

TÍNH GẦN ĐÚNG TÍCH PHÂN (approximation of integrals)

Tích phân xác định

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \quad (1)$$

cần phải tính gần đúng khi tích phân của hàm dưới dấu tích phân $f(x)$ không tính được dễ dàng hoặc giá trị của hàm này chỉ được cho tại một số nút (điểm lưới) x_k trên đoạn $[a, b]$. Tất cả các công thức dạng hiển tính xấp xỉ $I(f)$ được gọi là *công thức cầu phương* hay *công thức tích phân số*. Công thức cầu phương để tính gần đúng tích phân (1) có dạng tổng quát là

$$Q(f) = \sum_{k=0}^n c_{0k}y_k + \sum_{k=1}^n c_{1k}y'_k + \cdots + \sum_{k=1}^n c_{pk}y_k^{(p)}, \quad (2)$$

với $y_k^q = f^{(q)}(x_k)$, $q = 1, 2, \dots, p$, $y_k = f(x_k)$, còn c_{qk} là các hằng số được gọi là *trọng số*. Khi đó,

$$I(f) = Q(f) + R, \quad (3)$$

với R là sai số của công thức cầu phương. Công thức cầu phương ứng dụng được, nếu giá trị của hàm số và đạo hàm của nó tại các điểm lưới được biết. Công thức chỉ sử dụng giá trị của hàm số gọi là *công thức giá trị trung bình* hay *công thức cầu phương Lagrange*, còn công thức sử dụng cả giá trị của đạo hàm của hàm số gọi là *công thức cầu phương Hermite*.

Có nhiều cách dẫn đến công thức cầu phương (2), một trong những cách đó là thay hàm f bằng một xấp xỉ f_n của nó mà tích phân

$$I_n(f) = \int_a^b f_n(x)dx, \quad n \geq 0, \quad (4)$$

dễ tính. Chẳng hạn như $f_n \in \mathbb{P}_n$ - tập hợp các đa thức bậc không quá n . Một cách tự nhiên, $f_n = \Pi_n f$, đa thức nội suy Lagrange của f trên các tập $n + 1$ điểm lưới $\{x_k\}$, $k = 0, 1, \dots, n$. Khi đó

$$I_n(f) = \sum_{k=1}^n f(x_k) \int_a^b \ell_k(x)dx, \quad (5)$$

với ℓ_k là đa thức Lagrange đặc trưng bậc n liên kết với nút x_k . Để ý rằng, công thức này là trường hợp riêng của công thức cầu phương

$$I_n(f) = \sum_{k=1}^n \alpha_k f(x_k), \quad (6)$$

với các hệ số α_k đã cho. Nếu ta xấp xỉ hàm f bằng nội suy Hermite thì ta sẽ nhận được công thức cầu phương Hermite (2).

Công thức (5) và (2) được gọi là *công thức cầu phương nội suy* do hàm f được thay bằng đa thức nội suy. *Bậc chính xác* của một công thức nội suy là số nguyên $r \geq 0$ lớn nhất mà

$$I_n(f) = I(f), \quad \text{với mọi } f \in \mathbb{P}_r.$$

Mọi công thức cầu phương nội suy sử dụng $n + 1$ điểm nút có bậc chính xác không nhỏ hơn n . Ngược lại, một công thức cầu phương sử dụng $n + 1$ điểm nút và có bậc chính xác n là điều kiện cần để nó có dạng nội suy.

CÔNG THỨC CẦU PHƯƠNG NỘI SUY

Các công thức dưới đây sử dụng xấp xỉ của hàm f dưới dấu tích phân bằng đa thức nội suy có bậc tương ứng. Để cho đơn giản, các điểm nút được lấy cách đều:

$$x_k = x_0 + kh, \quad k = 0, 1, \dots, n, \quad x_0 = a, h = \frac{b - a}{n}.$$

Các công thức này có sai số $|R|$ được đánh giá qua cận trên M_p của $|f^{(p)}|$.

