Глава 4

Численное интегрирование

Рассмотрим интеграл вида

$$I(f) = \int\limits_a^b p(x)\, f(x)\, dx\,,$$

где $[a,b]$ — конечный или бесконечный промежуток числовой оси и $f(x)$ — произвольная функция из некоторого класса F. Если не оговорено противное, то считаем, что все $f(x)$ непрерывны на отрезке $[a,b]$. Заданную функцию $p(x)$ называют *весовой*. Будем предполагать, что на $[a,b]$ она измерима, тождественно не равна нулю (как правило, почти всюду положительна) и ее произведение на любую $f(x) \in F$ суммируемо.

Для приближенного вычисления интеграла $I(f)$ строят линейные квадратурные формулы (*квадратуры*) следующего вида:

$$S_n(f) = \sum_{i=1}^{n} c_i\, f(x_i)\,.$$

Постоянные c_i называются *коэффициентами* (*весами*) квадратуры, x_i — ее *узлами*.

Для каждой функции $f(x) \in F$ погрешность квадратурной формулы $S_n(f)$ определяется как $R_n(f) = I(f) - S_n(f)$. При этом оценкой погрешности на классе F называют величину

$$R_n(F) = \sup_{f\in F} |R_n(f)|\,, \quad \|R_n(F)\| = \sup_{f\in F,\, \|f\|_F \neq 0} \frac{|R_n(f)|}{\|f\|_F}\,.$$

На практике часто используют оценки сверху для $|R_n(f)|$, которые будем обозначать через R_n.

4.1. Интерполяционные квадратуры

Имеется большая группа квадратурных формул, построенных на основе замены $f(x)$ алгебраическим интерполяционным многочленом. Пусть на конечном промежутке $[a,b]$ по заданному набору различных узлов $\{x_i\}_{i=1}^n$ функция $f(x)$ приближается интерполяционным многочленом Лагранжа $L_n(x)$ степени $n-1$

$$L_n(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,.$$

Положим

$$S_n(f) = \int\limits_a^b p(x)\, L_n(x)\, dx\,.$$

Отсюда получаем явные формулы для набора коэффициентов $\{c_i\}_{i=1}^n$ и оценку погрешности R_n такую,что $|I(f) - S_n(f)| \leqslant R_n$,

$$c_i = \int_a^b p(x) \prod_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j}\, dx, \quad R_n = \frac{\left\|f^{(n)}(x)\right\|}{n!}\int_a^b |p(x)|\,|\omega_n(x)|\,dx\,,$$

где

$$\left\|f^{(n)}(x)\right\| = \max_{x\in[a,b]}\left|f^{(n)}(x)\right|\,, \quad \omega_n(x) = \prod_{i=1}^n (x-x_i)\,.$$

В оценках, приведенных ниже, также используется равномерная норма.

Квадратурные формулы интерполяционного типа, построенные в случае весовой функции $p(x) \equiv 1$ для системы равноотстоящих узлов $x_i = a+(i-1)\,\dfrac{b-a}{n-1}$, $i = 1,\ldots,n$, называют *формулами Ньютона—Котеса.*

4.1. Получить формулы Ньютона—Котеса и соответствующие оценки погрешностей при числе узлов $n = 1, 2, 3$.

У к а з а н и е. При вычислении интегралов использовать замену переменной $x = x(t) = \dfrac{b+a}{2} + \dfrac{b-a}{2}\,t$. В частности,

$$\int_a^b |\omega_n(x)|\,dx = \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1}\int_{-1}^1 |\omega_n^0(t)|\,dt\,,$$

где $\omega_n^0(t) = \prod\limits_{i=1}^n (t-t_i)$, а t_i являются образами узлов x_i на отрезке $[-1, 1]$.

