ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ И ИНТЕГРИРОВАНИЕ

§1.1. Численное дифференцирование

В этом разделе рассмотрим способы конструирования формул, позволяющих вычислять приближенные значения производных от функции, заданной таблицей значений. Пусть в точках x_i $(i=\overline{0,n})$ известны значения функции $y_i = f(x_i)$. Простейший способ построения формул численного дифференцирования состоит в следующем. По табличным данным приближаем функцию интерполяционным полиномом. Дифференцируя полином нужное число раз, получаем требуемую формулу.

Например, при использовании полинома n-й степени имеем

$$f(x) = P_n(x) + R_n(x),$$

где $R_n(x)$ – ошибка интерполяции (или остаточный член интерполирования). Соответственно для k-й производной от функции $f(x)$ на отрезке интерполирования $\left[x_0, x_n\right]$ получаем приближенную формулу

$$\frac{d^k f}{dx^k} \approx \frac{d^k P_n(x)}{dx^k},$$

погрешность которой характеризуется k-й производной от ошибки интерполяции

$$\frac{d^k R_n(x)}{dx^k}.$$

Анализ погрешности формул численного дифференцирования, опирающийся на дифференцирование остаточного члена, затруднен тем, что выражение для последнего

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n)$$

содержит неявную зависимость от x через $\xi = \xi\left(x\right) \in \left[x_0, x\right]$. Тем не менее, именно такой способ исследования погрешности реализован во многих литературных источниках. Рассмотрим ниже другой подход к анализу точности формул численного дифференцирования.

Примеры. Пусть надо приблизить производные функции *f(x)* в окрестности табличной точки $x \approx x_i$. Далее мы будем полагать, что табличные точки равноотстоят друг от друга, то есть $x_i = x_0 + ih$. Это непринципиально с точки зрения рассматриваемого способа конструирования приближенных формул для производных, просто формулы будут выглядеть проще.

а) Приблизим в рассматриваемой окрестности функцию полиномом первой степени:

$$f(x) \approx p_1(x) = f_i + \frac{f_{i+1} - f_i}{h}(x - x_i).$$

Тогда в окрестности табличной точки $x \approx x_i$

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \approx x_i} \approx \frac{dp_1(x)}{dx} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \ .$$

Используя кусочно-линейную интерполяцию, можно было бы приблизить $f(x)$ в рассматриваемой окрестности и так

$$f(x) \approx \overline{p_1}(x) = f_i + \frac{f_i - f_{i-1}}{h}(x - x_i)$$

Отсюда

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \approx x_i} \approx \frac{d\,\overline{p_1}(x)}{dx} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}$$

Мы получили простейшие приближенные формулы для первой производной от функции, заданной таблично: в первой приближенной формуле – ***правое разностное отношение,*** во второй – ***левое разностное отношение***, соответственно. Очевидно, что можно было бы их написать сразу, опираясь на определение производной от функции и не привлекая интерполяцию в качестве промежуточного этапа. Ясно также, что для получения приближенных формул для второй и высших порядков производных линейного приближения функции недостаточно.

б) Приблизим в рассматриваемой окрестности функцию полиномом второй степени

$$f(x) \approx p_2(x) = f_i + \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}(x - x_i) + \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2h^2}(x - x_i)^2 \ .$$

Легко проверяется, что это интерполяционный полином, построенный по значениям функции в точках $\{x_{i-1}, x_i, x_{i+1}\}$. Здесь использована такая форма записи потому, что она компактней сравнительно с ньютоновской, тем более с лагранжевой формами. Дифференцируя один раз, получаем новую приближенную формулу для первой производной

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \approx x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}(x - x_i)$$

Здесь, в отличие от правого и левого разностных отношений, приближение зависит от *x*. В частности, для $x = x_i$ имеем

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x = x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}.$$

Это так называемое ***центральное разностное отношение***.

Дифференцируя полином два раза, получаем приближенную формулу для второй производной

$$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x \approx x_i} \approx \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2}.$$

Аналогичным образом, привлекая интерполяцию более высокого порядка, можно получать новые формулы для первой и второй производных и формулы для высших производных.

