12.4. Методы численного интегрирования

Квадратурные формулы интерполяционного типа, общий способ получения, порядок, точность, порядок погрешности, виды погрешности. Формулы Ньютона-Котеса, примеры. Формула Симпсона, анализ погрешности. Составная формула Симпсона, анализ погрешности. Интегрирование с заданной точностью. Оценка погрешности интегрирования по правилу Рунге. Метод адаптивной квадратуры (опция). Квадратурные формулы наивысшей точности (Гаусса)

Построение квадратурных формул – общий подход

Рассмотрим задачу о вычислении интеграла

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{12.1}$$

С целью численного решения задачи (12.1) используем значения функции $f(x)$ в узлах сетки $x_0 < x_1 < ... < x_n$ и полином $P_n(x)$ степени не выше n, интерполирующий $f(x)$ в указанных узлах: $P_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0,...n.$

Узлы, выбранные для построения интерполяционного полинома, могут попадать или не попадать на отрезок интегрирования.

Граничные узлы интерполяции могут совпадать или не совпадать с границами отрезка интегрирования.

Сетка, образованная узлами интерполяции, может быть равномерной или неравномерной.

Полагая, что на отрезке интегрирования $[a,b]$

функция $f(x)$ **примерно «равна»**

своему интерполяционному полиному $P_n(x)$ **степени не выше** n

$$f(x) \sim P_n(x) \tag{12.2}$$

«заменяем» интеграл от функции

интегралом интерполяционного полинома:

$$\int_a^b f(x)\,dx \sim \int_a^b P_n(x)\,dx \tag{12.3}$$

Чтобы решить поставленную задачу

1) Запишем полином $P_n(x)$ в форме Лагранжа:

$$P_n(x) = \sum_{i=0}^{n} L_{ni}(x) f_i \tag{12.4}$$

где $L_{ni}(x), i=0,...n$ – полиномы Лагранжа и $f_i = f(x_i), i=0,...n$ - значения функции в узлах интерполяции.

2) Проинтегрируем $P_n(x)$ на отрезке $[a,b]$:

$$\int_a^b P_n(x)dx = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n L_{ni}(x)\cdot f_i\right)dx = \sum_{i=0}^n f_i \cdot \left(\int_a^b L_{ni}(x)dx\right) \qquad (12.5)$$

3) Введем обозначения

$$c_i = \int_a^b L_{ni}(x)dx, \; i=0,...n \qquad (12.6)$$

Это коэффициенты, значения которых зависят от отрезка интегрирования $[a,b]$ и расположения узлов сетки $x_0 < x_1 < ... < x_n$, и не зависят от функции $f(x)$.

4) Запишем результат (12.5) с помощью обозначений (12.6)

$$\int_a^b P_n(x)dx = \sum_{i=0}^n c_i f_i \qquad (12.7)$$

5) Результат интегрирования полинома обозначим символом I_n

$$I_n = \int_a^b P_n(x)\, dx \qquad (12.8)$$

Квадратурной формулой интерполяционного типа для решения задачи (12.1) на сетке $x_0 < x_1 < ... < x_n$ называют формулу вида

$$I_n = \sum_{i=0}^n c_i f_i \qquad (12.9)$$

где коэффициенты $c_i, i=0,...n$ определены по формулам (12.6), а значения $f_i = f(x_i), i=0,...n$ есть значения функции $f(x)$ в узлах интерполяции.

Квадратурная формула I_n служит для приближенного вычисления I:

$$I = \int_a^b f(x)dx \sim I_n = \sum_{i=0}^n c_i f_i \qquad (12.10)$$

Формула I_n заменяет вычисление интеграла I вычислением некоторой линейной комбинации значений функции в узлах сетки.

Погрешность квадратурной формулы

Определение 1. Погрешностью квадратурной формулы I_n называют разность истинного значения интеграла I и значения I_n, соответствующего формуле:

$$\psi_n = I - I_n \qquad (12.11)$$

Для погрешности квадратурной формулы справедливо следующее представление.

Утверждение 1. Если на отрезке «задания и применения интерполяционного полинома» функция $f(x)$ является достаточно гладкой, для погрешности ψ_n верно

$$\psi_n = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\ \omega(x)\ dx \qquad (12.12)$$

где $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$,

$\xi(x) \in [\min[a, x_0], \max[b, x_n]]$.

