Лекция 15

Тема 8. Численное интегрирование

§ 8.1. Простейшие квадратурные формулы

1. Постановка задачи. В прикладных исследованиях часто возникает задача вычисления значения определенного интеграла

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{8.1}$$

Этот интеграл может выражать площадь, объем, работу переменной силы и т.д.

Если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке [a, b] и ее первообразную $F(x)$ удается выразить через известные функции, то для вычисления интеграла (8.1) можно воспользоваться *формулой Ньютона-Лейбница:*

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a). \tag{8.2}$$

К сожалению, в подавляющем большинстве случаев получить значение определенного интеграла с помощью формулы (8.2) или других аналитических методов не удается.

Пример 8.1. Интеграл $\int_0^x e^{-t^2}dt$ широко используется при исследовании процессов теплообмена и диффузии, в статистической физике и теории вероятностей. Однако его значение не может быть выражено в виде конечной комбинации элементарных функций.

Заметим, что даже в тех случаях, когда удается получить первообразную функцию $F(x)$ в аналитической форме, значительные усилия, затраченные на это, часто оказываются чрезмерно высокой платой за окончательный результат. Добавим еще, что вычисление интеграла в этих случаях по формуле (8.2), как правило, приводят к громоздким (а часто – и приближенным) вычислениям. Следует отметить также, что зачастую найти точное значение интеграла (8.1) просто невозможно. Например, это имеет место, когда функция $f(x)$ задается таблицей своих значений.

Обычно для вычисления значения определенного интеграла применяют специальные численные методы. Наиболее широко используют на практике *квадратурные формулы* – приближенные равенства вида

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N} A_i f(\overline{x_i}). \tag{8.3}$$

Здесь $\overline{x_i}$ – некоторые точки из отрезка [a, b] – *узлы квадратурной формулы*; A_i – числовые коэффициенты, называемые *весами квадратурной формулы;* $N \geq 0$ – целое число. Сумма $\sum_{i=0}^{N} A_i f(\overline{x_i})$, которая принимается за приближенное значение интеграла, называется *квадратурной суммой*. Величина $R = \int_a^b f(x)dx - \sum_{i=0}^{N} A_i f(\overline{x_i})$ называется *погрешностью* (или *остаточным членом*) *квадратурной формулы*.

Будем говорить, что квадратурная формула (8.3) точна для многочленов степени m, если для любого многочлена степени не выше m эта формула дает точное значение интеграла, т.е.

$$\int_a^b P_m(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N} A_i \; P_m(\overline{x_i}).$$

При оценке эффективности квадратурных формул часто исходят из того, что наиболее трудоемкой операцией при вычислении по формуле (8.3) является нахождение значения функции f. Поэтому среди двух формул, позволяющих вычислить интеграл с заданной точностью ε, более эффективной считается та, в которой используется меньшее количество узлов.

Выведем простейшие квадратурные формулы, исходя из наглядных геометрических соображений. Будем интерпретировать интеграл (8.1) как площадь криволинейной трапеции, ограниченной графиком функции $y = f(x)$ (при $f(x) \geq 0$), осью абсцисс и прямыми
$x = a$, $x = b$ (рис. 8.1,*а*).

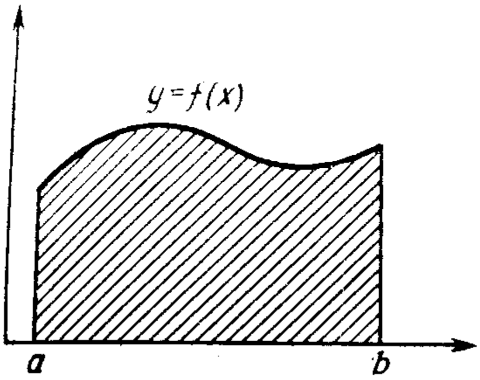

Рис.8.1,а

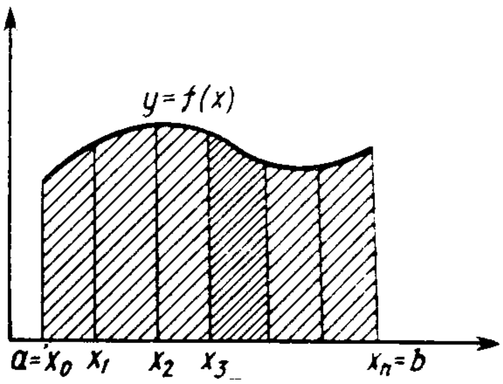

Рис.8.1,б

Разобьем отрезок $[a, b]$ на элементарные отрезки $[x_{i-1}, x_i]$ точками $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$. Интеграл I разобьется при этом на сумму элементарных интегралов:

$$\mathrm{I} = \sum_{i=1}^{n} I_i, \tag{8.4}$$

где $I_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx$, что соответствует разбиению площади исходной криволинейной трапеции на сумму площадей элементарных криволинейных трапеций (рис. 8.1,б).

