Предлагается выполнить одно из заданий, в котором требуется вычислить приближенное значение интеграла. Задан такой интеграл, точное значение которого можно вычислить вручную или с помощью математического пакета (например, Maple). Это позволяет сравнить реальную ошибку вычисленного значения с теоретической оценкой погрешности метода расчета.

Чтобы выполнить такое задание требуется построить алгоритм метода, составить программу его реализации на вычислительной машине и провести расчет. При разработке алгоритма надо обращать внимание на ситуации, когда малые погрешности при вводе данных или при расчете могут вызывать большие погрешности вычисленного решения.

Дополнительная информация, которая требуется в задании, выдается преподавателем. После выполнения каждого задания требуется составить отчет по форме:

1. постановка задачи;
2. распечатка программы и результатов счета;
3. анализ погрешности результатов.

1 Тема „Численное интегрирование“

Целью заданий этого раздела является изучение приближенных методов вычисления интегралов с помощью ЭВМ, оценка эффективности этих методов, а также дополнительная практика в составлении и программировании вычислительных алгоритмов. Эффективность метода определяется гарантированной оценкой погрешности и временем расчета.

При выполнении заданий требуется построить алгоритм предложенного метода и написать программу, его реализующую. Язык программирования можно выбирать любой из доступных.

В вариантах заданий, как правило, предлагается находить приближенные значения интегралов, для которых существует первообразная. Это позволяет сравнить практическую оценку погрешности рассматриваемого метода с ее точным значением (вычисленным с помощью первообразной). Время расчета зависит от количества вычислений значений подынтегральной функции.

Современные ЭВМ обладают большой точностью. При небольшом по объему расчете увидеть влияние ошибок округления на результат можно либо, ограничивая число знаков при записи числа, либо, вводя в исходные данные (например, в значения подынтегральной функции) малую случайную погрешность. Введение случайной ошибки моделирует реальную вычислительную ситуацию, когда подынтегральная функция задана приближенно или расчет проводится с невысокой точностью.

В каждом задании требуется вычислить значение интеграла

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

используя алгоритм расчета по составной квадратурной формуле с автоматическим выбором шага, обеспечивающим точность ε. Квадратурная формула предложена в варианте задания. Составная формула должна быть выведена для этой квадратурной формулы. Требуется также сравнить рассчитанное значение с точным.

Задание 1 "Приближенное вычисление интегралов".

Требуется вычислить приближенное значение интеграла

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

с точностью ε.

1. Найдите первообразную $F(x)$ вручную или с помощью символьных машинных систем для заданной функции $f(x)$ и вычислите точное значение интеграла $I(f) = F(b) - F(a)$.

2. Вычислите приближенное значение $I(f)$ с автоматическим выбором шага, используя составную, построенную по заданной квадратурной формуле.

3. Сравните погрешность вычисленных значений интеграла и минимальную величину шага при каждом расчете.

Задание 2 "Приближенное вычисление интегралов от функций, заданных со случайной ошибкой".

Требуется вычислить приближенное значение интеграла

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

с точностью ε.

1. Найдите первообразную $F(x) = \displaystyle\int f(x)\,dx$ вручную или с помощью символьных машинных систем и вычислите точное значение интеграла $I(f) = F(b) - F(a)$.

2. Вычислите приближенное значение интеграла $I(f)$ с автоматическим выбором шага, используя составную квадратурную формулу, указанную в варианте задания.

3. Используя ту же самую составную формулу, вычислите приближенное значение интеграла для функции, заданной со случайной ошибкой. Случайную ошибку внесите в

подынтегральную функцию, вычисляя ее значения по одной из формул: $f(x(1+\varepsilon_1 h(x)))$ или $(1+\varepsilon_1 h(x))f(x)$, где $\varepsilon_1 \leqslant \sqrt{\varepsilon}$, $h(x)$ — случайная ошибка с нулевым математическим ожиданием и дисперсией равной единице. Для вычисления значений $h(x)$ используйте один из стандартных датчиков случайных величин.

