Приближенные методы решения определенных интегралов

Численное интегрирование

- Ряд технологических задач требует увязки в математическое описание всей информации о процессе. Как правило, большинство балансовых уравнений в химической технологии представлены системой интегральных и дифференциальных уравнений, в результате решения которых могут быть получены зависимости, характеризующие протекание процесса.
- Часто на практике не удается вычислить интеграл аналитическим путем. В этих случаях применяют приближенные методы численного интегрирования.

Постановка задачи

- Вычислить определенный интеграл

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

при условии, что ***a*** и ***b*** конечны и *F*(x) является непрерывной функцией ***x*** на всем интервале $x \in [a,b]$. Во многих случаях, когда подынтегральная функция задана в аналитическом виде, интеграл от этой функции в пределах от ***a*** до ***b*** может быть вычислен по формуле *Ньютона-Лейбница*:

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

Недостатки формулы Ньютона-Лейбница

- первообразная функция $f(x)$ слишком сложна и ее нельзя выразить в элементарных функциях;
- функция $f(x)$ задана в виде таблицы, что особенно часто встречается в задачах химической технологии при обработке экспериментальных данных.

- В этих случаях используются методы численного интегрирования.

Численное интегрирование

- Задача численного интегрирования – нахождение приближенного значения интеграла по заданным или вычисленным значениям.
- Общий подход к решению задачи:

- Определенный интеграл представляет собой площадь, ограниченную кривой $f(x)$, осью x и переменными ***a*** и ***b***.
- Необходимо вычислить интеграл, разбивая интервал [a,b] на множество мелких интервалов, находя приблизительно площадь каждой полоски и суммируя их.

- В зависимости от способа вычисления подынтегральной суммы существуют различные методы численного интегрирования (методы ***прямоугольников, трапеций, парабол*** и др.).

Метод прямоугольников

- Простейшим методом численного интегрирования является ***метод прямоугольников***. Он непосредственно использует замену определенного интеграла интегральной суммой:

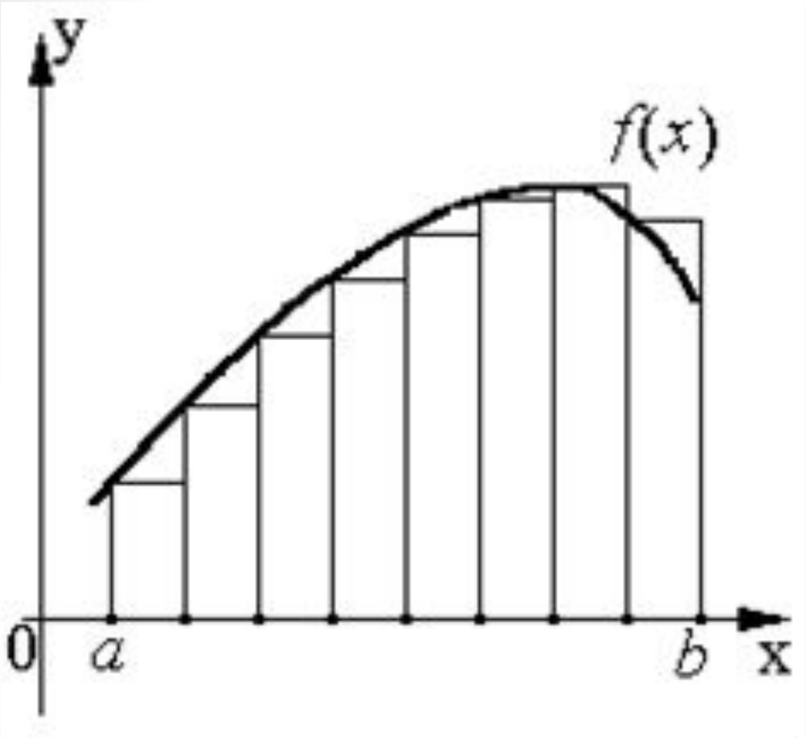
$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i) \cdot \Delta x_i$$