Введем обозначения: $f_i = f(x_i)$, $f_{i-\frac{1}{2}} = f(x_{i-\frac{1}{2}})$, где $x_{i-\frac{1}{2}} =$
$= (x_{i-1} + x_i)/2$ – середина элементарного отрезка. Для простоты шаг
$h = x_i - x_{i-1}$ будем считать постоянным.

2. Формула прямоугольников. Заменим приближенно площадь элементарной криволинейной трапеции площадью прямоугольника, основанием которого является отрезок $[x_{i-1}, x_i]$, а высота равна значению $f_{i-\frac{1}{2}}$ (на рис. 8.2, а через $N_{i-\frac{1}{2}}$ обозначена точка с координатами $(x_{i-\frac{1}{2}}, f_{i-\frac{1}{2}})$). Так мы приходим к *элементарной квадратурной формуле прямоугольников*:

$$I_i \approx hf_{i-\frac{1}{2}}. \tag{8.5}$$

Произведя такую замену для всех элементарных криволинейных трапеций, получаем *составную квадратурную формулу прямоугольников*:

$$I \approx I_{\text{пр}}^{h} = h\,(f_{1/2} + f_{3/2} + \dots + f_{n-1/2}) = h\sum_{i=1}^{n} f_{i-1/2}. \qquad (8.6)$$

Эта формула соответствует приближенной замене площади исходной криволинейной трапеции площадью ступенчатой фигуры, изображенной на рис. 8.2, б.

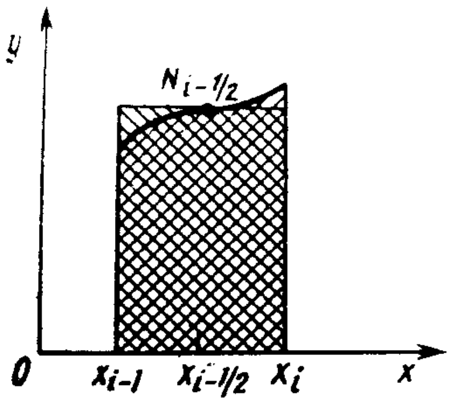

Рис.8.2,а

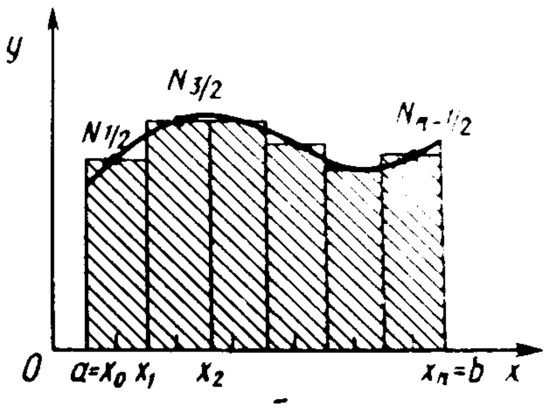

Рис.8.2,б

3. **Формула трапеций.** Соединив отрезком точки $N_{i-1}(x_{i-1}, f_{i-1})$ и $N_i(x_i, f_i)$ на графике функции $y = f\,(x)$, получим трапецию (рис. 8.3,а). Заменим теперь приближенно площадь элементарной криволинейной трапеции площадью построенной фигуры. Тогда получим *элементарную квадратурную формулу трапеций*:

$$I_i \approx \frac{h}{2}\,(f_{i-1} + f_i). \qquad (8.7)$$

Пользуясь этой формулой для $i = 1, 2, \dots, n$ выводим *составную квадратурную формулу трапеций*:

$$I \approx I_{\text{тр}}^{h} = h\,\left(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \dots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2}\right) =$$

$$= h\,\left(\frac{f_0 + f_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f_i\right). \qquad (8.8)$$

Эта формула соответствует приближенной замене площади исходной криволинейной трапеции площадью фигуры, ограниченной ломаной линией, проходящей через точки $N_0, N_1, \ldots, N_n$ (рис.8.3,б).

