис x_j всередині кожного інтервалу j знаходяться за формулою

$$x_i = \frac{a_{j+1} + a_i}{2} + \frac{a_{j+1} - a_j}{2} t_i, \quad (9.34)$$

де

$$\begin{aligned} a_{j+1} &= a_j + h; & a_1 &= a \\ a_{l+1} &= b & j &= 1, \dots, l; \\ h &= \frac{b-a}{n} \end{aligned}$$

I_j знаходяться за формулою:

$$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(x) dx = \frac{(a_{j+1} - a_j)}{2} \sum_{i=1}^n A_i f(x_i) \quad (9.35)$$

4. Оцінювання похибки.

В методі Чебишова послідовність дій аналогічна методу Гаусса, але в пункті 1 коефіцієнти t_j беруться з таблиці 9.8, а в пункті 3 для знаходження j -го інтеграла використовується формула

$$I_j = \int_{a_j}^{a_{j+1}} f(x) dx = \frac{(a_{j+1} - a_j)}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i), \quad (9.36)$$

де x_i оцінюється тим же чином, що і в методі Гаусса, за формулою (9.34).

9.6.6 Метод Монте – Карло

Метод чисельного інтегрування Монте–Карло – це найбільш відоме застосування статистичного моделювання для розв’язання прикладних математичних задач.

Якщо з послідовністю випадкових чисел $\{x_i\} \in X$ з законом розподілу ймовірностей $f_x(x)$ провести функціональне перетворення

$$y_i = \varphi(x_i),$$

то математичне сподівання отриманої послідовності випадкових чисел $\{y_i\} \in Y$

$$m_y = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) f_x(x) dx \quad (9.37)$$

при обсязі вибірки більше декількох тисяч чисел з достатньо високою точністю може бути оцінено за формулою

$$m_y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i. \quad (9.38)$$

Введемо в вирази (9.34), (9.35) так звану функцію індикатора області

$$1[a, b, x] = \begin{cases} 1, & a \leq x \leq b; \\ 0, & x < a, x > b. \end{cases}$$

Якщо тепер обрати функцію

$$\varphi(x) = \frac{f(x)}{f_x(x)},$$

то кінцевий вираз буде мати вигляд

$$I = m_y = \int_a^b f(x) dx = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i)}{f_x(x_i)} 1[a, b, x_i].$$

Похибка методу Монте – Карло визначається похибкою генерації псевдовипадкової послідовності чисел, що згенеровані на ЕОМ, та обсягом вибірки. Вона може бути оцінена із співвідношення

$$\Delta = \frac{1}{2\sqrt{n(1-P)}}, \quad (9.39)$$

де P – гарантована ймовірність потрапляння похибки в інтервал $[-\Delta; +\Delta]$.

Кількість випробувань n не залежить від кратності інтеграла, тому метод Монте–Карло знаходить застосування для обчислення багатократних інтегралів,

де застосовувати інші методи чисельного інтегрування неефективно через помітне збільшення кількості обчислювальних операцій.

Розглянемо послідовність дій при обчисленні кратних інтегралів. Для реалізації цієї процедури перш за все потрібно мати m генераторів випадкових чисел, де m дорівнює кратності інтегрування.

Геометрично, обчислення m -кратного інтеграла

$$I = \iiint_{(S)} \dots \int f(x_1, x_2, \dots, x_m) dx_1 dx_2 \dots dx_m, \quad (9.40)$$

де $y = f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ – неперервна функція в обмеженій замкненій області S , зводиться до визначення $(m+1)$ -вимірного об'єму прямого циліндра в просторі $0x_1, x_2, \dots, x_m, y$, що побудований на основі S і обмежений зверху поверхнею $y = f(x_1, x_2, \dots, x_m)$.

Для перетворення інтеграла (9.40) таким чином, щоб нова область інтегрування цілком знаходилась всередині одиничного m -вимірного куба σ , зробимо заміну змінних

$$x_i = a_i + (b_i - a_i)\xi_i,$$

де ξ_i – відповідні координати від 0 до 1; a_i, b_i – граничні значення координат, де розташована область інтегрування.

Тоді з (9.40) отримуємо

$$I = (a_1 - b_1)(a_2 - b_2) \dots (a_m - b_m) I_\xi,$$

де

$$I_\xi = \iiint_{(\sigma)} \dots \int f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m) d\xi_1 d\xi_2 \dots d\xi_m.$$

Якщо застосувати m генераторів рівномірно розподілених випадкових чисел в діапазоні $(0,1)$, то обчислення середнього значення функції від їх комбінацій з застосуванням багатовимірного індикатора області інтегрування дасть шукану оцінку інтеграла

$$I_\xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\xi_{1i}, \xi_{2i}, \dots, \xi_{mi}) 1[\xi_{1i}, \xi_{2i}, \dots, \xi_{mi}]$$

де $1[\xi_{1i}, \xi_{2i}, \dots, \xi_{mi}]$ дорівнює 1, якщо точка потрапляє всередину області інтегрування, і 0, якщо не потрапляє.

Похибка обчислення m -кратного інтеграла за методом Монте – Карло оцінюється аналогічно однократному за формулою (9.39).