

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ — ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ

В. Э. Вишневский, А. М. Максина, И. В. Олемской
Практикум на ЭВМ по численным методам
Тема 7. Вычисление определённого интеграла
Методические указания

Санкт-Петербург
2016

Постановка задачи

Рассматривается задача о вычислении однократного интеграла

$$J(F) = \int_a^b F(x)dx, \quad (1)$$

с использованием конечного числа значений интегрируемой функции. Интервал интегрирования $[a, b]$ — любой отрезок числовой оси (конечный или бесконечный). Подынтегральная функция $F(x)$ — любая интегрируемая в смысле Римана функция.

Такой интеграл является пределом суммы вида:

$$J(F) = \int_a^b F(x)dx = \lim_{r_n \rightarrow 0} \sum_{i=1}^n F(\xi_i)\Delta x_i = \lim_{r_n \rightarrow 0} S_n, \quad (2)$$

где $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $r_n = \max_{i=1, \dots, n} \Delta x_i$, $S_n = \sum_{i=1}^n F(\xi_i)\Delta x_i$.

Взяв достаточно малые частичные отрезки $[x_{i-1}, x_i]$ и вычислив достаточно много значений $F(\xi_i)$, $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$, можно найти значение интеграла с любой заданной точностью. Каждая интегральная сумма определяется способом деления отрезка $[a, b]$ на части Δx_i и выбором в каждой из них промежуточных точек ξ_i .

При построении правила вычисления (1), одинакового для всех функций $F(x)$, можно взять все Δx_i одинаковыми: $\Delta x_i = \frac{b-a}{n} = h$, а в качестве точек ξ_i выбрать середины частичных отрезков $[x_{i-1}, x_i]$: $\xi_i = a + (i - \frac{1}{2})h$. Получим правило интегрирования, называемое составной формулой *средних прямоугольников* (или *средней точки*)

$$J(F) = \int_a^b F(x)dx \approx \sum_{i=1}^n F(\xi_i)\Delta x_i = h \sum_{i=1}^n F\left(a + \left(i - \frac{1}{2}\right)h\right). \quad (3)$$

Оно позволяет вычислять интеграл (1) сколь угодно точно при всякой функции $F(x)$, но оно является медленно сходящимся даже для случая аналитической функции $F(x)$ и требует для достижения хорошей точности вычисления интеграла большого числа значений $F(x)$. Правило (3) становится неприменимым, если интеграл является несобственным.

Правила численного интегрирования, рассчитанные на более узкие классы функций, могут иметь лучшую точность, если заранее принять во внимание свойства функций этих классов и использовать их при конструировании. Каждое правило основано на замене

интегрируемой функции на какую-либо элементарную функцию: алгебраический многочлен, рациональную функцию, тригонометрический многочлен и др.

Такая замена дает хорошую точность, если заменяемая функция $F(x)$ обладает высоким порядком гладкости. При наличии у $F(x)$ каких-нибудь особенностей, мы заинтересованы в выделении их. Выделение делается обычно при помощи разложения $F(x)$ на два сомножителя $F(x) = p(x) \cdot f(x)$, причем $p(x)$ имеет особенности того же типа, что и $F(x)$, и называется *весовой* функцией или просто *весом* (обозначение $p(x)$ вводится по первой букве французского слова *poids* — вес). Важно, чтобы функция $p(x)$ имела аналитически вычисляемые j -е моменты:

$$\mu_j = \int_a^b p(x)x^j dx, \quad j = 0, 1, \dots \quad (4)$$

Второй сомножитель, $f(x)$ — гладкая функция. Такое разложение приводит (1) к виду:

$$J(F) = \int_a^b p(x)f(x)dx. \quad (5)$$

Считая вес $p(x)$ фиксированным, а $f(x)$ — произвольной гладкой функцией, строим правила интегрирования вида

$$J(F) = \int_a^b p(x)f(x)dx \approx \sum_{j=1}^n A_j f(x_j) = S_n, \quad x_j \in [a, b], \quad (6)$$

расчитанные на функции, имеющие одинаковые, заранее известные особенности. Здесь $f(x) \in \Phi(a, b)$ — некоторый класс функций, определенных на $[a, b]$; $p(x)$ — весовая функция: некоторая фиксированная *неотрицательная* на $[a, b]$ функция, для которой

$$\int_a^b p(x)dx > 0,$$

и $\forall f(x) \in R$ существует

$$\int_a^b p(x)|f(x)|dx.$$

Определение 1. Формулу (6) называют *формулой механических квадратур* или просто *квадратурной формулой* (КФ).

$S_n = \sum_{j=1}^n A_j f(x_j)$ называют *квадратурной суммой*, A_j — квадратурными *коэффициентами*, а x_j — *узлами* квадратурной формулы.

Условимся считать, что узлы квадратурной формулы (6) расположены по возрастанию: $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ и не повторяются.

Определение 2. Величина

$$R_n(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx - \sum_{j=1}^n A_j f(x_j) = J(f) - S_n(f) \quad (7)$$

называется *методической погрешностью* или *остаточным членом* квадратурной формулы (6).

Определение 3. Говорят, что квадратурная формула (6) имеет *алгебраическую степень точности* (АСТ) m , если она верна для любых многочленов степени m и не верна для многочленов степени $m + 1$.

Это равносильно тому, что равенство

$$\int_a^b p(x)x^i dx = \sum_{j=1}^n A_j x_j^i, \quad (8)$$

выполняется для $i = \overline{0, m}$ и не выполняется для $i = m + 1$. Или, что то же самое, $R_n(x_i) = 0$, $i = \overline{0, m}$ и $R_n(x_{m+1}) \neq 0$. Параметры квадратурной формулы n , x_j , A_j , $j = \overline{1, n}$ чаще всего выбирают так, чтобы квадратурная формула имела максимально возможную алгебраическую степень точности.

