***Лекція 6.* Чисельне інтегрування.**

ПЛАН

1. *Наближене обчислення визначених інтегралів*
2. *Оцінки похибок*
3. *Принцип Рунге оцінки похибок*
4. *Про чисельну реалізацію квадратурних формул*
5. *Метод чисельного диференціювання функцій з використанням інтерполяційного многочлена Ньютона.*

6.1. Наближене обчислення визначених інтегралів

Для наближеного обчислення інтеграла від обмеженої на проміжку $[a,b]$ функції

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

застосовують квадратурні формули [1], [2], [3], [4].

Квадратурна формула - це наближена рівність

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} q_i f(x_i) = S_n(f), \qquad (6.1)$$

де q_i - деякі числа, які називають коефіцієнтами, а x_i - точки відрізку [a,b]

$$a \le x_1 < x_2 < \ldots < x_n \le b.$$

Їх називають вузлами квадратурної формули. Кожна квардратурна формула визначається набором вагових коефіцієнтів q_i та вузлів $x_i, i = 1,2,\ldots,n.$ Для обчислення необхідна також інформація про підінтегральну функцію. Такою інформацією є обчислені значення функції $f(x)$ у вузлах $x_i, i = 1,2,\ldots,n.$

Різниця

$$R(f) = \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=1}^{n} q_i f(x_i)$$

називається похибкою квадратурної формули.

На практиці широко використовуються формули Ньютона-Котеса з рівновіддаленими вузлами. Наведемо найпростіші з них.

Нехай відрізок інтегрування $[a,b]$ поділено на N рівних частин точками ділення $x_i = x_0 + ih, \; i = 1,2,\ldots N, \; x_0 = a, x_N = b, h = \dfrac{b-a}{N}$

Формула *лівих прямокутників*

$$I(f) \approx h[f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{N-1})]. \qquad (6.2)$$

Формула *правих прямокутників*

$$I(f) \approx h[f(x_1) + f(x_2) + \ldots + f(x_N)]. \qquad (6.3)$$

Формула *середніх прямокутни*ків

$$I(f) \approx h\left[f(x_0 + \frac{h}{2}) + f(x_1 + \frac{h}{2}) + \ldots + f(x_{N-1} + \frac{h}{2}) \right]. \qquad (6.4)$$

Формула *трапецій*

$$I(f) \approx h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N)\right]. \tag{6.5}$$

Формула *Симпсона* $\left(N = 2m,\, h = \dfrac{b-a}{2m}\right)$

$$I(f) \approx \frac{h}{3}\{f(x_0) + 4\left[f(x_1) + f(x_3) + \ldots + f(x_{2m-1})\right] +$$

$$+2\left[f(x_2) + f(x_4) + \ldots + f(x_{2m-2})\right] + f(x_{2m})\}. \tag{6.6}$$

6.2. Оцінка похибок

Похибки наведених формул мають вигляд. Для формул лівих та правих прямокутників

$$|R_{пр}(f)| \le h\frac{b-a}{2}\max_{a\le x\le b}|f'(x)|. \tag{6.7}$$

Для формули середніх прямокутників

$$|R_{спр}(f)| \le h^2\frac{b-a}{24}\max_{a\le x\le b}|f''(x)|. \tag{6.8}$$

Для формули трапецій

$$|R_{тр}(f)| \le h^2\frac{b-a}{12}\max_{a\le x\le b}|f''(x)|. \tag{6.9}$$

Для формули Симпсона

$$|R_{сім}(f)| \le h^4\frac{b-a}{180}\max_{a\le x\le b}|f^{(IV)}(x)|. \tag{6.10}$$

Наведені формули дозволяють оцінити порядок точності p квадратур по відношенню до кроку h. Для формул середніх прямокутників і трапецій $p = 2$, для формули Симпсона $p = 4$. Це означає, що зменшуючи крок інтегрування у λ разів, ми можемо розраховувати на зменьшення похибки у λ^p разів.

