. Численное интегрирование

Квадратурные формулы прямоугольников

Пусть требуется найти значение интеграла I Римана $I = \int_a^b f(x)dx$ для некоторой заданной на отрезке $[a,b]$ функции $f(x)$. Хорошо известно, что для функций, допускающих на промежутке $[a,b]$ конечное число точек разрыва первого рода, такое значение существует, единственно и может быть формально получено по определению:

$$
\begin{aligned}
&I = \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}) \\
&\xi_i \in [x_i - x_{i-1}] \qquad , \\
&[a,b] \to [x_0, x_1, ..., x_n]
\end{aligned}
\tag{5.1}
$$

где $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ - произвольная упорядоченная система точек отрезка $[a,b]$ такая, что

$$\max\{x_0 - a, x_i - x_{i-1}, b - x_n\} \to 0, \quad n \to \infty,$$

а ξ_i - произвольная точка элементарного промежутка $[x_i - x_{i-1}]$.

Приближенные формулы для вычисления определенных интегралов называют квадратурными формулами или формулами численного интегрирования.

Геометрический смысл определенного интеграла состоит в следующем: вычисление $I = \int_a^b f(x)dx$ при $f(x) \geq 0$ равносильно построению квадрата, равновеликого криволинейной трапеции с основанием $[a,b]$ и крышей $f(x)$.

Простые квадратурные формулы можно вывести непосредственно из определения интеграла, т.е. из представления (5.1). Зафиксировав некоторое $n \geq 1$, будем иметь

$$I \approx \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}) \tag{5.2}$$

Это приближенное равенство назовем общей формулой прямоугольников (площадь криволинейной трапеции приближенно заменяется площадью ступенчатой фигуры, составленной из прямоугольников, основаниями которых служат отрезки $[x_{i-1}, x_i]$, а высотами – ординаты $f(\xi_i)$.

Чтобы из общей формулы (5.2) получить правило приближенного вычисления интеграла, воспользуемся свободой расположения точек x_i, разбивающих промежуток интегрирования $[a,b]$ на элементарные отрезки $[x_{i-1}, x_i]$, и свободой выбора точек ξ_i на этих отрезках.

Условимся в дальнейшем пользоваться равномерным разбиением отрезка $[a,b]$ на n частей точками x_i с шагом $h = \frac{b-a}{n}$, полагая

$$x_0 = a, \quad x_i = x_{i-1} + h, \quad x_n = b, \quad i = 1,2,\ldots, n-1 \tag{5.3}$$

При таком разбиении формула (5.2) принимает вид

$$I \approx h \sum_{i=1}^{n} f(\xi_i), \quad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i] \tag{5.4}$$

Рассмотрим три случая расположения точек ξ_i на элементарных отрезках $[x_{i-1}, x_i]$.

1. *Квадратурная формула левых прямоугольников*.

Пусть $\xi_i = x_{i-1}$. Тогда из (5.4) получаем

$$I \approx I_{пр}^{л} = h \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1}) \tag{5.5}$$

2. *Квадратурная формула правых прямоугольников*

Пусть $\xi_i = x_i$. Тогда имеем

$$I \approx I_{пр}^{п} = h \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \tag{5.6}$$

3. *Квадратурная формула средних прямоугольников*

Пусть $\xi_i = \frac{1}{2}(x_{i-1} + x_i), \quad \xi_i = x_{i-1} + \frac{h}{2}, \quad \xi_i = x_i - \frac{h}{2}$.

Точка ξ_i берется посередине между точками x_{i-1} и x_i. отсюда получаем

$$I \approx I_{пр}^{ср} = h \sum_{i=1}^{n} f\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right) = h \sum_{i=1}^{n} f\left(x_i - \frac{h}{2}\right) \tag{5.7}$$

Остаточный член (глобальной погрешности) квадратурной формулы средних прямоугольников имеет вид:

$$R_{пр}(h) = \frac{b-a}{24} f''(\xi_n) h^2, \ \xi_n \in (a, b). \tag{5.11}$$

Как видно из формулы (5.11), при увеличении числа n элементарных промежутков, на которые разбивается промежуток интегрирования $[a,b]$ по формуле средней точки (5.7) убывает пропорционально квадрату шага h. Нетрудно убедиться, что погрешность численного интегрирования непрерывно дифференцируемой функции по формулам левых и правых прямоугольников (5.5), (5.6) убывает по линейному закону.

Квадратурные формулы Нютона-Котеса

Подстановка в интеграл $\int_a^b f(x)dx$ вместо функции $f(x)$ ее интерполяционного многочлена Лагранжа той или иной степени n приводит к семейству квадратурных формул, называемых формулами Ньютона-Котеса.

Как было показано в Главе 1, функция $f(x) \in C^{n+1}[a,b]$ может быть единственным образом представлена в виде

$f(x) = L_n(x) + R_n(x)$, где

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{\substack{j \neq i \\ j=0}}^{n} \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)}$$ - интерполяционный многочлен Лагранжа,

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\Pi_{n+1}(x)$$ -остаточный член,

$$\Pi_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n}(x - x_i), \quad \xi \in (a,b).$$

Если система узлов интерполирования $\{x_i\}_{i=0}^{n}$ совпадает с точками разбиения (5.3) отрезка $[a,b]$ с шагом h, то замена переменной $x = x_0 + qh$ преобразует многочлен Лагранжа к виду

$$L_n(x_0 + qh) = \sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\frac{f(x_i)}{i!(n-i)!}\cdot\frac{q(q-1)...(q-n)}{q-i}$$

(5.12)

Для того, чтобы использовать такое выражение $L_n(x)$ вместо $f(x)$ в $\int_a^b f(x)dx$, нужно изменить границы интегрирования (значению $x = a$ соответствует значение $q = 0$, а $x = b$ - значение $q = n$) и учесть, что $dx = hdq$.

