Санкт-Петербургский государственный университет Факультет прикладной математики — процессов управления

В. Э. Вишневский, А. М. Максина, И. В. Олемской Практикум на ЭВМ по численным методам Тема 7. Вычисление определённого интеграла Методические указания

Постановка задачи

Рассматривается задача о вычислении однократного интеграла

$$J(F) = \int_{a}^{b} F(x)dx,\tag{1}$$

с использованием конечного числа значений интегрируемой функции. Интервал интегрирования [a,b] — любой отрезок числовой оси (конечный или бесконечный). Подынтегральная функция F(x) — любая интегрируемая в смысле Римана функция.

Такой интеграл является пределом суммы вида:

$$J(F) = \int_{a}^{b} F(x)dx = \lim_{r_{n} \to 0} \sum_{i=1}^{n} F(\xi_{i}) \Delta x_{i} = \lim_{r_{n} \to 0} S_{n},$$
 (2)

где $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$, $r_n = \max_{i=\overline{1,n}} \Delta x_i$, $S_n = \sum_{i=1}^n F(\xi_i) \Delta x_i$.

Взяв достаточно малые частичные отрезки $[x_{i-1}, x_i]$ и вычислив достаточно много значений $F(\xi_i), \, \xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$, можно найти значение интеграла с любой заданной точностью. Каждая интегральная сумма определяется способом деления отрезка [a,b] на части Δx_i и выбором в каждой из них промежуточных точек ξ_i .

При построении правила вычисления (1), одинакового для всех функций F(x), можно взять все Δx_i одинаковыми: $\Delta x_i = \frac{b-a}{n} = h$, а в качестве точек ξ_i выбрать середины частичных отрезков $[x_{i-1}, x_i]$: $\xi_i = a + (i - \frac{1}{2})h$. Получим правило интегрирования, назваемое составной формулой *средних прямоугольников* (или *средней точки*)

$$J(F) = \int_{a}^{b} F(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} F(\xi_{i})\Delta x_{i} = h \sum_{i=1}^{n} F(\xi_{i}) + \left(i - \frac{1}{2}\right)h.$$
 (3)

Оно позволяет вычислять интеграл (1) сколь угодно точно при всякой функции F(x), но оно является медленно сходящимся даже для случая аналитической функции F(x) и требует для достижения хорошей точности вычисления интеграла большого числа значений F(x). Правило (3) становится неприменимым, если интеграл является несобственным.

Правила численного интегрирования, рассчитанные на более узкие классы функций, могут иметь лучшую точность, если заранее принять во внимание свойства функций этих классов и использовать их при конструировании. Каждое правило основано на замене

интегрируемой функции на какую-либо элементарную функцию: алгебраический многочлен, рациональную функцию, тригонометрический многочлен и др.

Такая замена дает хорошую точность, если заменяемая функция F(x) обладет высоким порядком гладкости. При наличии у F(x) каких-нибудь особенностей, мы заинтересованы в выделении их. Выделение делается обычно при помощи разложения F(x) на два сомножителя $F(x) = p(x) \cdot f(x)$, причем p(x) имеет особенности того же типа, что и F(x), и называется весовой функцией или просто весом (обозначение p(x) вводится по первой букве французского слова poids — вес). Важно, чтобы функция p(x) имела аналитически вычисляемые j-е моменты:

$$\mu_j = \int_a^b p(x)x^j dx, \quad j = 0, 1, \dots$$
 (4)

Второй сомножитель, f(x) — гладкая функция. Такое разложение приводит (1) к виду:

$$J(F) = \int_{a}^{b} p(x)f(x)dx. \tag{5}$$

Считая вес p(x) фиксированным, а f(x) — произвольной гладкой функцией, строим правила интегрирования вида

$$J(F) = \int_{a}^{b} p(x)f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n} A_{j}f(x_{j}) = S_{n}, \quad x_{j} \in [a, b],$$
 (6)

расчитанные на функции, имеющие одинаковые, заранее известные особенности. Здесь $f(x) \in \Phi(a,b)$ — некоторый класс функций, определенных на [a,b]; p(x) — весовая функция: некоторая фиксированная неотрицательная на [a,b] функция, для которой

$$\int_{a}^{b} p(x)dx > 0,$$

и $\forall f(x) \in R$ существует

$$\int_{a}^{b} p(x)|f(x)|dx.$$

Определение 1. Формулу (6) называют формулой механических квадратур или просто квадратурной формулой (КФ).

 $S_n = \sum_{j=1}^n A_j f(x_j)$ называют квадратурной суммой, A_j — квадратурными коэффициентами, а x_j — узлами квадратурной формулы.

Условимся считать, что узлы квадратурной формулы (6) расположены по возрастанию: $a \le x_0 < x_1 < ... < x_n \le b$ и не повторяются.

Определение 2. Величина

$$R_n(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx - \sum_{j=1}^n A_j f(x_j) = J(f) - S_n(f)$$
 (7)

называется методической погрешностью или остаточным членом квадратурной формулы (6).

Определение 3. Говорят, что квадратурная формула (6) имеет алгебраическую степень точности (ACT) m, если она верна для любых многочленов степени m и не верна для многочленов степени m+1.

Это равносильно тому, что равенство

$$\int_{a}^{b} p(x)x^{i}dx = \sum_{j=1}^{n} A_{j}x_{j}^{i},$$
(8)

выполняется для $i=\overline{0,m}$ и не выполняется для i=m+1. Или, что то же самое, $R_n(x^i)=0,\ i=\overline{0,m}$ и $R_n(x^{m+1})\neq 0$. Параметры квадратурной формулы $n,\ x_j,\ A_j,\ j=\overline{1,n}$ чаще всего выбирают так, чтобы квадратурная формула имела максимально возможную алгебраическую степень точности.