Якщо розглядати похибку $R(f)$ як функцію h, то, враховуючи сказане вище, $R(f)$ можна записати у вигляді

$$R(f) = R_h = Mh^p + o(h^p),$$

де p - порядок точності квадратури, M - деяка константа, а $o(h^p)$ - величина більш високого порядку малості ніж h^p

$$\lim_{h\to 0}\frac{o(h^p)}{h^p} = 0.$$

6.3. Принцип Рунге оцінки похибок

Центральною проблемою кожного алгоритму є оцінка його похибки. Формули (6.7)-(6.10) дозволяють за певних умов розв'язати цю проблему. Проте з практичної точки зору вони не є ефективними, тому що їх застосування пов'язане, як правило, з складними перетвореннями та дослідженнями похідних. Існують інші методи оцінки похибки, які засновані на інформації, яка використовується для розв'язання поставленої проблеми.

Такою інформацією є обчислені значення функції. Для розв'язання такої задачі існують спеціальни методи. Одним з них є принцип Рунге, який базується на подвійному перерахунку. Він полягає в наступному.

Нехай для обчислення інтеграла

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

застосовується деяка квадратурна формула S з порядком точності p відносно h. Обчислимо двічи наближене значення інтегралів S_{h_1} та S_{h_2}, з кроком h_1 та h_2, $h_1 = \lambda h_2 \ (\lambda > 1)$. Тоді похибка $R(f)$

$$| R(f) | = | I(f) - S_{h_2} | \approx \frac{| S_{h_2} - S_{h_1} |}{\lambda^p - 1}. \tag{6.11}$$

Формула дозволяє наближено оцінити похибку обчислень.

Якщо точність ε задана, то для досягнення необхідної точності послідовно проводять обчислення, зменшуючи кожний раз крок у λ разів (λ - фіксоване число) поки не буде досягнена необхідна точність

$$\frac{| S_{h_2} - S_{h_1} |}{\lambda^p - 1} < \varepsilon. \tag{6.12}$$

Після цього покладають

$$I(f) \approx S_{h_2}.$$

Як правило, таку процедуру застосовують, зменшуючи крок у 2 рази (λ=2).

Зауваження. Як говорилось вище, формула (6.11) надає наближене значення оцінки похибки.

Формула виводиться за припущенням, що похибка може бути представлена у виді

$$R(f) = Mh^p,$$

де h - крок інтегруванння, p - порядок точності, M - константа.

Насправді похибка має іншу структуру

$$R(f) = Mh^p + o(h^p).$$

Тому умова (6.11) не завжди виконується. Для її підтвердження необхідно зберегти три обчислених значення інтегралів $S_{h_1}, S_{h_2}, S_{h_3}$ з кроком $h_1, h_2 = \frac{h_1}{\lambda}, h_3 = \frac{h_2}{\lambda}$ відповідно та перевірити умову

$$\left| \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{S_{h_3} - S_{h_2}} - \lambda^p \right| < (\lambda^{p+1} - 1)\varepsilon, \tag{6.13}$$

де p - порядок точності формули.

6.4. Про чисельну реалізацію квадратурних формул

Чисельна реалізація методу - важливий етап розв'язання будь-якої задачі. Тому при побудові алгоритму слід особливу увагу приділяти организації обчислень, найбільш раціональному їх проведенню, зменьшенню обчислювальної роботи.

Наприклад, при обчисленні інтегралу з контролем похибки за методом Рунге треба послідовно обчислювати значення $S_h, S_{\frac{h}{2}}$ збільшуючи число вузлів на кожному кроці. Обчислюючи значення $S_{\frac{h}{2}}$ незалежно, ми збільшуємо обчислювальну роботу, бо для половини вузлів значення функції були обчислені при знаходженні S_h. При цьому можна так організувати обчислення $S_{\frac{h}{2}}$, щоб не повторювати роботу, виконану при знаходженні S_h.

Побудуємо алгоритм для формули Симпсона.