§1.2. Погрешность формул численного дифференцирования

Отметим, что любая формула для приближения любой производной в конкретной точке имеет следующую структуру

$$\frac{d^k f}{dx^k} \approx \sum c_i f_i \ ,$$

(c_i – постоянные коэффициенты), где суммирование производится по некоторому диапазону табличных данных. Анализ погрешности этой формулы сводится к следующему. Предполагая необходимую гладкость функции $f(x)$, заменяем все входящие в правую часть формулы значения f_i по формулам Тейлора *относительно точки, для которой рассматривается приближение*. После проведения простых арифметических выкладок в качестве главного члена правой части получим приближенное значение производной. Остальные члены будут характеризовать погрешность.

Пример. Оценить погрешность формулы

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \square x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

для точки $x \in \left[x_i, x_{i+1}\right]$. Заменяем f_i и f_{i+1} по формулам Тейлора относительно точки x

$$f_{i+1} = f(x) + f'(x)(x_{i+1} - x) + \frac{1}{2} f''(x)(x_{i+1} - x)^2 + \frac{1}{6} f'''(\xi)(x_{i+1} - x)^3,$$

$$f_i = f(x) + f'(x)(x_i - x) + \frac{1}{2} f''(x)(x_i - x)^2 + \frac{1}{6} f'''(\eta)(x_i - x)^3.$$

Последние слагаемые представляют собой остаточные члены, так что $\xi \in \left[x, x_{i+1}\right]$, $\eta \in \left[x_i, x\right]$. Подставляя эти выражения в правую часть $\dfrac{f_{i+1} - f_i}{h}$ приближенного равенства, получаем

$$\frac{f_{i+1} - f_i}{h} = \frac{1}{h}\{ f'(x)(x_{i+1} - x_i) + \frac{1}{2} f''(x)\left[(x_{i+1} - x)^2 - (x_i - x)^2\right] +$$

$$+\frac{1}{6} f'''(\xi)(x_{i+1} - x)^3 - \frac{1}{6} f'''(\eta)(x_{i+1} - x)^3\} =$$

$$= f'(x) + \frac{1}{2} f''(x)(x_{i+1} + x_i - 2x) + \frac{1}{6} f'''(\xi)\frac{(x_{i+1} - x)^3}{h} - \frac{1}{6} f'''(\eta)\frac{(x_i - x)^3}{h}.$$

Таким образом, погрешность формулы для произвольной точки $x \in \left[x_i, x_{i+1}\right]$

$$\Delta = \left| f'(x) - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right| \le M_2 \left| \frac{x_{i+1} + x_i}{2} - x \right| + \frac{M_3}{3} h^2 \ ,$$

где $M_2 = \max\limits_{[x_i, x_{i+1}]} \left| f''(x) \right|$, $M_3 = \max\limits_{[x_i, x_{i+1}]} \left| f'''(x) \right|$.

Для значений $x = \dfrac{x_{i+1} + x_i}{2}$ погрешность $\Delta = O(h^2)$. Для остальных x погрешность $\Delta \le \dfrac{M_2 h}{2}$, то есть формула

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x \,\Box\, x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

является в общем случае формулой первого порядка точности, но для середины интервала она обеспечивает второй порядок. Вообще говоря, второй порядок точности достигается для всех точек x, таких, что $\left| x - \dfrac{x_{i+1} + x_i}{2} \right| = O(h^2)$

.

§1.3. Неустойчивость численного дифференцирования.

Речь пойдет о влиянии погрешностей входных данных на результат вычисления производных по формулам численного дифференцирования. Разберемся с сутью вопроса на конкретном примере.

Пусть в точках $\{x_i, i = 1, 2, ..., n\}$ заданы значения функции $\{ f_i \}$, которые отличаются от точных значений $f_i = f(x_i)$: $f_i = f_i \pm \delta_i$ (δ_i – погрешности табличных данных). Как правило, оценка абсолютных погрешностей исходных данных $\delta = \max\limits_i \delta_i$ является известной величиной.

Пусть в точке $x = x_i$ нужно приблизить первую производную от функции $f(x)$. Используем для этой цели какую-либо приближенную формулу, для определенности – простейшую

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x = x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \ .$$

Ее погрешность

$$\Delta = \left| \frac{df}{dx} - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right| = \left\| \left[\frac{df}{dx} - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right] + \left| \frac{f_{i+1} - f_i}{h} - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right\| \le$$

$$\le \left| \frac{df}{dx} - \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \right| + \left| \frac{f_{i+1} - f_{i+1}}{h} \right| + \left| \frac{f_i - f_i}{h} \right|.$$

Первое слагаемое представляет собой ошибку метода и согласно оценке, полученной ранее, не превосходит $\dfrac{M_2 h}{2}$, где $M_2 = \max\limits_{[x_i, x_{i+1}]} \left| f''(x) \right|$.