Необходимо отметить, что в некоторых задачах не все параметры являются произвольными. Например, если F(x) задана таблично, то мы ограничены в выборе узлов x_j . Иногда для упрощения счета можно потребовать равенства $A_1=A_2=...=A_n=A=$ const. В таком случае в нашем распоряжении только n+1 параметр: A и x_j , $j=\overline{1,n}$. Величина погрешности $R_n(f)$ зависит от свойств функции f и от выбора квадратурной формулы, т.е. от узлов и коэффициентов. При исследовании погрешности основными являются две задачи: оценка погрешности для функций с известными (распространенными) свойствами и выяснение условий сходимости — условий, при которых $R_n(f) \to 0$ при $n \to \infty$.

Таким образом, для построения квадратурной формулы при фиксированном, но произвольном n необходимо указать способ выбора узлов x_j , $j=\overline{1,n}$, и коэффициентов A_j , $j=\overline{1,n}$ квадратурной формулы и указать способ оценивания методической погрешности $R_n(f)$ для данной функции $f(\cdot)$ или некоторого множества функций $\Phi(a,b)$.

Замечание 1. При вычислении величин $f(x_j)$ приходится почти всегда иметь дело с приближенными значениями функции $\bar{f}(x_j)$, верными на некоторое число значащих цифр: $|f(x_j) - \bar{f}(x_j)| < \varepsilon, \ j = \overline{1,n}$. Квадратурная сумма будет вычислена с погрешностью

$$|S_n - \bar{S}_n| < \varepsilon \sum_{j=1}^n |A_j|.$$

Если сумма $\sum_{j=1}^n |A_j|$ велика, то это естественно вызывает большую погрешность в приближенном значении интеграла. Именно поэтому при построении квадратурных формул стремятся к тому, чтобы $\sum_{j=1}^n |A_j|$ имела бы возможно меньшее значение. Если $p(x)\geqslant 0$, $x\in [a,b]$ и квадратурная формула верна для $f\equiv 1$,что равносильно равенству $\int_a^b p(x)dx=\sum_{j=1}^n A_j$, то $\sum_{j=1}^n |A_j|$ будет иметь наименьшее значение, когда все $A_j>0$. Именно это обстоятельство придает квадратурным формулам с положительными коэффициентами особое значение.

Определение 4. Последовательность квадратурных формул называется *квадратурным процессом*.

Эта последовательность определяется двумя треугольными матрицами: матрицей узлов и матрицей коэффициентов

$$X = \left| \begin{array}{cccc} x_1^{(1)} & & & & \\ x_1^{(2)} & x_2^{(2)} & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & & \\ x_1^{(n)} & x_2^{(n)} & \cdots & x_n^{(n)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{array} \right| \quad \text{if} \quad A = \left| \begin{array}{ccccc} A_1^{(1)} & & & & \\ A_1^{(2)} & A_2^{(2)} & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \\ A_1^{(n)} & A_2^{(n)} & \cdots & A_n^{(n)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{array} \right|.$$

Квадратурная формула соответствующая n-й строке этих матриц, имеет вид:

$$\int_{a}^{b} p(x)f(x)dx = \sum_{j=1}^{n} A_{j}^{(n)}f(x_{j}^{(n)}) + R_{n}(f) = S_{n}(f) + R_{n}(f).$$

Определение 5. Будем говорить, что квадратурный процесс, определенный матрицами X и A, cxodumcs для функции f, если

$$\lim_{n \to \infty} S_n(f) = \lim_{n \to \infty} \sum_{j=1}^n A_j^{(n)} f(x_j^{(n)}) = \int_a^b p(x) f(x) dx.$$

Интерполяционные квадратурные формулы

Рассмотрим квадратурную формулу с *п* узлами

$$\int_{a}^{b} p(x)f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n} A_{j}f(x_{j}). \tag{9}$$

Если узлы заданы, то наилучшей точности можно добиться, заменяя функцию f(x) на её интерполяционный полином и вычисляя получаемый интеграл аналитически. Коэффициенты A_j находятся в этом случае однозначно.

Определение 6. Квадратурная формула (9) называется *интерполяционной* (ИКФ), если её коэффициенты удовлетворяют равенству

$$A_j = \int_a^b p(x) \frac{\omega(x)}{(x - x_j)\omega'(x_j)} dx, \tag{10}$$

где
$$\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)$$
 — узловой многлочлен.

Методическая погрешность интерполяционного правила (9), (10), если f(x) имеет непрерывную производную порядка n на (a,b), имеет вид

$$R_n(f) = \frac{1}{n!} \int_a^b p(x)\omega(x)f^{(n)}(\xi)dx, \quad \xi \in [a, b].$$

Для функции f(x), имеющей непрерывную и ограниченную по модулю производную порядка n $(f(x) \in C^{(n)}(a,b), |f^{(n)}(x)| \leqslant M_n)$ верна оценка

$$R_n(f) \leqslant \frac{M_n}{n!} \int_a^b |p(x)\omega(x)| dx. \tag{11}$$

Замечание 2. Всякое квадратурное правило (9), алгебраическая степень точности которого не меньше чем n-1, является интерполяционным. Верно и противоположное: алгебраическая степень точности ИКФ при всяком расположении узлов x_i будет не меньше n-1.

Это является следствием того, что если f(x) является полиномом степени меньшей n, то она совпадает со своим интерполяционным полином, построенным по n узлам.