О т в е т: $n = 1$ — формула прямоугольников

$$S_1(f) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad R_1 = \|f'(x)\|\,\frac{(b-a)^2}{4}\;;$$

$n = 2$ — формула трапеций

$$S_2(f) = \frac{b-a}{2}\,(f(a)+f(b)), \quad R_2 = \|f''(x)\|\,\frac{(b-a)^3}{12}\;;$$

$n = 3$ — формула парабол (Симпсона)

$$S_3(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4\,f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right), \quad R_3 = \|f^{(3)}(x)\|\,\frac{(b-a)^4}{192}\;.$$

4.2. Рассмотрим формулы прямоугольников и трапеций. Какая из них имеет лучшую точность?

$\lhd$ Можно сравнивать точность только для функций из одного класса, поэтому необходимо получить для формулы прямоугольников другую оценку погрешности. Воспользуемся в качестве приближения к функции $f(x)$ отрезком ряда Тейлора в точке $\dfrac{a+b}{2}$. Имеем

$$f(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right) + \frac{f''(\xi)}{2}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2.$$

Тогда для квадратурной формулы $\widetilde{S}_1(f)$, полученной с помощью интегрирования двух первых слагаемых, справедливо равенство

$$\widetilde{S}_1(f) = \int_a^b \left[f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)\right] dx = S_1(f)\,,$$

при этом оценка погрешности принимает вид

$$\widetilde{R}_1 = \frac{\|f''(x)\|}{2} \int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 dx = \|f''(x)\|\,\frac{(b-a)^3}{24}\;.$$

Следовательно, на классе функций с непрерывной второй производной формула прямоугольников имеет оценку погрешности в два раза меньшую, чем формула трапеций. $\triangleright$

В общем случае оценка погрешности для формул Ньютона—Котеса имеет следующий вид:

при нечетных n

$$\tilde{R}_n = \frac{\left\|f^{(n+1)}(x)\right\|}{(n+1)!} \left| \int_a^b x\,\omega_n(x)\,dx \right|,$$

при четных n

$$\tilde{R}_n = \frac{\left\|f^{(n)}(x)\right\|}{n!} \left| \int_a^b \omega_n(x)\,dx \right|.$$

Отсюда можно получить известную оценку погрешности для формулы Симпсона: $\tilde{R}_3 = \|f^{(4)}(x)\|\,\dfrac{(b-a)^5}{2880}$.

4.3. Пусть весовая функция $p(x)$ четная, узлы x_i расположены симметрично относительно нуля, т. е. $x_{n+1-i} = -x_i$, $i = 1, \ldots, n$. Доказать, что в интерполяционной квадратурной формуле для вычисления интеграла $I(f) = \int\limits_{-a}^{a} p(x)\,f(x)\,dx$ коэффициенты, соответствующие симметричным узлам, равны, т. е. $c_{n+1-i} = c_i$, $i = 1, \ldots, n$.

Указание. В формуле для коэффициента квадратуры

$$c_{n+1-i} = a \int_{-1}^{1} p\,(at) \prod_{j \neq n+1-i} \frac{t - t_j}{t_i - t_j}\,dt$$

заменить узлы на симметричные $t_{n+1-i} = -t_i$, $t_j = -t_{n+1-j}$, формально поменять индекс в произведении и использовать свойство определенного интеграла $\int\limits_{-1}^{1} g(t)dt = \int\limits_{-1}^{1} g(-t)dt$.

4.4. Доказать, что для погрешности квадратурной формулы трапеций справедливо представление

$$R_2(f) = \int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{2}\,(f(a) + f(b)) = \frac{1}{2}\int_a^b (a-\xi)(b-\xi)f''(\xi)\,d\xi.$$

Указание. Проинтегрировать правую часть равенства по частям два раза или использовать формулу Тейлора с остаточным членом в интегральной форме.

Составные квадратурные формулы. Рассмотрим задачи на построение составных квадратурных формул и вывод оценок их погрешностей. Пусть $h = \frac{b-a}{N}$ и $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \ldots, N$. Введем следующие обозначения: $I^{(k)}(f) = \int\limits_{x_k}^{x_{k+1}} p(x) f(x)\, dx$, $S_n^{(k)}(f) = S_n(f)$ для отрезка $[x_k, x_{k+1}]$, $k = 0, \ldots, N-1$.