Учитывая это, получаем

$$\Delta \le \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\delta}{h} = \Phi(h).$$

Очевидно, при $h \approx \delta$ неустранимая погрешность может стать величиной порядка $O(1)$.

В этом проявляется неустойчивость численного дифференцирования: ***погрешности табличных данных могут как угодно сильно исказить вычисляемый по приближенной формуле результат***.

Как видно из полученной оценки, существует оптимальный шаг $h_{опт}$, при котором оценка для возможной ошибки минимальна. Найдем его:

$$\frac{d\Phi(h)}{dh} = \frac{M_2}{2} - \frac{2\delta}{h^2} = 0 .$$

Отсюда $h_{опт} = 2\sqrt{\dfrac{\delta}{M_2}}$. При этом

$$\Phi(h_{опт}) = \frac{M_2}{2} 2\sqrt{\frac{\delta}{M_2}} + 2\delta \frac{1}{2}\sqrt{\frac{M_2}{\delta}} = 2\sqrt{M_2\delta} .$$

Таким образом, в лучшем случае (при оптимальном шаге) можно лишь гарантировать, что производная от $f(x)$, вычисленная по формуле

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_{x = x_i} \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{h} ,$$

может отличаться от точного значения не более, чем на $2\sqrt{M_2\delta}$. Если, например, $\delta \le 0{,}01$, то $\Delta \approx 0{,}1$ (при $M_2 \approx 1$). Точно так же для любой другой формулы численного дифференцирования при известных оценках для величин производных от $f(x)$, требуемых при анализе, может быть найден вклад в итоговую ошибку неустранимых погрешностей входных данных и оптимальный шаг, при котором суммарная погрешность минимизируется.

§2.1. Численное интегрирование

Речь пойдет о методах вычисления значения определенного интеграла

$$J = \int_a^b f(x)dx .$$

Рассмотрим здесь простейшие, но в то же время широко используемые в практических вычислениях формулы: прямоугольников (с центральной точкой), трапеций, Симпсона.

Способ их получения состоит в следующем. Разобьем отрезок интегрирования $[a,b]$ на N элементарных шагов. Точки разбиения x_n $(n = 0,1,...,N)$; $h_n = x_{n+1} - x_n$, так что $\sum_{n=0}^{N-1} h_n = b - a$. Точки x_n называют ***узлами***, h_n – ***шагами интегрирования*** (в частном случае шаг интегрирования может быть постоянным $h = \dfrac{b-a}{N}$). Также будем пользоваться обозначением $f_i = f(x_i)$.·

Искомое значение интеграла представим в виде

$$J = \sum_{n=0}^{N-1} \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)dx = \sum_{n=0}^{N-1} J_n \text{ где } J_n = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)dx \ .$$

Формула прямоугольников. Считая шаг h_n малым, заменим J_n в предыдущем равенстве площадью прямоугольника с основанием h_n и высотой $f_{n+\frac{1}{2}} = f(x_n + \frac{h_n}{2})$. Тогда придем к локальной формуле прямоугольников

$$J_n = h_n f_{n+\frac{1}{2}} .$$

Суммируя приближенные значения по всем элементарным отрезкам, получаем ***формулу средних прямоугольников*** (или с центральной точкой) для вычисления приближения к J

$$J = \sum_{n=0}^{N-1} h_n f_{n+\frac{1}{2}} \ .$$

В частном случае, когда $h_n = h = const$, формула прямоугольников записывается в виде

$$J = h \sum_{n=0}^{N-1} f_{n+\frac{1}{2}} \ .$$

Можно конструировать аналогичные формулы, используя в качестве высоты элементарных прямоугольников значение $f(x)$ не в середине отрезков, а, например, на границе (левой или правой – получим, соответственно, ***формулы левых или правых прямоугольников***). Но в этом случае существенно ухудшается точность вычисляемого результата.

Формула трапеций. На элементарном отрезке $\left[x_n, x_{n+1}\right]$ заменим подынтегральную функцию интерполяционным полиномом первой степени

$$f(x) \approx f_n + \frac{f_{n+1} - f_n}{x_{n+1} - x_n}(x - x_n) \ .$$

Выполняя интегрирование по отрезку, приходим к локальной ***формуле трапеций***

$$J_n = \frac{1}{2}(x_{n+1} - x_n)(f_{n+1} + f_n) = \frac{1}{2}h_n(f_{n+1} + f_n) \ .$$

Название связано с тем, что интеграл по элементарному отрезку заменяется площадью трапеции с основаниями, равными значениям $f(x)$ на краях отрезка, и высотой, равной h_n.

