

Составная квадратурная формула Симпсона $I_{2,m}$

Задачи вычисления интегралов с высокой точностью на отрезках интегрирования большой длины приводят к необходимости применения составных формул, схем контроля погрешности и построения неравномерных сеток.

Эти вопросы изложены в разделах о применении правила Рунге и метода адаптивной квадратуры, поэтому данный раздел начинается с описания составной формулы Симпсона на произвольной сетке.

Полный анализ погрешности получается более наглядным, если его провести на примере равномерной сетки. Потому вслед за описанием на произвольной сетке приведено описание формулы на сетке с участками равной длины.

Составная формула $I_{2,m}$ на произвольной сетке

Составная квадратурная формула Симпсона $I_{2,m}$ используется для приближенного вычисления интеграла I на основе **квадратурных формул** вида (12.17), которые применяются **на участках отрезка** $[a, b]$:

$$I = \int_a^b f(x) dx \sim I_{2,m} \quad (12.30)$$

Обозначения:

$[x_i, x_{i+1}], i = 0, \dots, m-1$ разбиение отрезка $[a, b]$ на m участков,
 $x_0 = a, x_m = b, x_0 < x_1 < \dots < x_m$

Точки $x_i, i = 0, \dots, m$ являются **основными узлами** составной формулы.

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

запись искомого интеграла как суммы
интегралов по участкам;

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \sim \frac{\hat{h}_i}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

квадратурная формула Симпсона на
участке $[x_i, x_{i+1}], i = 0, \dots, m-1$;

$$\hat{h}_i - \text{«шаг формулы Симпсона на участке } [x_i, x_{i+1}] \text{», } \hat{h}_i = \frac{x_{i+1} - x_i}{2};$$

$x_{i+1/2}$ – **середина участка** $[x_i, x_{i+1}]$, то есть **дополнительный узел** формулы.

Составная квадратурная формула Симпсона $I_{2,m}$ на m участках имеет вид

$$I_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}_i}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) \quad (12.31)$$

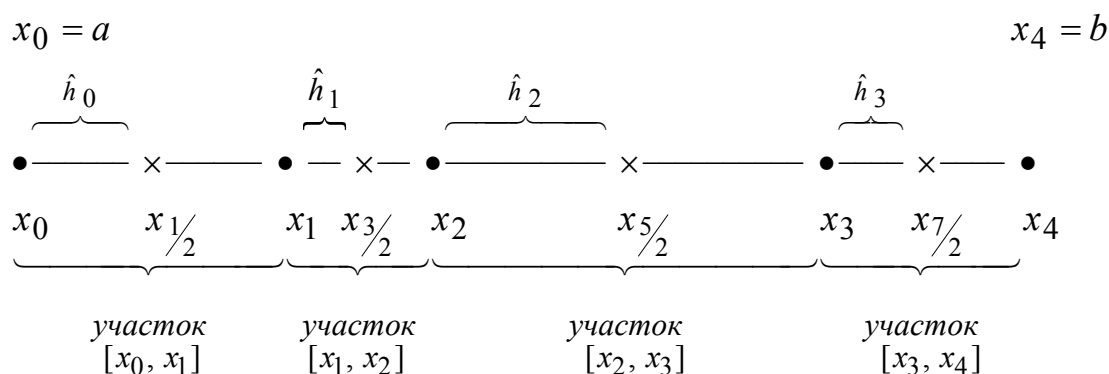
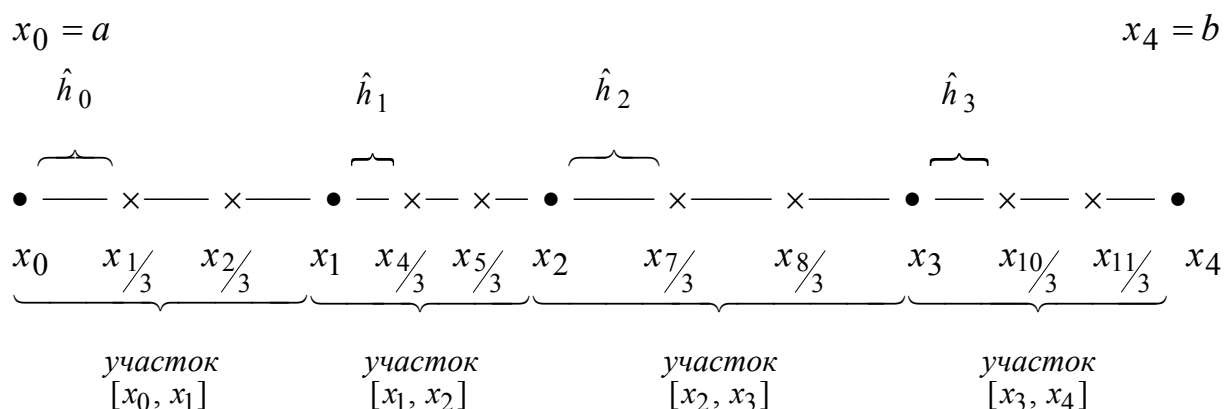
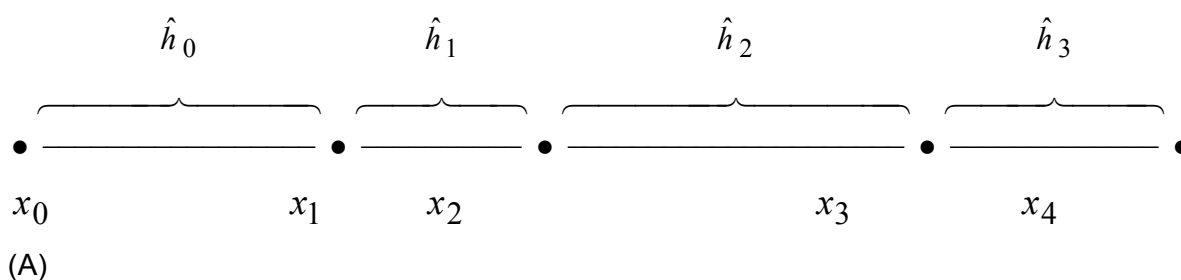


Рисунок 1

Пример неравномерной сетки для составной формулы Симпсона, $m=4$

Комментарий

В обозначении $I_{2,m}$ индекс 2 указывает на порядок формулы Симпсона ($n=2$), индекс m указывает на то, что формула Симпсона применяется на m участках отрезка $[a, b]$. Обозначение $I_{1,m}$ соответствует составной формуле трапеций, а обозначение $I_{3,m}$ – составной формуле «правила $\frac{3}{8}$ », когда они применяются на m участках отрезка $[a, b]$.