Необходимо отметить, что в некоторых задачах не все параметры являются произвольными. Например, если $F(x)$ задана таблично, то мы ограничены в выборе узлов x_j . Иногда для упрощения счета можно потребовать равенства $A_1 = A_2 = \dots = A_n = A = \text{const}$. В таком случае в нашем распоряжении только $n + 1$ параметр: A и x_j , $j = \overline{1, n}$. Величина погрешности $R_n(f)$ зависит от свойств функции f и от выбора квадратурной формулы, т. е. от узлов и коэффициентов. При исследовании погрешности основными являются две задачи: оценка погрешности для функций с известными (распространенными) свойствами и выяснение условий сходимости — условий, при которых $R_n(f) \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Таким образом, для построения квадратурной формулы при фиксированном, но произвольном n необходимо указать способ выбора узлов x_j , $j = \overline{1, n}$, и коэффициентов A_j , $j = \overline{1, n}$ квадратурной формулы и указать способ оценивания методической погрешности $R_n(f)$ для данной функции $f(\cdot)$ или некоторого множества функций $\Phi(a, b)$.

Замечание 1. При вычислении величин $f(x_j)$ приходится почти всегда иметь дело с приближенными значениями функции $\bar{f}(x_j)$, верными на некоторое число значащих цифр: $|f(x_j) - \bar{f}(x_j)| < \varepsilon$, $j = \overline{1, n}$. Квадратурная сумма будет вычислена с погрешностью

$$|S_n - \bar{S}_n| < \varepsilon \sum_{j=1}^n |A_j|.$$

Если сумма $\sum_{j=1}^n |A_j|$ велика, то это естественно вызывает большую погрешность в приближенном значении интеграла. Именно поэтому при построении квадратурных формул стремятся к тому, чтобы $\sum_{j=1}^n |A_j|$ имела бы возможно меньшее значение. Если $p(x) \geq 0$, $x \in [a, b]$ и квадратурная формула верна для $f \equiv 1$, что равносильно равенству $\int_a^b p(x) dx = \sum_{j=1}^n A_j$, то $\sum_{j=1}^n |A_j|$ будет иметь наименьшее значение, когда все $A_j > 0$. Именно это обстоятельство придает квадратурным формулам с положительными коэффициентами особое значение.

Определение 4. Последовательность квадратурных формул называется *квадратурным процессом*.

Эта последовательность определяется двумя треугольными матрицами: матрицей узлов и матрицей коэффициентов

$$X = \begin{vmatrix} x_1^{(1)} & & & & \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & & & \\ \dots & \dots & \dots & & \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & \dots & x_n^{(n)} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad \text{и} \quad A = \begin{vmatrix} A_1^{(1)} & & & & \\ A_1^{(2)} & A_2^{(2)} & & & \\ \dots & \dots & \dots & & \\ A_1^{(n)} & A_2^{(n)} & \dots & A_n^{(n)} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix}.$$

Квадратурная формула соответствующая n -й строке этих матриц, имеет вид:

$$\int_a^b p(x) f(x) dx = \sum_{j=1}^n A_j^{(n)} f(x_j^{(n)}) + R_n(f) = S_n(f) + R_n(f).$$

Определение 5. Будем говорить, что квадратурный процесс, определенный матрицами X и A , *сходится* для функции f , если

$$\lim_{n \rightarrow \infty} S_n(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{j=1}^n A_j^{(n)} f(x_j^{(n)}) = \int_a^b p(x) f(x) dx.$$

Интерполяционные квадратурные формулы

Рассмотрим квадратурную формулу с n узлами

$$\int_a^b p(x) f(x) dx \approx \sum_{j=1}^n A_j f(x_j). \quad (9)$$

Если узлы заданы, то наилучшей точности можно добиться, заменяя функцию $f(x)$ на её интерполяционный полином и вычисляя получаемый интеграл аналитически. Коэффициенты A_j находятся в этом случае однозначно.

Определение 6. Квадратурная формула (9) называется *интерполяционной* (ИКФ), если её коэффициенты удовлетворяют равенству

$$A_j = \int_a^b p(x) \frac{\omega(x)}{(x - x_j)\omega'(x_j)} dx, \quad (10)$$

где $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n)$ — *узловой многочлен*.

Методическая погрешность интерполяционного правила (9), (10), если $f(x)$ имеет непрерывную производную порядка n на (a, b) , имеет вид

$$R_n(f) = \frac{1}{n!} \int_a^b p(x) \omega(x) f^{(n)}(\xi) dx, \quad \xi \in [a, b].$$

Для функции $f(x)$, имеющей непрерывную и ограниченную по модулю производную порядка n ($f(x) \in C^{(n)}(a, b)$, $|f^{(n)}(x)| \leq M_n$) верна оценка

$$R_n(f) \leq \frac{M_n}{n!} \int_a^b |p(x)\omega(x)| dx. \quad (11)$$

Замечание 2. Всякое квадратурное правило (9), алгебраическая степень точности которого не меньше чем $n - 1$, является интерполяционным. Верно и противоположное: алгебраическая степень точности ИКФ при всяком расположении узлов x_j будет не меньше $n - 1$.

Это является следствием того, что если $f(x)$ является полиномом степени меньшей n , то она совпадает со своим интерполяционным полином, построенным по n узлам.