Коэффициенты ИК Φ A_j проще найти из требования точного равенства квадратурной суммы S_n и интеграла для всех одночленов степеней от 0 до n-1. Получаем следующий

Алгоритм построения ИКФ

- 1. Задать узлы квадратурной формулы (9) $x_i, j = 1, 2, ..., n$.
- 2. Вычислить *моменты* весовой функции p(x) на [a,b]

$$\mu_j = \int_a^b p(x)x^j dx, \quad j = 0, 1, ..., n - 1.$$
 (12)

3. Решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{j=1}^{n} A_j x_j^s = \mu_s, \quad s = 0, 1, ..., n - 1.$$
 (13)

Пример построения ИКФ

Построить двухточечную (n=2) интерполяционную квадратурную формулу для вычисления интеграла

$$\int_{a}^{b} \frac{f(x)}{\sqrt{x-a}} dx \approx \sum_{j=1}^{n} A_{j} f(x_{j}), \quad b > a.$$

В качестве весовой функции при условии достаточно гладкой функции f(x) возьмем $p(x)=1/\sqrt{x-a}$. Сделаем замену переменной t=x-a и сведём исходную задачу к построению ИКФ для вычисления интеграла

$$\int_{0}^{b-a} \frac{\hat{f}(t)}{\sqrt{t}} dt \approx \sum_{j=1}^{n} A_j \hat{f}(t_j).$$

Далее вычисляем моменты весовой функции

$$\mu_0 = \int_0^{b-a} \frac{1}{\sqrt{t}} dt = 2(b-a)^{\frac{1}{2}}, \quad \mu_1 = \int_0^{b-a} \frac{t}{\sqrt{t}} dt = \frac{2}{3}(b-a)^{\frac{3}{2}}.$$

При заданных узлах $(t_1, t_2 \in [0, b-a])$ двухточечная ИКФ имеет АСТ не меньше 1. А это значит, что должны выполняться равенства

$$R_2(1) = \int_0^{b-a} \frac{1}{\sqrt{t}} dt - (A_1 + A_2) = 0 \implies A_1 + A_2 = \mu_0,$$

$$R_2(t) = \int_0^{b-a} \frac{t}{\sqrt{t}} dt - (A_1 t_1 + A_2 t_2) = 0 \implies A_1 t_1 + A_2 t_2 = \mu_1.$$

Решая эту линейную систему относительно A_1 и A_2 , получим значение коэффициентов КФ

$$A_1 = \frac{\mu_0 t_2 - \mu_1}{t_2 - t_1}, \quad A_2 = \frac{\mu_1 - \mu_0 t_1}{t_2 - t_1}.$$

Проверим, является ли единица алгебраической степенью точности для построенной квадратурной формулы

$$\int_{0}^{b-a} \frac{f(t)}{\sqrt{t}} dt = \frac{\mu_0 t_2 - \mu_1}{t_2 - t_1} f(t_1) + \frac{\mu_1 - \mu_0 t_1}{t_2 - t_1} f(t_2) + R_2(f).$$
 (14)

Для этого вычислим

$$R_2(t^2) = \int_0^{b-a} \frac{t^2}{\sqrt{t}} dt - \frac{\mu_0 t_2 - \mu_1}{t_2 - t_1} t_1^2 + \frac{\mu_1 - \mu_0 t_1}{t_2 - t_1} t_2^2 = \mu_2 - \mu_1(t_1 + t_2) + \mu_0 t_1 t_2.$$

Если $R_2(t^2) \neq 0$, для выбранных t_1 и t_2 , то это и доказывает тот факт, что алгебраическая степень точности квадратурной формулы (14) не больше 1.

Замечание 3. Особое место в теории интерполяционных квадратурных формул занимают интерполяционные квадратурные формулы с равноотстоящими узлами — $\kappa вадратурные$ формулы типа Нъютона — $Komca^1$.

¹Исаа́к Нью́тон (англ. Sir Isaac Newton) (1643–1727), английский физик и

Квадратурные формулы наивысшей АСТ

Поставим своей целью построить такие квадратурные формулы с n узлами, чтобы достичь наивысшей возможной алгебраической степени точности.

Поскольку АСТ n-1 требует, чтобы формула была интерполяционной, то коэффициенты должны быть найдены по формуле (10). Таким образом, повысить АСТ сверх n-1 мы можем только особым образом выбирая узлы x_i .

Определение 7. Интерполяционная квадратурная формула (9) называется квадратурной формулой наивысшей алгебраической степени точности (КФНАСТ) или КФ типа Гаусса², если её узлы выбраны таким образом, что её АСТ равна 2n-1. Т. е.

$$\mu_s = \int_a^b p(x)x^s dx = \sum_{j=1}^n A_j x_j^s, \quad s = 0, 1, ..., 2n - 1.$$
 (15)

Теорема. Для того, чтобы квадратурная формула (9) была точной для алгебраических многочленов степени 2n-1, необходимо и достаточно выполнения условий:

- формула (9) должна быть интерполяционной;
- узлы x_j формулы (9) должны быть такими, чтобы узловой многочлен $\omega(x)=(x-x_1)(x-x_2)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)=x^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$ был ортогонален с весом p(x) ко всякому многочлену Q(x) степени меньше n, т. е.

$$\int_{a}^{b} p(x)\omega(x)Q(x)dx = 0, \quad \forall Q(x) : \deg Q(x) \leqslant n - 1. \tag{16}$$

математик, создавший теоретические основы механики и астрономии, открывший закон всемирного тяготения, разработавший (наряду с Г. Лейбницем) дифференциальное и интегральное исчисления, изобретатель зеркального телескопа и автор важнейших экспериментальных работ по оптике.

Ро́джер Котс (также Котес) (англ. Roger Cotes) (1682–1716), английский математик, сотрудничавший с И. Ньютоном. Помимо квадратурных формул Ньютона—Котса, он также известен тем, что первым вывел формулу показательной записи комплексного числа, называемую сейчас формулой Эйлера.

 2 Иога́нн Карл Фри́дрих Га́усс (нем. Johann Carl Friedrich Gauß) (1777–1855), немецкий математик, механик, физик, внёсший фундаментальный вклад также в астрономию и геодезию.