Исходный интеграл $I(f)$ равен $I(f) = \sum\limits_{k=0}^{N-1} I^{(k)}(f)$, поэтому соответствующая составная квадратурная формула принимает вид $S_n^N(f) = \sum\limits_{k=0}^{N-1} S_n^{(k)}(f)$, а для ее погрешности справедливо неравенство $|R_n^N(f)| \leqslant \sum\limits_{k=0}^{N-1} \left| R_n^{(k)}(f) \right|$. Например, в случае составной формулы прямоугольников

$$S_1^N(f) = \frac{b-a}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(x_k + \frac{h}{2}\right)$$

для погрешности на отрезке $[x_k, x_{k+1}]$ имеем неравенство

$$\left| R_1^{(k)}(f) \right| \leqslant \|f''(x)\| \, \frac{(x_{k+1} - x_k)^3}{24} = \|f''(x)\| \, \frac{h^3}{24} = \|f''(x)\| \, \frac{(b-a)^3}{24\, N^3} \,.$$

Следовательно, для всего отрезка $[a, b]$ оценка погрешности получается суммированием по всем $[x_k, x_{k+1}]$

$$R_1^N = \|f''(x)\| \, \frac{(b-a)^3}{24\, N^2} \,.$$

4.5. Для вычисления $\int\limits_0^1 f(x)\, dx$ применяется составная формула трапеций. Оценить минимальное число разбиений N, обеспечивающее точность $0,5 \cdot 10^{-3}$ на следующих классах функций: 1) $\|f''(x)\| \leqslant 1$; 2) $\int\limits_0^1 |f''(x)|\, dx \leqslant 1$.

Ответ: 1) $N = 13$; 2) $N = 16$ (для этого случая полезно использовать 4.4).

4.6. Для составной квадратурной формулы трапеций с шагом $h = \frac{b-a}{N}$, погрешность которой имеет вид

$$R_2^N(f) = \int\limits_a^b f(x)\, dx - \frac{b-a}{N} \left(\frac{1}{2}\, f(x_0) + \frac{1}{2}\, f(x_N) + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) \right)$$

получить оценки погрешности следующего вида:

$$1)\ R_2^N = \frac{h^2}{8}\int\limits_a^b |f''(x)|\,dx; \quad 2)\ R_2^N = \frac{h^2}{2}\sqrt{\frac{b-a}{30}}\left(\int\limits_a^b |f''(x)|^2 dx\right)^{1/2}.$$

Указание. Использовать 4.4. Для второго случая дополнительно ввести функцию

$$\varphi_k(x) = \begin{cases} (x_k - x)(x_{k+1} - x) & \text{на } [x_k, x_{k+1}], \\ 0 & \text{вне } [x_k, x_{k+1}]. \end{cases}$$

Тогда имеют место соотношения

$$\sum_{k=0}^{N-1}\int\limits_{x_k}^{x_{k+1}} (x_k - \xi)(x_{k+1} - \xi) f''(\xi)\,d\xi =$$

$$= \sum_{k=0}^{N-1}\int\limits_a^b \varphi_k(\xi) f''(\xi)\,d\xi = \int\limits_a^b f''(\xi)\sum_{k=0}^{N-1}\varphi_k(\xi)\,d\xi\,,$$

к последнему из которых следует применить неравенство Коши—Буняковского.

4.7. Вычислить интеграл $\int\limits_0^1 \exp(x^2)dx$ по формуле Ньютона—Котеса с узлами $x_1 = 0$, $x_2 = \frac{1}{4}$, $x_3 = \frac{1}{2}$, $x_4 = \frac{3}{4}$, $x_5 = 1$ и оценить погрешность.