5. Сравните погрешности вычисленных значений интегралов между собою. Проанализируйте зависимость результата расчета от случайной ошибки, выбрав несколько значений ε_1.

Задание 3 "Вычисление интегралов от осциллирующих функций".

Вычислите с заданной точностью ε значение

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

Производная подынтегральной функции меняет знак на $[a,b]$ в точках, число которых совпадает или превышает значение ω (сильно осциллирующая функция при $\omega \gg 1$).

Для заданной функции $f(x,\omega)$ можно вручную или с помощью символьных машинных систем вычислить первообразную $F(x,\omega) = \int f(x,\omega)\,dx$. Кроме того, $f(x,\omega)$ можно записать с помощью нескольких слагаемых. Например,

$$f(x,\omega) = \varphi_1(x,\omega)\,\sin k_1\omega x + \varphi_2(x,\omega)\,\cos k_2\omega x,$$

где $\varphi_1(x,\omega)$ и $\varphi_1(x,\omega)$ – гладкие функции, имеющие на $[a,b]$ мало нулей, k_1,k_2 — целые числа. Тогда

$$I(f,\omega) = \int\limits_a^b \varphi_1(x,\omega)\,\sin k_1\omega x\,dx + \int\limits_a^b \varphi_2(x,\omega)\,\cos k_2\omega x\,dx = I_1(\varphi_1,\omega) + I_2(\varphi_2,\omega).$$

Для выполнения задания:

1. Найдите первообразную и вычислите точное значение интеграла $I(f,\omega) = F(b,\omega) - F(a,\omega)$.

2. Вычислите приближенное значение

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

с автоматическим выбором шага, используя указанную в варианте задания составную квадратурную формулу с весом $\rho(x) = 1$.

3. Выведите указанные в варианте задания составные квадратурные формулы Ньютона–Котеса с весовыми функциями $\rho(x) = \sin \omega x$, $\rho(x) = \cos \omega x$. Подынтегральную функцию представьте в виде суммы слагаемых, каждое из которых является произведением $\rho(x)\ \varphi(x, \omega)$, где весовая функция $\rho(x) = \sin k_1 \omega x$ или $\rho(x) = \cos k_2 \omega x$, k_1, k_2 — целые.

4. Вычислите $I(f, \omega)$ как сумму интегралов, каждый из которых вычисляется с автоматическим выбором шага по построенным составным формулам с весовыми функциями $\rho(x) = \sin k_1 \omega x$ или $\rho(x) = \cos k_2 \omega x$.

5. Проведите расчет для трех групп значений ω, указанных в варианте задания.

6. Сравните при каждом расчете точные и рассчитанные значения интеграла, а также величины шагов составных формул, обеспечивающих заданную точность ε.

Методические указания

1. Формулы Ньютона-Котеса для вычисления интегралов имеют вид

$$I(f) = \int_a^b \rho(x) f(x)\ dx \approx S_n(f) = \frac{b-a}{2} \sum_{k=1}^{n} C_k f(x_k),$$

где $C_k = \int\limits_{-1}^{1} \rho\left(\frac{a+b}{2} + t\frac{b-a}{2}\right) \prod\limits_{j=1, j\neq k}^{n} \frac{t-d_j}{d_k - d_j}\, dt$ — коэффициенты Ньютона-Котеса, значения $d_k \in [-1, 1]$ определяют узлы $x_k = (a+b)/2 + d_k(b-a)/2 \in [a, b]$ квадратурной формулы.