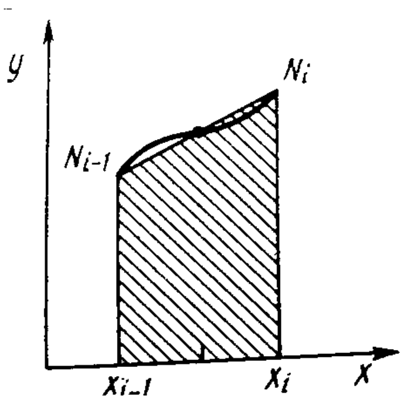

Рис. 8.3,а

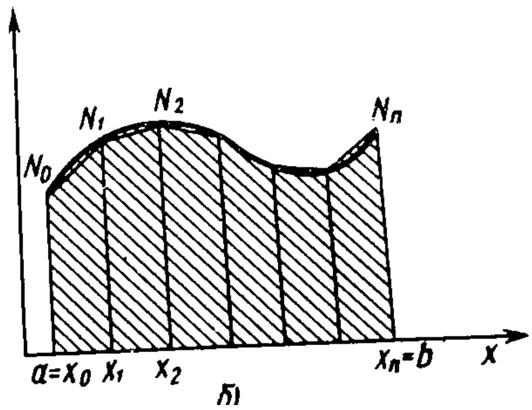

Рис. 8.3,б

4. Формула Симпсона. Если площадь элементарной криволинейной трапеции заменить площадью фигуры, расположенной под параболой, проходящей через точки $N_{i-1}, N_{i-1/2}, N_i$ (рис.8.4,а), то получим приближенное равенство $I_i \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} P_2(x)dx$.

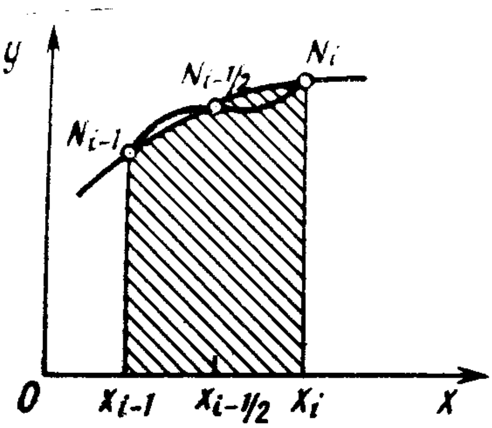

Рис.8.4,а

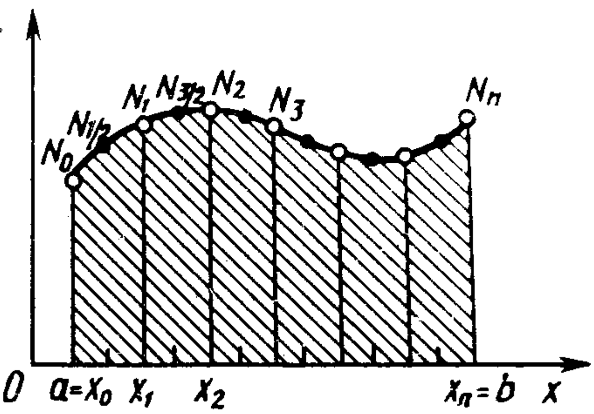

Рис.8.4,б

Здесь $P_2(x)$ – интерполяционный многочлен второй степени с узлами $x_{i-1}, x_{i-1/2}, x_i$. Как нетрудно убедиться, верна формула

$$P_2(x) = f_{i-1/2} + \frac{f_i - f_{i-1}}{h}(x - x_{i-1/2}) + \frac{f_i - 2f_{i-\frac{1}{2}} + f_{i-1}}{h^2/2}(x - x_{i-1/2})^2.$$

Ее интегрирование приводит к равенству

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} P_2(x)dx = h\, f_{i-1/2} + \frac{f_i - f_{i-1}}{h}\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(x - x_{i-\frac{1}{2}}\right)dx\ +$$

$$+\frac{f_i - 2f_{i-\frac{1}{2}} + f_{i-1}}{h^2/2}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x - x_{i-\frac{1}{2}})^2\, dx =$$

$$= h\, f_{i-1/2} + \frac{h}{6}(f_i - 2f_{i-\frac{1}{2}} + f_{i-1}) = \frac{h}{6}(f_{i-1} + 4f_{i-\frac{1}{2}} + f_i)$$