Суммируя J_n по всем отрезкам, получаем формулу трапеций для вычисления приближения к J

$$J = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{N-1} h_n(f_n + f_{n+1})$$

В случае постоянного шага интегрирования формула принимает вид

$$J = \frac{h}{2}\sum_{n=0}^{N-1}(f_n + f_{n+1}) = \frac{h}{2}\left[f_0 + 2f_1 + \dots + 2f_{N-1} + f_N \right] .$$

Формула Симпсона. На элементарном отрезке $\left[x_n, x_{n+1}\right]$, привлекая значение функции в середине, заменим подынтегральную функцию интерполяционным полиномом второй степени

$$f(x) \approx P_2(x) = f_{\frac{n+1}{2}} + \frac{f_{n+1} - f_n}{h_n}\left[x - \frac{x_{n+1} + x_n}{2}\right] +$$
$$+ \frac{f_{n+1} - 2f_{\frac{n+1}{2}} + f_n}{2\left(\frac{h_n}{2}\right)^2}\left[x - \frac{x_{n+1} + x_n}{2}\right]^2$$

(напомним, что $h_n = x_{n+1} - x_n$, $f_n = f(x_n)$, $f_{n+\frac{1}{2}} = f\left(x_n + \frac{h_n}{2}\right)$). Вычисляя интеграл от полинома по отрезку $\left[x_n, x_{n+1}\right]$, приходим к локальной формуле Симпсона

$$J_n = \frac{h_n}{6}\left[f_n + 4f_{n+\frac{1}{2}} + f_{n+1} \right] .$$

Суммируя по всем отрезкам, получаем формулу Симпсона для вычисления приближения к J

$$J = \frac{1}{6}\sum_{n=0}^{N-1} h_n\left[f_n + 4f_{n+\frac{1}{2}} + f_{n+1} \right] .$$

Для постоянного шага интегрирования $h_n = const = h = \frac{b-a}{N}$ формула принимает вид

$$J = \frac{h}{6}\sum_{n=0}^{N-1}\left[f_n + 4f_{n+\frac{1}{2}} + f_{n+1} \right] =$$
$$= \frac{h}{6}\left(f_0 + 4f_{\frac{1}{2}} + 2f_1 + 4f_{\frac{3}{2}} + \dots + 2f_{N-1} + 4f_{\frac{N-1}{2}} + f_N \right)$$

Иногда последнюю формулу записывают без использования дробных индексов в виде

$$J = \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N \right).$$

К этой записи приходим, если под локальной формулой понимать результат интегрирования по паре элементарных отрезков

$$J_n = \int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} P_2(x)dx = \frac{h}{3}\left(f_{n-1} + 4f_n + f_{n+1} \right),$$

где $P_2(x)$ – интерполяционный полином второй степени для $f(x)$ на $\left[x_{n-1}, x_{n+1}\right]$, построенный по значениям в точках x_{n-1}, x_n, x_{n+1}. Шаг h здесь предполагается постоянным. Суммируя локальные приближения по всем парам и получим вторую формулу. Разумеется, число пар на $\left[a,b\right]$ в этом случае должно быть целым, то есть N – четным.

Формулы, построенные таким образом и используемые для приближенного вычисления интеграла, называются ***квадратурными***.

§2.2. Погрешность квадратурных формул

Один из возможных способов оценки точности построенных формул состоит в следующем. Рассмотрим интеграл по элементарному отрезку

$$J_n = \int\limits_{x_n}^{x_{n+1}} f(x)dx$$

Выберем на этом отрезке какую-либо «опорную» точку x=z и представим подынтегральную функцию по формуле Тейлора относительно этой точки

$$f(x) = f(z) + f'(z)(x-z) + \frac{1}{2} f''(z)(x-z)^2 + \cdots + R(x-z) \ ,$$

где $R(x-z)$ – остаточный член используемой формулы Тейлора. Вычисляя интеграл от последней суммы, получаем представление J_n виде

$$J_n = f(z)h_n + A_2 h_n^2 + A_3 h_n^3 + \cdots + \int\limits_{x_n}^{x_{n+1}} R(x-z)dx,$$

где коэффициенты $A_2, A_3,$ ... зависят от производных $f'(z), f''(z),$...