(Б)

Рисунок 2

Пример неравномерной сетки для составной формулы трапеций $m=4$ (А) и составной формулы «Правило $\frac{3}{8}$ » $m=4$ (Б)

Составная формула $I_{2,m}$ на равномерной сетке

Чтобы получить составную формулу $I_{2,m}$ на равномерной сетке, разбиваем отрезок $[a, b]$ на m **равных участков**. Длина каждого участка составляет

$$h = \frac{b-a}{m}.$$

Определим **основные узлы** составной формулы:

$$x_i = a + ih, i = 0, \dots, m,$$

где h (длина участка) выступает как **«шаг составной формулы»**.

Искомый интеграл есть сумма интегралов, взятых по участкам:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

Чтобы на каждом из участков применить формулу Симпсона, нужны **дополнительные узлы**. Они должны быть расположены посередине каждого из участков:

$$x_{i+1/2} = x_i + \frac{h}{2}, i = 0, \dots, m-1$$

Для надежности вычислений дополнительные узлы часто записывают в виде

$$x_{i+1/2} = a + \left(i + \frac{1}{2}\right)h, i = 0, \dots, m-1.$$

Запишем формулу Симпсона для вычисления интеграла на участке $[x_i, x_{i+1}]$:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \sim \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) \quad (12.32)$$

Обозначение \hat{h} есть **«шаг формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$ »**.

Длина отрезка интегрирования, число участков, шаг составной формулы и шаг формулы на участке связаны соотношениями

$$\hat{h} = \frac{h}{2} = \frac{b-a}{2m}. \quad (12.33)$$

(Попытка сократить число показателей, характеризующих сетку задачи, приводит к ошибкам в интерпретации справочной информации, отладке программ и реализации адаптивных алгоритмов).

Чтобы вычислить искомый интеграл, суммируем формулы (12.32):

$$\int_a^b f(x) dx \sim \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) \quad (12.34)$$

Составной квадратурной формулой Симпсона $I_{2,m}$ на равномерной сетке называем формулу

$$I_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) \quad (12.35)$$

где \hat{h} – «шаг формулы Симпсона», одинаковый для всех участков:

$$\hat{h} = \frac{x_{i+1} - x_i}{2} = \text{const}, \text{ то есть } \hat{h} = \frac{b-a}{2m}$$

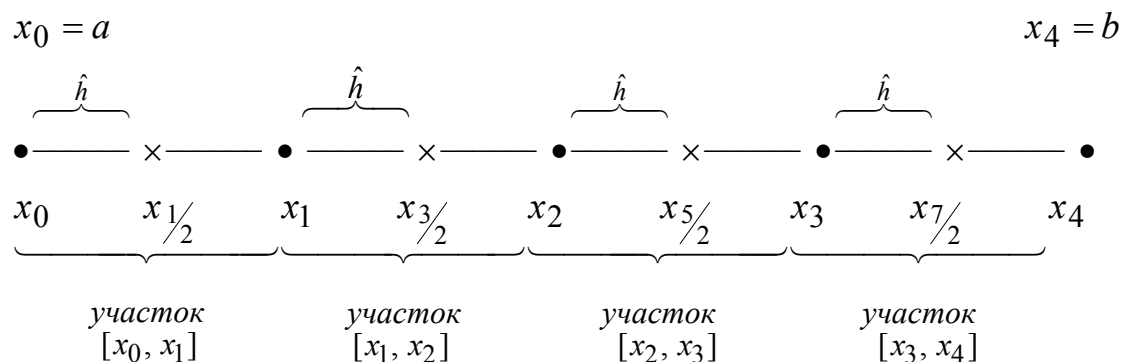


Рисунок 3

Пример равномерной сетки для составной формулы Симпсона, $m = 4$

Комментарий

При подготовке программной реализации метода на равномерной сетке часто используют запись следующего вида:

$$\int_a^b f(x)dx \sim \frac{b-a}{6m} (f_0 + 4f_{1/2} + 2f_1 + 4f_{3/2} + 2f_2 + \dots + 2f_{m-1} + 4f_{m-1/2} + f_m)$$

Погрешность составной формулы $I_{2,m}$

Определение 6. Погрешностью составной формулы Симпсона называют разность истинного значения интеграла I и значения $I_{2,m}$, соответствующего составной формуле:

$$\psi_{2,m} = I - I_{2,m} \quad (12.36)$$

Сформулируем результат для равномерной сетки.

Утверждение 6. Если на отрезке интегрирования $[a, b]$ функция $f(x)$ четыре раза непрерывно-дифференцируема, для **погрешности составной квадратурной формулы Симпсона** $I_{2,m}$ на равномерной сетке верно представление

$$\psi_{2,m} = -\frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2m} \right)^5 \sum_{i=0}^{m-1} f^{IV}(\xi_i) \quad (12.37)$$

где ξ_i есть неизвестные средние точки, расположенные на участках $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$.

Для **погрешности** верна оценка

$$|\psi_{2,m}| \leq \left(\frac{b-a}{2} \right)^5 \left(\frac{1}{m} \right)^4 \hat{M} \quad (12.38)$$

где $\hat{M} = \frac{1}{90} \cdot \max_{x \in [a, b]} |f^{IV}(x)|$.

Комментарий

Если функция $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ является достаточно гладкой, погрешность составной формулы Симпсона на равномерной сетке при увеличении числа участков m убывает как

$$O\left(\frac{1}{m^4}\right).$$

В частности, при удвоении числа участков погрешность падает в 16 раз. Это высокий темп снижения погрешности.

Доказательство

Искомый интеграл I может быть записан как сумма интегралов, взятых по участкам отрезка интегрирования:

$$I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

Интеграл по каждому из участков $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$ вычисляется приближенно по формуле Симпсона:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \sim \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

Составная формула Симпсона суммирует полученные значения:

$$I_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

Поэтому разность значений $I - I_{2,m}$ должна быть записана **как разность** сумм:

$$I - I_{2,m} = \left(\sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \right) - \left(\sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) \right)$$

и переписана как **сумма** разностей:

$$I - I_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \left(\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx - \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) \right)$$

Таким образом, **погрешность составной формулы**, то есть (по определению)

$$\psi_{2,m} = I - I_{2,m}$$

оказалась **суммой погрешностей базовых формул** по всем участкам отрезка интегрирования:

$$\psi_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \psi_2[x_i, x_{i+1}]$$

Погрешность **каждой базовой формулы** (по Утверждению 3) составит

$$\psi_2[x_i, x_{i+1}] = -\frac{1}{90} \hat{h}^5 \cdot f^{IV}(\xi_i) \quad (12.39)$$

где \hat{h} есть «шаг формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$ », то есть

$$\hat{h} = \frac{x_{i+1} - x_i}{2}$$

а неизвестная средняя точка $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$.