Доказательство

Погрешность ψ_n запишем по определению (12.11), увидим ее связь с погрешностью интерполяции $r_n(x)$ и применим Теорему о погрешности интерполяции (модуль 12.2):

$$\psi_n = \int_a^b f(x)dx - \int_a^b P_n(x)dx = \int_a^b (f(x) - P_n(x))dx = \int_a^b r_n(x)dx =$$

$$= \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi(x))\ \omega(x)\ dx$$

Здесь $\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$, $\xi(x) \in [\min[a, x_0], \max[b, x_n]]$.

Порядок формулы, точность формулы, порядок погрешности формулы, виды погрешности

Квадратурную формулу характеризуют:

n	**порядок формулы**, то есть степень соответствующего ей интерполяционного полинома;
p	**точность формулы**, то есть максимально возможная степень полиномов, для которых формула дает точный результат (нулевую погрешность ψ_n); очевидно, что $p \geq n$.
k	**порядок малости погрешности**, см. примеры далее.

При изучении погрешности различают

ψ_n	погрешность квадратурной формулы (погрешность интегрирования)
$В\Pi_n$	вычислительную погрешность интегрирования
$О\Pi_n$	общую погрешность квадратурной формулы (общую погрешность интегрирования)

Квадратурные формулы Ньютона-Котеса

Определение 2. Квадратурную формулу вида (12.9) для вычисления интеграла (12.1) называют квадратурной формулой Ньютона-Котеса порядка n, если начальный и последний узлы интерполяции совпадают с границами отрезка интегрирования: $x_0 = a, x_n = b$ и сетка $x_0 < x_1 < ... < x_n$ является равномерной

$$x_i = a + ih, i = 0,...n, h = \frac{b-a}{n}$$

При построении формул Ньютона-Котеса порядка n функцию $f(x)$ (как и в общем случае) заменяют на отрезке интегрирования $[a,b]$ ее интерполяционным полиномом $P_n(x)$ степени не выше n.

Утверждение 2. Если на отрезке интегрирования $[a,b]$ функция $f(x)$ является достаточно гладкой, погрешность квадратурной формулы Ньютона-Котеса порядка n в зависимости от четной или нечетной степени интерполяционного полинома $P_n(x)$ имеет вид

$$\psi_n = \begin{cases} \dfrac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) \int\limits_a^b (x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)dx, & n = 2N-1 \\ \dfrac{1}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi) \int\limits_a^b x(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_n)dx, & n = 2N \end{cases} \qquad (12.13)$$

При нечетных n точность формулы p равна ее порядку: $p = n$, а при четных n точность формулы p выше ее порядка: $p = n+1$.

Пример 1

Формула Ньютона-Котеса порядка $n = 1$ называется **формулой трапеций**. Формула имеет вид

$$I_1 = \int\limits_a^b P_1(x)dx = \frac{h}{2}\left(f(a) + f(b)\right) \qquad (12.14)$$

где $h = b - a$ называется «шагом формулы трапеций».

При построении данной квадратурной формулы полином $P_1(x)$ интерполирует $f(x)$ на сетке

$$x_0 = a, \ x_1 = a + h.$$

При этом $b = a + h$.

Пример 2

Формула Ньютона-Котеса порядка $n = 2$ называется **формулой Симпсона**. Формула имеет вид

$$I_2 = \int\limits_a^b P_2(x)dx = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f(a+h) + f(b)\right) \qquad (12.15)$$

где $h = \dfrac{b-a}{2}$ называется «шагом формулы Симпсона».

При построении данной квадратурной формулы полином $P_2(x)$ интерполирует $f(x)$ на сетке

$x_0 = a,\; x_1 = a + h, x_2 = a + 2h.$

При этом $b = a + 2h$.

Пример 3

Формула Ньютона Котеса порядка $n = 3$ называется **«правилом $3/8$ »**.

$$I_3 = \int_a^b P_3(x)dx = \frac{3h}{8}\left(f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(b)\right) \tag{12.16}$$

где $h = \dfrac{b-a}{3}$ называется «шагом правила $3/8$ ».

При построении данной квадратурной формулы полином $P_3(x)$ интерполирует $f(x)$ на сетке

$x_0 = a,\; x_1 = a + h, x_2 = a + 2h,\; x_3 = a + 3h.$

При этом $b = a + 3h$.

Запись формул в каноническом виде

Формула трапеций как частный случай формулы (12.9) имеет вид

$$I_1 = c_0 \cdot f_0 + c_1 \cdot f_1$$

где $c_0 = c_1 = \dfrac{h}{2}$, $f_0 = f(x_0) = f(a)$, $f_1 = f(x_1) = f(b)$.