Заметим далее, что каждая из рассматриваемых квадратурных формул (прямоугольников, трапеций и Симпсона) в пределах элементарного отрезка $\left[x_n, x_{n+1}\right]$ может быть представлена в виде

$$J_n = h\left[rf_n + sf_{n+\frac{1}{2}} + qf_{n+1} \right]$$

со своими коэффициентами r, s, q. Заменяя в последней формуле каждое из значений функции f по формуле Тейлора относительно той же точки z, получим представление приближенного значения J_n также в виде, аналогичном J_n

$$J_n = f(z)h_n + B_2 h_n^2 + B_3 h_n^3 + \cdots + R \ .$$

Сравнивая представления J_n и J_n, обнаруживаем, что наряду с первым слагаемым в них совпадает еще некоторое количество (p–1) слагаемых, так что $A_2 = B_2$, $A_3 = B_3$, ... Разность несовпадающих слагаемых будет, очевидно, характеризовать ошибку квадратурной формулы. Оценивая величину этой разности, приходим к оценке для локальной (на интервале $\left[x_n, x_{n+1}\right]$) погрешности

$$\left|J_n - J_n\right| \le D \max_{[x_n, x_{n+1}]} \left| f_n^{(p)} \right| h_n^{p+1},$$

где D – числовая константа, а $f^{(p)}$ – p-я производная функции $f(x)$.

Суммируя локальные погрешности по всем интервалам, получим требуемую оценку погрешности рассматриваемой формулы:

$$\left|J_n - J_n\right| \le D(b-a) M_p \bar{h}^p,$$

где $M_p = \max\left|f^{(p)}\right|$ по всему отрезку $[a,b]$, а $\bar{h} = \max\limits_n h_n$, если $h_n \ne const$. Степень p принято называть ***порядком точности квадратурной формулы***.

Для рассмотренных здесь квадратурных формул получаемые таким образом оценки погрешности имеют вид:

формула прямоугольников: $\left|J_n - J_n\right| \le \dfrac{1}{24}(b-a) M_2 \bar{h}^2$;

формула трапеций: $\left|J_n - J_n\right| \le \dfrac{1}{12}(b-a) M_2 \bar{h}^2$;

формула Симпсона: $\left|J_n - J_n\right| \le \dfrac{1}{2880}(b-a) M_4 \bar{h}^4$;

формула Симпсона с постоянным шагом: $\left|J_n - J_n\right| \le \dfrac{1}{180}(b-a) M_4 h^2$.

От выбора «опорной» точки результат не зависит. Например, для оценки погрешности формул прямоугольников и Симпсона целесообразно взять в качестве z середину отрезка $[x_n, x_{n+1}]$ (выкладки при этом упрощаются).

Полученные оценки, как следует из их вида, зависят от гладкости подынтегральной функции. Например, если $f(x)$ только трижды непрерывно дифференцируема на $[a,b]$, то оценка погрешности формулы Симпсона ухудшается на порядок.

Если известны оценки для абсолютных величин соответствующих производных, то, используя оценки погрешности приведенных квадратурных формул, можно априори (до проведения расчета) определить шаг интегрирования $h=const$, при котором погрешность вычисленного результата гарантировано не превышает допустимого уровня погрешности ε. Для этого достаточно решить относительно h неравенство $D(b-a)M_p h^p \le \varepsilon$.

Однако типичной является ситуация, когда величины нужных производных не поддаются оценке. Тогда контроль за точностью вычисляемых результатов можно организовать, проводя вычисления на последовательно сгущающейся сетке узлов интегрирования.

Контроль за точностью вычисляемого значения интеграла реализуется с помощью следующего алгоритма. Пусть шаг интегрирования $h=const$, $J^{(h)}$ – вычисленное с шагом h приближение к J. Если, далее, вычислено также приближенное значение $J^{\left(\frac{h}{2}\right)}$ с шагом $\dfrac{h}{2}$, то в качестве приближенной оценки погрешности последнего вычисленного значения можно рассматривать величину

$$\left| J^{\left(\frac{h}{2}\right)} - J \right| \approx \left| J^{\left(\frac{h}{2}\right)} - J^{(h)} \right|.$$