Формулы (12.39) нужно просуммировать по участкам отрезка интегрирования, а величину \hat{h} записать в соответствии с (12.33):

$$\hat{h} = \frac{x_{i+1} - x_i}{2} = \frac{b - a}{2m}.$$

Тогда **погрешность составной формулы** выражается формулой

$$\psi_{2,m} = -\frac{1}{90} \hat{h}^5 \cdot \sum_{i=0}^{m-1} f^{IV}(\xi_i) \quad (12.40)$$

и затем

$$\psi_{2,m} = -\frac{1}{90} \left(\frac{b - a}{2m} \right)^5 \sum_{i=0}^{m-1} f^{IV}(\xi_i) \quad (12.41)$$

где неизвестные средние точки $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$.

Оценим модуль погрешности:

$$|\psi_{2,m}| \leq \frac{1}{90} \left(\frac{b-a}{2m} \right)^5 \sum_{i=0}^{m-1} |f^{IV}(\xi_i)| \quad (12.42)$$

Так как сумма модулей не превосходит произведения количества слагаемых на максимальное по модулю слагаемое, а именно

$$\sum_{i=0}^{m-1} |f^{IV}(\xi_i)| \leq m \cdot \max_{x \in [a, b]} |f^{IV}(x)|$$

неравенство (12.42) принимает вид (12.38).

Вычислительная погрешность интегрирования по формуле $I_{2,m}$

Определение 7. Вычислительной погрешностью интегрирования по составной формуле Симпсона называют разность значения $I_{2,m}$, **соответствующего** составной формуле Симпсона, и значения $\tilde{I}_{2,m}$, **полученного** по составной формуле Симпсона:

$$B\Pi_{2,m} = I_{2,m} - \tilde{I}_{2,m} \quad (12.43)$$

Сформулируем и докажем результат для произвольной сетки.

Утверждение 7. Если шаги квадратурных формул, заданных на участках $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$ составной формулы, а именно, числа

$$\hat{h}_i, i = 0, \dots, m-1$$

заданы точно и при вычислении выражения (12.31) погрешность выполнения арифметических операций «исключена», тогда **вычислительная погрешность интегрирования** по составной квадратурной формуле Симпсона $I_{2,m}$ зависит от ошибок задания функции в основных и дополнительных узлах

$$B\Pi_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}_i}{3} (\delta_i + 4\delta_{i+1/2} + \delta_{i+1}) \quad (12.44)$$

и для нее справедлива оценка

$$|B\Pi_{2,m}| \leq \delta \cdot (b-a) \quad (12.45)$$

Величины

$$\delta_i = f_i - \tilde{f}_i, i = 0, \dots, m$$

$$\delta_{i+1/2} = f_{i+1/2} - \tilde{f}_{i+1/2}, i = 0, \dots, m-1$$

представляют собой ошибки (погрешности) задания функции в узлах и число $\delta > 0$ есть оценка этих ошибок:

$$\begin{aligned} |\delta_i| &\leq \delta, i = 0, \dots, m, \\ \left| \delta_{i+1/2} \right| &\leq \delta, i = 0, \dots, m-1 \end{aligned} \quad (12.46)$$

Доказательство

Составной формуле Симпсона соответствует значение

$$I_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}_i}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

Вследствие погрешности задания или вычисления значений функции в основных и дополнительных узлах будет вычислено

$$\tilde{I}_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}_i}{3} (\tilde{f}_i + 4\tilde{f}_{i+1/2} + \tilde{f}_{i+1})$$

Разность указанных значений составит

$$I_{2,m} - \tilde{I}_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}_i}{3} \cdot ((f_i - \tilde{f}_i) + 4(f_{i+1/2} - \tilde{f}_{i+1/2}) + (f_{i+1} - \tilde{f}_{i+1}))$$

что означает

$$BP_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}_i}{3} \cdot (\delta_i + 4\delta_{i+1/2} + \delta_{i+1})$$

Оценим модуль вычислительной погрешности:

$$\begin{aligned} |BP_{2,m}| &\leq \sum_{i=0}^{m-1} \left| \frac{\hat{h}_i}{3} \right| |\delta_i + 4\delta_{i+1/2} + \delta_{i+1}| \\ &\leq \sum_{i=0}^{m-1} \left| \frac{\hat{h}_i}{3} \right| (|\delta_i| + 4|\delta_{i+1/2}| + |\delta_{i+1}|) \leq \sum_{i=0}^{m-1} \left| \frac{\hat{h}_i}{3} \right| \cdot 6 \cdot \delta \end{aligned}$$

Так как \hat{h}_i есть «шаг формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$ », то есть

$$\hat{h}_i = \frac{x_{i+1} - x_i}{2},$$

получим

$$|BP_{2,m}| \leq \sum_{i=0}^{m-1} \frac{(x_{i+1} - x_i)}{2} \cdot 2 \cdot \delta = \delta \cdot (b - a)$$

потому что сумма длин всех участков $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$ равна длине отрезка интегрирования $[a, b]$.

Комментарий

При увеличении числа участков m вычислительная погрешность составной формулы Симпсона не возрастает: она ограничена.

Это означает, что при вычислении интегралов по составным формулам длины участков можно уменьшать, а число участков можно наращивать: ошибки, инициированные погрешностью исходных данных, не нарастают.

Общая погрешность интегрирования по составной формуле $I_{2,m}$

Определение 8. Общей погрешностью интегрирования по составной формуле Симпсона называют разность истинного значения интеграла I и значения $\tilde{I}_{2,m}$, полученного по формуле:

$$ОП_{2,m} = I - \tilde{I}_{2,m} \quad (12.47)$$

Прибавляя и вычитая «истинное» значение составной квадратурной формулы $I_{2,m}$, получим

$$ОП_2 = \underbrace{I - \tilde{I}_{2,m}}_{\substack{\text{общая} \\ \text{погрешность} \\ \text{интегрирования}}} = \underbrace{I - I_{2,m}}_{\substack{\text{погрешность} \\ \text{составной} \\ \text{формулы} \\ \text{Симпсона}}} + \underbrace{I_{2,m} - \tilde{I}_{2,m}}_{\substack{\text{вычислительная} \\ \text{погрешность} \\ \text{интегрирования}}}$$

Сформулируем общий результат для произвольной сетки и оценку – для равномерной.