4.8. Найти оценку погрешности вычисления интеграла $\int\limits_0^1 f(x)\,dx$ при $f(x) = \dfrac{1}{1+x^2}$ по составной квадратурной формуле

$$S(f) = \frac{f(0) + 4f(0,1) + 2f(0,2) + 4f(0,3) + \ldots + 4f(0,9) + f(1,0)}{30}.$$

Указание. Покажем, что $\|f^{(n)}(x)\| = n!$. Для этого введем функцию $y = \operatorname{arctg} x$. Тогда $y' = f(x)$. Используя обратную функцию $x = \operatorname{tg} y$, получим

$$y' = \cos^2 y, \quad y'' = -2y'\cos y \sin y, \quad \ldots .$$

Эти выражения можно преобразовать к виду

$$y' = \cos y \sin\left(y + \frac{\pi}{2}\right),$$

$$y'' = \cos^2 y \sin 2\left(y + \frac{\pi}{2}\right),$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$$

$$y^{(n)} = (n-1)!\cos^n y \sin n\left(y + \frac{\pi}{2}\right).$$

Отсюда следует $\|f^{(n)}(x)\| = \|y^{(n+1)}(x)\| = n!$.

Ответ: $\|f^{(4)}(x)\|\,\dfrac{1}{2880\cdot 5^4} = \dfrac{1}{75000}$.

4.9. Найти оценку погрешности вычисления интеграла $\int\limits_0^1 f(x)\,dx$ при $f(x) = \dfrac{1}{1+x^2}$ по составной квадратурной формуле

$$S(f) = \frac{f(0) + 2f(0,1) + 2f(0,2) + ... + 2f(0,9) + f(1,0)}{20}\,.$$

Ответ: $\|f''(x)\| \dfrac{1}{12 \cdot 10^2} = \dfrac{1}{600}$ (см. указание к 4.8).

4.10. Оценить число разбиений отрезка N для вычисления интеграла $\int\limits_0^1 \sin(x^2)\,dx$ по составной квадратурной формуле трапеций, обеспечивающее точность 10^{-4}.

Ответ: $N \geqslant 45 > \left[\sqrt{\dfrac{\theta}{12}} \cdot 10^2\right] + 1, \quad \theta = \max(2, 4\sin 1 - 2\cos 1) < 2,29\,.$

4.11. Оценить число разбиений отрезка N для вычисления интеграла $\int\limits_0^1 \exp(x^2)\,dx$ по составной квадратурной формуле прямоугольников, обеспечивающее точность 10^{-4}.

Ответ: $N \geqslant [50\sqrt{\mathrm{e}}] + 1 = 83\,.$

4.12. Оценить число узлов составной квадратурной формулы трапеций для вычисления интеграла $\int\limits_0^1 \exp(x^2)dx$, обеспечивающее точность $\varepsilon \leqslant 10^{-4}$.

4.13. Оценить число узлов составной квадратурной формулы Симпсона для вычисления интеграла $\int\limits_0^2 f(x)dx$, обеспечивающее точность $\varepsilon \leqslant 0,5 \cdot 10^{-4}$ на классе функций, удовлетворяющих условию $\|f^{(4)}(x)\| \leqslant 1$.

4.14. Записать квадратурную формулу для вычисления с точностью 10^{-4} интегралов $I(f) = \int\limits_0^\infty \mathrm{e}^{-x} f(x)dx$, $I(f) = \int\limits_0^\infty x\mathrm{e}^{-x} f(x)dx$, если для некоторого фиксированного $k \geqslant 1$ выполнено неравенство $\|f^{(k)}(x)\| \leqslant 1$.

4.15. Доказать справедливость следующих представлений погрешностей квадратурных формул:

$$1)\ \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{8}\left(f(a) + 3f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + 3f\left(\frac{a+2b}{3}\right) + f(b)\right) =$$
$$= -\left(\frac{b-a}{3}\right)^5 \frac{3}{80}\, f^{(4)}(\xi), \qquad a < \xi < b\,;$$

$$2)\ \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{90}\left(7f(a) + 32f\left(\frac{3a+b}{4}\right) + 12f\left(\frac{a+b}{2}\right) + 32f\left(\frac{a+3b}{4}\right) +\right.$$
$$\left. + 7f(b)\right) = -\left(\frac{b-a}{4}\right)^7 \frac{8}{945}\, f^{(6)}(\xi), \qquad a < \xi < b\,;$$

$$3)\ \int_a^b f(x)dx - \frac{b-a}{2}\,(f(a) + f(b)) - \frac{(b-a)^2}{12}\,(f'(a) - f'(b)) =$$
$$= \frac{(b-a)^5}{720}\, f^{(4)}(\xi), \qquad a < \xi < b\,.$$