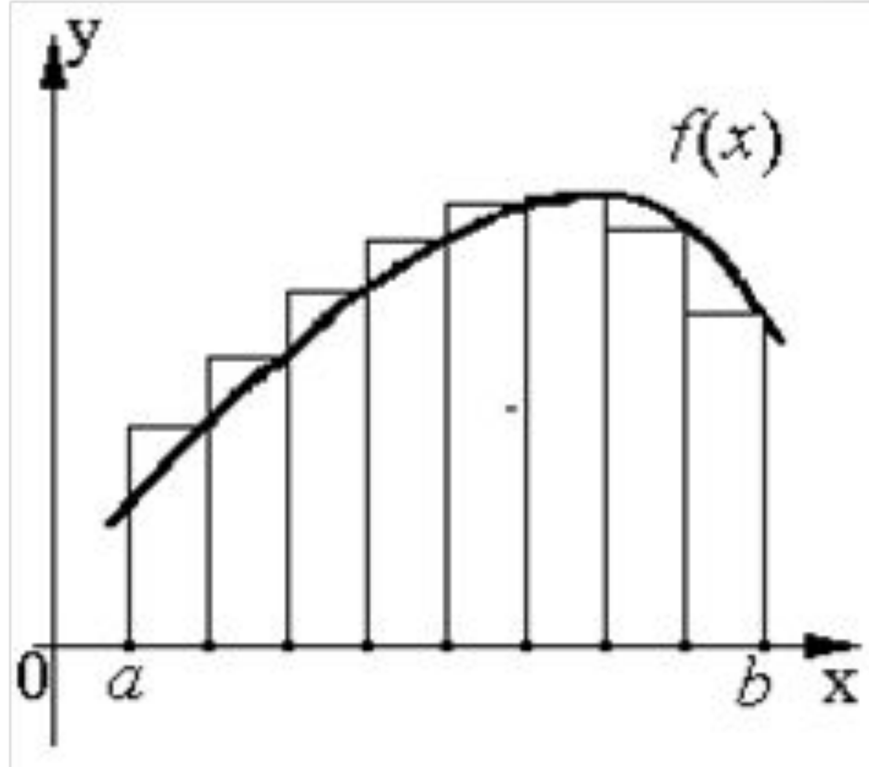
$$\xi_i \in [x_{i-1}, x_i].$$

- Разобьём интервал интегрирования $[a,b]$ на ***n равных*** частей. Обозначим

$\Delta x_i = h$ - шаг разбиения.

Формула прямоугольника применяется к каждому отрезку. В качестве точек ξ_i выбираются левые ($\xi_i = x_{i-1}$) или правые ($\xi_i = x_i$) границы элементарных отрезков.