Таким образом, выведена *элементарная квадратурная формула Симпсона:*

$$I_i \approx \frac{h}{6}(f_{i-1} + 4f_{i-\frac{1}{2}} + f_i). \qquad (8.9)$$

Применяя эту формулу на каждом элементарном отрезке, выводим *составную квадратурную формулу Симпсона*:

$$I \approx I_C^h = \frac{h}{6}(f_0 + 4f_{\frac{1}{2}} + 2f_1 + 4f_{\frac{3}{2}} + 2f_2 + \cdots + 2f_{n-1} + 4f_{n-\frac{1}{2}} + f_n) =$$

$$= \frac{h}{6}(f_0 + f_n + 4\sum_{i=1}^{n} f_{i-\frac{1}{2}} + 2\sum_{i=1}^{n-1} f_i). \qquad (8.10)$$

Учитывая геометрическую интерпретацию формулы Симпсона, ее иногда называют *формулой парабол*.

5. **Оценка погрешности.** Оценим погрешность выведенных формул в предположении, что подынтегральная функция f достаточно гладкая. Как и в предыдущих разделах, будем использовать обозначение $M_k = \max_{[a,b]} |f^{(k)}(x)|$.

Т е о р е м а 8.1. *Пусть функция f дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[a, b]$. Тогда для составных квадратурных формул прямоугольников и трапеций справедливы следующие оценки погрешности:*

$$|I - I_{\text{пр}}^h| \le \frac{M_2\,(b-a)}{24}\, h^2, \qquad (8.11)$$

$$|I - I_{\text{тр}}^h| \le \frac{M_2\,(b-a)}{12}\, h^2. \qquad (8.12)$$

□ Выведем сначала оценку (8.11). Представим погрешность $R = I - I_{\text{пр}}^h$ формулы прямоугольников в виде

$$R = \int_a^b f(x)dx - h\sum_{i=1}^{n} f_{i-1/2} = \sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(f(x) - f(x_{i-1/2})\mathrm{d}x.$$

Используя формулу Тейлора

$$f(x) = f(x_{i-1/2}) + f'(x_{i-1/2})(x - x_{i-1/2}) + \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_{i-1/2})^2,$$

где $x \in [x_{i-1}, x_i]$, $\xi = \xi(x) \in [x_{i-1}, x_i]$, имеем

$$R_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i}(f(x) - f(x_{i-1/2})\, dx = \frac{1}{2}\int_{x_{i-1}}^{x_i} f''(\xi(x))(x - x_{i-1/2})^2\mathrm{d}x,$$

$$|R_i| \le \frac{M_2}{2}\int_{x_{i-1}}^{x_i}(x - x_{i-1/2})^2\mathrm{d}x = \frac{M_2}{24}h^3.$$

Так как $R = \sum_{i=1}^{n} R_i$, то $|R| \le \sum_{i=1}^{n}\frac{M_2}{24}h^3 = \frac{M_2}{24}h^3 n$. Замечая, что $nh = b - a$, приходим к оценке (8.11).

Для вывода оценки (8.12) воспользуемся тем, что отрезок, соединяющий точки N_{i-1} и N_i, представляет собой график интерполяционного многочлена первой степени

$$y = P_1(x) = f_{i-1}\frac{x_i - x}{h} + f_i\frac{x - x_{i-1}}{h}.$$

Поэтому для элементарной формулы трапеций верно равенство:

$$R_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\ dx - \frac{h}{2}(f_{i-1} + f_i) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} (f(x) - P_1(x))\, dx$$

Используя оценку погрешности линейной интерполяции, имеем:

$$|R_i| \le \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{M_2}{2}(x - x_{i-1})(x_i - x)dx = \frac{M_2}{12}\ h^3.$$

Следовательно, для $R = I - I_{\text{тр}}^h$ справедлива оценка

$$|\mathrm{R}| \le \sum_{i=1}^{n} |R_i| \le \frac{M_2}{12}\, h^3 = \frac{M_2\,(b-a)}{12}\, h^2.\ \blacksquare$$

Приведем теперь без доказательства теорему об оценке погрешности формулы Симпсона.

Т е о р е м а 8.2. *Пусть функция* f *имеет на отрезке непрерывную производную четвертого порядка* $f^{(4)}$ *. Тогда для формулы Симпсона* (8.10) *справедлива оценка погрешности*

$$|I - I_{\text{С}}^h| \le \frac{M_4\,(b-a)}{2880}\, h^4. \qquad (8.13)$$

З а м е ч а н и е. Оценки (8.11), (8.12) и (8.13) означают, что формулы прямоугольников и трапеций имеют второй порядок точности относительно h, а формула Симпсона – четвертый порядок точности. Из тех же оценок следует, что формулы прямоугольников и трапеций точны для многочленов первой степени, а формула Симпсона – для многочленов третьей степени.