Công thức hình chữ nhật

Trên đoạn $[x_0, x_0 + h]$ hàm số f được xấp xỉ bằng giá trị $f(x_0)$ của nó tại nút x_0 , điểm bên trái của đoạn thẳng. Khi đó

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x) dx \approx hf(x_0), \quad |R| \leq \frac{h^2}{2} M_1.$$

Bằng cách lấy tổng, ta nhận được công thức hình chữ nhật (bên trái)

$$\int_a^b f(x) dx \approx h(f(x_0) + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1})), \quad |R| \leq \frac{(b-a)h}{2} M_1,$$

với M_1 là cận trên của $|f'(x)|$ trên đoạn $[a, b]$. Tương tự như thế người ta nhận được công thức hình chữ nhật bên phải

$$\int_a^b f(x)dx \approx h(f(x_1) + \dots + f(x_{n-1}) + f(x_n)), \quad |R| \leq \frac{(b-a)h}{2} M_1,$$

và công thức trung điểm

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\left(f\left(\frac{x_0 + x_1}{2}\right) + \dots + f\left(\frac{x_{n-1} + x_n}{2}\right)\right), \quad |R| \leq \frac{(b-a)h}{2} M_1,$$

trong trường hợp này các điểm nút là các trung điểm $(x_k + x_{k+1})/2, k = 0, 1, \dots, n$.

Các công thức này có độ chính xác là 1.

Công thức hình thang

Trên đoạn $[x_0, x_0 + h]$ hàm f được nội suy qua giá trị của nó tại các nút x_0 và x_1 bằng đa thức bậc nhất. Khi đó

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx \frac{h}{2} \left(f(x_0) + f(x_1) \right), \quad |R| \leq \frac{h^3}{12} M_2.$$

Tổng của các xấp xỉ tương tự trên các đoạn $[x_0, x_1], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ cho công thức hình thang

$$\int_a^b f(x)dx \approx h \left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{f(x_n)}{2} \right), \quad |R| \leq \frac{(b-a)h^2}{12} M_2. \quad (7)$$

Sai số của công thức hình thang có bậc h^2 và bậc chính xác của nó là 1.

Công thức Simpson

Trên đoạn $[x_0, x_2]$ hàm $f(x)$ được nội suy bằng đa thức nội suy bậc 2 tại các nút $x_0 = a, x_1$ và x_2 :

$$\int_{x_0}^{x_0+2h} f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \right), \quad |R| \leq \frac{h^5}{90} M_4.$$

Tổng của các xấp xỉ tương tự trên các đoạn $[x_0, x_2], \dots, [x_{n-2}, x_n]$ với n chẵn cho công thức Simpson

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \dots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n) \right),$$

$$|R| \leq \frac{h^4}{180} M_4.$$

Độ chính xác của công thức này là 3.

Công thức Newton-Cotes

Công thức này dựa trên nội suy Lagrange khi các nút sắp xếp đều trên đoạn $[a, b]$. Với $n \geq 0$, các nút cho quá trình cầu phương là $x_k = x_0 + kh, k = 0, \dots, n, h = (b - a)/n, x_0 = a, x_n = b$. Các công thức hình chữ nhật, hình thang và Simpson là những trường hợp riêng của công thức Newton-Cotes ứng với $n = 0, 1, 2$. Với ℓ_k là đa thức Lagrange đặc trưng bậc n liên kết với nút x_k để nội suy f trên đoạn $[a, b]$, ta có

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^n f(x_k) \int_a^b \ell_k(x)dx + \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x-x_0) \cdots (x-x_n)dx.$$

Khi các nút phân bố đều, ta nhận được công thức Newton-Cotes

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{nh}{P_n} \sum_{j=0}^n f(a + jh)p_{jn} + R_n[f],$$

$$P_n = \sum_{j=1}^n p_{jn}.$$

Giá trị của P_n, p_{jn} và R_n được cho ở bảng sau.

n	P_n	p_{0n}	p_{1n}	p_{2n}	p_{3n}	p_{4n}	p_{5n}	p_{6n}	p_{7n}	R_n
1	2	1	1							$-\frac{h^3}{12}f^{(2)}(\xi)$
2	6	1	4	1						$-\frac{h^5}{90}f^{(4)}(\xi)$
3	8	1	3	3	1					$-\frac{3h^5}{80}f^{(4)}(\xi)$
4	90	7	32	12	32	7				$-\frac{8h^7}{945}f^{(6)}(\xi)$
5	288	19	75	50	50	75	19			$-\frac{275h^7}{12096}f^{(6)}(\xi)$
6	840	41	216	27	272	27	216	41		$-\frac{9h^9}{1400}f^{(8)}(\xi)$
7	17 280	751	3577	1323	2989	2989	1323	3577	751	$-\frac{8183h^9}{518400}f^{(8)}(\xi)$

Công thức cầu phương Hermite

Trên đoạn $[x_0, x_0 + h]$ hàm $f(x)$ được nội suy bằng đa thức bậc 3 từ các giá trị của $f(x)$ và $f'(x)$ tại x_0 và $x_1 = x_0 + h$:

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f(x_0)+f(x_1))+\frac{h^2}{12}(f'(x_0)-f'(x_1)), \quad |R| \leq \frac{h^5}{720}M_4.$$

Tổng của các công thức cầu phương Hermite trên các đoạn $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$ cho ta công thức cầu phương Hermite

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\left(\frac{f(x_0)}{2} + f(x_1) + \dots + f(x_{n-1}) + \frac{h^2}{12}(f'(x_0) - f'(x_n))\right),$$

$$|R| \leq \frac{(b-a)h^4}{720}M_4. \quad (8)$$

Công thức này có độ chính xác là 3.