Следует обратить внимание на следующие особенности:

- все корни многочлена $\omega(x)$ лежат внутри отрезка [a,b] и различны между собой;
- все коэффициенты квадратурной формулы $A_i > 0, j = \overline{1,n};$
- квадратурная формула типа Гаусса не может быть верной для всех многочленов степени 2n;
- ullet если $f(x) \in C^{(2n)}(a,b)$, то существует точка $\xi \in [a,b]$ такая, что для методической погрешности квадратурной формулы наивысшей алгебраической степени точности верно равенство

$$R_n(f) = \frac{1}{2n!} \int_a^b p(x)\omega^2(x) f^{(2n)}(\xi) dx.$$

Для функции f(x), у которой 2n-я производная непрерывна $(f(x) \in C^{(2n)}(a,b))$ и ограничена по модулю $(|f^{(2n)}(x)| \leq M_{2n})$, верна оценка

$$R_n(f) \leqslant \frac{M_{2n}}{(2n)!} \int_a^b |p(x)\omega^2(x)| dx. \tag{17}$$

Алгоритм построения КФ типа Гаусса

1. Вычислить *моменты* весовой функции p(x) на [a,b]

$$\mu_j = \int_a^b p(x)x^j dx, \quad j = 0, 1, ..., 2n - 1.$$
 (18)

2. Решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{j=0}^{n-1} a_j \mu_{j+s} = -\mu_{n+s}, \quad s = 0, 1, ..., n-1.$$
 (19)

3. Найти узлы x_i , $j = \overline{1,n}$, как корни узлового многочлена

$$\omega(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_1x + a_0 = 0.$$
 (20)

4. Решить систему линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{j=1}^{n} A_j x_j^s = \mu_s, \quad s = \overline{0, n-1}.$$
 (21)

Пример построения КФ типа Гаусса

Построить двухточечную (n=2) КФНАСТ для вычисления интеграла

$$\int_{a}^{b} \frac{f(x)}{\sqrt{x-a}} dx \approx \sum_{j=1}^{n} A_{j} f(x_{j}), \quad b > a.$$

Аналогично примеру с ИКФ делаем замену переменной t = x - a:

$$\int_{0}^{b-a} \frac{\hat{f}(t)}{\sqrt{t}} dt \approx \sum_{j=1}^{n} A_j \hat{f}(t_j).$$

Вычисляем нужные нам моменты весовой функции $p(t) = \frac{1}{\sqrt{t}}$: $\mu_0 = 2(b-a)^{\frac{1}{2}}, \ \mu_1 = \frac{2}{3}(b-a)^{\frac{3}{2}}, \ \mu_2 = \frac{2}{5}(b-a)^{\frac{5}{2}}, \ \mu_3 = \frac{2}{7}(b-a)^{\frac{7}{2}}.$ Формируем систему линейных алгебраических уравнений

$$\begin{cases} a_0\mu_0 + a_1\mu_1 = -\mu_2, \\ a_0\mu_1 + a_1\mu_2 = -\mu_3 \end{cases}$$

для определения коэффициентов $a_1,\ a_0$ узлового многочлена $\omega(t).$ Находим её решение

$$a_1 = \frac{\mu_0 \mu_3 - \mu_1 \mu_2}{\mu_1^2 - \mu_0 \mu_2}, \quad a_0 = \frac{\mu_2^2 - \mu_1 \mu_3}{\mu_1^2 - \mu_0 \mu_2}.$$

Далее, разрешая уравнение $\omega(t)=0$, находим корни t_0 и t_1 узлового многочлена, являющиеся узлами квадратурной формулы. Коэффициенты же квадратурной формулы являются решением системы алгебраических уравнений

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = \mu_0, \\ A_1 t_1 + A_2 t_2 = \mu_1. \end{cases}$$

Составные квадратурные формулы

Основная идея метода заключается в том, что для повышения точности интегрирования отрезок [a,b] делят на несколько частей, применяют избранную квадратурную формулу к каждой отдельной части и результаты складывают. Для большинства квадратурных формул методическая погрешность $R_n(f)$ зависит от величины отрезка интегрирования и может быть представлена в виде:

$$R_n(f) = (b-a)^m K(a,b),$$
 (22)

где K(a,b) есть медленно меняющаяся функция от a,b и s. Эта зависимость показывает, что если уменьшить отрезок интегрирования в k раз, то $R_n(f)$ уменьшится в k^m раз.

Для вычисления интеграла по отрезку [a,b] разделим его на k равных частей и вычислим при помощи выбранной квадратурной формулы интегралы по всем частичным отрезкам. На каждом частичном отрезке методическая погрешность будет в k^m раз меньше, чем при применении квадратурной формулы непосредственно ко всему интервалу [a,b]. При сложении всех таких интегралов получится результат, погрешность которого будет в k^{m-1} раз меньше, чем погрешность (22), когда квадратурная формула применяется для вычисления интеграла по всему отрезку [a,b].

Разобъем исходный интервал интегрирования на частичные отрезки

$$[a,b]: a = z_0 < z_1 < z_2 < \cdots < z_k = b.$$

В самом общем случае $h_i = z_{i+1} - z_i$ предполагаются различными.

Теперь применим на каждом частичном отрезке $[z_i, z_{i+1}]$ какоенибудь квадратурное правило (в общем случае свое) для вычисления интеграла

$$J^{(i)}(f) = \int_{z_i}^{z_{i+1}} p(x)f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{n_i} A_{ij}f(x_{ij}) = S_{n_i}^{(i)}(f), \qquad (23)$$

$$R_{r_i}^{(i)}(f) = J^{(i)}(f) - S_{r_i}^{(i)}(f), \quad i = \overline{0, k-1}.$$

Просуммируем по i левые и правые части (23):

$$J(f) = \int_{a}^{b} p(x)f(x)dx = \sum_{i=0}^{k-1} J^{(i)}(f) = \sum_{i=0}^{k-1} \int_{z_{i}}^{z_{i+1}} p(x)f(x)dx \approx$$

$$\approx \sum_{i=0}^{k-1} \sum_{j=1}^{n_{i}} A_{ij}f(x_{ij}) = \sum_{i=0}^{k-1} S_{n_{i}}^{(i)}(f) = S_{N}(f), \quad N = \sum_{i=0}^{k-1} n_{i}, \quad (24)$$

$$R_{N}(f) = J(f) - S_{N}(f) = \sum_{i=0}^{k-1} R_{n_{i}}(f).$$

Определение 8. Полученное правило (24) вычисления интеграла называется *составной квадратурной формулой* (СК Φ).