Утверждение 8. Общая погрешность интегрирования по составной квадратурной формуле Симпсона $I_{2,m}$ равна сумме погрешности указанной формулы и вычислительной погрешности интегрирования

$$ОП_{2,m} = \psi_{2,m} + ВП_{2,m} \quad (12.48)$$

Оценка общей погрешности имеет вид

$$\left| ОП_{2,m} \right| \leq \left| \psi_{2,m} \right| + \left| ВП_{2,m} \right|. \quad (12.49)$$

При выполнении предположений о гладкости функции $f(x)$ из **Утверждения 6** и об источниках вычислительной погрешности из **Утверждения 7** оценка общей погрешности интегрирования по формуле $I_{2,m}$ на равномерной сетке принимает вид

$$\left| ОП_{2,m} \right| \leq \left(\frac{b-a}{2} \right)^5 \left(\frac{1}{m} \right)^4 \hat{M} + \delta(b-a) \quad (12.50)$$

$$\text{где } \hat{M} = \frac{1}{90} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{IV}(x)|.$$

Комментарий

При увеличении числа участков m погрешность составной формулы **на равномерной сетке** стремится к нулю, а вычислительная погрешность ограничена.

Используем это свойство и оценку (12.50) для решения задач о подборе числа участков, обеспечивающих вычисление интеграла с требуемой точностью.

Пример

Интегрирование с заданной точностью на равномерной сетке

Поставлена задача вычислить интеграл

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

По условию задачи функция $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ является достаточно гладкой, а значения $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ заданы с погрешностью, не превышающей число $\delta > 0$.

Нужно вычислить I с **общей погрешностью**, не превышающей заданное число $\varepsilon > 0$, используя **составную формулу Симпсона на равномерной сетке**, полагая, что основным источником вычислительной погрешности интегрирования являются ошибки вычисления функции.

Решение

Тезис 1

По составной формуле Симпсона с числом участков m в качестве приближенного значения I должно быть вычислено

$$I_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

где \hat{h} есть «шаг формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$ », а именно

$$\hat{h} = \frac{b-a}{2m}$$

В силу ошибок вычисления $f(x)$ будет вычислено значение

$$\tilde{I}_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}}{3} (\tilde{f}_i + 4\tilde{f}_{i+1/2} + \tilde{f}_{i+1})$$

В качестве приближенного значения I будет предложено

$$I \approx \tilde{I}_{2,m}$$

Тезис 2

Общей погрешностью интегрирования по составной формуле называют величину

$$ОП_{2,m} = I - \tilde{I}_{2,m}$$

(разность истинного значения интеграла и того значения, которое получилось при попытке применить составную формулу)

По **Утверждению 8** общая погрешность оценивается неравенством (12.31):

$$\left| ОП_{2,m} \right| \leq \left(\frac{b-a}{2} \right)^5 \left(\frac{1}{m} \right)^4 \hat{M} + \delta(b-a)$$

$$\text{где } \hat{M} = \frac{1}{90} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{IV}(x)|$$

Тезис 3

Чтобы использовать неравенство, нужно знать \hat{M} ,

а для этого нужно **вычислить** (то есть получить формулу и взять максимум)

четвертую производную подынтегральной функции $f(x)$

или оценить максимум с помощью **конечных или разделенных разностей**.

Предположим, что получено \hat{M}^* , являющееся верхней оценкой \hat{M} :

$$\hat{M} = \frac{1}{90} \cdot \max_{x \in [a,b]} |f^{IV}(x)| \leq \hat{M}^*$$

Тогда для общей погрешности верна оценка

$$\left| ОП_{2,m} \right| \leq \left(\frac{b-a}{2} \right)^5 \left(\frac{1}{m} \right)^4 \hat{M}^* + \delta(b-a)$$

Тезис 4

Чтобы выполнить требование

$$\left| ОП_{2,m} \right| \leq \varepsilon$$

ставим условие

$$\left(\frac{b-a}{2} \right)^5 \left(\frac{1}{m} \right)^4 \hat{M}^* + \delta(b-a) \leq \varepsilon$$

Далее два варианта

Вариант I. Если отрезок интегрирования $[a, b]$ и (или) оценка погрешности исходных данных δ слишком велики и в силу этих обстоятельств

$$\delta(b-a) \geq \varepsilon,$$

то на основе имеющихся оценок **гарантировать вычисление I с общей погрешностью, не превышающей заданное число ε , невозможно.**

Вариант II. Если исходные данные достаточно точны и (или) отрезок интегрирования мал, то есть

$$\delta(b-a) < \varepsilon$$

определим положительный параметр $\varepsilon_I > 0$, который будет использован для контроля всех остальных компонент погрешности:

$$\varepsilon_I = \varepsilon - \delta(b-a)$$

Тезис 5

Параметром $\varepsilon_I > 0$ следует распорядиться следующим образом.

1) Если погрешность выполнения арифметических операций отсутствует (это гипотетический случай), ставим условие

$$\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \left(\frac{1}{m}\right)^4 \hat{M}^* \leq \varepsilon - \delta(b-a) = \varepsilon_I$$

Тогда m – число участков составной формулы – должно соответствовать требованию

$$m^4 \geq \left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{\hat{M}^*}{\varepsilon_I}$$

то есть

$$m \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5}{32} \cdot \frac{\hat{M}^*}{\varepsilon_I}}$$

2) Если погрешность выполнения арифметических операций присутствует, вводится еще один параметр – число $\varepsilon_{II} > 0$.

При подборе m – количества участков составной формулы – ставится условие

$$\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \left(\frac{1}{m}\right)^4 \hat{M}^* \leq \varepsilon - \delta(b-a) - \varepsilon_{II} = \varepsilon_I - \varepsilon_{II}$$

причем правая часть неравенства должна остаться положительной: $\varepsilon_I - \varepsilon_{II} > 0$.

Тогда

$$m \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5}{32} \cdot \frac{\hat{M}^*}{(\varepsilon_I - \varepsilon_{II})}}$$

Таким образом, интеграл I будет вычислен с общей погрешностью, не превышающей заданное число $\varepsilon > 0$:

$$\left| \int_a^b f(x) dx - \tilde{I}_{2,m} \right| \leq \varepsilon$$

Ответ

Вариант I. По условию задачи $\delta(b-a) \geq \varepsilon$

На основе имеющихся оценок гарантировать вычисление I с общей погрешностью, не превышающей заданное число ε , невозможно.