CÔNG THỨC CẦU PHƯƠNG DẠNG GAUSS

Công thức cầu phương dạng Gauss là công thức giá trị trung bình, nhưng

trong biểu thức

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^n c_k f(x_k) \quad (9)$$

không chỉ có mỗi các hệ số c_k mà cả các nút x_k cũng là các tham số cần chọn. Các giá trị này được chọn để sao cho công thức (9) là chính xác với các đa thức bậc càng cao càng tốt.

Công thức cầu phương Gauss

Có thể biến đổi đoạn $[a, b]$ thành đoạn $[-1, 1]$ và chọn các điểm nút x_k là nghiệm của đa thức Legendre, sau đó các hệ số c_k được xác định sao cho công thức (9) lấy tích phân chính xác các đa thức bậc đến $2n + 1$. Nghiệm của đa thức Legendre nằm đối xứng qua điểm không. Với $n = 1, 2, 3$ ta có

$$\begin{aligned} n = 1 \quad & x_0 = -x_1, & c_0 &= 1, \\ & x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0,577350269\dots, & c_1 &= 1, \\ n = 2 \quad & x_0 = -x_2, & c_0 &= \frac{5}{9}, \\ & x_1 = 0, & c_1 &= \frac{8}{9}, \\ & x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}} = 0,774596669\dots, & c_2 &= c_0, \\ n = 3 \quad & x_0 = -x_3, & c_0 &= 0,347854854, \\ & x_1 = -x_2, & c_1 &= 0,652145154\dots, \\ & x_2 = 0,339981043\dots, & c_2 &= c_1, \\ & x_3 = 0,861136311\dots, & c_3 &= c_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Nhận xét: Phép biến đổi $t = (b - a)/2x + (a + b)/2$ biến đổi đoạn $[a, b]$ thành đoạn $[-1, 1]$ ($t \in [a, b], x \in [-1, 1]$). Với các giá trị x_k và c_k được chọn cho đoạn $[-1, 1]$ ta nhận được công thức cầu phương Gauss trên đoạn $[a, b]$ bất kỳ:

$$\int_a^b f(t)dt \approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^n c_k f\left(\frac{b-a}{2}x_k + \frac{a+b}{2}\right). \quad (11)$$

Công thức Lobatto

Trong một số trường hợp hai điểm biên của đoạn lấy tích phân cũng được sử dụng để xấp xỉ tích phân. Khi đó trong công thức (9) chỉ còn $2n$ biến tự do và chúng có thể xác định được sao cho các đa thức bậc đến bậc $2n - 1$ có thể lấy được tích phân chính xác. Trong trường hợp $n = 2$ ta có

$$\begin{aligned}x_0 &= -1, & c_0 &= \frac{1}{3}, \\x_1 &= 0, & c_1 &= \frac{4}{3}, \\x_2 &= 1, & c_2 &= c_0,\end{aligned}\tag{12}$$

và với $n = 3$ ta có

$$\begin{aligned}x_0 &= -1, & c_0 &= \frac{1}{6}, \\x_1 &= -x_2, & c_1 &= \frac{5}{6}, \\x_2 &= \frac{1}{5}, & c_2 &= c_1, \\x_3 &= 1, & c_3 &= c_0.\end{aligned}\tag{13}$$

Trường hợp $n = 2$ ta nhận được công thức Simpson.

THUẬT TOÁN ROMBERG

Thuật toán Romberg bắt đầu từ dãy các tổng dạng hình thang, bước sau được thực hiện bằng cách chia đôi khoảng lấy tích phân. Thuật toán gồm các bước sau.

