4.4. Главный член погрешности

Будем считать промежуток $[a, b]$ конечным и предположим, что $f(x)$ имеет на $[a, b]$ непрерывные производные до порядка $m + s$. Для квадратурной формулы $S_n(f) = \sum\limits_{i=1}^{n} c_i f(x_i)$, имеющей алгебраический порядок точности $m - 1$, справедливо равенство

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

Используя формулу Тейлора для $f(a + (x - a))$ с остаточным членом в интегральной форме $\int\limits_a^x \frac{(x-t)^m}{m!} f^{(m+1)}(t)dt$, можно получить следующее представление погрешности $R_n(f)$:

$$R_n(f) = \int\limits_a^b f^{(m)}(t)K(t)dt.$$

Здесь ядро $K(t)$ имеет вид

$$K(t) = \int\limits_t^a p(x)\, \frac{(x-t)^{m-1}}{(m-1)!}\, dx - \sum_{i=1}^{n} c_i E(x_i - t)\, \frac{(x_i - t)^{m-1}}{(m-1)!}\,,$$

где «гасящая» функция $E(x)$ определяется формулой

$$E(x) = \begin{cases} 1 & \text{при} \quad x > 0, \\ \frac{1}{2} & \text{при} \quad x = 0, \\ 0 & \text{при} \quad x < 0. \end{cases}$$

Имеет место представление Эйлера для погрешности:

$$R_n(f) \equiv R_m(f) = A_0 \left[f^{(m-1)}(b) - f^{(m-1)}(a)\right] + \ldots$$
$$\cdots + A_{s-1} \left[f^{(m+s-2)}(b) - f^{(m+s-2)}(a)\right] + R_{m+s}(f),$$

$$A_j = \frac{1}{b-a} \int\limits_a^b L_j(t)dt,\; L_{j+1}(t) = \int\limits_a^t \left[A_j - L_j(x)\right] dx, L_0(t) = K(t),$$

$$R_{m+s}(f) = \int\limits_a^b f^{(m+s)}(t)L_s(t)dt.$$

Главным членом погрешности обычно называют первое слагаемое в этом представлении. Формула Эйлера позволяет с точностью до $O\left(h^{m+2}\right)$ определить значение главного члена погрешности.

Правило Рунге. Пусть на отрезке длины h для вычисления интеграла $I(f)$ используется некоторая квадратурная формула $S_h(f)$, имеющая алгебраический порядок точности $m-1$. Разлагая $f(x)$ в ряд Тейлора в середине отрезка (точке c), получим

$$I(f)-S_h(f)=\alpha f^{(m)}(c)h^{m+1}+O\left(h^{m+2}\right).$$

Обозначим через $S_{h/2}(f)$ составную формулу, полученную с помощью формулы $S_h(f)$ для двух половинок отрезка длины h. Тогда при том же α находим

$$I(f)-S_{h/2}(f)=\alpha f^{(m)}(c)\,\frac{h^{m+1}}{2^m}+O\left(h^{m+2}\right).$$

Следовательно, с точностью до членов $O\left(h^{m+2}\right)$ справедливо следующее *правило Рунге*:

$$I(f)-S_{h/2}(f)\approx\frac{S_{h/2}(f)-S_h(f)}{2^m-1}\,.$$

4.78. Пусть интеграл $I(f)=\int\limits_a^b f(x)\,dx$, где $f(x)$ — гладкая функция, вычисляют по составной формуле трапеций $S_2^N(f)$ с постоянным шагом $h=\dfrac{b-a}{N}$.

1) Показать, что суммарная погрешность удовлетворяет соотношению

$$R_2^N=a_1h^2+a_2h^4+a_3h^6+\ \ldots\ .$$

2) Показать, что

$$R_2^N(f)=I(f)-S_2^N(f)=-\frac{h^2}{12}\int\limits_a^b f''(x)dx+Z(f),\ Z(f)=o(h^2).$$

3) Пусть $|f^{(3)}(x)|\leqslant M_3$ на отрезке $[a,b]$. Показать, что $|Z(f)|\leqslant c_3M_3(b-a)h^3$.

4) Пусть $|f^{(4)}(x)|\leqslant M_4$ на отрезке $[a,b]$. Показать, что $|Z(f)|\leqslant c_4M_4(b-a)h^4$.