Уместно предложить в качестве ответа значение

$$I \approx \tilde{I}_{2,m}$$

где число участков подобрано так, чтобы погрешность замены интеграла на квадратурную формулу имела тот же порядок, что и оценка вычислительной погрешности, например

$$m \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5}{32} \cdot \frac{\hat{M}^*}{\delta(b-a)}}$$

то есть

$$m \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^4}{32} \cdot \frac{\hat{M}^*}{\delta}}$$

Нужно сообщить, что задача решена с (общей) погрешностью, не превышающей $2\varepsilon > 0$

Вариант II. По условию задачи $\delta(b-a) < \varepsilon$

В качестве ответа нужно предложить значение

$$I \approx \tilde{I}_{2,m}$$

где число участков соответствует требованию

$$m \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5}{32} \cdot \frac{\hat{M}^*}{(\varepsilon_I - \varepsilon_{II})}}$$

то есть

$$m \geq \sqrt[4]{\frac{(b-a)^5}{32} \cdot \frac{\hat{M}^*}{(\varepsilon - \delta(b-a) - \varepsilon_{II})}}$$

Нужно сообщить, что задача решена с общей погрешностью, не превышающей $\varepsilon > 0$, при условии, что погрешность выполнения арифметических операций остается в пределах $\varepsilon_{II} > 0$.

Комментарии

1) Решение задачи следует начинать с проверки:

$$\delta(b-a) < \varepsilon \text{ или } \delta(b-a) \geq \varepsilon.$$

2) Способ решения не зависит от того, точно или грубо оценили \hat{M}^* .

Если число \hat{M}^* , то есть верхняя оценка максимального модуля четвертой производной (с учетом множителя $\frac{1}{90}$), завышено, требования к числу участков составной формулы, то есть числу m , также будут завышены.

3) Модель решения задачи:

Параметр $\varepsilon > 0$, предназначенный для контроля общей погрешности, делят на три положительные составляющие:

$$\varepsilon = \delta(b - a) + \varepsilon_{II} + (\varepsilon_I - \varepsilon_{II}) \quad (12.44)$$

Каждую составляющую (каждое слагаемое) используют для контроля своей части погрешности.

$\delta(b - a) > 0$	контролирует вычислительную погрешность, вызванную ошибками задания функции
$(\varepsilon_I - \varepsilon_{II}) > 0$	контролирует погрешность замены интеграла квадратурной формулой
$\varepsilon_{II} > 0$	«запас» («допуск») на то, что погрешность выполнения арифметических операций, оставаясь пренебрежимо малой для отдельной операции, накапливается по мере их выполнения.

С четвертым комментарием нужно просто ознакомиться:

4) В ходе решения задачи возникает предположение о том, что погрешность арифметических операций существует.

Способы оценки погрешности отдельных арифметических операций и вычисления значений функций есть в учебной литературе.

Чтобы работать с такими оценками, теоретический аппарат нужно дополнить.

Например, так: $\tilde{I}_{2,m} = \tilde{\tilde{I}}_{2,m} + (\tilde{I}_{2,m} - \tilde{\tilde{I}}_{2,m})$, где

$$\underbrace{\tilde{I}_{2,m}}_{\text{то, что получилось при попытке вычислить } I_{2,m}} = \underbrace{\tilde{\tilde{I}}_{2,m}}_{\text{то, что должно было получиться без погрешности арифметических операций, но с ошибками вычисления функции в узлах}} + \underbrace{(\tilde{I}_{2,m} - \tilde{\tilde{I}}_{2,m})}_{\text{влияние погрешности арифметических операций на результат вычислений } \tilde{\tilde{I}}_{2,m}}$$

Тогда вычислительная погрешность (как часть теоретического аппарата) остается прежней, но ее структура становится сложнее (см. схему ниже), а величина $\delta(b - a)$ контролирует только часть вычислительной погрешности:

$$\left| I_{2,m} - \tilde{\tilde{I}}_{2,m} \right| \leq \delta(b - a)$$

$$\underbrace{ВП_{2,m} = I_{2,m} - \tilde{I}_{2,m}}_{\text{вычислительная погрешность интегрирования: разность того, что соответствует квадратурной формуле, и того, что получилось при попытке ее вычислить}} = I_{2,m} - (\tilde{\tilde{I}}_{2,m} + \tilde{I}_{2,m} - \tilde{\tilde{I}}_{2,m}) =$$

вычислительная погрешность интегрирования: разность того, что соответствует квадратурной формуле, и того, что получилось при попытке ее вычислить

$$= \underbrace{(I_{2,m} - \tilde{\tilde{I}}_{2,m})}_{\text{погрешность, обусловленная неточностью исходных данных}} + \underbrace{(\tilde{\tilde{I}}_{2,m} - \tilde{I}_{2,m})}_{\text{погрешность, обусловленная неточной обработкой поступивших (неточных) данных}}$$

Оценка погрешности интегрирования по правилу Рунге

Чтобы вычислить интеграл I с заданной точностью, нужно определить число участков составной формулы, то есть определить число m .

В случае составной формулы Симпсона для этого необходимо вычислить (оценить) максимум модуля четвертой производной подынтегральной функции.

В случае составной формулы порядка n потребуется производная порядка $n + 1$ (для нечетных порядков) или $n + 2$ (для четных порядков), что не всегда удобно.

Способ оценки погрешности по правилу Рунге не требует вычисления и (или) оценки производных.

Чтобы применить это правило, необходимо дважды вычислить интеграл по составной формуле на «обычной» и «удвоенной» сетке, и затем сравнить результаты.

При этом основная сетка составной формулы может быть неравномерной. Важно, чтобы при «удвоении» сетки каждый ее участок был поделен ровно пополам.

Утверждение 9. Пусть I – точное (истинное) значение интеграла (12.1).

Введем обозначения:

$I_{2,m}$ значение, соответствующее составной формуле Симпсона с числом участков m ;

$I_{2,2m}$ значение, соответствующее составной формуле Симпсона с числом участков $2m$ («удвоение» исходной сетки)

$\Psi_{2,m} = I - I_{2,m}$ погрешность составной формулы Симпсона с числом участков m .

Тогда

$$\Psi_{2,m} = I - I_{2,m} \approx \frac{I_{2,2m} - I_{2,m}}{2^4 - 1} \cdot 2^4 \quad (12.51)$$

Если для вычисления интеграла I используется составная формула Ньютона-Котеса порядка n с числом участков m и порядком погрешности k , то для оценки погрешности составной формулы справедливо аналогичное утверждение.

Утверждение 10. Пусть I – точное (истинное) значение интеграла (12.1).

Введем обозначения:

$I_{n,m}$ значение, соответствующее составной формуле Ньютона-Котеса порядка n с числом участков m ;

$I_{n,2m}$ значение, соответствующее составной формуле Ньютона-Котеса порядка n с числом участков $2m$ («удвоение» исходной сетки)

$\psi_{n,m} = I - I_{n,m}$ погрешность составной формулы Ньютона-Котеса порядка n с числом участков m .

Тогда

$$\psi_{n,m} = I - I_{n,m} \approx \frac{I_{n,2m} - I_{n,m}}{2^{k-1} - 1} \cdot 2^{k-1} \quad (12.52)$$

где k – порядок погрешности формулы Ньютона-Котеса порядка n .