Xác định tổng hình thang

Tính gần đúng tích phân $\int_a^b f(x)dx$ theo công thức (7) với bước lưới

$$h_i = \frac{b-a}{2^i}, \quad i = 0, 1, \dots, m.\tag{14}$$

Công thức (7) với bước lưới ký hiệu là $T(h_i)$. Ta có

$$\begin{aligned}T(h_i) &= T\left(h_{i-1}2\right) = \frac{h_{i-1}}{2} \left[\frac{1}{2}f(a) + f\left(a + \frac{h_{i-1}}{2}\right) + f(a + h_{i-1}) + f\left(a + \frac{3}{2}h_{i-1}\right) \right. \\&\quad \left. + f(a + 2h_{i-1}) + \dots + f\left(a + \frac{2n-1}{2}h_{i-1}\right) + \frac{1}{2}f(b) \right] \\&= \frac{1}{2}T(h_{i-1}) + \frac{h_{i-1}}{2} \sum_{j=0}^{n-1} f\left(a + \frac{h_{i-1}}{2} + jh_{i-1}\right), \quad i = 1, 2, \dots, m; n = 2^{i-1}.\end{aligned}\tag{15}$$

Công thức truy hồi (15) cho thấy rằng, để tính $T(h_i)$ từ $T(h_{i-1})$ chỉ cần sử dụng giá trị của hàm tại các nút mới xuất hiện.

Sơ đồ tam giác

Đặt $T_{0i} = T(h_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots$ và tính tuần tự các giá trị

$$T_{ki} = T_{k-1,i} + \frac{T_{k-1,i} - T_{k-1,i-1}}{4^k - 1}, \quad k = 1, 2, \dots, m, i = k, k+1, \dots \quad (16)$$

Các giá trị trong (16) được thực hiện theo sơ đồ tam giác

$$\begin{array}{ccccccc} T_{00} & & \searrow & & & & \\ T_{01} & & \rightarrow & T_{11} & & & \\ \vdots & & & & \ddots & & \\ T_{k-1,1} & \rightarrow & \dots & \rightarrow & T_{k-1,k-1} & & \\ & \searrow & & \searrow & & \searrow & \\ T_{k,1} & \rightarrow & \dots & \rightarrow & T_{k,k-1} & \rightarrow & T_{kk} \end{array}$$

Nguyên lý ngoại suy

Phương pháp Romberg là một ứng dụng của *nguyên lý ngoại suy*. Ứng dụng này sẽ được mô tả từ cách tìm ra công thức (16) với $k = 1$. Giả sử tích phân cần tính là I , còn $T(h)$ là tổng hình thang (7). Nếu trên đoạn $[a, b]$ hàm số $f(x)$ khả vi liên tục, $(2m + 2)$ lần, thì sai số R của tổng hình thang có khai triển tiệm cận theo h là

$$R(h) = I - T(h) = a_1 h^2 + a_2 h^4 + \dots + a_m h^{2m} + O(h^{2m+2}) \quad (17)$$

hay

$$T(h) = I - a_1 h^2 - a_2 h^4 - \dots - a_m h^{2m} + O(h^{2m+2}) \quad (18)$$

với các hệ số a_1, a_2, \dots, a_m là các hằng số không phụ thuộc vào h .

Xác định $T(h)$ và $T(\frac{h}{2})$ theo (18) và xét tổ hợp tuyến tính

$$T_1(h) = \alpha_1 T(h) + \alpha_2 T\left(\frac{h}{2}\right) = (\alpha_1 + \alpha_2)I - \alpha_1 \left(\alpha_1 + \frac{\alpha_2}{4}\right)h^2 - \alpha_2 \left(\alpha_1 + \frac{\alpha_2}{16}\right)h^4 - \dots \quad (19)$$

Với $\alpha_1 + \alpha_2 = 1$ và $\alpha_1 + \frac{\alpha_2}{4} = 0$, thì $T_1(h)$ có sai số bậc 4, trong khi đó $T(h)$ và $T(h/2)$ chỉ có bậc sai số là 2. Trong trường hợp này

$$T_1(h) = -\frac{1}{3}T(h) + \frac{4}{3}T\left(\frac{h}{2}\right) = T\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{1}{3}\left(T\left(\frac{h}{2}\right) - T(h)\right). \quad (20)$$

Đây là cách nâng bậc của sai số trong (16) với $k = 1$. Tiếp tục quá trình này, ta nhận được T_k trong (16) thỏa mãn

$$T_{ki} = I + O(h_i^{2k+2}). \quad (21)$$

ĐINH NHO HÀO

Tài liệu tham khảo

1. P. Deuflhard and A. Hohmann, *Numerical Analysis in Modern Scientific Computing. An Introduction*, second edition, Springer-Verlag, New York, 2003
2. G. I. Marchuk, *Methods of Numerical Mathematics*, second edition, Springer-Verlag, New York-Berlin, 1982.
3. A. Quarteroni, R. Sacco, and F. Saleri, *Numerical Mathematics*, second edition, Springer-Verlag, Berlin, 2007.