Формула Симпсона как частный случай квадратурной формулы (12.9) имеет вид

$$I_2 = c_0 \cdot f_0 + c_1 \cdot f_1 + c_2 \cdot f_2$$

где $c_0 = c_2 = \dfrac{h}{3}, c_1 = \dfrac{4h}{3}$, $f_0 = f(x_0) = f(a)$, $f_1 = f(x_1) = f\left(\dfrac{a+b}{2}\right)$, $f_2 = f(x_2) = f(b)$

Правило $3/8$ как частный случай квадратурной формулы (12.9) имеет вид

$$I_3 = c_0 \cdot f_0 + c_1 \cdot f_1 + c_2 \cdot f_2 + c_3 \cdot f_3$$

где $c_0 = c_3 = \frac{3h}{8}, c_1 = c_2 = \frac{9h}{8}$, $f_0 = f(x_0) = f(a)$,

$$f_1 = f(x_1) = f\left(\frac{2a+b}{3}\right),\ f_2 = f(x_2) = f\left(\frac{a+2b}{3}\right),\ f_3 = f(x_3) = f(b)$$

При $n \le 8$ нужную формулу можно найти в справочнике. При $n > 8$ формулы, как правило, не используются: их коэффициенты велики по модулю и различны по знаку, что приводит к росту вычислительной погрешности.

Квадратурная формула Симпсона I_2

Квадратурная формула Симпсона I_2 используется для приближенного вычисления интеграла (12.1) на основе интерполяционного полинома $P_2(x)$ степени не выше 2

$$I = \int_a^b f(x)dx \sim I_2$$

Формула имеет вид

$$I_2 = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) \qquad (12.17)$$

где $h = \frac{b-a}{2}$ есть «шаг формулы Симпсона».

Обоснование формулы I_2

Полагая $f(x)$ на отрезке интегрирования $[a,b]$ примерно «равной» своему интерполяционному полиному $P_2(x)$ степени не выше 2 (это парабола)

$$f(x) \sim P_2(x)$$

«заменяем» интеграл от функции интегралом от параболы:

$$\int_a^b f(x)\,dx \sim \int_a^b P_2(x)\,dx$$

Узлы интерполяции имеют вид

$$x_0 = a,\ \ x_1 = a + h, x_2 = a + 2h.$$

где $h = \frac{b-a}{2}$ есть «шаг формулы Симпсона», такой, что $b = a + 2h$.

В узлах интерполяции полином $P_2(x)$ должен соответствовать требованиям

$$P_2(x_0) = f(a),$$

$$P_2(x_1) = f(a+h) = f\left(\frac{a+b}{2}\right),$$

$$P_2(x_2) = f(a+2h) = f(b).$$

Записывая $P_2(x)$ в форме Лагранжа, вычисляем интеграл:

$$\int_a^b P_2(x)dx =$$
$$= \int_a^b \left(\frac{(x-x_1)(x-b)}{(a-x_1)(a-b)} f(a) + \frac{(x-a)(x-b)}{(x_1-a)(x_1-b)} f(x_1) + \frac{(x-x_1)(x-a)}{(b-x_1)(b-a)} f(b) \right) dx =$$
$$= \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b) \right)$$

Результат интегрирования полинома $P_2(x)$ обозначим через I_2

$$I_2 = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

Значение искомого интеграла полагаем «равным» значению формулы:

$$I = \int_a^b f(x)dx \sim I_2$$

Погрешность формулы I_2

Определение 3. Погрешностью квадратурной формулы Симпсона называют разность истинного значения интеграла I и значения I_2, соответствующего формуле:

$$\psi_2 = I - I_2 \qquad (12.18)$$

Утверждение 3. Если на отрезке интегрирования $[a,b]$ функция $f(x)$ четыре раза непрерывно-дифференцируема, для погрешности квадратурной формулы Симпсона верно представление

$$\psi_2 = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi) \qquad (12.19)$$

где ξ есть неизвестная средняя точка на отрезке интегрирования: $\xi \in [a,b]$.