Комментарий

В случае составной формулы Симпсона $k = 5$, потому что погрешность базовой (не составной) формулы Симпсона имеет порядок $k = 5$.

Доказательство Утверждения 9

Пусть оценивается величина $\psi_{2,m}$ – погрешность составной формулы Симпсона с числом участков m .

Предположим, что на каждом участке **составной формулы**, а именно, на каждом отрезке $[x_i, x_{i+1}]$, **погрешность базовой (квадратурной) формулы** достаточно точно описывается главным членом погрешности:

$$\psi_2[x_i, x_{i+1}] = -\frac{\hat{h}^5}{90} f^{IV}(x_i) + o(\hat{h}^5)$$

где $\hat{h} = \frac{x_{i+1} - x_i}{2}$ есть шаг формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$.

Покажем, как оценить $\psi_2[x_i, x_{i+1}]$.

На участке основной сетки значение интеграла вычислено по формуле

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

Значение, соответствующее квадратурной формуле, обозначим $I_2[x_i, x_{i+1}]$.

Для «истинного» значения интеграла на участке $[x_i, x_{i+1}]$ справедливо представление

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = I_2[x_i, x_{i+1}] + \psi_2[x_i, x_{i+1}]$$

Так как

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = \int_{x_i}^{x_{i+0.5}} f(x) dx + \int_{x_{i+0.5}}^{x_{i+1}} f(x) dx$$

для подсчета интеграла на участке $[x_i, x_{i+1}]$ можно применить формулу Симпсона отдельно на каждой половине участка, сохраняя прежние обозначения для узлов и шага формулы:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{\hat{h}}{2 \cdot 3} (f_i + 4f_{i+1/4} + f_{i+1/2}) + \frac{\hat{h}}{2 \cdot 3} (f_{i+1/2} + f_{i+3/4} + f_{i+1})$$

Значения, соответствующие квадратурным формулам на половинах участка, обозначим $I_2[x_i, x_{i+1/2}]$ и $I_2[x_{i+1/2}, x_{i+1}]$.

Погрешности квадратурных формул для половин участка $[x_i, x_{i+1}]$ составят

$$\psi_2[x_i, x_{i+1/2}] = -\frac{\hat{h}^5}{90 \cdot 2^5} f^{IV}(x_i) + o(\hat{h}^5)$$

$$\psi_2[x_{i+1/2}, x_{i+1}] = -\frac{\hat{h}^5}{90 \cdot 2^5} f^{IV}(x_{i+1/2}) + o(\hat{h}^5)$$

Используя формулу Тейлора и представление

$$f^{IV}(x_{i+1/2}) = f^{IV}(x_i) + O(\hat{h})$$

несложно показать, что

$$\psi_2[x_i, x_{i+1}] = -\frac{\hat{h}^5}{90 \cdot 2^5} f^{IV}(x_i) + o(\hat{h}^5)$$

Таким образом, неизвестное «истинное» значение интеграла на участке $[x_i, x_{i+1}]$ можно записать двумя способами:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = I_2[x_i, x_{i+1}] - \frac{\hat{h}^5}{90} f^{IV}(x_i) + o(\hat{h}^5)$$

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx = I_2[x_i, x_{i+1/2}] + I_2[x_{i+1/2}, x_{i+1}] - 2 \cdot \frac{\hat{h}^5}{90 \cdot 2^5} f^{IV}(x_i) + o(\hat{h}^5)$$

где три значения, соответствующие трем обращениям к формуле Симпсона, известны.

Сумма значений квадратурных формул на половинах участка есть «новое» приближенное значение интеграла, соответствующего участку $[x_i, x_{i+1}]$:

$$I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] = I_2[x_i, x_{i+1/2}] + I_2[x_{i+1/2}, x_{i+1}]$$

Приравнивая правые части каждого равенства и «отбрасывая» (по правилу Рунге) бесконечно малые величины, получим приближенное равенство

$$I_2[x_i, x_{i+1}] - \frac{\hat{h}^5}{90} f^{IV}(x_i) \approx I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] - \frac{\hat{h}^5}{90 \cdot 2^4} f^{IV}(x_i)$$

Откуда следует

$$-\frac{\hat{h}^5}{90} f^{IV}(x_i) \approx \frac{I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] - I_2[x_i, x_{i+1}]}{2^4 - 1} \cdot 2^4$$

Так как в левой части приближенного равенства оказался главный член погрешности формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$, заменим его на саму погрешность

$$\psi_2[x_i, x_{i+1}] \approx \frac{I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] - I_2[x_i, x_{i+1}]}{2^4 - 1} \cdot 2^4$$

Таким образом, погрешность квадратурной формулы участка $[x_i, x_{i+1}]$ можно оценить: правая часть приближенного равенства известна. Такую оценку обеспечивают три обращения к квадратурной формуле: одно обращение на участке $[x_i, x_{i+1}]$ и два обращения на половинах данного участка.

Просуммируем полученные оценки по всем m участкам составной формулы:

$$\sum_{i=0}^{m-1} \psi_2[x_i, x_{i+1}] \approx \frac{\sum_{i=0}^{m-1} [I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] - I_2[x_i, x_{i+1}]]}{2^4 - 1} \cdot 2^4$$

Сумма значений квадратурных формул по участкам вида $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$ является **значением составной формулы Симпсона с числом участков m** :

$$\sum_{i=0}^{m-1} I_2[x_i, x_{i+1}] = I_{2,m}$$

Сумма значений квадратурных формул, вычисленных на половинах участков $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$, является **значением составной формулы Симпсона с числом участков $2m$** :

$$\sum_{i=0}^{m-1} I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] = I_{2,2m}$$

Сумма погрешностей квадратурных формул по участкам вида $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$ является **погрешностью составной формулы Симпсона с числом участков m** :

$$\sum_{i=0}^{m-1} \psi_2[x_i, x_{i+1}] = \psi_{2,m}$$

Таким образом, доказано представление

$$\psi_{2,m} \approx \frac{I_{2,2m} - I_{2,m}}{2^4 - 1} \cdot 2^4$$

В практике численных методов вместо знака приближенного равенства часто пишут равенство.

Пример

Метод адаптивной квадратуры

Метод адаптивной квадратуры позволяет приближенно вычислить интеграл

$$I = \int_a^b f(x) dx \quad (12.53)$$

с заданной точностью (ε) за счет оптимизации неравномерных сеток (m – финальное число участков сетки) с помощью различных составных квадратурных формул, построенных на базе формул Ньютона-Котеса различных порядков (n).