4.16. Показать, что ни для какой системы узлов и коэффициентов погрешность квадратурной формулы $R_n(f)$ не стремится сильно к нулю на пространстве непрерывных функций ($f(x) \in C[a,b]$). Более того, всегда справедливо равенство

$$\|R_n(C)\| = \int_a^b p(x)\,dx + \sum_{i=1}^n |c_i|.$$

$\lhd$ Рассмотрим непрерывную на отрезке $[a,b]$ функцию $f(x)$ такую, что

$$\max_{[a,b]} |f(x)| = 1, \qquad \int_a^b p(x)f(x)\,dx \geqslant \int_a^b p(x)\,dx - \varepsilon$$

и $f(x_i) = -\operatorname{sign} c_i$, $i = 1, 2, \ldots, n$, где ε — произвольно малое число. Она строится конструктивно по заданным узлам x_i и весам c_i: $f(x) \equiv 1$ вне малых окрестностей точек x_i, внутри них — непрерывная функция $|f(x)| \leqslant 1$ и $f(x_i) = -\operatorname{sign} c_i$. Для такой функции справедливо неравенство

$$R_n(f) = I(f) - S_n(f) \geqslant \int_a^b p(x)\,dx + \sum_{i=1}^n |c_i| - \varepsilon,$$

и так как $|R_n(f)| \leqslant \|R_n(C)\| \max\limits_{[a,b]} |f(x)| = \|R_n(C)\|$, то имеет место оценка

$$\|R_n(C)\| \geqslant \int_a^b p(x)\,dx + \sum_{i=1}^n |c_i| - \varepsilon,$$

откуда в силу произвольности ε следует, что

$$\|R_n(C)\| \geqslant \int_a^b p(x)\,dx + \sum_{i=1}^n |c_i|.$$

Неравенство противоположного знака устанавливается просто, поэтому искомое утверждение доказано.

Этот факт иллюстрирует «пессимистическую» точку зрения, согласно которой проблема численного интегрирования непрерывных функций, вообще говоря, неразрешима. Однако для практических приложений более важен факт существования системы узлов и весовых коэффициентов таких, что $R_n(f) \to 0$ слабо на $C[a,b]$ при $n \to \infty$. Это тем более важно, что в приложениях приходится иметь дело не со всем пространством $C[a,b]$, а с некоторым его компактным подмножеством, для элементов которого можно указать порядок стремления к нулю величины $R_n(f)$. ▷

4.17. Пусть $C_q = \int\limits_a^b |f^{(q)}(x)|dx < \infty$, $q = 1, 2$. Получить оценку погрешности формулы трапеций $|R_2^N(f)| \leqslant \tau_q C_q h^q$, где τ_q — абсолютная постоянная, h — шаг интегрирования.

4.18. Пусть $C_q = \int\limits_a^b |f^{(q)}(x)|dx < \infty$, $q = 1, 2, 3, 4$. Получить оценку погрешности формулы Симпсона $|R_3^N(f)| \leqslant \rho_q C_q h^q$, где ρ_q — абсолютная постоянная, h — шаг интегрирования.

В упражнениях 4.19–4.21 рассматривается приближенное вычисление интеграла $I(f_b) = \int\limits_0^1 f_b(x)dx$ от функции с параметром $|b| < 1$:

$$f_b(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } \ x = 0, \\ x^b & \text{при } \ x \in (0, 1]. \end{cases}$$

4.19. Интеграл $I(f_b)$ вычисляется по составной квадратурной формуле трапеций с постоянным шагом $\frac{1}{N}$. Доказать, что суммарная погрешность удовлетворяет следующему соотношению: $|R_2^N(f)| \leqslant \frac{D_1(b)}{N^{1+b}}$, $D_1(b) \neq 0$.