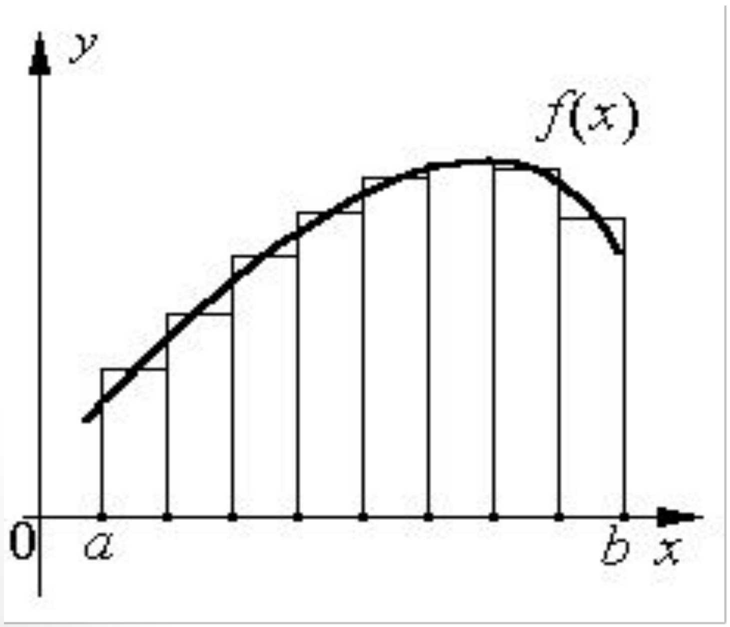


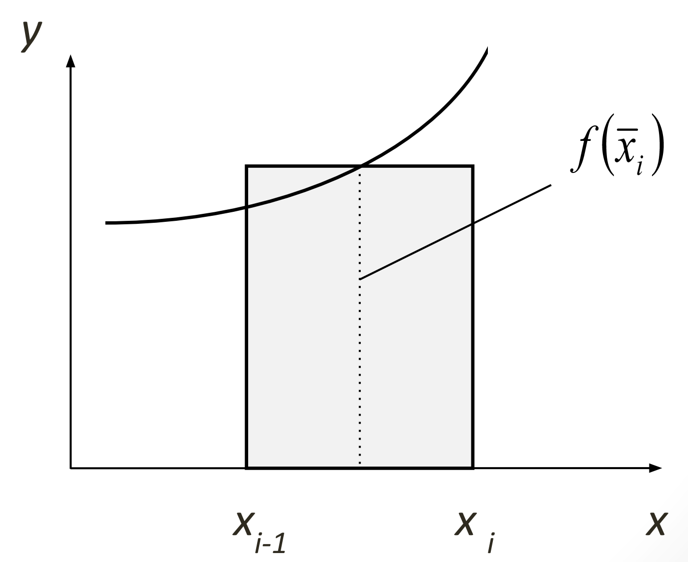


$$\int_a^b f(x)dx = h_1 \cdot f(x_0) + h_2 \cdot f(x_1) + \ldots + h_n \cdot f(x_{n-1})$$

$$\int_a^b f(x)dx = h_1 \cdot f(x_1) + h_2 \cdot f(x_2) + \ldots + h_n \cdot f(x_n)$$

- Более точным является вид формулы прямоугольников, использующий значения функции в средних точках элементарных отрезков. Таким образом, площадь криволинейной трапеции заменяется суммой прямоугольников с основанием ***h*** и высотами, равными значениям функции ***f(x)*** в середине оснований.





- Получим формулу:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} f\left(\overline{x_i}\right)$$

- где

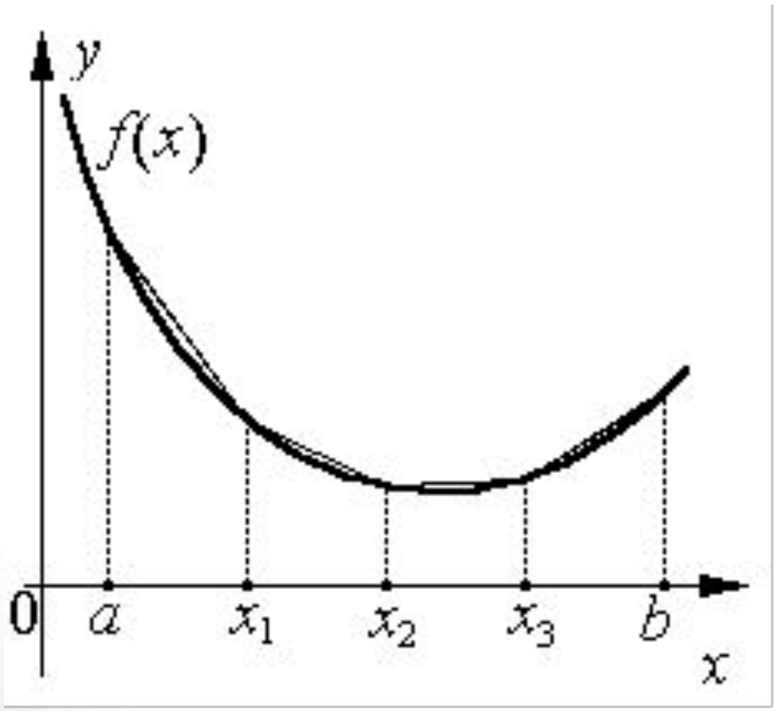
$$\frac{b-a}{n} = h$$

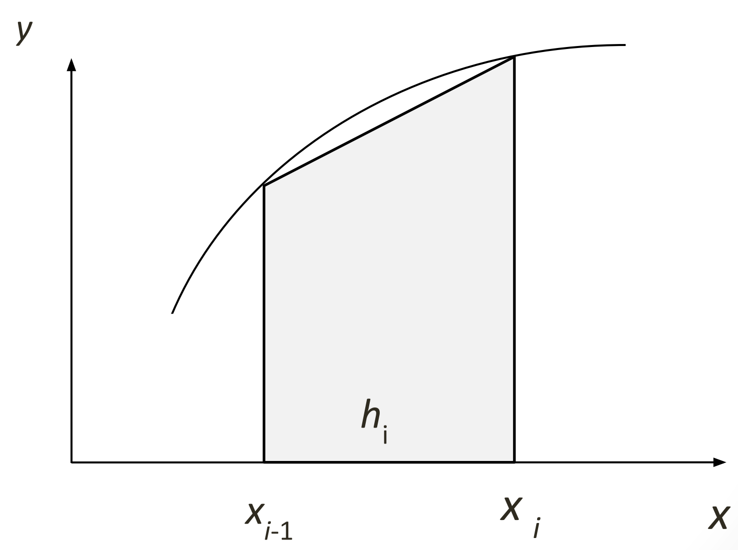
- или

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

Метод трапеций

- Метод трапеций использует линейную интерполяцию, т.е. график функции *y* =*f*(*x*) представляется в виде ломаной, соединяющей точки (x_i, y_i).