Указание. Пусть $[x_i,x_{i+1}]$ — один из подотрезков длины h, на которые разбит отрезок $[a,b]$, и пусть $\bar{x}=\dfrac{x_i+x_{i+1}}{2}$. Используя тейлоровское разложение подынтегральной функции в точке $\bar{x}$, получить следующие представления:

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx=hf(\bar{x})+\frac{h^3}{24}\,f''(\bar{x})+\frac{h^5}{1920}\,f^{(4)}(\bar{x})+\ \ldots\ ,$$

$$\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)\,dx=\frac{f(x_i)+f(x_{i+1})}{2}\,h-\frac{h^3}{12}\,f''(\bar{x})-\frac{h^5}{480}\,f^{(4)}(\bar{x})-\ \ldots\ .$$

4.79. Пусть $I(f) = \int\limits_0^1 f(x)dx$ вычисляют по составной формуле трапеций с переменным шагом интегрирования: $x_i = \varphi(ih)$, $\varphi(t)$ — гладкая функция, $\varphi(0) = 0$, $\varphi(1) = 1$. Доказать, что главный член погрешности есть

$$-\frac{h^2}{12}\int\limits_0^1 f''(\varphi(t))(\varphi'(t))^3 dt.$$

Указание. Применить 4.78, учитывая справедливость равенства $x_{i+1} - x_i = h\,\varphi'(ih) + o(1)$.

4.80. Пусть интеграл $I(f) = \int\limits_a^b f(x)\,dx$, где $f(x)$ — гладкая функция, вычисляют по составной формуле Симпсона $S_3^N(f)$ с постоянным шагом $h = \frac{b-a}{N}$. Показать, что для составной формулы Симпсона суммарная погрешность удовлетворяет соотношению

$$R_3^N(f) = b_1h^4 + b_2h^6 + \ldots\ .$$

4.81. Пусть интеграл $I(f) = \int\limits_0^1 x^\lambda f(x)\,dx$, где $f(x)$ — гладкая функция и $f(0) \ne 0$, вычисляют по составной формуле трапеций с постоянным шагом $h = \frac{1}{N}$. Показать, что при $-1 < \lambda < 1$ суммарная погрешность удовлетворяет соотношению $R_2^N = a_1h^{1+\lambda} + a_2h^{2+\lambda} + \ldots$.

4.82. Используя значения S_h и $S_{h/2}$ квадратуры с главным членом погрешности ch^m, т. е. $I = S_h + ch^m$, построить квадратурную формулу более высокого порядка точности.

Ответ: $S_{h,h/2} = S_{h/2} + \dfrac{S_{h/2} - S_h}{2^m - 1}$.

4.83. Показать, что при применении правила Рунге к формуле трапеций получается формула Симпсона. Насколько при этом увеличится порядок главного члена погрешности?

Указание. В обозначениях 4.82 имеем $m = 2$, $S_{h,h/2} = S_{h/2} + \frac{1}{3}\left(S_{h/2} - S_h\right)$ при $S_h = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$, $b - a = h$. Порядок главного члена погрешности увеличится на 2.

4.84. Показать, что операция построения формулы

$$S_{h,h/2} = S_{h/2} + \frac{S_{h/2} - S_h}{2^m - 1}$$

является экстраполяционной, т. е. при $S_h \ne S_{h/2}$ величина $S_{h,h/2}$ всегда лежит вне отрезка с концами S_h и $S_{h/2}$.

◁ Действительно, если $S_{h/2} > S_h$, то $S_{h,h/2} > S_{h/2} > S_h$. Если $S_{h/2} < S_h$, то $S_{h,h/2} < S_{h/2} < S_h$. ▷

4.85. Пусть для вычисления интеграла I от некоторой функции используется квадратурная формула S_h, фактический порядок главного члена погрешности p которой неизвестен для данной функции. Предложить способ численной оценки значения порядка p.