Алгебраическая точность квадратурных формул Ньютона-Котеса, построенных по n узлам, равна $(n-1)$, а оценка их погрешности имеет вид

$$|R_n(f) - S_n(f)| \leq C \cdot \frac{M_n}{n!} \left(\frac{b-a}{2}\right)^{n+1},$$

где $M_n = \max\limits_{x\in[a,b]} |f^{(n)}(x)|$, $C = \int\limits_{-1}^{1} \left|\rho\left(\frac{a+b}{2} + t\frac{b-a}{2}\right)\right| \prod\limits_{j=1}^{n} |t - d_j|\, dt.$

Как правило, при выводе формул Ньютона-Котеса используются равноотстоящие узлы.

2. Формулы типа Гаусса. Если при выводе формулы Ньютона-Котеса выбирать узлы так, чтобы ее алгебраическая точность равнялась бы $2n-1$, то получится квадратурная формула Гаусса.

Искомые узлы $x_k \in [a, b]$, $k = 1, \ldots, n$ формулы Гаусса являются вещественными корнями многочлена $P_n(x)$ степени n ортогонального с весом $\rho(x)$ произвольному многочлену $P_i(x)$ степени $i \le n-1$, то есть

$$\int\limits_a^b \rho(x)\, P_i(x)\, P_n(x)\, dx = 0.$$

Если весовая $\rho(x)$ положительна почти всюду на $[a,b]$, то такой многочлен существует.

Алгоритм построения многочлена $P_n(x)$ начинается с выбора многочленов нулевой $P_0(x)=1$ и первой степени $P_1(x)=x\,P_0(x)+c$. Константа c находится из условия

$$\int\limits_a^b \rho(x)\, P_0(x)\, P_1(x)\, dx = 0.$$

Для многоленов старшей степени существует реккурентная формула

$$P_{m+1}(x) = (x+c_m)P_m(x) + c_{m-1}P_{m-1}(x) \quad m = 1,\ldots,n-1,$$

где

$$c_m = -\frac{\int\limits_a^b \rho(x)\, xP_m(x)\, P_m(x)\, dx}{\int\limits_a^b \rho(x)\, P_m(x)\, P_m(x)\, dx}, \quad c_{m-1} = -\frac{\int\limits_a^b \rho(x)\, xP_m(x)\, P_{m-1}(x)\, dx}{\int\limits_a^b \rho(x)\, P_{m-1}(x)\, P_{m-1}(x)\, dx}.$$

3. Составные (обобщенные) квадратурные формулы. Пусть в варианте задания указана квадратурная формула, построенная по n узлам

$$I(f) = \int\limits_a^b \rho(x)\, f(x)\, dx \approx S_n(f) = \sum_{k=1}^n C_k f(x_k),$$

с оценкой погрешности

$$|R_n(f)| = |I(f) - S_n(f)| \leqslant C\frac{M_m}{m!}\left(\frac{b-a}{2}\right)^{m+1},$$

где $M_m = \max\limits_{a\leqslant x\leqslant b} |f^{(m)}(x)|$, $\xi(x) \in (a,b)$, константа

$$C = \int\limits_{-1}^1 \left|\rho\left(\frac{a+b}{2} + t\frac{b-a}{2}\right)\right| \prod_{k=1}^n |t-d_k|^j\, dt.$$

Здесь значения m и j зависят от типа формулы. Для формулы Ньютона-Котеса $m=n$, $j=1$, а для формулы Гаусса $m=2n$, $j=2$.

Из оценки погрешности видно, что она будет малой при достаточно малой длине отрезка интегрирования $(b-a)$. Если разбить отрезок $[a,b]$ на N отрезков длиной $H =$

$(b-a)/N$ с помощью точек $a_j = a+jH$, $j = 0, 1, 2, ..., N$, $a_0 = a$, $a_N = b$, то для интеграла $I(f)$ справедливо равенство

$$I(f) = \int\limits_a^b \rho(x)\, f(x)\, dx = \sum_{j=0}^{N-1} \int\limits_{a_j}^{a_{j+1}} \rho(x)\, f(x)\, dx = \sum_{j=0}^{N-1} I_j(f).$$