Нехай обчислене значення S_{h_1} для кроку $h = \frac{b-a}{2m}$ з $2m+1$ вузлами $(m \geq 1)$ $x_0, x_1, \ldots, x_{2m}$. є

$$S_{h_1} = \frac{h_1}{3}\left\{ f_0 + 4[f_1 + f_3 + \ldots + f_{2m-1}] + 2[f_2 + f_4 + \ldots + f_{2m-2}] + f_{2m} \right\},$$

де $f_i = f(x_i)$.

Формулу можна записати компактно, якщо позначити

$$W_1 = f_0 + 2(f_2 + f_4 + \ldots + f_{2m-2}) + f_{2m}, \quad V_1 = 2\sum_{i=1}^{m} f(a + (2i-1)h_1).$$

Тоді

$$S_{h_1} = \frac{h_1}{3}[W_1 + 2V_1].$$

Визначимо S_{h_2}, удвоє зменшивши крок, $h_2 = \frac{h_1}{2}$. При цьому додається $2m$ нових точок:

$$x_i^* = a + (2i-1)h_2, \quad i = 1, 2, \ldots, 2m.$$

Обчислимо значення функції у цих точках

$$f_i^* = f(a + (2i-1)h_2)$$

і знайдемо

$$S_{h_2} = \frac{h_3}{3}\left\{ f_0 + 4(f_1^* + f_2^* + \ldots + f_{2m}^*) + 2(f_1 + f_2 + \ldots + f_{2m-1}) + f_{2m} \right\}.$$

Покладемо

$$W_2 = f_0 + 2(f_1 + f_3 + \ldots + f_{2m-1}) + 2(f_2 + f_4 + \ldots + f_{2m-2}) + f_{2m} \quad V_2 = 2\sum_{i=1}^{2m} f(a + (2i-1)h_2).$$

Тоді

$$S_{\frac{h}{2}} = \frac{h_2}{3}[W_2 + 2V_2].$$

При цьому

$$W_2 = W_1 + V_1,$$

$$V_2 = \sum_{i=1}^{2m} f(a + (2i-1)h_2).$$

Таким чином, обчислення S_{h_m}, $h_m = \frac{b-a}{2m}$, при послідовному діленні кроку $h_1 = \frac{b-a}{2}$ виконуємо згідно з наступним.

Покладаємо

$$h_1 = \frac{b-a}{2},$$

$$W_1 = f_a + f_b,$$

$$V_1 = 2f(a + h_1), \qquad m = 1.$$

Покладемо, кожний раз подвоюючи m,

$$h_j = \frac{h_{j-1}}{2},$$

$$W_j = W_{j-1} + V_{j-1},$$

$$V_j = 2\sum_{i=1}^{2m} f(a + (2i-1)h_j).$$

Покладаючи $j = 2,3,\ldots$ знаходимо

$$S_{h_m} = \frac{h_m}{3}[W_m + 2V_m].$$

Точність контролюємо за допомогою співвідношень (6.12) та (6.13). Ці співвідношення на проміжних етапах не є об'єктом аналізу.

Для скорочення обчислень і спрощення процедури перетворимо співвідношення (6.11). Розглянемо

$$S_{h_2} - S_{h_1} = \frac{h_2}{3}[W_2 + 2V_2] - \frac{h_1}{3}[W_1 + 2V_1] = \frac{h_2}{3}[-W_2 + 2(V_2 - V_1)].$$

Таким чином співвідношення (11) приймає вигляд

$$h_2 \,|-W_2 + 2(V_2 - V_1)| \le 45\varepsilon,$$

де ε - надана точність.

Підведемо підсумок. Алгоритм обчислення інтеграла з заданою точністю ε за формулою Симпсона має наступний вигляд.

1. $E = 45 \cdot \varepsilon.$

2. Обчислюємо

$$m = 1, \quad h = \frac{b-a}{2},$$

$$W = f_a + f_b, \quad V_1 = 2f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

3. Знаходимо

$$m := 2m, \quad h := \frac{h}{2}, \quad W = W + V_1,$$

$$V_2 = 2\sum_{i=1}^{m} f(a + (2i-1)h) \quad Q = h\,|2(V_2 - V_1) - W|.$$

4. Покладаємо

$$V_1 = V_2, \qquad P = Q.$$

5. Ділимо крок на 2, збільшуємо m в два рази:

$$m := 2m, \quad h := \frac{h}{2}, \quad W = W + V_1,$$

$$V_2 = 2\sum_{i=1}^{m} f(a + (2i-1)h) \quad Q = h\,|2(V_2 - V_1) - W|.$$

6. Перевіряємо умови

$$Q < E. \qquad (6.14)$$

$$\left|\frac{P}{Q} - 16\right| < 30E. \qquad (6.15)$$

7. Якщо умова (6.14) або (6.15) не виконується, то повертаємося до пункту 4.