Для погрешности формулы Симпсона верна оценка

$$|\psi_2| \le \hat{M}\, h^5, \qquad (12.20)$$

где $\hat{M} = \frac{1}{90} \max\limits_{x\in[a,b]} \left| f^{IV}(x) \right|$,

$h = \frac{b-a}{2}$ есть шаг формулы Симпсона,

Доказательство

На основании Утверждения 2 в случае $n = 2$ запишем

$$\psi_2 = \frac{1}{4!} f^{IV}(\xi) \int_a^b x\,(x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)dx =$$

$$= \frac{1}{4!} f^{IV}(\xi) \int_a^b x\,(x - a)(x - \left(\frac{a+b}{2}\right))(x - b)dx = \ldots = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi)$$

Порядок формулы I_2

Формула имеет порядок 2, так как построена на основе интерполяционного полинома степени не выше 2 по трем узлам интерполяции (на это указывает индекс 2 в обозначении I_2).

Точность формулы I_2

Так как погрешность ψ_2 определяется четвертой производной подынтегральной функции $f(x)$, результат численного интегрирования будет точным для всех $f(x)$, которые являются полиномами от нулевой до третьей степени включительно (для указанных полиномов четвертая производная и соответственно погрешность ψ_2 обращаются в ноль).

Точность формулы Симпсона равна 3.

Порядок погрешности формулы I_2

Порядок погрешности формулы Симпсона используется для оценки погрешности численного интегрирования на базе **составных квадратурных формул** по результатам, полученным на «обычной» и «удвоенной» сетке (см. раздел «Оценка погрешности интегрирования по правилу Рунге», модуль 12.4)

Рассмотрим **подход к исследованию порядка погрешности** и покажем, что **для формулы Симпсона порядок погрешности равен 5 .**

Чтобы изучить порядок погрешности, рассмотрим модельную ситуацию:

$$I = \int_a^{a+2h} f(x)dx \text{ при } h \to 0,$$

то есть a фиксировано, b стремится к a .

Погрешность квадратурной формулы Симпсона записывается в виде

$$\psi_2 = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(\xi),$$

где $\xi \in [a, a + 2h]$ и для каждого значения h формула (12.19) содержит «свое» значение неизвестной средней точки ξ .

Чтобы выделить главный член погрешности, запишем четвертую производную, взятую в средней точке, по формуле Тейлора в неизменной (фиксированной) точке a:

$$f^{IV}(\xi) = f^{IV}(a) + f^{V}(\eta)(\xi - a),$$

где $\eta \in [a, \xi]$ - новая средняя точка.

В предположении, что пятая производная на отрезке $[a, a+2h]$ **ограничена, учитывая, что** $|\xi - a| \le |b - a| = 2h$, **запишем**

$$f^{IV}(\xi) = f^{IV}(a) + O(h).$$

Результат

1) Если на отрезке $[a, a+2h]$ функция $f(x)$ является достаточно гладкой, погрешность формулы Симпсона представима в виде

$$\psi_2 = -\frac{h^5}{90} f^{IV}(a) + o(h^5)$$

2) Если $f^{IV}(a) \ne 0$, главный член погрешности формулы Симпсона имеет вид

$$-\frac{h^5}{90} f^{IV}(a)$$

и порядок погрешности есть $k = 5$.

Комментарии

При уменьшении шага формулы Симпсона в 10 раз (соответственно при уменьшении длины участка интегрирования в 10 раз) погрешность формулы уменьшается в 100 000 раз.

Для изучения порядка погрешности могли быть также рассмотрены:

$I = \int\limits_{b-2h}^{b} f(x)dx$, значение b фиксировано, $h \to 0$

$I = \int\limits_{x_1-h}^{x_1+h} f(x)dx$, значение x_1 фиксировано, $h \to 0$

Вычислительная погрешность формулы I_2

Определение 4. Вычислительной погрешностью интегрирования по формуле Симпсона называют разность значения I_2, соответствующего формуле Симпсона, и значения $\tilde{I}_2$, полученного по формуле Симпсона:

$$B\Pi_2 = I_2 - \tilde{I}_2 \tag{12.21}$$

В общем случае источниками вычислительной погрешности любой квадратурной формулы вида (12.9) могут быть:

1) неточное задание узлов интерполяции $x_i, i = 0,\ldots n$, используемых при вычислении коэффициентов (12.6), и неточное задание границ отрезка $[a,b]$;

2) неточный подсчет коэффициентов (12.6) и погрешности выполнения арифметических операций при вычислении выражения (12.9);

3) неточное задание функции $f(x)$ в узлах интерполяции.

В связи с тем, что неточность задания функции присутствует практически всегда и во многих случаях ее влияние превосходит влияние остальных источников, рассмотрим «модельную ситуацию», аналогичную рассмотренной в модуле п. 12.2, и сформулируем следующее утверждение.