$\triangleleft$ Возможен следующий способ (*процесс Эйткена*), являющийся обобщением правила Рунге. Пусть I — точное значение интеграла. Запишем его приближенные значения с шагами h, $\frac{h}{2}$ и $\frac{h}{4}$. Если учитывать только главный член погрешности, то получаем систему трех уравнений

$$I = S_h + ch^p, \quad I = S_{h/2} + \frac{1}{2^p}\, ch^p, \quad I = S_{h/4} + \frac{1}{4^p}\, ch^p,$$

в которой значения I, c и p неизвестны. Из первого и второго уравнений имеем $ch^p\left(1 - \frac{1}{2^p}\right) = S_{h/2} - S_h$. Из второго и третьего уравнений находим

$$\frac{1}{2^p}\, ch^p\left(1 - \frac{1}{2^p}\right) = S_{h/4} - S_{h/2}.$$

Из последних двух равенств получаем уравнение для определения p:

$$2^p = \frac{S_{h/2} - S_h}{S_{h/4} - S_{h/2}}\,.$$

Выражение для главного члена погрешности имеет вид

$$ch^p = \frac{\left(S_{h/2} - S_h\right)^2}{2S_{h/2} - S_h - S_{h/4}}\,. \qquad \triangleright$$

Упражнения 4.86–4.88 иллюстрируют возможные обобщения правила Рунге.

4.86. Пусть задан некоторый метод вычисления интеграла с погрешностью $I(f) - S_h(f) = ch^m + O(h^{m+1})$ и вычислен интеграл с шагом h_1 и с шагом $h_2 = \frac{h_1}{\lambda}$. Показать, что

$$I(f) - S_{h_2}(f) \approx \frac{S_{h_2}(f) - S_{h_1}(f)}{\lambda^m - 1}\,.$$

Имеется в виду предельный переход при $h_2 \to 0, \lambda = \mathrm{const} > 1$.

4.87. Пусть $I(f) - S_h(f) = ch^m + O(h^{m+1})$ и вычислен интеграл с шагом h_1 и с шагом $h_2 = \frac{h_1}{\lambda}$. Доказать, что

$$I(f) - S_{h_2}(f) \approx \frac{S_{h_2}(f) - S_{h_1}(f)}{\left(\frac{h_1}{h_2}\right)^m - 1}$$

при следующих условиях: $h_1 \to 0$, $\frac{\lambda - 1}{h_1} \to \infty$.

4.88. Пусть $I(f) - S_h(f) = ch^m + O(h^{m+2})$ и вычислен интеграл с шагом h_1 и с шагом $h_2 = \dfrac{h_1}{\lambda}$. Доказать, что

$$I(f) - S_{h_2}(f) \approx \frac{S_{h_2}(f) - S_{h_1}(f)}{\left(\dfrac{h_1}{h_2}\right)^m - 1}$$

при следующих условиях: $h_1 \to 0, h_1 > h_2$.

4.5. Функции с особенностями

Быстро осциллирующие функции. Пусть требуется вычислить интеграл $\int\limits_a^b \exp\{\mathrm{i}\omega x\} f(x)dx$, где $\omega(b-a) \gg 1$, $f(x)$ — гладкая функция. Функции $\mathrm{Re}\,(\exp\{\mathrm{i}\omega x\} f(x))$, $\mathrm{Im}\,(\exp\{\mathrm{i}\omega x\} f(x))$ имеют на рассматриваемом отрезке примерно $\omega\dfrac{b-a}{\pi}$ нулей. Многочлен степени n имеет не более n нулей на этом отрезке, поэтому такие функции могут быть хорошо приближены многочленами степени n лишь при $n \gg \omega\dfrac{b-a}{\pi}$. Следовательно, для непосредственного вычисления интегралов от таких функций потребуется применение квадратур, точных для многочленов очень высокой степени.

Более выгодным может оказаться использование $\exp\{\mathrm{i}\omega x\}$ в качестве весовой функции. Задавшись узлами интерполирования

$$x_j = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}\, d_j\,, \quad j = 1, 2, \ldots, n\,,$$

построим многочлен Лагранжа $L_n(x)$ и рассмотрим квадратурную формулу

$$\begin{aligned} S_n^\omega(f) &= \int\limits_a^b \exp\{\mathrm{i}\omega x\} L_n(x)dx = \\ &= \frac{b-a}{2} \exp\left\{\mathrm{i}\omega\, \frac{a+b}{2}\right\} \sum_{j=1}^{n} D_j\left(\omega\, \frac{b-a}{2}\right) f(x_j), \end{aligned} \tag{4.2}$$

где

$$D_j(p) = \int\limits_{-1}^{1} \left(\prod_{k \neq j} \frac{\xi - d_k}{d_j - d_k}\right) \exp\{\mathrm{i}p\xi\} d\xi,\; p = \omega\, \frac{b-a}{2}\,.$$

При этом оценка погрешности

$$R_n = D\,(d_1, \ldots, d_n) \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(n)}(x)\right| \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1}$$

не зависит от ω.