- Площадь каждой такой трапеции определяется по формуле

$$S_i = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} \cdot h_i \qquad \boldsymbol{h = \frac{b-a}{n}}$$

- *i*=1,2,…,*n* , где *n* – число интервалов разбиения
- Складывая все эти равенства, получим ***формулу трапеций*** для численного интегрирования:

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

- или

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

- Данные формулы можно представить в виде:

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

$$\int_a^b f(x)dx = h\cdot\left(\frac{y_0+y_n}{2}+\sum_{i=1}^{n-1} y_i\right)$$

Метод парабол. Формула Симпсона

- Метод более точный по сравнению с методами прямоугольников и трапеций.
- В основе формулы Симпсона квадратичная интерполяция подынтегральной функции на отрезке [*a* ,*b*] по трем равноотстоящим узлам.
- Разобьем интервал интегрирования [*a, b*] на четное число *n* равных отрезков с шагом *h*.
- Примем: $x_0=a,\ x_1=x_0+h,\ \ldots\ ,\ x_n=x_0+nh=b.$
- Значения функций в точках обозначим соответственно:
- $y_0=f(a);\ \ y_1=f(x_1);\ \ y_2=\mathrm{f}(x_2);\ \ \ldots\ ;\ \ y_n=f(b).$

Метод парабол

- На каждом отрезке **[x_0,x_2], [x_2,x_4], …, [x_{i-1},x_{i+1}]** подынтегральную функцию $f(x)$ заменим интерполяционным многочленом второй степени.

$$f(x) \approx P_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i$$

- где $x_{i-1} \le x \le x_{i+1}$
- В качестве $P_i(x)$ можно принять интерполяционный многочлен Лагранжа второй степени, проходящий через концы каждых трех ординат:

y_0, y_1, y_2 ; y_2, y_3, y_4 ; y_4, y_5, y_6; …. ; y_{n-2}, y_{n-1}, y_n.

Формула Лагранжа для интервала $[x_{i-1}, x_{i+1}]$

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

$$+ \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)} \cdot y_{i+1} \quad .$$