В качестве квадратурных формул (23) могут быть использованы квадратурные формулы всех рассмотренных типов (интерполяционные, типа Ньютона—Котса, типа Гаусса и др.) То же самое можно сказать и о числе узлов квадратурной формулы, используемом на каждом из частичных отрезков. Оно может зависеть от номера отрезка.

В смешанной составной квадратурной формуле используется несколько типов малых формул (с одинаковым или разным числом узлов), в однородном — только одинаковые квадратурные формулы.

Пример построения СК Φ Ньютона — Котса

Разобъем интегрирования [a,b] на k равных частичных отрезков длиной $h=\frac{b-a}{k}$: $[z_{i-1},z_i],\ i=\overline{1,k},\$ где $z_i=a+ih,\ i=\overline{0,k}.$ Будем применять одно и то же квадратурное правило на каждом

частичном отрезке. Построим малую интерполяционную трёхточечную квадратурную формулу с равноотстоящими узлами

$$J^{(i)}(f) = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{f(x)}{(x-a)^{\alpha}} dx \approx A_{i1} f(z_{i-1}) + A_{i2} f\left(\frac{z_{i-1} + z_i}{2}\right) + A_{i3} f(z_i).$$

Обозначим центральную точку отрезка $[z_{i-1},z_i]$ через $z_{i-\frac{1}{2}}=\frac{z_{i-1}+z_i}{2}$. Теперь на каждом частичном отрезке считаем моменты весовой функции

$$\mu_{is} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{x^s}{(x-a)^{\alpha}} dx, \quad \alpha < 1, \quad s = 0, 1, 2.$$

$$\mu_{i0} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{1}{(x-a)^{\alpha}} dx = \frac{(z_i - a)^{1-\alpha} - (z_{i-1} - a)^{1-\alpha}}{1-\alpha},$$

$$\mu_{i1} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{x}{(x-a)^{\alpha}} dx = \frac{(z_i - a)^{2-\alpha} - (z_{i-1} - a)^{2-\alpha}}{2-\alpha} + a\mu_{i0},$$

$$\mu_{i2} = \int_{z_{i-1}}^{z_i} \frac{x^3}{(x-a)^{\alpha}} dx = \frac{(z_i - a)^{3-\alpha} - (z_{i-1} - a)^{3-\alpha}}{3-\alpha} + 2a\mu_{i1} - a^2\mu_{i0}$$

и определяем коэффициенты квадратурной формулы

$$\begin{split} A_{i1} &= \frac{\mu_{i2} - \mu_{i1}(z_{i-\frac{1}{2}} + z_i) + \mu_{i0}z_{i-\frac{1}{2}}z_i}{(z_{i-\frac{1}{2}} - z_{i-1})(z_i - z_{i-1})}, \\ A_{i2} &= -\frac{\mu_{i2} - \mu_{i1}(z_{i-1} + z_i) + \mu_{i0}z_{i-1}z_i}{(z_{i-\frac{1}{2}} - z_{i-1})(z_i - z_{i-\frac{1}{2}})}, \\ A_{i3} &= \frac{\mu_{i2} - \mu_{i1}(z_{i-\frac{1}{2}} + z_{i-1}) + \mu_{i0}z_{i-\frac{1}{2}}z_{i-1}}{(z_i - z_{i-\frac{1}{2}})(z_i - z_{i-1})}. \end{split}$$

Просуммировав по всем частичным отрезкам $[z_0, z_1], [z_1, z_2]$ и т. д.,

выпишем составную квадратурную формулу

$$\int_{a}^{b} \frac{f(x)}{(x-a)^{\alpha}} dx \approx A_{11}f(z_{0}) + A_{12}f(z_{\frac{1}{2}}) + A_{13}f(z_{1}) + A_{12}f(z_{1}) + A_{21}f(z_{1}) + A_{22}f(z_{\frac{3}{2}}) + A_{23}f(z_{2}) + \dots + A_{k,1}f(z_{k-1}) + A_{k,2}f(z_{k-\frac{1}{2}}) + A_{k,3}f(z_{k}) = A_{11}f(z_{0}) + A_{k,3}f(z_{k}) + \sum_{i=1}^{k} A_{i2}f(z_{i-\frac{1}{2}}) + \sum_{i=1}^{k-1} (A_{i,3} + A_{i+1,1})f(z_{i}).$$
(25)

Практические способы оценки погрешности составных квадратурных формул

Для представления погрешности составной квадратурной формулы (24) (в частности (25)) для широкого класса функций $f(\cdot)$ *при достаточно малой величине шага* h (в случае неравномерного разбиения — максимальной величине шага) можно написать:

$$R_N(f) = C_m h^m + O(h^{m+1}),$$
 (26)

где m — натуральное число, а $C_m = C_m(f)$ — некоторая константа, зависящая лишь от $f(\cdot)$ и типа формулы, но не зависящая от h. Под $O(h^{m+1})$ понимаются члены сходящиеся к нулю быстрее, чем h^m .

Формула (26) дает асимптотическое представление (разложение) погрешности формулы (24) по параметру h — шагу равномерного разбиения интеграрования. Она справедлива, в частности, для однородной СК Φ , в которой малые квадратурные формулы (23) имеют $\overline{\text{ACT}}\ m-1$, а функция $f(\cdot)$ — непрерывную (интегрируемую) на [a,b] производную $f^{(m)}(\cdot)$.