4.20. Интеграл $I(f_b)$ вычисляется по составной квадратурной формуле трапеций с распределением узлов $x_q = \varphi\left(\frac{q}{N}\right)$, $\varphi(t) = t^{3/(1+b)}$. Доказать, что суммарная погрешность удовлетворяет соотношению $|R_2^N(f)| \leqslant$ $\leqslant \frac{D_2(b)}{N^2}$, $D_2(b) \neq 0$.

4.21. Интеграл $I(f_b)$ вычисляется по составной квадратурной формуле трапеций с распределением узлов $x_q = \varphi\left(\frac{q}{N}\right)$, $\varphi(t) = t^a$. Доказать, что при $a > \frac{2}{b+1}$ суммарная погрешность удовлетворяет соотношению $|R_2^N(f)| \leqslant \frac{D(a,b)}{N^2}$, $D(a,b) \neq 0$.

Проверить, что $D(a,b) > D_2(b)$, где $D_2(b)$ определено в 4.20.

4.2. Метод неопределенных коэффициентов

Если интегралы вида $\int\limits_a^b p(x)x^k\,dx$ вычисляются просто, то при заданном наборе различных узлов можно найти коэффициенты c_i из условия точности квадратурной формулы $S_n(f) = \sum\limits_{i=1}^{n} c_i\, f(x_i)$ для произвольного многочлена наиболее высокой степени, т. е. из равенств $I(x^k) = S_n(x^k)$, $k = 0, 1, \ldots, (n-1)$. Полученная система линейных уравнений относительно c_i имеет единственное решение.

Если квадратура точна для многочлена степени m (говорят, что она имеет алгебраический порядок точности, равный m), то справедливо равенство $R_n(f) = R_n(f - P_m)$. Взяв в качестве $P_m(x)$ интерполяционный многочлен для $f(x)$, построенный по нулям многочлена Чебышёва, можно получить оценку

$$|R_n(f)| \leqslant \frac{\|f^{(m+1)}\|}{(m+1)!}\,\frac{(b-a)^{m+1}}{2^{2m+1}}\left(\int\limits_a^b |p(x)|dx + \sum_{i=1}^{n}|c_i|\right).$$

Из условия точности квадратурной формулы для функций заданного вида можно выписать уравнения (в общем случае нелинейные) не только для определения коэффициентов, но и для узлов квадратуры.

Квадратурными формулами Чебышёва называют квадратуры с одинаковыми коэффициентами, т. е.

$$S_n(f) = c\sum_{i=1}^{n} f(x_i), \quad c = \frac{1}{n}\int\limits_a^b p(x)\,dx.$$

Их построение заключается в нахождении узлов x_i из условия точности для многочлена максимально высокой степени. Квадратуры Чебышёва (их удается построить при $n = 1, 2, 3, 4, 7, 10$) обычно применяют, если значения $f(x_i)$ известны с независимыми случайными погрешностями. В этом случае выбор равных коэффициентов обеспечивает минимальную дисперсию $S_n(f)$.

4.22. Получить формулу Симпсона методом неопределенных коэффициентов.

Указание. Сначала построить формулу на отрезке $[-1, 1]$, а затем отобразить ее на $[a, b]$.

Ответ: $S_3(f) = \dfrac{b-a}{6}\left(f(a) + 4\,f\left(\dfrac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$.

4.23. Для формул трапеций и Симпсона найти оценки погрешности, следующие из метода неопределенных коэффициентов.

Ответ: для формулы трапеций $|R_2(f)| \leqslant \dfrac{(b-a)^3}{8}\,\|f''\|$, так как $m = 1$; для формулы Симпсона $|R_3(f)| \leqslant \dfrac{(b-a)^5}{1536}\,\|f^{(4)}\|$, так как $m = 3$.