Коэффициенты ИКФ A_j проще найти из требования точного равенства квадратурной суммы S_n и интеграла для всех одночленов степеней от 0 до $n - 1$. Получаем следующий

Алгоритм построения ИКФ

1. Задать узлы квадратурной формулы (9) $x_j, j = 1, 2, \dots, n$.
2. Вычислить *моменты* весовой функции $p(x)$ на $[a, b]$

$$\mu_j = \int_a^b p(x)x^j dx, \quad j = 0, 1, \dots, n - 1. \quad (12)$$

3. Решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{j=1}^n A_j x_j^s = \mu_s, \quad s = 0, 1, \dots, n - 1. \quad (13)$$

Пример построения ИКФ

Построить двухточечную ($n = 2$) интерполяционную квадратурную формулу для вычисления интеграла

$$\int_a^b \frac{f(x)}{\sqrt{x-a}} dx \approx \sum_{j=1}^n A_j f(x_j), \quad b > a.$$

В качестве весовой функции при условии достаточно гладкой функции $f(x)$ возьмем $p(x) = 1/\sqrt{x-a}$. Сделаем замену переменной $t = x - a$ и сведём исходную задачу к построению ИКФ для вычисления интеграла

$$\int_0^{b-a} \frac{\hat{f}(t)}{\sqrt{t}} dt \approx \sum_{j=1}^n A_j \hat{f}(t_j).$$

Далее вычисляем моменты весовой функции

$$\mu_0 = \int_0^{b-a} \frac{1}{\sqrt{t}} dt = 2(b-a)^{\frac{1}{2}}, \quad \mu_1 = \int_0^{b-a} \frac{t}{\sqrt{t}} dt = \frac{2}{3}(b-a)^{\frac{3}{2}}.$$

При заданных узлах $(t_1, t_2 \in [0, b-a])$ двухточечная ИКФ имеет АСТ не меньше 1. А это значит, что должны выполняться равенства

$$R_2(1) = \int_0^{b-a} \frac{1}{\sqrt{t}} dt - (A_1 + A_2) = 0 \quad \implies \quad A_1 + A_2 = \mu_0,$$

$$R_2(t) = \int_0^{b-a} \frac{t}{\sqrt{t}} dt - (A_1 t_1 + A_2 t_2) = 0 \quad \implies \quad A_1 t_1 + A_2 t_2 = \mu_1.$$

Решая эту линейную систему относительно A_1 и A_2 , получим значения коэффициентов КФ

$$A_1 = \frac{\mu_0 t_2 - \mu_1}{t_2 - t_1}, \quad A_2 = \frac{\mu_1 - \mu_0 t_1}{t_2 - t_1}.$$

Проверим, является ли единица алгебраической степенью точности для построенной квадратурной формулы

$$\int_0^{b-a} \frac{f(t)}{\sqrt{t}} dt = \frac{\mu_0 t_2 - \mu_1}{t_2 - t_1} f(t_1) + \frac{\mu_1 - \mu_0 t_1}{t_2 - t_1} f(t_2) + R_2(f). \quad (14)$$

Для этого вычислим

$$R_2(t^2) = \int_0^{b-a} \frac{t^2}{\sqrt{t}} dt - \frac{\mu_0 t_2 - \mu_1}{t_2 - t_1} t_1^2 + \frac{\mu_1 - \mu_0 t_1}{t_2 - t_1} t_2^2 = \mu_2 - \mu_1(t_1 + t_2) + \mu_0 t_1 t_2.$$

Если $R_2(t^2) \neq 0$, для выбранных t_1 и t_2 , то это и доказывает тот факт, что алгебраическая степень точности квадратурной формулы (14) не больше 1.

Замечание 3. Особое место в теории интерполяционных квадратурных формул занимают интерполяционные квадратурные формулы с равноотстоящими узлами — *квадратурные формулы типа Ньютона – Котса*¹.

¹ *Исаак Ньютон* (англ. *Sir Isaac Newton*) (1643–1727), английский физик и

Квадратурные формулы наивысшей АСТ

Поставим своей целью построить такие квадратурные формулы с n узлами, чтобы достичь наивысшей возможной алгебраической степени точности.

Поскольку АСТ $n - 1$ требует, чтобы формула была интерполяционной, то коэффициенты должны быть найдены по формуле (10). Таким образом, повысить АСТ сверх $n - 1$ мы можем только особым образом выбирая узлы x_j .

Определение 7. Интерполяционная квадратурная формула (9) называется *квадратурной формулой наивысшей алгебраической степени точности* (КФНАСТ) или КФ типа Гаусса², если её узлы выбраны таким образом, что её АСТ равна $2n - 1$. Т. е.

$$\mu_s = \int_a^b p(x)x^s dx = \sum_{j=1}^n A_j x_j^s, \quad s = 0, 1, \dots, 2n - 1. \quad (15)$$

Теорема. Для того, чтобы квадратурная формула (9) была точной для алгебраических многочленов степени $2n - 1$, необходимо и достаточно выполнения условий:

- формула (9) должна быть интерполяционной;
- узлы x_j формулы (9) должны быть такими, чтобы узловой многочлен $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0$ был ортогонален с весом $p(x)$ ко всякому многочлену $Q(x)$ степени меньше n , т. е.

$$\int_a^b p(x)\omega(x)Q(x)dx = 0, \quad \forall Q(x) : \deg Q(x) \leq n - 1. \quad (16)$$

математик, создавший теоретические основы механики и астрономии, открывший закон всемирного тяготения, разработавший (наряду с Г. Лейбницем) дифференциальное и интегральное исчисления, изобретатель зеркального телескопа и автор важнейших экспериментальных работ по оптике.

Роджер Котс (также Котес) (англ. Roger Cotes) (1682–1716), английский математик, сотрудничавший с И. Ньютоном. Помимо квадратурных формул Ньютона — Котса, он также известен тем, что первым вывел формулу показательной записи комплексного числа, называемую сейчас формулой Эйлера.

²*Йоганн Карл Фридрих Гаусс (нем. Johann Carl Friedrich Gauß) (1777–1855)*, немецкий математик, механик, физик, внёсший фундаментальный вклад также в астрономию и геодезию.