Если для вычисления приближенного значения $I_j(f)$ использовать указанную квадратурную формулу $S_{jn}(f)$, то получится составная или обобщенная квадратурная формула

$$I(f) = \int\limits_a^b \rho(x) f(x)\, dx = \sum_{j=0}^{N-1} I_j(f) \approx$$

$$\approx S_n = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{H}{2} \sum_{k=1}^{n} C_{jk} f(x_{jk}) = \frac{H}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \sum_{k=1}^{n} C_{jk} f(x_{jk}),$$

с оценкой погрешности

$$|R_n(f)| = |I(f) - S_n(f)| \leqslant \sum_{j=0}^{N-1} |I_j(f) - S_{jn}(f)| \leqslant \sum_{j=0}^{N-1} C_j \frac{M_{jm}}{m!} \left(\frac{H}{2}\right)^{m+1}.$$

Если $M_m = \max\limits_{a\leqslant x\leqslant b} |f^{(m)}(x)|$, $C = \max\limits_{0\leqslant j\leqslant N-1} C_j$, то

$$|R_n(f)| \leqslant \frac{b-a}{2}\, C\, \frac{M_m}{m!} \left(\frac{H}{2}\right)^{m}.$$

Отсюда следует, что, если ограничена $|f^{(m)}(x)|$, то существует такое число отрезнов N (или величина H), что $|R_n(f)| \leqslant \varepsilon$.

С точностью до бесконечно малых порядка $O(H^{m+1})$ справедливо приближенное равенство

$$R_n(f) = I(f) - S_{H/2}(f) \approx \widetilde{R}_n(f) = \frac{S_{H/2}(f) - S_H(f)}{2^m - 1}.$$

Вычисляемое значение $\widetilde{R}_n(f)$ (правило Рунге для практической оценки погрешности) позволяет организовать алгоритм вычисления интеграла с автоматическим выбором шага.

4. Алгоритмы вычисления приближенного значения интегралов

Для вычисления приближенного значения интеграла $I(f)$ с заданной точностью ε используется составная квадратурная формула.

Пусть составная формула строится с помощью квадратуры Ньютона-Котеса с равноотстоящими узлами. Если весовая функция $\rho(x) = 1$, то коэффициенты Ньютона-Котеса не зависят от пределов интегрирования, и для вычисления каждого значения

$I_j(f) = \int\limits_{a_j}^{a_{j+1}} \rho(x)\, f(x)\, dx$ не требуется их пересчитывать. Если же $\rho(x) \neq const$, то для каждого $I_j(f)$ надо пересчитывать коэффициенты, так как они зависят от пределов интегрирования.

Если для построения составной формулы используется формула Гаусса, то для вычисления требуется пересчитывать соответствующие коэффициенты и узлы.

Далее рассматриваются возможные варианты алгоритмов с автоматическим выбором шага

Общий случай

(весовая функция $\rho(x) \neq const$).

В этом случае коэффициенты и узлы квадратурной формулы зависят от пределов интегрирования, и для вычисления приближенного значения $I_j(f)$ на отрезке $[a_j, a_{j+1}]$ по формуле $I_j(f) \approx S_j(f) = \sum\limits_{k=1}^{n} (c_j)_k f((x_j)_k)$ требуется пересчитывать соответствующие коэффициенты, а иногда и узлы.

Если обозначить через $f(x)$ процедуру-функцию для вычисления значения подынтегральной функции и через $koef(a, b, c_j, x_j)$ процедуру вычисления массива коэффициентов $(c_j)_k$ и массива узлов $(x_j)_k$ $(k = 1, \ldots, n)$ для пределов интегрирования a и b, то один из вариантов алгоритма можно записать в виде:

1. Начало.
2. Ввод значений: a, b — пределы интегрирования, ε — точность расчета, n — количество узлов и m —порядок алгебраической точности выбранной квадратурной формулы, IT — максимально возможное число делений шага пополам.
3. Вычисления начального шага $N := \dfrac{b-a}{\sqrt[m]{\varepsilon}}$, $H = \dfrac{b-a}{N}$. При таком выборе начального шага $|R_m(f)| = O(\varepsilon)$.
4. $S := 1$ (для входа в цикл), $it := 0$.
5. $S_1 := 0$.
6. Начало цикла: пока не достигнута точность $|S - S_1| \leqslant \varepsilon$ и число делений шага $it \leqslant IT$
7. $S := S_1$, $S_1 := 0$, $x := a$.
8. начало цикла по j от 1 до $N - 1$
9. обращение к процедуре $koef(x, x + h, c_j, x_j)$,
10. в цикле по k от 1 до n вычисляется $S_1 := S_1 + (c_j)_k f((x_j)_k)$,
11. $x := x + H$, конец цикла по j.
12. если $|S - S_1| \leqslant \varepsilon$, тогда выход на конец программы, значение интеграла $I(f) \approx S_1$ вычислено с точностью ε

14. иначе

если $it \geqslant IT$ тогда печать строки

' за it итераций точность не достигнута'.

15. иначе

можно для анализа сходимости на каждом шаге H

выдавать значения $I(f) \approx S$, it, и H.

$H := H/2$, $it := it + 1$; $S := S_1$.

16. конец цикла по точности и числу итераций.

17. конец.

Случай весовой функции $\rho(x) = 1$ и равноотстоящих узлов.

В этом случае в квадратурных формулах Ньютона-Котеса можно привести подобные, так как коэффициенты и узлы не зависят от пределов интегрирования. Эти составные формулы позволяют построить алгоритм с автоматическим выбором шага, в котором значение подынтегральной функции в каждом узле вычисляется не более одного раза.

Если функция $f(x)$ имеет ограниченные производные до p–ого порядка, то часто используются составные квадратурные формулы, построенные с помощью следующих формул:

1. Формула срединных прямоугольников ($n = 1$, $p = 2$)

$$I(f) \approx (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) \quad \text{с оценкой погрешности} \quad |R_1(f)| \leqslant \frac{M_2}{24}(b-a)^3$$

2. Формула трапеции ($n = 2$, $p = 2$)

$$I(f) \approx \left(\frac{b-a}{2}\right)(f(a) + f(b)) \quad \text{с оценкой погрешности} \quad |R_2(f)| \leqslant \frac{M_2}{12}(b-a)^3$$

3. Формула Симпсона ($n = 3$, $p = 4$). Если обозначить $h = (b-a)/2$, то формулу Симпсона можно записать в виде

$$I(f) \approx \left(\frac{b-a}{6}\right)(f(a) + 4f(a+h) + f(b)) \text{ с оценкой погрешности } |R_3(f)| \leqslant M_4 \frac{(b-a)^5}{2880}.$$

При построении составной формулы по каждой из этих формул можно привести подобные. Например, составную квадратурную формулу Симпсона можно преобразовать к виду

$$I(f) \approx S_3 == \frac{h}{3}\left(f(a) + f(b) + 4\sum_{j=0}^{k-1} f(x_{2j+1}) + 2\sum_{j=1}^{k-1} f(x_{2j})\right),$$

где $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \ldots, 2k$, $x_{2k} = b$. Оценка погрешности этой формулы

$$|R_3(f)| \leqslant M_4 \frac{(b-a)h^4}{180} \quad M_4 = \max_{a \leqslant x \leqslant b} |f^{(4)}(x)|.$$

Если составлена процедура-функция $f(x)$ для вычисления подынтегральной функции в точке x, то один из вариантов алгоритма вычисления интеграла $I(f)$ с помощью составной формулы Симпсона можно записать в виде