Замечание 3. Для смешанных СКФ, особенно с малыми формулами разной АСТ, число m зависит от соотношения и расположения малых формул по частичным отрезкам. В частности, m может быть не целым.

В этом подразделе и далее будем обозначать квадратурную сумму и погрешность однородной составной квадратурной формулы с постоянным шагом h как S_h и R_h соответственно, т. е. нижний индекс будет обозначать длину шага, а не количество вычислений $f(x_i)$, как это было раньше. Также для упрощения записи формул опустим (f) в этих обозначениях.

Практическая оценка константы C_m проводится следующим образом. Фиксируем два значения шага разбиения $h_1=h$ и $h_2=h/L$, L>1, и проводим расчеты по исследуемой квадратурной формуле на двух равномерных сетках с шагом h_1 и h_2 . Предполагаем, что для ее методической погрешности верно асимптотическое разложение (26), т.е.

$$R_{h_1} = J(f) - S_{h_1} = C_m h_1^m + O(h_1^{m+1}) = C_m h^m + O(h^{m+1})$$
 (27)

И

$$R_{h_2} = J(f) - S_{h_2} = C_m h_2^m + O(h_2^{m+1}) =$$

$$= C_m \left(\frac{h}{L}\right)^m + O\left(\left(\frac{h}{L}\right)^{m+1}\right) = \frac{C_m}{L^m} h^m + O\left(h^{m+1}\right).$$
(28)

Исключая из (27), (28) неизвестное значение интеграла J(f), найдем

$$S_{h_2} - S_{h_1} = C_m h^m \left(1 - \frac{1}{L^m} \right) + O(h^{m+1}),$$
 (29)

откуда

$$C_m = \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{h^m (1 - L^{-m})} + O(h^{m+1}).$$
(30)

Подставляя это выражение для C_m в равенства (27), (28) и отбрасывая члены более высокого порядка малости, чем h^m , найдем приближенные представления погрешностей R_{h_1} и R_{h_2} составной квадратурной формулы на рассматриваемых равномерных сетках:

$$R_{h_1} = J(f) - S_{h_1} \approx \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{1 - L^{-m}},$$
 (31)

 $^{^3}$ Карл Дави́д Тольме́ Ру́нге (нем. Carl David Tolme Runge) (1856—1927), немецкий математик, физик и спектроскопист. Внес существенный вклад в численный анализ, в частности, явился одним из разработчиков методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений, носящих теперь общее название методов типа Рунге — Кутты.

$$R_{h_2} = J(f) - S_{h_2} \approx \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{L^m - 1}.$$
 (32)

Определение 9. Представленный практический способ оценивания методической погрешности называется *правилом Рунге*.

Так при L=2 — если шаг расчёта уменьшается в два раза — погрешность составной квадратурной формулы $R_{\frac{h}{2}}$ меньше погрешности R_h почти в 2^m раз.

Используя правило Рунге, можно решить вопрос о нахождении оптимального шага разбиения h_{opt} интервала интегрирования, обеспечивающего (в первом приближении) вычисление интеграла с требуемой точностью ε :

$$\varepsilon = \left| R_{h_{opt}} \right| \approx \left| C_m h_{opt}^m \right| \approx \frac{\left| S_{h_2} - S_{h_1} \right|}{h^m \left(1 - L^{-m} \right)} h_{opt}^m = R_{h_1} \left(\frac{h_{opt}}{h} \right)^m. \tag{33}$$

Отсюда получаем приблизительный оптимальный шаг разбиения

$$h_{opt} = h \left(\frac{\varepsilon (1 - L^{-m})}{|S_{h_2} - S_{h_1}|} \right)^{\frac{1}{m}} = h_1 \sqrt[m]{\frac{\varepsilon}{|R_{h_1}|}} = h_2 \sqrt[m]{\frac{\varepsilon}{|R_{h_2}|}}.$$
(34)

Замечание 4. Находя оптимальный шаг, следует несколько уменьшить значение, получаемое по формуле (34). Во-первых, из-за приближённости вычислений значение погрешности на найденном шаге h_{opt} может быть больше предсказанного. Рекомендуется домножить h_{opt} на некий «гарантийный множитель» fac < 1, например, 0.95. Во-вторых, для вычисления интеграла по СКФ с постоянным шагом, необходимо, чтобы в отрезке [a,b] укладывалось целое число таких шагов. С этой целью следует округлить число $(b-a)/h_{opt}$ вверх, и вычислить новую длину оптимального шага, поделив b-a на найденное округлённое значение.

Merry

Метод Ричардсона⁴ → №₩₩₩₩₩

Можно повысить точность оценки погрешности, если рассматривать её асимптотическое представление в виде

$$R_h = J(f) - S_h = C_m h^m + C_{m+1} h^{m+1} + \dots + C_{m+r-1} h^{m+r-1} + O(h^{m+r}).$$
(35)

Фиксируя r и отбрасывая члены порядка h^{m+r} , получим выражение, в котором при любом известном h остаётся r+1 неизвестная величина: C_m,\ldots,C_{m+r-1} и J(f). Если теперь провести расчёты на r+1 сетке с шагами h_1,h_2,\ldots,h_{r+1} , то получим систему линейных алгебраических уравнений на перечисленные неизвестные. Решив ее, получим оценку (35) более точную, чем (26), и приближение к J(f), которое будет существенно точнее, чем любое из значений $S_{h_1},\ldots,S_{h_{r+1}}$.

Определение 10. Этот подход к оценке методической погрешности называется методом Pичарdсонa, а приближение к J(f) — yточнением по Pичарdсонy.