8. Якщо обидві умови виконуються, то покладаємо

$$I(f) \approx \frac{h}{3}(W + 2V_2).$$

Побудуємо алгоритм обчислення інтегралу за формулою лівих прямокутників. При n вузлах формула має вигляд:

$$S_{h_1} = h_1[f(x_1) + \ldots + f(x_n)],$$

де $h_1 = \dfrac{b - a}{n}$

Покладемо

$$V_1 = \sum_{i=1}^{n} f(x_i),\ \text{ò} \qquad S_{h_1} = h_1 V_1.$$

Ділимо крок на 2, $h_2 = \dfrac{h_1}{2}$ та подвіюємо кількість вузлів $n_2 = 2n$. Додаємо вузли $y_1, y_2, \ldots, y_n$

$$y_i = a + (2i - 1)h_2.$$

Тоді

$$Sh_2 = h_2\left[\sum_{i=1}^{n} f(x_i) + \sum_{i=1}^{n} f(y_i)\right].$$

Якщо покласти

$$W_1 = \sum_{i=1}^{n_2} f(a + (2i - 1)h_2),\ \text{ò}$$

$$V_2 = V_1 + W_1, \qquad S_{h_2} = h_2 V_2$$

При цьому

$$S_{h_2} - S_{h_1} = h_2 V_2 - h_1 V_1 = h_2[W_1 - V_1].$$

Аналогічно отримуємо на наступному етапі

$$n_3 = 2n_2, \quad h_3 = \frac{h_2}{2}, \quad W_2 = \sum_{i=1}^{n_3} f(a + (2i - 1)h_3), \quad V_3 = V_2 + W_2, \quad S_{h_3} = h_3 V_3,$$

а також

$$S_{h_3} - S_{h_2} = h_3[W_2 - V_2].$$

Перевіряємо умови (12) та (13). Так як порядок точності форми лівих прямокутників $p = 1$ та $\lambda = 2$, то ці умови приймуть вигляд:

$$h_2 |W_1 - V_1| = 2h_3 |W_1 - V_1| < \varepsilon$$

та

$$\left| \frac{W_1 - V_1}{W_2 - V_2} - 1 \right| < 1,5\varepsilon.$$

Таким чином, алгоритм може бути записаний у наступному вигляді:

1. $m = 0, \quad h = b - a, \quad v = f(a)$
2. Покладаємо

$$m = 1, \quad h := 0,5h, \quad W = f(a + h), \quad V := V + W, \quad P = W - V.$$

3. Збільшуємо число вузлів вдвічі та ділимо крок на 2.

$$m := 2m, \quad h := 0,5h, \quad W = \sum_{i=1}^{m} f(a + (2i - 1)h), \quad V = V + W, \quad Q = W - V$$

4. Перевіряємо умову

$$hP < 0,5\varepsilon \tag{6.15}$$

та

$$\left| \frac{P}{Q} - 1 \right| < 1,5\varepsilon \tag{6.15}$$

5. Якщо не виконана жодна із умов, то покладаємо

$$P = Q$$

та переходимо до пункту 3 алгоритму. 6. Якщо обидві умови (6.14) та (6.15) виконані, то покладаємо

$$Y \approx hV.$$

На цьому обчислення закінчуються. Аналогічно можна будувати алгоритми для методів прямокутників і трапецій.

Відмітимо, що для побудови алгоритму відповідного до формули середніх прямокутників необхідно покласти $\lambda = 3$, тобто зменшувати крок не вдвічі, а втричі.