При необходимости вычислить результат с требуемой точностью ε вычисления повторяются с последовательно уменьшающимся (вдвое) шагом до тех пор, пока не выполнится условие

$$\left| J^{\left(\frac{h}{2}\right)} - J^{(h)} \right| \le \varepsilon .$$

Организованная таким образом процедура вычислений и есть ***счет с автоматическим выбором шагов интегрирования***. Можно применять указанное правило для контроля за локальной погрешностью на каждом элементарном интервале. При этом длина очередного интервала $h_n = x_{n+1} - x_n$, посредством последовательного уменьшения (или увеличения!) начальной длины вдвое, устанавливается такой, чтобы локальная погрешность удовлетворяла неравенству

$$\left| J_n - J_n \right| \approx \left| J^{\left(\frac{h}{2}\right)} - J^{(h)} \right| \le \varepsilon \frac{h_n}{b-a}.$$

Тогда в худшем случае ошибка вычисленного значения по всему отрезку интегрирования не будет превосходить сумму локальных погрешностей $\sum\limits_n \varepsilon \dfrac{h_n}{b-a} = \varepsilon$, то есть не будет превосходить заданного уровня погрешности.

Способ вычисления с автоматическим выбором имеет то преимущество, что он «приспосабливается» к особенностям подынтегральной функции: в областях резкого изменения функции шаг уменьшается, а там, где функция меняется слабо, – увеличивается.

§2.3. Устойчивость квадратурных формул

При численном интегрировании влияние погрешностей входных данных на результат вычислений вполне умеренно. В самом деле, любая из рассмотренных нами квадратурных формул может быть представлена в виде

$$J = \sum c_i f_i$$

($c_i > 0$ – постоянные коэффициенты), где суммирование производится по всем узлам интегрирования. Нетрудно понять, что $\sum c_i \equiv b - a$. В самом деле, любая квадратурная формула дает точный результат, если f=*const*, в частности при f=1. Таким образом, для $f_i = f_i \pm \delta_i$ имеем

$$\left| J - J \right| = \left| J - \sum c_i f_i \right| = \left| \left(J - \sum c_i f_i \right) + \left(\sum c_i f_i - \sum c_i f_i \right) \right| \le$$

$$\le \left| \left(J - \sum c_i f_i \right) \right| + \sum c_i \left| f_i - f_i \right| .$$

Первое слагаемое в правой части неравенства – ошибка метода, второе – неустранимая погрешность, обусловленная погрешностями входных данных. Для последней получаем оценку

$$\sum c_i \left| f_i - f_i \right| \le \delta \sum c_i = \delta(b-a),$$

то есть неустранимая погрешность при вычислениях по квадратурным формулам остается ограниченной (и является величиной порядка погрешности самих входных данных, если длина отрезка интегрирования порядка единицы).

§2.4. Приемы вычисления несобственных интегралов

Имеются в виду сходящиеся интегралы двух типов:

$$1.\int_a^b f(x)dx, \text{ причем } f(x)\xrightarrow[x\to a]{}\infty,\ 2.\int_a^\infty f(x)dx.$$

Второй интеграл, вообще говоря, может быть сведен к первому заменой переменной интегрирования $t=\frac{1}{x}$. Поэтому пока будем говорить об интегралах первого типа.

Очевидно, непосредственное использование квадратурных формул трапеций и Симпсона для вычисления таких интегралов невозможно (так как точка x=a, в которой подынтегральная функция не определена, является для этих формул узлом интегрирования). По методу прямоугольников вычисления формально провести можно, но результат будет сомнительным, так как оценка погрешности теряет смысл (производные подынтегральной функции не ограничены).

Продемонстрируем приемы, которые позволяют получать надежные результаты в подобных случаях, на примере интеграла

$$J=\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}dx \ .$$

а) Иногда подходящая замена переменной интегрирования позволяет вообще избавиться от особенности. В рассматриваемом примере после замены $x=t^2$ получаем

$$J=2\int_0^1 \cos\left(t^2\right)dt,$$

и интеграл вычисляется с требуемой точностью по любой из квадратурных формул.

б) Та же цель (избавление от особенности) достигается иногда предварительным интегрированием по частям:

$$J=\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}}dx=\left|\begin{matrix} u=\cos x & dv=\frac{1}{\sqrt{x}} \\ du=-\sin x & v=2\sqrt{x}\end{matrix}\right| = 2\sqrt{x}\cos x\Big|_0^1 + 2\int_0^1 \sqrt{x}\sin x dx.$$

Последний интеграл формально может быть вычислен стандартным образом, но оценка погрешности для любой квадратурной формулы будет иметь лишь первый порядок, так как при $x=0$ не существует второй производной от подынтегральной функции. Проводя еще пару раз интегрирование по частям, придем к интегралу от дважды непрерывно дифференцируемой функции, который с гарантированной точностью может быть вычислен по формулам трапеций или прямоугольников.