Для случая r=1 получаем оценку, совпадающую с правилом Рунге. В этом случае также можно использовать уточнение по Ричардсону, более точное чем S_{h_1} и S_{h_2} (помним, что $h_1=Lh_2$):

$$J(f) \approx S_{h_1} + \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{1 - L^{-m}} = S_{h_2} + \frac{S_{h_2} - S_{h_1}}{L^m - 1}.$$

Замечание 5. Для каждой конкретной функции $f(\cdot)$ величина C_m (как и C_{m+1} , и последующие) и скорость сходимости m становятся постоянными только при достаточно малых h. Часто при длинах шагов, используемых в практических вычислениях, нельзя быть уверенным в том, что процесс сходится со скоростью ACT+1. Величина h, для которой асимптотическая оценка (26) становится верна, зависит от задачи и от веса $p(\cdot)$. Как правило, для $p(\cdot) \equiv 1$ устойчивая сходимость достигается при больших длинах шага, чем в других случаях.

⁴ Лью́ис Фрай Ри́чардсон (англ. Lewis Fry Richardson) (1881–1953), английский математик, физик, метеоролог, психолог и пацифист, впервые применивший современные математические методы прогнозирования погоды и приложения подобных методов для изучения причин возникновения войн и их предотвращения. Также разработал метод решения систем линейных уравнений, известный как модифицированные итерации Ричардсона, и одним из первых стал изучать фракталы.

В случае если неизвестен порядок главного члена погрешности m или нет уверенности в том, что шаг h достаточно мал, чтобы значение C_m перестало заметно меняться при его изменении, можно оценить практическую скорость сходимости приближения S_h к J(f) при уменьшающемся h. В отличие от правила Рунге, кроме J(f) и C_m неизвестным становится ещё и само число m, и для его определения используется третья сетка.

Пусть $h_1=h,\ h_2=h_1/L$ и $h_3=h_2/L=h_1/L^2,\ L>1.$ Тогда, используя (29) и отбрасывая члены порядка $h^{m+1},$ получаем

$$\frac{S_{h_{3}}-S_{h_{2}}}{S_{h_{2}}-S_{h_{1}}} \approx \frac{C_{m} \left(\frac{h}{L}\right)^{m} \left(1-\frac{1}{L^{m}}\right)}{C_{m} h^{m} \left(1-\frac{1}{L^{m}}\right)} = \frac{1}{L^{m}}.$$

Отсюда,

$$m \approx -\frac{\ln \frac{S_{h_3} - S_{h_2}}{S_{h_2} - S_{h_1}}}{\ln L}.$$
 (36)

Заметим, что если асимпотическая сходимость для данного h ещё не достигнута, то значения $S_{h_1},\ S_{h_2}$ и S_{h_3} могут находиться с разных сторон от точной величины интеграла J(f). В этом случае под логарифмом в числителе (36) может оказаться отрицательное число, а оценка m окажется слишком грубой, даже если «схитрить» и вычислить её, взяв логарифм в числителе от модуля выражения. С другой стороны, иногда это лучшее, что можно сделать.

Задание для самостоятельного выполнения

Цель задания

Убедиться в необходимости использования квадратурных формул для вычисления «неберущихся» определенных интегралов. Попытаться вычислить предложенный интеграл методом (3). Убедиться в необходимости применения более сложных правил интегрирования, рассчитанных на узкий класс задач.

 $^{^5}$ Алекса́ндр Крейг Э́йткен (англ. Alexander Craig Aitken) (1895—1967), новозеландский математик, разработал обобщённый метод наименьших квадратов, а также ввёл общепринятые теперь векторно-матричные обозначения для линейной регрессионной модели.

Ознакомиться с двумя наиболее распространенными классами квадратурных формул — формулами Ньютона — Котса и Гаусса — и с вычислением интегралов от разрывных функций.

Научиться управлять численным процессом с целью обеспечения заданной точности за приемлемое время, используя составные $K\Phi$ и практические способы оценки погрешности и выбора оптимального разбиения.

Содержание задания

Для заданного набора значений параметров вычислить интеграл

$$\int_{a}^{b} \frac{f(x)}{(x-a)^{\alpha}(b-x)^{\beta}} dx \tag{37}$$

с заданной точностью ε с использованием двух типов формул. Найти «точное» значение интеграла для сверки получаемых численных результатов с помощью какой-нибудь компьютерной системы научных вычислений.

Вариант Ньютона — Котса

- Построить интерполяционную квадратурную формулу с весовой функцией $p(x)=(x-a)^{-\alpha}(b-x)^{-\beta}$ на отрезке [a,b] по трём равномерно распределённым узлам $x_1=a, x_2=(a+b)/2, x_3=b$. Оценить методическую погрешность построенного правила (11), сравнить её с точной погрешностью.
- На базе построенной малой ИКФ построить составную КФ и, уменьшая длину шага h, добиться заданной точности $\varepsilon=10^{-6}$. Погрешность оценивать методом Ричардсона. На каждых последовательных трёх сетках оценивать скорость сходимости по правилу Эйткена.
- Проведя вычисления по трём грубым сеткам с малым числом шагов (например, 1, 2 и 4) использовать оценку скорости сходимости и выбрать оптимальный шаг h_{opt} . Начать расчёт с шага h_{opt} и снова довести до требуемой точности ε .

Вариант Гаусса

Выполнить всё то же самое, используя трёхточечные формулы Гаусса вместо формул Ньютона—Котса. Узлы каждой малой формулы находить либо с помощью формул Кардано, либо численно.

Обратите внимание, что из-за ограниченности разрядной сетки при хранении чисел и большой чувствительности полиномов к погрешностям в их коэффициентах, может оказаться так, что узлы формул Гаусса, находимые как корни узлового многочлена, будут выходить за границы отрезка интегрирования, что не позволит найти с их помощью решение задачи.