Следует обратить внимание на следующие особенности:

- все корни многочлена $\omega(x)$ лежат внутри отрезка $[a, b]$ и различны между собой;
- все коэффициенты квадратурной формулы $A_j > 0$, $j = \overline{1, n}$;
- квадратурная формула типа Гаусса не может быть верной для всех многочленов степени $2n$;
- если $f(x) \in C^{(2n)}(a, b)$, то существует точка $\xi \in [a, b]$ такая, что для методической погрешности квадратурной формулы наивысшей алгебраической степени точности верно равенство

$$R_n(f) = \frac{1}{2n!} \int_a^b p(x)\omega^2(x)f^{(2n)}(\xi)dx.$$

Для функции $f(x)$, у которой $2n$ -я производная непрерывна ($f(x) \in C^{(2n)}(a, b)$) и ограничена по модулю ($|f^{(2n)}(x)| \leq M_{2n}$), верна оценка

$$R_n(f) \leq \frac{M_{2n}}{(2n)!} \int_a^b |p(x)\omega^2(x)|dx. \quad (17)$$

Алгоритм построения КФ типа Гаусса

1. Вычислить *моменты* весовой функции $p(x)$ на $[a, b]$

$$\mu_j = \int_a^b p(x)x^j dx, \quad j = 0, 1, \dots, 2n - 1. \quad (18)$$

2. Решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{j=0}^{n-1} a_j \mu_{j+s} = -\mu_{n+s}, \quad s = 0, 1, \dots, n - 1. \quad (19)$$

3. Найти узлы x_j , $j = \overline{1, n}$, как корни узлового многочлена

$$\omega(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0 = 0. \quad (20)$$

4. Решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{j=1}^n A_j x_j^s = \mu_s, \quad s = \overline{0, n-1}. \quad (21)$$

Пример построения КФ типа Гаусса

Построить двухточечную ($n = 2$) КФНАСТ для вычисления интеграла

$$\int_a^b \frac{f(x)}{\sqrt{x-a}} dx \approx \sum_{j=1}^n A_j f(x_j), \quad b > a.$$

Аналогично примеру с ИКФ делаем замену переменной $t = x - a$:

$$\int_0^{b-a} \frac{\hat{f}(t)}{\sqrt{t}} dt \approx \sum_{j=1}^n A_j \hat{f}(t_j).$$

Вычисляем нужные нам моменты весовой функции $p(t) = \frac{1}{\sqrt{t}}$:
 $\mu_0 = 2(b-a)^{\frac{1}{2}}$, $\mu_1 = \frac{2}{3}(b-a)^{\frac{3}{2}}$, $\mu_2 = \frac{2}{5}(b-a)^{\frac{5}{2}}$, $\mu_3 = \frac{2}{7}(b-a)^{\frac{7}{2}}$.

Формируем систему линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} a_0\mu_0 + a_1\mu_1 = -\mu_2, \\ a_0\mu_1 + a_1\mu_2 = -\mu_3 \end{cases}$$

для определения коэффициентов a_1 , a_0 узлового многочлена $\omega(t)$.
Находим её решение

$$a_1 = \frac{\mu_0\mu_3 - \mu_1\mu_2}{\mu_1^2 - \mu_0\mu_2}, \quad a_0 = \frac{\mu_2^2 - \mu_1\mu_3}{\mu_1^2 - \mu_0\mu_2}.$$

Далее, разрешая уравнение $\omega(t) = 0$, находим корни t_0 и t_1 узлового многочлена, являющиеся узлами квадратурной формулы. Коэффициенты же квадратурной формулы являются решением системы алгебраических уравнений

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = \mu_0, \\ A_1 t_1 + A_2 t_2 = \mu_1. \end{cases}$$

Составные квадратурные формулы

Основная идея метода заключается в том, что для повышения точности интегрирования отрезок $[a, b]$ делят на несколько частей, применяют избранную квадратурную формулу к каждой отдельной части и результаты складывают. Для большинства квадратурных формул методическая погрешность $R_n(f)$ зависит от величины отрезка интегрирования и может быть представлена в виде:

$$R_n(f) = (b - a)^m K(a, b), \quad (22)$$

где $K(a, b)$ есть медленно меняющаяся функция от a , b и s . Эта зависимость показывает, что если уменьшить отрезок интегрирования в k раз, то $R_n(f)$ уменьшится в k^m раз.

Для вычисления интеграла по отрезку $[a, b]$ разделим его на k равных частей и вычислим при помощи выбранной квадратурной формулы интегралы по всем частичным отрезкам. На каждом частичном отрезке методическая погрешность будет в k^m раз меньше, чем при применении квадратурной формулы непосредственно ко всему интервалу $[a, b]$. При сложении всех таких интегралов получится результат, погрешность которого будет в k^{m-1} раз меньше, чем погрешность (22), когда квадратурная формула применяется для вычисления интеграла по всему отрезку $[a, b]$.

Разобьем исходный интервал интегрирования на частичные отрезки

$$[a, b] : a = z_0 < z_1 < z_2 < \dots < z_k = b.$$

В самом общем случае $h_i = z_{i+1} - z_i$ предполагаются различными.

Теперь применим на каждом частичном отрезке $[z_i, z_{i+1}]$ какое-нибудь квадратурное правило (в общем случае свое) для вычисления интеграла

$$J^{(i)}(f) = \int_{z_i}^{z_{i+1}} p(x)f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n_i} A_{ij}f(x_{ij}) = S_{n_i}^{(i)}(f), \quad (23)$$

$$R_{n_i}^{(i)}(f) = J^{(i)}(f) - S_{n_i}^{(i)}(f), \quad i = \overline{0, k-1}.$$

Просуммируем по i левые и правые части (23):

$$\begin{aligned} J(f) &= \int_a^b p(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^{k-1} J^{(i)}(f) = \sum_{i=0}^{k-1} \int_{z_i}^{z_{i+1}} p(x)f(x)dx \approx \\ &\approx \sum_{i=0}^{k-1} \sum_{j=1}^{n_i} A_{ij}f(x_{ij}) = \sum_{i=0}^{k-1} S_{n_i}^{(i)}(f) = S_N(f), \quad N = \sum_{i=0}^{k-1} n_i, \end{aligned} \quad (24)$$

$$R_N(f) = J(f) - S_N(f) = \sum_{i=0}^{k-1} R_{n_i}(f).$$

Определение 8. Полученное правило (24) вычисления интеграла называется *составной квадратурной формулой* (СКФ).