Утверждение 4. Если коэффициенты квадратурной формулы Симпсона, а именно

$$c_0 = c_2 = \frac{h}{3}; c_1 = \frac{4h}{3}$$

заданы точно и при вычислении выражения (12.17) погрешность выполнения арифметических операций отсутствует,

тогда вычислительная погрешность интегрирования по формуле Симпсона зависит от ошибок задания функции в узлах интерполяции

$$В\Pi_2 = \frac{h}{3}(\delta_0 + 4\delta_1 + \delta_2) \qquad (12.22)$$

и оценивается величиной

$$|\, В\Pi_2 \,| \le \delta \cdot (b-a) \qquad (12.23)$$

Здесь $\delta_i = f_i - \tilde{f}_i, i = 0, 1, 2$ – ошибки (погрешности) задания функции в узлах интерполяции и число $\delta > 0$ есть оценка этих ошибок:

$$|\, \delta_i \,| \le \delta, i = 0, 1, 2. \qquad (12.24)$$

Доказательство

Значение, соответствующее формуле Симпсона, составит

$$I_2 = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right) = \frac{h}{3}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right)$$

Значение, полученное по формуле Симпсона, составит

$$\tilde{I}_2 = \frac{h}{3}\left(\tilde{f}_0 + 4\tilde{f}_1 + \tilde{f}_2\right)$$

Вычислительная погрешность интегрирования в соответствии с (12.21) записывается следующим образом:

$$ВП_2 = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) - \frac{h}{3}(\tilde{f}_0 + 4\tilde{f}_1 + \tilde{f}_2) = \frac{h}{3}(\delta_0 + 4\delta_1 + \delta_2)$$

С учетом (12.24) и предположений об отсутствии иных источников вычислительной погрешности записываем оценку

$$| ВП_2 | \le \delta \frac{h}{3}(1+4+1) = 2\,\delta\, h$$

Так как шаг формулы Симпсона есть $h = \frac{b-a}{2}$, получаем

$$| ВП_2 | \le \delta \cdot (b-a)$$

Комментарий

Из (12.23) следует вычислительная устойчивость численного интегрирования: если $h \to 0$ (то есть $b \to a$) $ВП_2 \to 0$.

Общая погрешность формулы I_2

Определение 5. Общей погрешностью интегрирования по формуле Симпсона называют разность истинного значения интеграла I и значения $\tilde{I}_2$, полученного по формуле:

$$ОП_2 = I - \tilde{I}_2 \tag{12.25}$$

Прибавляя и вычитая «истинное» значение квадратурной формулы I_2, получим

$$ОП_2 = \underbrace{I - \tilde{I}_2}_{\substack{\text{общая}\\ \text{погрешность}\\ \text{интегрирования}}} = \underbrace{I - I_2}_{\substack{\text{погрешность}\\ \text{формулы}\\ \text{Симпсона}}} + \underbrace{I_2 - \tilde{I}_2}_{\substack{\text{вычислительная}\\ \text{погрешность}\\ \text{интегрирования}}}$$

Вытекает результат:

Утверждение 5. Общая погрешность интегрирования по формуле Симпсона равна сумме погрешности квадратурной формулы и вычислительной погрешности интегрирования

$$ОП_2 = \psi_2 + ВП_2 \tag{12.26}$$

Для нее справедлива оценка

$$| ОП_2 | \le | \psi_2 | + | ВП_2 |. \tag{12.27}$$

При выполнении предположений о гладкости функции $f(x)$ на отрезке интегрирования (см. Утверждение 3) и об источниках вычислительной погрешности (см. Утверждение 4) оценка общей погрешности интегрирования по формуле Симпсона принимает вид

$$| ОП_2 | \le \hat{M}h^5 + \delta(b-a) \tag{12.28}$$

где $\hat{M} = \dfrac{1}{90} \max\limits_{x \in [a,b]} \left| f^{IV}(x) \right|$;

$h = \dfrac{b-a}{2}$ есть шаг формулы Симпсона,

число $\delta > 0$ есть оценка ошибок задания подынтегральной функции в узлах сетки:

$\left| \delta_i \right| \le \delta, i = 0, 1, 2$, где $\delta_i = f_i - \tilde{f}_i, i = 0, 1, 2$

Комментарий

Из (12.28) следует еще один аспект вычислительной устойчивости квадратурных формул: если $h \to 0$ (то есть $b \to a$) $O\Pi_2 \to 0$.