Варианты заданий

1.
$$f(x) = 2\cos(2.5x)\exp(x/3) + 4\sin(3.5x)\exp(-3x) + x$$
,
 $a = 1.5, b = 3.3, \alpha = 1/3, \beta = 0$;

2.
$$f(x) = 3\cos(0.5x)\exp(x/4) + 5\sin(2.5x)\exp(-x/3) + 2x$$
,
 $a = 1.7, b = 3.2, \alpha = 0, \beta = 1/4$;

3.
$$f(x) = 2.5\cos(2x)\exp(2x/3) + 4\sin(3.5x)\exp(-3x) + 3x$$
,
 $a = 0.1, b = 2.3, \alpha = 1/5, \beta = 0$;

4.
$$f(x) = 3\cos(3.5x)\exp(4x/3) + 2\sin(3.5x)\exp(-2x/3) + 4x$$
,
 $a = 1, b = 3, \alpha = 0, \beta = 1/6$;

5.
$$f(x) = \cos(1.5x) \exp(2x/3) + 3\sin(5.5x) \exp(-2x) + 2$$
,
 $a = 2.5, b = 4.3, \alpha = 2/7, \beta = 0$;

6.
$$f(x) = 4\cos(0.5x)\exp(-5x/4) + 2\sin(4.5x)\exp(x/8) + 2$$
,
 $a = 1.3, b = 2.2, \alpha = 0, \beta = 5/6$;

7.
$$f(x) = 4.5\cos(7x)\exp(-2x/3) + 1.4\sin(1.5x)\exp(-x/3) + 3$$
,
 $a = 2.1, b = 3.3, \alpha = 2/5, \beta = 0$;

8.
$$f(x) = 3.7\cos(1.5x)\exp(-4x/3) + 2.4\sin(4.5x)\exp(2x/3) + 4$$
,
 $a = 1.8, b = 2.3, \alpha = 0, \beta = 3/5$;

9.
$$f(x) = 3\cos(1.5x)\exp(x/4) + 4\sin(3.5x)\exp(-3x) + 4x$$
,
 $a = 2.5, b = 3.3, \alpha = 2/3, \beta = 0$;

10.
$$f(x) = 1.3\cos(3.5x)\exp(2x/3) + 6\sin(4.5x)\exp(-x/8) + 5x$$
,
 $a = 0.7, b = 3.2, \alpha = 0, \beta = 1/4$;

- 11. $f(x) = 0.5\cos(2x)\exp(2x/5) + 2.4\sin(1.5x)\exp(-6x) + 6x$, $a = 1.1, b = 2.5, \alpha = 2/5, \beta = 0$;
- 12. $f(x) = 4\cos(2.5x)\exp(4x/7) + 2.5\sin(5.5x)\exp(-3x/5) + 4.3x$, $a = 1.8, b = 2.9, \alpha = 0, \beta = 4/7$;
- 13. $f(x) = 2\cos(3.5x)\exp(5x/3) + 3\sin(1.5x)\exp(-4x) + 3$, $a = 1.5, b = 2.3, \alpha = 1/5, \beta = 0$;
- 14. $f(x) = 3\cos(2.5x)\exp(7x/4) + 5\sin(0.5x)\exp(3x/8) + 4$, $a = 2.3, b = 2.9, \alpha = 0, \beta = 2/5$;
- 15. $f(x) = 3.5\cos(0.7x)\exp(-5x/3) + 2.4\sin(5.5x)\exp(-3x/4) + 5$, $a = 1.1, b = 2.3, \alpha = 4/5, \beta = 0$;
- 16. $f(x) = 2.7\cos(3.5x)\exp(-7x/3) + 4.4\sin(2.5x)\exp(5x/3) + 2$, $a = 2.8, b = 4.3, \alpha = 0, \beta = 3/7$;
- 17. $f(x) = 6\cos(1.5x)\exp(5x/3) + 2\sin(0.5x)\exp(-1.3x) + 5.4x$, $a = 3.5, b = 3.7, \alpha = 2/3, \beta = 0$;
- 18. $f(x) = 4\cos(2.5x)\exp(5x/4) + 2.5\sin(1.5x)\exp(-2x/7) + 5x$, $a = 2.7, b = 3.2, \alpha = 0, \beta = 3/4$;
- 19. $f(x) = 0.5\cos(3x)\exp(2x/5) + 4\sin(3.5x)\exp(-3x) + 3x$, $a = 1.1, b = 2.3, \alpha = 2/5, \beta = 0$:
- 20. $f(x) = 1.5\cos(3.7x)\exp(4x/7) + 3\sin(2.5x)\exp(3x/4) + 3x$, $a = 1.5, b = 3, \alpha = 0, \beta = 5/6$;
- 21. $f(x) = 3\cos(2.5x)\exp(4x/3) + 4\sin(5.5x)\exp(-3.5x) + 3$, $a = 2.5, b = 4.3, \alpha = 2/7, \beta = 0$;
- 22. $f(x) = 5\cos(0.3x)\exp(-7x/4) + 7\sin(0.5x)\exp(2x/3) + 4$, $a = 0.5, b = 2.2, \alpha = 0, \beta = 3/5$;
- 23. $f(x) = 2.5\cos(5.7x)\exp(-4x/3) + 2.4\sin(2.5x)\exp(-3x/3) + 7$, $a = 0.2, b = 3.1, \alpha = 3/5, \beta = 0$;
- 24. $f(x) = 5.7\cos(2.5x)\exp(-4x/7) + 4.4\sin(4.3x)\exp(2x/7) + 5$, $a = 0.8, b = 1.3, \alpha = 0, \beta = 4/7$.

Литература

- 1. Крылов В. И. Приближенное вычисление интегралов, 2-е изд. М.: Наука, 1967. 500 с.
- 2. Вержбицкий В. М. Основы численных методов: учебник для вузов М.: Директ-Медиа, 2013. 847 с.
- 3. Калиткин Н. Н. Численные методы: учебное пособие, 2-е изд. СПб: БХВ-Петербург, 2011. 592 с.
- 4. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы, 8-е изд. М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2015. 639 с.