В качестве квадратурных формул (23) могут быть использованы квадратурные формулы всех рассмотренных типов (интерполяционные, типа Ньютона — Котса, типа Гаусса и др.) То же самое можно сказать и о числе узлов квадратурной формулы, используем на каждом из частичных отрезков. Оно может зависеть от номера отрезка.

В смешанной составной квадратурной формуле используется несколько типов малых формул (с одинаковым или разным числом узлов), в однородном — только одинаковые квадратурные формулы.

Пример построения СКФ Ньютона — Котса

Разобьем интервал интегрирования $[a, b]$ на k равных частичных отрезков длиной $h = \frac{b-a}{k}$: $[z_{i-1}, z_i]$, $i = \overline{1, k}$, где $z_i = a + ih$, $i = \overline{0, k}$. Будем применять одно и то же квадратурное правило на каждом

частичном отрезке. Построим малую интерполяционную трёхточечную квадратурную формулу с равноотстоящими узлами

$$J^{(i)}(f) = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{f(x)}{(x-a)^\alpha} dx \approx A_{i1}f(z_{i-1}) + A_{i2}f\left(\frac{z_{i-1} + z_i}{2}\right) + A_{i3}f(z_i).$$

Обозначим центральную точку отрезка $[z_{i-1}, z_i]$ через $z_{i-\frac{1}{2}} = \frac{z_{i-1} + z_i}{2}$.

Теперь на каждом частичном отрезке считаем моменты весовой функции

$$\mu_{is} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{x^s}{(x-a)^\alpha} dx, \quad \alpha < 1, \quad s = 0, 1, 2.$$

$$\mu_{i0} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{1}{(x-a)^\alpha} dx = \frac{(z_i - a)^{1-\alpha} - (z_{i-1} - a)^{1-\alpha}}{1 - \alpha},$$

$$\mu_{i1} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{x}{(x-a)^\alpha} dx = \frac{(z_i - a)^{2-\alpha} - (z_{i-1} - a)^{2-\alpha}}{2 - \alpha} + a\mu_{i0},$$

$$\mu_{i2} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{x^2}{(x-a)^\alpha} dx = \frac{(z_i - a)^{3-\alpha} - (z_{i-1} - a)^{3-\alpha}}{3 - \alpha} + 2a\mu_{i1} - a^2\mu_{i0}$$

и определяем коэффициенты квадратурной формулы

$$A_{i1} = \frac{\mu_{i2} - \mu_{i1}(z_{i-\frac{1}{2}} + z_i) + \mu_{i0}z_{i-\frac{1}{2}}z_i}{(z_{i-\frac{1}{2}} - z_{i-1})(z_i - z_{i-1})},$$

$$A_{i2} = -\frac{\mu_{i2} - \mu_{i1}(z_{i-1} + z_i) + \mu_{i0}z_{i-1}z_i}{(z_{i-\frac{1}{2}} - z_{i-1})(z_i - z_{i-\frac{1}{2}})},$$

$$A_{i3} = \frac{\mu_{i2} - \mu_{i1}(z_{i-\frac{1}{2}} + z_{i-1}) + \mu_{i0}z_{i-\frac{1}{2}}z_{i-1}}{(z_i - z_{i-\frac{1}{2}})(z_i - z_{i-1})}.$$

Просуммировав по всем частичным отрезкам $[z_0, z_1]$, $[z_1, z_2]$ и т. д.,

выпишем составную квадратурную формулу

$$\begin{aligned}
 \int_a^b \frac{f(x)}{(x-a)^\alpha} dx &\approx A_{11}f(z_0) + A_{12}f(z_{\frac{1}{2}}) + A_{13}f(z_1) + \\
 &+ A_{21}f(z_1) + A_{22}f(z_{\frac{3}{2}}) + A_{23}f(z_2) + \dots + \\
 &+ A_{k,1}f(z_{k-1}) + A_{k,2}f(z_{k-\frac{1}{2}}) + A_{k,3}f(z_k) = \\
 &= A_{11}f(z_0) + A_{k,3}f(z_k) + \sum_{i=1}^k A_{i2}f(z_{i-\frac{1}{2}}) + \sum_{i=1}^{k-1} (A_{i,3} + A_{i+1,1})f(z_i).
 \end{aligned} \tag{25}$$

Практические способы оценки погрешности составных квадратурных формул

Для представления погрешности составной квадратурной формулы (24) (в частности (25)) для широкого класса функций $f(\cdot)$ при достаточно малой величине шага h (в случае неравномерного разбиения — максимальной величине шага) можно написать:

$$R_N(f) = C_m h^m + O(h^{m+1}), \tag{26}$$

где m — натуральное число, а $C_m = C_m(f)$ — некоторая константа, зависящая лишь от $f(\cdot)$ и типа формулы, но не зависящая от h . Под $O(h^{m+1})$ понимаются члены сходящиеся к нулю быстрее, чем h^m .

Формула (26) дает асимптотическое представление (разложение) погрешности формулы (24) по параметру h — шагу равномерного разбиения интервала интегрирования. Она справедлива, в частности, для однородной СКФ, в которой малые квадратурные формулы (23) имеют АСТ $m - 1$, а функция $f(\cdot)$ — непрерывную (интегрируемую) на $[a, b]$ производную $f^{(m)}(\cdot)$.