Рассмотрим метод на примере составной формулы Симпсона $I_{2,m}$. Сначала приведем свойства полученного решения, а затем – принципы его получения.

Свойства решения

1) При использовании метода адаптивной квадратуры интеграл I будет вычислен по составной квадратурной формуле Симпсона (порядок формулы $n = 2$) на неравномерной сетке отрезка $[a, b]$ с числом участков m по формуле

$$I_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} \frac{\hat{h}_i}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1}) \quad (12.54)$$

где

$x_0 = a < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m = b$ есть границы участков $[x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m-1$

\hat{h}_i – «шаг формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$ », $\hat{h}_i = \frac{x_{i+1} - x_i}{2}$;

$x_{i+1/2}$ – середина участка $[x_i, x_{i+1}]$.

С учетом вычислительной погрешности вместо $I_{2,m}$ будет получено $\tilde{I}_{2,m}$

2) Если шаги \hat{h}_i , $i = 0, \dots, m-1$ будут вычислены точно и при подсчете выражения (12.54) погрешность выполнения арифметических операций будет «исключена», вычислительная погрешность интегрирования $BP_{2,m} = I_{2,m} - \tilde{I}_{2,m}$ будет ограничена:

$$|BP_{2,m}| \leq \delta \cdot (b - a)$$

Здесь $\delta > 0$ есть оценка погрешности задания функции $f(x)$ в основных и дополнительных узлах сетки.

3) По итогам работы метода погрешность $\psi_{2,m}$ составной формулы, то есть

$$\psi_{2,m} = I - I_{2,m}$$

составит

$$\psi_{2,m} = -\frac{1}{90} \cdot \sum_{i=0}^{m-1} f^{IV}(\xi_i) \cdot \hat{h}_i^5,$$

где $\hat{h}_i = \frac{x_{i+1} - x_i}{2}$ — есть половина длины соответствующего участка и неизвестные средние точки $\xi_i \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 0, \dots, m$.

4) Число участков m и границы участков, то есть узлы $x_0 = a < x_1 < \dots < x_{m-1} < x_m = b$ заранее неизвестны (кроме пределов интегрирования $x_0 = a$ и $x_m = b$). Число участков и границы будут сформированы в ходе работы метода.

5) В рамках возможностей правила Рунге процедура построения сетки гарантирует, что погрешность $\psi_{2,m}$ составной формулы соответствует требованию

$$|\psi_{2,m}| = \left| \frac{1}{90} \cdot \sum_{i=0}^{m-1} f^{IV}(\xi_i) \cdot \hat{h}_i^5 \right| \leq \varepsilon$$

где $\varepsilon > 0$ — есть параметр метода.

6) Таким образом, интеграл I будет вычислен с общей погрешностью, не превышающей

$$|OP_{2,m}| \leq \delta \cdot (b - a) + \varepsilon$$

7) Выполнение требования

$$|\psi_{2,m}| \leq \varepsilon$$

обеспечивается за счет того, что на участках с большими (по модулю) значениями $f^{IV}(x)$ сетка оказывается «густой» и участки интегрирования имеют малую длину, а на участках с малыми (по модулю) значениями $f^{IV}(x)$ сетка является «разреженной» и участки интегрирования могут быть длинными.

Принцип получения решения

1) Начальная сетка может быть задана равномерной. Пусть она содержит m^* участков, начальный и последний узел совпадают с пределами интегрирования: $x_0 = a$ и $x_m = b$, длина участка составляет

$$h = \frac{b - a}{m^*}$$

Границами участков $[x_i, x_{i+1}]$ являются узлы $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, m^*$.

Если для контроля погрешности задан параметр $\varepsilon > 0$, для контроля погрешности на каждом участке начальной сетки по отдельности устанавливается параметр $\frac{\varepsilon}{m^*} > 0$.

Пример показан на рисунке 4.

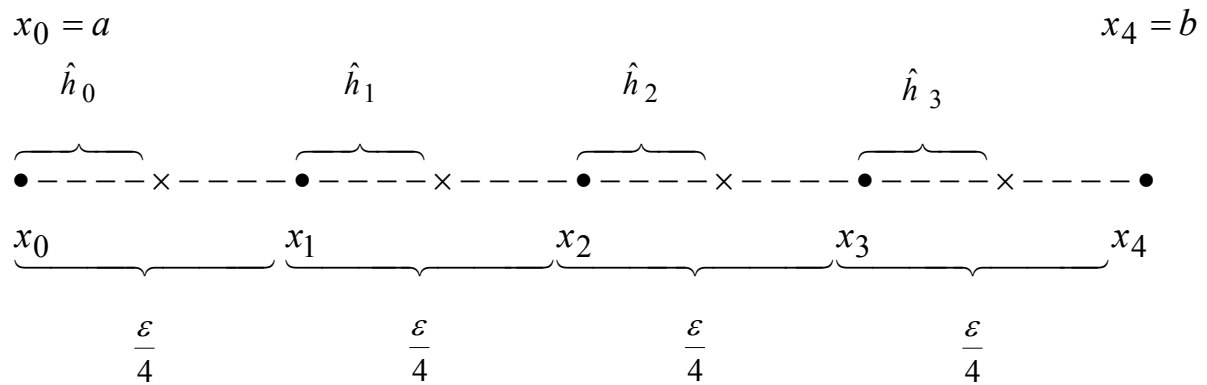


Рисунок 4

Пример начальной сетки метода адаптивной квадратуры: составная формула Симпсона, начальное число участков $m^* = 4$, параметр контроля погрешности $\varepsilon > 0$. Показаны основные и дополнительные узлы сетки, шаг формулы Симпсона на каждом участке и параметр контроля погрешности для каждого участка

2) Пусть интеграл вычисляется на участке $[x_i, x_{i+1}]$. Применим на этом участке формулу Симпсона:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{\hat{h}}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

Результат обозначим через $I_2[x_i, x_{i+1}]$.

Затем применим эту же формулу на каждой половине участка:

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{\hat{h}}{2 \cdot 3} (f_i + 4f_{i+1/4} + f_{i+1/2}) + \frac{\hat{h}}{2 \cdot 3} (f_{i+1/2} + 4f_{i+3/4} + f_{i+1})$$

Результат обозначим через $I_2^{нов}[x_i, x_{i+1}]$

В соответствии с правилом Рунге для оценки погрешности формулы

используем величину $R_2[x_i, x_{i+1}]$, которую определим следующим образом:

$$R_2[x_i, x_{i+1}] = \frac{I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] - I_2[x_i, x_{i+1}]}{2^4 - 1} \cdot 2^4 =$$

$$= \frac{16}{15} \cdot [I_2^{HOB}[x_i, x_{i+1}] - I_2[x_i, x_{i+1}]]$$

На каждом участке должен быть использован «свой» положительный параметр контроля погрешности, который зависит от длины участка.