1. Начало
2. Ввод значений: a, b — пределы интегрирования, ε — точность расчета, IT — максимально возможное число делений шага пополам.
3. Вычисляются значения $k := 2\frac{b-a}{\sqrt[4]{\varepsilon}} + 1$, $h = \frac{b-a}{k}$. При таком выборе начального шага $|R_3(f)| = O(\varepsilon)$ и число отрезков четное.
4. Вычисляется $S_0 = f(a) + f(b)$. Эта сумма S_0 входит в формулу Симпсона при любом шаге h.
5. $S_2 := 0$, $x := a + 2 * h$. Пока $x < b$ в цикле вычисляется $S_2 := S_2 + f(x)$; $x := x + 2 * h$. S_2 — сумма значений функции $f(x)$ в узлах с четными индексами.
6. it:=0 — счетчик для числа делений шага h, $int := 0$— приближенное значение интеграла, вычисленное с шагом h, $int1 := 1$—с шагом $h/2$. $int1$ присвоено значение 1, чтобы войти в цикл.
7. Пока $|int - int1| > eps$(то есть не достигнута точность) и $it \leqslant IT$ выполняются в цикле следующие действия
8. int1:=int, $S_1 := 0$, $x := a + h$. Пока $x < b$ вычисляется $S_1 := S_1 + f(x)$; $x := x + 2 * h$. S_1 — сумма значений функции $f(x)$ в узлах с нечетными индексами.
9. $int := (S_0 + 4 * S_1 + 2 * S_2) * h/3$.
10. можно для анализа сходимости на каждом шаге h выдавать значения $I(f) \approx int$, it, и h.
    $h := h/2$, $it := it + 1$; $S_2 := S_1 + S_2$; (после деления шага пополам индексы узлов с нечетными индексами станут четными, и значения $f(x)$ в них пересчитывать не требуется).
11. конец цикла по точности и числу делений шага пополам.
12. если $it \leqslant IT$
    то печать: 'приближенное значение интеграла равно', int , 'вычислено с точностью', eps.
    иначе печать: 'за', it, 'делений шага точность', eps 'не достигнута'.
13. Конец.

Примеры вариантов задания

Вариант задания 1 Вычислить

$$I(f) = \int\limits_0^1 \sin\sqrt{x}\,dx$$

с точностью $\varepsilon = 1)^{-6}$, используя составные формулы трапеций и Симпсона.

Вариант задания 4 Вычислить

$$I(f) = \int\limits_0^1 (e^{-x}\sin\omega x + \sin x\cos\omega x)\,dx$$

с точностью $\varepsilon = 10^{-6}$, используя составные формулу Симпсона и составные фор-формулы с весовыми функциями $\sin\omega x$ и $\cos\omega x$, построенные по трем равноотстоящим узлам.

Список литературы

[1] Бахвалов Н.С. Численные методы. -М.:Наука,1973.

[2] Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. -М.:Наука,1989г.

[3] Калиткин Н.Н. Численные методы. -М.:Наука,1978

[4] Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. -М.:Наука,1989.

[5] Вержбицкий В.М. Основы численных методов.- М.:Высш.шк.,2002.

[6] Демидович Б.П., Марон И.Л. Основы вычислительной математики.М.:Наука,1966.

[7] Дж. Ортега, У. Пул Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений.

[8] Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. - М.: Мир, 1960.

[9] Беленькая Л.Х., Овчинникова С.Н. Вычислительная погрешность при расчетах на ЭВМ, Методические указания.. Ростов -на- Дону, УПЛ РГУ, 1994г., 27 с.

[10] Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. -М.:Наука,1977.

[11] Копченова Н.В., Марон И.А. Вычислительная математика в примерах и задачах.М.: Наука, Гл.ред.физ.-мат.лит., 1972.

[12] Бахвалов Н.С., Лапин А.В., Чижонков Е.В. Численные методы в задачах и упражнениях. М., "Высшая школа ", 2000.

[13] Крылов В.И., Бобков В.В. Вычислительные методы. Т.II, М.: Наука, 1977