Замечание 3. Для смешанных СКФ, особенно с малыми формулами разной АСТ, число m зависит от соотношения и расположения малых формул по частичным отрезкам. В частности, m может быть не целым.

Правило Рунге³

В этом подразделе и далее будем обозначать квадратурную сумму и погрешность однородной составной квадратурной формулы с постоянным шагом h как S_h и R_h соответственно, т. е. нижний индекс будет обозначать длину шага, а не количество вычислений $f(x_i)$, как это было раньше. Также для упрощения записи формул опустим (f) в этих обозначениях.

Практическая оценка константы C_m проводится следующим образом. Фиксируем два значения шага разбиения $h_1 = h$ и $h_2 = h/L$, $L > 1$, и проводим расчеты по исследуемой квадратурной формуле на двух равномерных сетках с шагом h_1 и h_2 . Предполагаем, что для ее методической погрешности верно асимптотическое разложение (26), т. е.

$$R_{h_1} = J(f) - S_{h_1} = C_m h_1^m + O(h_1^{m+1}) = C_m h^m + O(h^{m+1}) \quad (27)$$

и

$$\begin{aligned} R_{h_2} &= J(f) - S_{h_2} = C_m h_2^m + O(h_2^{m+1}) = \\ &= C_m \left(\frac{h}{L}\right)^m + O\left(\left(\frac{h}{L}\right)^{m+1}\right) = \frac{C_m}{L^m} h^m + O(h^{m+1}). \end{aligned} \quad (28)$$

Исключая из (27), (28) неизвестное значение интеграла $J(f)$, найдем

$$S_{h_2} - S_{h_1} = C_m h^m \left(1 - \frac{1}{L^m}\right) + O(h^{m+1}), \quad (29)$$

откуда

$$C_m = \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{h^m (1 - L^{-m})} + O(h^{m+1}). \quad (30)$$

Подставляя это выражение для C_m в равенства (27), (28) и отбрасывая члены более высокого порядка малости, чем h^m , найдем приближенные представления погрешностей R_{h_1} и R_{h_2} составной квадратурной формулы на рассматриваемых равномерных сетках:

$$R_{h_1} = J(f) - S_{h_1} \approx \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{1 - L^{-m}}, \quad (31)$$

³Карл Давид Тольме Рунге (нем. *Carl David Tolme Runge*) (1856–1927), немецкий математик, физик и спектроскопист. Внес существенный вклад в численный анализ, в частности, явился одним из разработчиков методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений, носящих теперь общее название методов типа Рунге — Кутты.

$$R_{h_2} = J(f) - S_{h_2} \approx \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{L^m - 1}. \quad (32)$$

Определение 9. Представленный практический способ оценивания методической погрешности называется *правилом Рунге*.

Так при $L = 2$ — если шаг расчёта уменьшается в два раза — погрешность составной квадратурной формулы $R_{\frac{h}{2}}$ меньше погрешности R_h почти в 2^m раз.

Используя правило Рунге, можно решить вопрос о нахождении оптимального шага разбиения h_{opt} интервала интегрирования, обеспечивающего (в первом приближении) вычисление интеграла с требуемой точностью ε :

$$\varepsilon = |R_{h_{opt}}| \approx |C_m h_{opt}^m| \approx \frac{|S_{h_2} - S_{h_1}|}{h^m (1 - L^{-m})} h_{opt}^m = R_{h_1} \left(\frac{h_{opt}}{h} \right)^m. \quad (33)$$

Отсюда получаем приблизительный оптимальный шаг разбиения

$$h_{opt} = h \left(\frac{\varepsilon (1 - L^{-m})}{|S_{h_2} - S_{h_1}|} \right)^{\frac{1}{m}} = h_1 \sqrt[m]{\frac{\varepsilon}{|R_{h_1}|}} = h_2 \sqrt[m]{\frac{\varepsilon}{|R_{h_2}|}}. \quad (34)$$

Замечание 4. Находя оптимальный шаг, следует несколько уменьшить значение, получаемое по формуле (34). Во-первых, из-за приближённости вычислений значение погрешности на найденном шаге h_{opt} может быть больше предсказанного. Рекомендуется домножить h_{opt} на некий «гарантийный множитель» $fac < 1$, например, 0.95. Во-вторых, для вычисления интеграла по СКФ с постоянным шагом, необходимо, чтобы в отрезке $[a, b]$ укладывалось целое число таких шагов. С этой целью следует округлить число $(b - a)/h_{opt}$ вверх, и вычислить новую длину оптимального шага, поделив $b - a$ на найденное округлённое значение.

Метод Ричардсона⁴

Можно повысить точность оценки погрешности, если рассматривать её асимптотическое представление в виде

$$R_h = J(f) - S_h = C_m h^m + C_{m+1} h^{m+1} + \dots + C_{m+r-1} h^{m+r-1} + O(h^{m+r}). \quad (35)$$

Фиксируя r и отбрасывая члены порядка h^{m+r} , получим выражение, в котором при любом известном h остаётся $r + 1$ неизвестная величина: C_m, \dots, C_{m+r-1} и $J(f)$. Если теперь провести расчёты на $r + 1$ сетке с шагами h_1, h_2, \dots, h_{r+1} , то получим систему линейных алгебраических уравнений на перечисленные неизвестные. Решив её, получим оценку (35) более точную, чем (26), и приближение к $J(f)$, которое будет существенно точнее, чем любое из значений $S_{h_1}, \dots, S_{h_{r+1}}$.

Определение 10. Этот подход к оценке методической погрешности называется *методом Ричардсона*, а приближение к $J(f)$ — *уточнением по Ричардсону*.