4.89. Для приближенного вычисления интегралов вида

$$I(f) = \int\limits_0^1 \sin(100\pi x) f(x)\, dx$$

построить методом неопределенных коэффициентов квадратурную формулу с заданными узлами $S(f) = c_1\, f(0) + c_2\, f(1)$, точную для многочленов наиболее высокой степени.

Ответ: $c_1 = -c_2 = \frac{1}{100\pi}$.

4.90. Для приближенного вычисления интегралов от быстро осциллирующих функций вида $I(f) = \int\limits_0^1 \cos(10^4\pi x)\, f(x)\, dx$ построить методом неопределенных коэффициентов квадратурную формулу с заданными узлами $S(f) = c_1\, f(0) + c_2\, f(1)$, точную для многочленов наиболее высокой степени.

Ответ: $c_1 = c_2 = 0$.

4.91. Построить формулу вида (4.2) для $n = 2,\ d_1 = -1,\ d_2 = 1$.

Ответ: $p = \omega\dfrac{b-a}{2}$,

$$D_1(p) = \int\limits_{-1}^{1} \frac{1-\xi}{2} \exp\{\mathrm{i}p\xi\} d\xi = \frac{\sin p}{p} + \frac{p\cos p - \sin p}{p^2}\,\mathrm{i},$$

$$D_2(p) = \int\limits_{-1}^{1} \frac{1+\xi}{2} \exp\{\mathrm{i}p\xi\} d\xi = \frac{\sin p}{p} - \frac{p\cos p - \sin p}{p^2}\,\mathrm{i}.$$

4.92. Показать, что при малых ω формулы, полученные в 4.91, могут иметь большую вычислительную погрешность.

Указание. При малых ω величина p мала. Функции $\cos p$ и $\sin p$ вычисляются с погрешностями $O(2^{-t})$ и $O(p2^{-t})$ соответственно, где t — длина мантиссы. Как следствие коэффициенты $D_1(p)$ и $D_2(p)$ из 4.91 приобретают погрешность $\dfrac{O(2^{-t})}{p}$.

4.93. Построить формулу вида (4.2) для $n = 3,\ d_1 = -1,\ d_2 = 0,\ d_3 = 1$ (формула Филона).

4.94. Построить формулу вида (4.2) для $n = 5,\ d_1 = -1,\ d_2 = -0.5,\ d_3 = 0,\ d_4 = 0.5,\ d_5 = 1$.

Вычисление интегралов от функций с особенностями. Значительная часть реально встречающихся подынтегральных функций — это функции с особенностями, причем особенность может содержаться либо в самой функции, либо в ее производных. Если нерегулярность функции не вызвана колебательным характером ее поведения, то для вычисления больших серий интегралов такого типа используют специальные приемы: выделение особенности в весовую функцию, разбиение интеграла на части, аддитивное представление подынтегральной функции, замену переменных и т. д.

4.95. Пусть вычисляется интеграл $I = \int\limits_0^1 f(x)dx$, причем $f(x)$ может быть представлена в виде $f(x) = g(x)x^{\alpha}$, где $\alpha \in (0,1)$, $g(x)$ — гладкая функция, $g(0) \neq 0$. Построить квадратурную формулу $S(g) = \sum\limits_{j=0}^{M} D_j g(jh)$ с оценкой погрешности вида $\mathrm{const} \cdot \max\limits_{x\in[0,1]} |g''(x)| \cdot M^{-2}$.

Указание. Выделить функцию x^{α} в качестве весовой, а $g(x)$ на каждом отрезке разбиения заменить многочленом Лагранжа первой степени.