Такой параметр для участка $[x_i, x_{i+1}]$ обозначим через $\varepsilon[x_i, x_{i+1}]$.

Если выполняется требование

$$|R_2[x_i, x_{i+1}]| \leq \varepsilon[x_i, x_{i+1}] \quad (12.55)$$

считаем, что «интеграл принят»: значение $I_2[x_i, x_{i+1}]$ пригодно для последующего использования.

Если

$$|R_2[x_i, x_{i+1}]| > \varepsilon[x_i, x_{i+1}]$$

участок $[x_i, x_{i+1}]$ должен быть поделен пополам и те же самые процедуры проведены на каждой его половине, причем на половине участка должен быть установлен контрольный параметр в 2 раза меньше прежнего:

$$\varepsilon[x_i, x_{i+1/2}] = \frac{1}{2} \cdot \varepsilon[x_i, x_{i+1}], \quad \varepsilon[x_{i+1/2}, x_{i+1}] = \frac{1}{2} \cdot \varepsilon[x_i, x_{i+1}]$$

Деление отрезка есть локальное «удвоение» сетки. Число участков сетки в этот момент увеличивается и в рамках теоретического описания меняется индексация узлов.

3) Метод продолжает работу до тех пор, пока интегралы по всем участкам не будут приняты. Искомый интеграл вычисляется суммированием тех интегралов, которые «приняты».

В рамках описанной выше процедуры

на участках длины $\frac{b-a}{m^*}$ используется параметр $\frac{\varepsilon}{m^*}$

на участках длины $\frac{b-a}{2m^*}$ используется параметр $\frac{\varepsilon}{2m^*}$

на участках длины $\frac{b-a}{2^S m^*}$ используется параметр $\frac{\varepsilon}{2^S m^*}$.

Поэтому сумма длин участков равна длине отрезка интегрирования, а сумма контрольных параметров равна контрольному параметру метода.

Пример показан на рисунке 5.

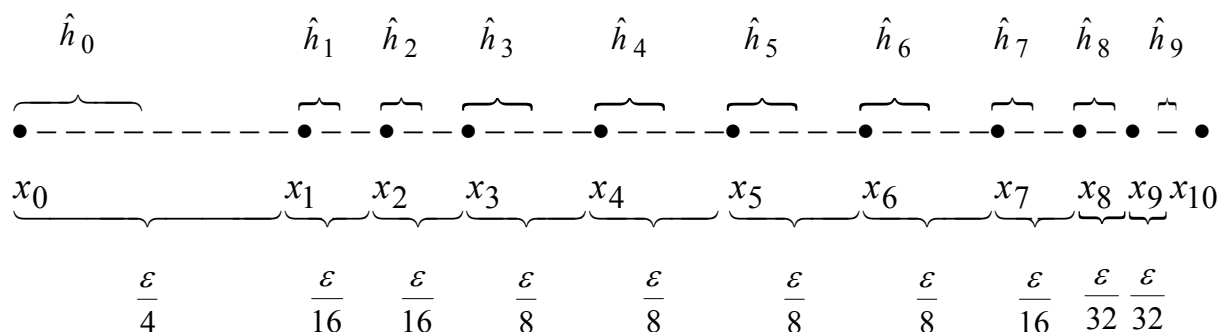


Рисунок 5

Пример финальной сетки метода адаптивной квадратуры: составная формула Симпсона, финальное число участков $m = 10$.

Показаны основные узлы сетки, шаг формулы Симпсона на каждом участке и параметр контроля погрешности для каждого участка.

Комментарии к рисунку

По завершении работы метода интеграл на отрезке $[a, b]$ вычислен на неравномерной сетке с числом участков $m = 10$ и параметром контроля $\varepsilon > 0$ по формуле

$$I_{2,10} = \sum_{i=0}^9 \frac{\hat{h}_i}{3} (f_i + 4f_{i+1/2} + f_{i+1})$$

Вычисление велось поэтапно, по мере формирования сетки. На финальной сетке:

1 участок исходной длины $\frac{b-a}{4}$ с параметром контроля погрешности $\frac{\varepsilon}{4}$

4 участка длины $\frac{b-a}{8}$ с параметром контроля погрешности $\frac{\varepsilon}{8}$

3 участка длины $\frac{b-a}{16}$ с параметром контроля погрешности $\frac{\varepsilon}{16}$

2 участка длины $\frac{b-a}{32}$ с параметром контроля погрешности $\frac{\varepsilon}{32}$

Сумма длин участков равна длине отрезка интегрирования:

$$(b-a) \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{8} \cdot 4 + \frac{1}{16} \cdot 3 + \frac{1}{32} \cdot 2 \right) = b-a$$

Сумма контрольных параметров равна контрольному параметру метода:

$$\varepsilon \cdot \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{8} \cdot 4 + \frac{1}{16} \cdot 3 + \frac{1}{32} \cdot 2 \right) = \varepsilon$$

4) Приведем обоснование метода.

Запишем погрешность формулы Симпсона на участке $[x_i, x_{i+1}]$, имеющем длину

$$\frac{b-a}{2^S m^*}.$$

Она равна

$$-\frac{\hat{h}_i^5}{90} f^{IV}(\xi_i),$$

где \hat{h}_i есть шаг формулы Симпсона, то есть половина длины участка: $\hat{h}_i = \frac{b-a}{2^{S+1} m^*}$

На участке указанной выше длины погрешность формулы составит

$$-\left(\frac{b-a}{2^{S+1} m^*}\right)^5 \frac{1}{90} f^{IV}(\xi_i) \sim O\left(\frac{1}{2^{5S}}\right)$$

Для контроля погрешности используется величина

$$\frac{\varepsilon}{2^S m^*} \sim O\left(\frac{1}{2^S}\right).$$

При $S \rightarrow \infty$ погрешность формулы стремится к нулю быстрее, чем параметр контроля погрешности, и если подынтегральная функция является достаточно гладкой, на участке достаточно малой длины условие (12.55) будет выполнено.

Когда на всех участках отрезка $[a, b]$ условие на погрешность (12.55), согласованное с длинами участков, будет выполнено, приближенное значение интеграла

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

будет получено суммированием:

$$\tilde{I}_{2,m} = \sum_{i=0}^{m-1} I_2[x_i, x_{i+1}], \quad x_0 = a, \quad x_m = b$$

При этом погрешность составной формулы не превысит заданную:

$$|I - \tilde{I}_{2,m}| \leq \varepsilon.$$

5) Для программной реализации метода можно использовать рекурсию.