в) Если упомянутыми простыми средствами избавиться от особенности не удается, то прибегают к универсальному методу выделения особенности. В нашем случае представим интеграл в виде суммы двух:

$$J = J_1 + J_2,\ \ J_1 = \int_0^{\delta} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx,\ \ J_2 = \int_{\delta}^{1} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx\,.$$

Второй интеграл особенности не содержит и вычисляется по любой квадратурной формуле (вопрос о выборе δ обсуждается ниже). Первый интеграл с требуемой точностью вычисляем аналитически, используя представление подынтегральной функции в окрестности особой точки ($x=0$) в виде отрезка ряда по степеням x, который получим после замены $\cos x$ соответствующим рядом Тейлора

$$J_1 = \int_0^{\delta} \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \int_0^{\delta} \frac{1 - \dfrac{x^2}{2!} + \dfrac{x^4}{4!} + \cdots + (-1)^m \dfrac{x^{2m}}{(2m)!} + \cdots}{\sqrt{x}} dx =$$

$$= 2\sqrt{\delta} - \frac{1}{2!}\frac{2}{5}\delta^{\frac{5}{2}} + \frac{1}{4!}\frac{2}{9}\delta^{\frac{9}{2}} + \cdots + (-1)^m \frac{1}{(2m)!}\frac{2}{(2m+\frac{1}{2})}\delta^{2m+\frac{1}{2}} + \cdots$$

Допустим, что мы решили ограничиться первыми m слагаемыми в полученном представлении. При этом погрешность не превосходит последнего приведенного в записи для J_1 слагаемого (в силу знакопеременности полученного ряда). Следовательно, для выбора двух параметров (δ и m) имеем условие

$$\frac{1}{(2m)!}\frac{2}{(2m+\frac{1}{2})}\delta^{2m+\frac{1}{2}} \le \frac{\varepsilon}{2}\ .$$

Еще $\dfrac{\varepsilon}{2}$ отводится в качестве допустимого уровня погрешности при вычислении J_2.

Таким образом, один из параметров (m или δ) можно задавать по своему усмотрению, второй – определяется из неравенства. При этом нужно принять в расчет следующее соображение. Если $\delta \ll 1$, то существенно ухудшается оценка погрешности для любой квадратурной формулы, которую мы планируем использовать для вычисления J_2, так как в качестве коэффициента при h^p (где p – порядок точности выбранной формулы) фигурирует максимальное на $[\delta, 1]$ значение p-й производной от подынтегральной функции, которое при $x=\delta$ в нашем случае имеет порядок $\delta^{-\left(p+\frac{1}{2}\right)}$. Следовательно, целесообразно задавать «Не слишком малое» δ (например, δ =0.1), а m найти затем из приведенного выше неравенства. Конечно, если поиск последовательных членов разложения подынтегральной функции затруднен, то приходится ограничиваться доступными членами, а из упомянутого неравенства определять δ.

Пример. Вычислим интеграл второго типа $\int_0^\infty e^{-x^2}dx$.

Можно, как отмечалось, свести его к интегралу первого типа. Но мы применим непосредственно универсальный прием выделения особенности. Здесь особенность в том, что верхний предел интегрирования – бесконечность. Представим интеграл в виде суммы двух $J = J_1 + J_2$: J_1 – интеграл по конечному отрезку [a, A], а J_2 – по [A, ∞]. Вычисление J_1 при заданном A вопросов не вызывает. Выберем теперь A так, чтобы в пределах допустимой погрешности вторым интегралом можно было пренебречь, то есть так, чтобы $|J_2| \le \frac{\varepsilon}{2}$. Например, учитывая, что при $A \ge 1$

$$\int_A^\infty e^{-x^2}dx \le \int_A^\infty xe^{-x^2}dx = \frac{1}{2}e^{-A^2}$$

и требуя, что бы выполнялось $\frac{1}{2}e^{-A^2} \le \frac{1}{2}\varepsilon$, найдем, что для этого достаточно взять $A \ge \sqrt{|\ln \varepsilon|}$.