Для случая $r = 1$ получаем оценку, совпадающую с правилом Рунге. В этом случае также можно использовать уточнение по Ричардсону, более точное чем S_{h_1} и S_{h_2} (помним, что $h_1 = Lh_2$):

$$J(f) \approx S_{h_1} + \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{1 - L^{-m}} = S_{h_2} + \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{L^m - 1}.$$

Замечание 5. Для каждой конкретной функции $f(\cdot)$ величина C_m (как и C_{m+1} , и последующие) и скорость сходимости m становятся постоянными только при достаточно малых h . Часто при длинах шагов, используемых в практических вычислениях, нельзя быть уверенным в том, что процесс сходится со скоростью АСТ + 1. Величина h , для которой асимптотическая оценка (26) становится верна, зависит от задачи и от веса $p(\cdot)$. Как правило, для $p(\cdot) \equiv 1$ устойчивая сходимость достигается при больших длинах шага, чем в других случаях.

⁴ *Лю́ис Фрай Ричардсон* (англ. *Lewis Fry Richardson*) (1881–1953), английский математик, физик, метеоролог, психолог и пацифист, впервые применивший современные математические методы прогнозирования погоды и приложения подобных методов для изучения причин возникновения войн и их предотвращения. Также разработал метод решения систем линейных уравнений, известный как модифицированные итерации Ричардсона, и одним из первых стал изучать фракталы.

Процесс Эйткена⁵

В случае если неизвестен порядок главного члена погрешности m или нет уверенности в том, что шаг h достаточно мал, чтобы значение C_m перестало заметно меняться при его изменении, можно оценить практическую скорость сходимости приближения S_h к $J(f)$ при уменьшающемся h . В отличие от правила Рунге, кроме $J(f)$ и C_m неизвестным становится ещё и само число m , и для его определения используется третья сетка.

Пусть $h_1 = h$, $h_2 = h_1/L$ и $h_3 = h_2/L = h_1/L^2$, $L > 1$. Тогда, используя (29) и отбрасывая члены порядка h^{m+1} , получаем

$$\frac{S_{h_3} - S_{h_2}}{S_{h_2} - S_{h_1}} \approx \frac{C_m \left(\frac{h}{L}\right)^m \left(1 - \frac{1}{L^m}\right)}{C_m h^m \left(1 - \frac{1}{L^m}\right)} = \frac{1}{L^m}.$$

Отсюда,

$$m \approx -\frac{\ln \frac{S_{h_3} - S_{h_2}}{S_{h_2} - S_{h_1}}}{\ln L}. \quad (36)$$

Заметим, что если асимптотическая сходимость для данного h ещё не достигнута, то значения S_{h_1} , S_{h_2} и S_{h_3} могут находиться с разных сторон от точной величины интеграла $J(f)$. В этом случае под логарифмом в числителе (36) может оказаться отрицательное число, а оценка m окажется слишком грубой, даже если «схитрить» и вычислить её, взяв логарифм в числителе от модуля выражения. С другой стороны, иногда это лучше, что можно сделать.

Задание для самостоятельного выполнения

Цель задания

Убедиться в необходимости использования квадратурных формул для вычисления «неберущихся» определенных интегралов. Попытаться вычислить предложенный интеграл методом (3). Убедиться в необходимости применения более сложных правил интегрирования, рассчитанных на узкий класс задач.

⁵Александр Крейг Эйткен (англ. Alexander Craig Aitken) (1895–1967), новозеландский математик, разработал обобщённый метод наименьших квадратов, а также ввёл общепринятые теперь векторно-матричные обозначения для линейной регрессионной модели.

Ознакомиться с двумя наиболее распространенными классами квадратурных формул — формулами Ньютона—Котса и Гаусса — и с вычислением интегралов от разрывных функций.

Научиться управлять численным процессом с целью обеспечения заданной точности за приемлемое время, используя составные КФ и практические способы оценки погрешности и выбора оптимального разбиения.

Содержание задания

Для заданного набора значений параметров вычислить интеграл

$$\int_a^b \frac{f(x)}{(x-a)^\alpha(b-x)^\beta} dx \quad (37)$$

с заданной точностью ε с использованием двух типов формул. Найти «точное» значение интеграла для сверки получаемых численных результатов с помощью какой-нибудь компьютерной системы научных вычислений.

Вариант Ньютона—Котса

- Построить интерполяционную квадратурную формулу с весовой функцией $p(x) = (x-a)^{-\alpha}(b-x)^{-\beta}$ на отрезке $[a, b]$ по трём равномерно распределённым узлам $x_1 = a$, $x_2 = (a+b)/2$, $x_3 = b$. Оценить методическую погрешность построенного правила (11), сравнить её с точной погрешностью.
- На базе построенной малой ИКФ построить составную КФ и, уменьшая длину шага h , добиться заданной точности $\varepsilon = 10^{-6}$. Погрешность оценивать методом Ричардсона. На каждых последовательных трёх точках оценивать скорость сходимости по правилу Эйткена.
- Проведя вычисления по трём грубым сеткам с малым числом шагов (например, 1, 2 и 4) использовать оценку скорости сходимости и выбрать оптимальный шаг h_{opt} . Начать расчёт с шага h_{opt} и снова довести до требуемой точности ε .

Вариант Гаусса

Выполнить всё то же самое, используя трёхточечные формулы Гаусса вместо формул Ньютона — Котса. Узлы каждой малой формулы находить либо с помощью формул Кардано, либо численно.

Обратите внимание, что из-за ограниченности разрядной сетки при хранении чисел и большой чувствительности полиномов к погрешностям в их коэффициентах, может оказаться так, что узлы формул Гаусса, находимые как корни узлового многочлена, будут выходить за границы отрезка интегрирования, что не позволит найти с их помощью решение задачи.