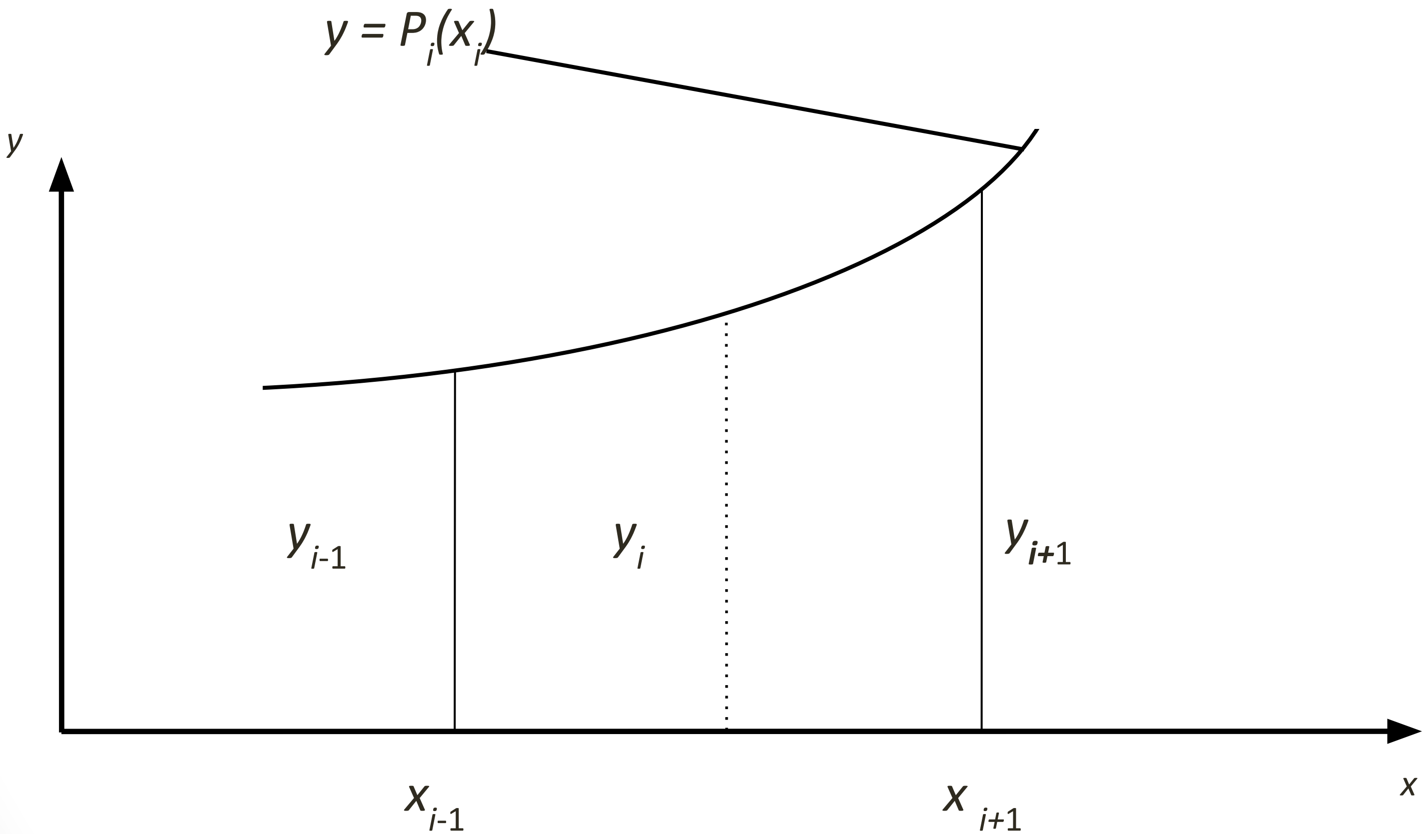


Рис. 6

- Элементарная площадь s_i может быть вычислена с помощью определенного интеграла.
- Учитывая, что $x_i - x_{i-1} = x_{i+1} - x_i = h$, получим для каждого элементарного участка:

$$s_i = \int_{X_{i-1}}^{X_{i+1}} P_i(x)dx = \frac{h}{3} \cdot (y_{i-1} + 4y_i + y_{i+1})$$

- После суммирования интегралов по всем отрезкам, получим составную формулу Симпсона:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \cdot \left[y_0 + 4(y_1 + y_3 + \ldots + y_{n-1}) + 2(y_2 + y_4 + \ldots + y_{n-2}) + y_n\right]$$

- Упрощенная формула Симпсона:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} \cdot \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

- **Пример:** Вычислить значение энтропии воды при нагревании ее от 400 до 500 К по формуле:
- $$\Delta S = n\int_{400}^{500}\frac{C_v dT}{T}$$
- Принимаем количество молей *n*=1, значение теплоемкости при *v=const*:
- C_v=35,0 Дж/моль*К .
- Разобьем интервал интегрирования на 10 равных частей. Шаг интегрирования будет равен *h*=(500 – 400) /10 =10.
- Результаты вычислений в таблице

$f(T) = \frac{Cv}{T} = \frac{35}{T}$					
T	***f* (T$_i$), *i*=1,3,…**	$f(T_i)$ i=2,4, …	$f(T_0)$ $f(T_{10})$	$\overline{T}$	$f(\overline{T}) = \frac{35}{\overline{T}}$
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 трапеций:
- $$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v \, dT}{T} = 10(\frac{0.1575}{2} + 0.39044 + 0.31189) = 7.8108$$
- по формуле Симпсона:
-
- $$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v \, dT}{T} = \frac{10}{3}(0.1575 + 4 * 0.39044 + 2 * 0.31189) = 7.8101$$
- по формуле прямоугольников:
-

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

- Найдем точное значение интеграла:
- $$\Delta S = \int_{400}^{500} \frac{C_v \, dT}{T} = 10 * 0.78096 = 7.8096$$
- Относительная погрешность вычислений по формуле *трапеций, Симпсона и прямоугольников* составляет соответственно: 0,01, 0,001, 0,005 %.
- Таким образом, наибольшую точность вычислений получили по формуле Симпсона.