4.96. Пусть вычисляется интеграл $\int\limits_0^1 \frac{f(x)\lambda}{\lambda^2 + x^2}\, dx$, $f \in C^{(2)}[0,1]$, $|\lambda| \ll 1$. Показать, что при использовании составной формулы трапеций с постоянным шагом $h = \frac{1}{M}$ суммарная погрешность оценивается величиной $\mathrm{const} \cdot \min\left(\frac{h}{\lambda}, \frac{h^2}{\lambda^2}\right)$.

4.97. Для вычисления интеграла $\int\limits_0^1 \frac{f(x)\lambda}{\lambda^2 + x^2}\, dx$, $f \in C^{(1)}[0,1]$, $|\lambda| \ll 1$, используется следующая квадратурная формула с постоянным шагом $h = \frac{1}{M}$:

$$S(f) = \sum_{j=1}^{M} f(\xi_j) \left[\operatorname{arctg}\left(\frac{jh}{\lambda}\right) - \operatorname{arctg}\left(\frac{(j-1)h}{\lambda}\right)\right],$$

где $(j-1)h \leqslant \xi_j \leqslant jh$. Получить оценку погрешности вида $|R^M| \leqslant \mathrm{const} \cdot \max\limits_{x\in[0,1]} |f'(x)| \cdot M^{-1}$.

4.98. Предложить способ вычисления интеграла $\int\limits_0^1 \frac{\ln x}{1+x^2}\, dx$ по составной квадратурной формуле с постоянным шагом h, чтобы погрешность имела порядок $O(h^2)$.

Указание. Представить подынтегральную функцию в виде $f(x) = G(x) + g(x)$, где $G(x) = \ln x$, $g(x) = -\frac{x^2 \ln x}{1+x^2}$, вычислить $\int\limits_0^1 G(x)dx$ в явном виде.

4.99. Предложить способ вычисления интеграла $\int\limits_0^1 \frac{\ln x}{1+x^2}\,dx$ по составной квадратурной формуле с постоянным шагом h, чтобы погрешность имела порядок $O\left(h^4\right)$.

Указание. См. указание к 4.98 при $G(x) = (1-x^2)\ln x$.

4.100. Пусть $f(x)$ — достаточно гладкая функция. Предложить квадратурную формулу для вычисления интеграла $\int\limits_0^1 f(x)x^{-\alpha}\sin(\omega x)dx$, где $\alpha > 1$, $\omega \gg 1$, $f(0) \neq 0$.

Указание. Разбить отрезок интегрирования на $[0,\varepsilon]$ и $[\varepsilon,1]$ с $\varepsilon \approx \frac{1}{\omega}$. На первом отрезке $\sin(\omega x)$ не является осциллирующей, поэтому в качестве весовой функции можно взять $x^{-\alpha}$, а на втором отрезке использовать неравномерные узлы и весовую функцию $\sin(\omega x)$.

4.101. Построить квадратурную формулу для вычисления с точностью $\varepsilon \leqslant 10^{-4}$ интеграла $\int\limits_1^\infty \frac{f(x)}{1+x^2}\,dx$, если для некоторого фиксированного $k \geqslant 1$ справедливо неравенство $|f^{(k)}(x)| \leqslant A_k$.

4.102. Построить квадратурную формулу для вычисления с точностью $\varepsilon \leqslant 10^{-4}$ интеграла $\int\limits_0^\infty f(x)\mathrm{e}^{-x}dx$, если для некоторого фиксированного $k \geqslant 1$ справедливо неравенство $|f^{(k)}(x)| \leqslant A_k$.

4.103. Построить квадратурную формулу (не проводя замену переменных) для вычисления с точностью $\varepsilon \leqslant 10^{-3}$ интеграла $\int\limits_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}}\,dx$, если для некоторого фиксированного $k \geqslant 1$ справедливо неравенство $|f^{(k)}(x)| \leqslant A_k$.

4.104. Построить квадратурную формулу для вычисления с точностью $\varepsilon \leqslant 10^{-4}$ интеграла $\int\limits_0^1 f(x)\,\frac{\sqrt{\sin x}}{x}\,dx$, если для некоторого фиксированного $k \geqslant 1$ справедливо неравенство $|f^{(k)}(x)| \leqslant A_k$.