Варианты заданий

- $f(x) = 2 \cos(2.5x) \exp(x/3) + 4 \sin(3.5x) \exp(-3x) + x$,
 $a = 1.5, b = 3.3, \alpha = 1/3, \beta = 0$;
- $f(x) = 3 \cos(0.5x) \exp(x/4) + 5 \sin(2.5x) \exp(-x/3) + 2x$,
 $a = 1.7, b = 3.2, \alpha = 0, \beta = 1/4$;
- $f(x) = 2.5 \cos(2x) \exp(2x/3) + 4 \sin(3.5x) \exp(-3x) + 3x$,
 $a = 0.1, b = 2.3, \alpha = 1/5, \beta = 0$;
- $f(x) = 3 \cos(3.5x) \exp(4x/3) + 2 \sin(3.5x) \exp(-2x/3) + 4x$,
 $a = 1, b = 3, \alpha = 0, \beta = 1/6$;
- $f(x) = \cos(1.5x) \exp(2x/3) + 3 \sin(5.5x) \exp(-2x) + 2$,
 $a = 2.5, b = 4.3, \alpha = 2/7, \beta = 0$;
- $f(x) = 4 \cos(0.5x) \exp(-5x/4) + 2 \sin(4.5x) \exp(x/8) + 2$,
 $a = 1.3, b = 2.2, \alpha = 0, \beta = 5/6$;
- $f(x) = 4.5 \cos(7x) \exp(-2x/3) + 1.4 \sin(1.5x) \exp(-x/3) + 3$,
 $a = 2.1, b = 3.3, \alpha = 2/5, \beta = 0$;
- $f(x) = 3.7 \cos(1.5x) \exp(-4x/3) + 2.4 \sin(4.5x) \exp(2x/3) + 4$,
 $a = 1.8, b = 2.3, \alpha = 0, \beta = 3/5$;
- $f(x) = 3 \cos(1.5x) \exp(x/4) + 4 \sin(3.5x) \exp(-3x) + 4x$,
 $a = 2.5, b = 3.3, \alpha = 2/3, \beta = 0$;
- $f(x) = 1.3 \cos(3.5x) \exp(2x/3) + 6 \sin(4.5x) \exp(-x/8) + 5x$,
 $a = 0.7, b = 3.2, \alpha = 0, \beta = 1/4$;

11. $f(x) = 0.5 \cos(2x) \exp(2x/5) + 2.4 \sin(1.5x) \exp(-6x) + 6x$,
 $a = 1.1, b = 2.5, \alpha = 2/5, \beta = 0$;
12. $f(x) = 4 \cos(2.5x) \exp(4x/7) + 2.5 \sin(5.5x) \exp(-3x/5) + 4.3x$,
 $a = 1.8, b = 2.9, \alpha = 0, \beta = 4/7$;
13. $f(x) = 2 \cos(3.5x) \exp(5x/3) + 3 \sin(1.5x) \exp(-4x) + 3$,
 $a = 1.5, b = 2.3, \alpha = 1/5, \beta = 0$;
14. $f(x) = 3 \cos(2.5x) \exp(7x/4) + 5 \sin(0.5x) \exp(3x/8) + 4$,
 $a = 2.3, b = 2.9, \alpha = 0, \beta = 2/5$;
15. $f(x) = 3.5 \cos(0.7x) \exp(-5x/3) + 2.4 \sin(5.5x) \exp(-3x/4) + 5$,
 $a = 1.1, b = 2.3, \alpha = 4/5, \beta = 0$;
16. $f(x) = 2.7 \cos(3.5x) \exp(-7x/3) + 4.4 \sin(2.5x) \exp(5x/3) + 2$,
 $a = 2.8, b = 4.3, \alpha = 0, \beta = 3/7$;
17. $f(x) = 6 \cos(1.5x) \exp(5x/3) + 2 \sin(0.5x) \exp(-1.3x) + 5.4x$,
 $a = 3.5, b = 3.7, \alpha = 2/3, \beta = 0$;
18. $f(x) = 4 \cos(2.5x) \exp(5x/4) + 2.5 \sin(1.5x) \exp(-2x/7) + 5x$,
 $a = 2.7, b = 3.2, \alpha = 0, \beta = 3/4$;
19. $f(x) = 0.5 \cos(3x) \exp(2x/5) + 4 \sin(3.5x) \exp(-3x) + 3x$,
 $a = 1.1, b = 2.3, \alpha = 2/5, \beta = 0$;
20. $f(x) = 1.5 \cos(3.7x) \exp(4x/7) + 3 \sin(2.5x) \exp(3x/4) + 3x$,
 $a = 1.5, b = 3, \alpha = 0, \beta = 5/6$;
21. $f(x) = 3 \cos(2.5x) \exp(4x/3) + 4 \sin(5.5x) \exp(-3.5x) + 3$,
 $a = 2.5, b = 4.3, \alpha = 2/7, \beta = 0$;
22. $f(x) = 5 \cos(0.3x) \exp(-7x/4) + 7 \sin(0.5x) \exp(2x/3) + 4$,
 $a = 0.5, b = 2.2, \alpha = 0, \beta = 3/5$;
23. $f(x) = 2.5 \cos(5.7x) \exp(-4x/3) + 2.4 \sin(2.5x) \exp(-3x/3) + 7$,
 $a = 0.2, b = 3.1, \alpha = 3/5, \beta = 0$;
24. $f(x) = 5.7 \cos(2.5x) \exp(-4x/7) + 4.4 \sin(4.3x) \exp(2x/7) + 5$,
 $a = 0.8, b = 1.3, \alpha = 0, \beta = 4/7$.

Литература

1. Крылов В. И. Приближенное вычисление интегралов, 2-е изд. — М.: Наука, 1967. 500 с.
2. Вержбицкий В. М. Основы численных методов: учебник для вузов — М.: Директ-Медиа, 2013. 847 с.
3. Калиткин Н. Н. Численные методы: учебное пособие, 2-е изд. — СПб: БХВ-Петербург, 2011. 592 с.
4. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы, 8-е изд. — М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. 639 с.