§ 8.2. Апостериорные оценки погрешности

Применение неравенств (8.11), (8.12) и (8.13) для априорной оценки погрешности квадратурных формул в большинстве случаев оказывается неэффективным или вообще невозможным. Это связано как с трудностями оценивания производных подынтегральной функции f, так и с тем, что получаемые оценки бывают сильно завышенными. Поэтому на практике обычно используются иные подходы к оценке погрешности, позволяющие строить процедуры численного интегрирования с автоматическим выбором шага.

1. Главный член погрешности.

Пусть I^h – приближенное значение интеграла $I = \int_a^b f(x)dx$, вычисленное по некоторой квадратурной формуле и использующее разбиение отрезка $[a, b]$ на элементарные отрезки длины h. Предположим, что для погрешности этой формулы справедливо представление

$$I - I^h = Ch^k + o\,(h^k), \tag{8.14}$$

где $C \neq 0$ и $k > 0$ – величины, не зависящие от h. Тогда величина Ch^k называется *главным членом погрешности* квадратурной формулы, а число k является порядком точности квадратурной формулы.
В силу предположения (8.14) для погрешности квадратурной формулы при достаточно малом справедливо приближенное равенство

$$I - I^h \approx Ch^k. \tag{8.15}$$

Несмотря на элементарный характер формулы (8.15), она позволяет сделать ряд важных выводов. Первый из них состоит в том, что уменьшение шага h в M раз приводит к уменьшению погрешности квадратурной формулы примерно в M^k раз. Действительно, при $h_1 = h/M$ имеем

$$I - I^{h_1} \approx C\,h_1^k = \frac{1}{M^k}\,C\,h^k \approx \frac{1}{M^k}\,(I - I^h).$$

В частности, уменьшение шага h в два раза приводит к уменьшению погрешности примерно в 2^k раз:

$$I - I^{h/2} \approx \frac{1}{2^k}\,C\,h^k \approx \frac{1}{2^k}\,(I - I^h). \tag{8.16}$$

2. Правило Рунге практической оценки погрешности. Вычитая из равенства (8.15) равенство (8.16), получим

$$I^{h/2} - I^{h} \approx \frac{1}{2^{k}} C\, h^{k}\, (2^{k} - 1).$$

Учитывая приближенное равенство (8.16), приходим к следующей приближенной формуле:

$$I - I^{h/2} \approx \frac{I^{h/2} - I^{h}}{2^{k} - 1}. \qquad (8.17)$$

Использование этой формулы для приближенной оценки погрешности значения $I^{h/2}$ принято называть *правилом Рунге* (или *правилом двойного пересчета*).

З а м е ч а н и е. Заменой h на $2h$ формула (8.17) приводится к следующему виду:

$$I - I^{h} \approx \frac{I^{h} - I^{2h}}{2^{k} - 1}. \qquad (8.18)$$

Для формул прямоугольников и трапеций k = 2, а для формулы Симпсона k = 4. Поэтому для этих квадратурных формул равенство (8.18) принимает следующий вид:

$$I - I^{h}_{\text{пр}} \approx \frac{1}{3}\, (I^{h}_{\text{пр}} - I^{2h}_{\text{пр}}), \qquad (8.19)$$

$$I - I^{h}_{\text{тр}} \approx \frac{1}{3}\, (I^{h}_{\text{тр}} - I^{2h}_{\text{тр}}), \qquad (8.20)$$

$$I - I^{h}_{\text{C}} \approx \frac{1}{15}\, (I^{h}_{\text{C}} - I^{2h}_{\text{C}}). \qquad (8.21)$$

Наличие правила Рунге получения апостериорной оценки погрешности позволяет строить процедуры вычисления интеграла I с заданной точностью ε, достигаемой последовательным дроблением шага интегрирования. Простейшая процедура такого типа состоит в последовательном вычислении значений I^{h_i} и соответствующих апостериорных оценок погрешности ε_i для $h_i = h_0/2^{i}$, где h_0 – начальное значение шага, i = *1, 2, 3, ...*. Вычисления прекращаются тогда, когда при некотором i оказывается $|\varepsilon_i| < \varepsilon$ (требуемая точность достигнута) либо тогда, когда величина $|\varepsilon_i|$ начинает возрастать (точность не может быть достигнута из-за влияния вычислительной погрешности).