Таким образом, получаем

$$I \approx h\int_0^n \sum_{i=0}^{n}(-1)^{n-i}\frac{f(x_i)}{i!(n-i)!}\cdot\frac{q(q-1)...(q-n)}{q-i}dq.$$

Это равенство, переписанное в виде

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{i=0}^{n}K_i f(x_i) \qquad (5.13)$$

и есть квадратурная формула Ньютона-Котеса, где

$$K_i = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-1)!}\frac{1}{n}\int_0^n \frac{q(q-1)...(q-n)}{(q-i)}dq \qquad (5.14)$$

- коэффициенты Котеса.

Свойства коэффициентов Котеса.

1. $\sum_{i=0}^{n} K_i = 1$, если $f(x) = 1$, то $R_n[f] = 0$

2. $K_i = K_{n-i}$

На самом деле, формулы (5.13)-(5.14) определяют семейство квадратурных формул. Параметром этого семейства является число n - степень интерполяционного многочлена, которым заменяется подынтегральная функция.

Рассмотрим несколько простейших частных случаев, соответствующих небольшим значениям n .

При этом конкретные квадратурные формулы будем получать как на основе общих формул (5.13)-(5.14), используя для этой цели свойства коэффициентов Котеса, так и используя вместо многочлена Лагранжа (5.12) эквивалентный ему (в силу единственности) первый интерполяционный многочлен Ньютона:

1. *Квадратурная формула трапеций*.

Пусть $n = 1$, т.е. имеется всего две точки x_0 и $x_1 = x_0 + h$.

Заменим подынтегральную функцию $f(x)$ многочленом Лагранжа $L_1(x)$, построенным по двум узлам (x_0, x_1).

$f(x) \approx L_1(x)$.

Используя свойства коэффициентов Котеса, находим:

$$K_0 + K_1 = 1$$
$$K_0 = K_1 \quad \Rightarrow K_0 = K_1 = 1/2 .$$

Тогда формулы (5.13) дают следующее выражение

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x)dx \approx (x_1 - x_0)(\frac{1}{2} y_0 + \frac{1}{2} y_1),$$

$$I \approx \frac{(x_1 - x_0)}{2}(y_0 + y_1)$$

Получена *простейшая квадратурная формула трапеций*, к которой легко прийти и из геометрических соображений.

Остаточный член этой формулы найдем интегрированием остаточного члена $R_1(x)$ формулы линейной интерполяции, преобразованного к виду:

$$R_1(x) = R_1(x_0 + qh) = \frac{f''(\xi)}{2} h^2 q(q-1)$$

Имеем

$$R_1(f) = \int_{x_0}^{x_1} h \frac{f''(\xi)}{2} h^2 (q^2 - q)dq = \frac{h^3}{2} f''(\xi) \int_0^1 (q^2 - q)dq = -\frac{f''(\xi_1)}{12} h^3$$

$$R_1[f] \approx O(h^3)$$

2. *Квадратурная формула Симпсона (формула парабол).* Положим в (5.15) $n = 2$, т.е. проинтерполируем функцию $f(x)$ по трем точкам: x_0, $x_1 = x_0 + h$ и $x_2 = x_0 + 2h$.

Заменим подынтегральную функцию $f(x)$ многочленом Лагранжа $L_2(x)$, построенным по трем точкам (x_0, x_1, x_2).

$$f(x) \approx L_2(x)$$

Используя свойства коэффициентов Котеса, находим:

$$K_0 = K_2$$

$$K_0 + K_1 + K_2 = 1$$

Из формулы (5.14) при $n = 2$ получаем

$$K_0 = \frac{1}{2}\frac{(-1)^{2-0}}{0!(2-0)!}\int_0^2 \frac{q(q-1)(q-2)}{(q-0)}dq = \frac{1}{4}\int_0^2 (q^2 - 3q + 2)dq = \frac{1}{4}\left(\frac{q^3}{3} - \frac{3q^2}{2} + 2q\right)_0^2 = \frac{1}{6}$$

и

$$K_0 = K_2 = \frac{1}{6}, \quad K_1 = \frac{4}{6}.$$

Тогда формулы (5.13) дают следующее выражение

$$\int_{x}^{x_2} f(x)dx = (x_2 - x_0)\left(\frac{1}{6}y_0 + \frac{4}{6}y_1 + \frac{1}{6}y_2\right) + R_2(f) = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) + R_2(f)$$

.

Итак, $$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2). \qquad (5.17)$$

Полученное приближенное равенство называется *простейшей формулой Симпсона.*

Остаточный член этой формулы найдем интегрированием остаточного члена $R_2(x)$ формулы квадратичной интерполяции, преобразованного к виду:

$$R_2(x) = R_2(x_0 + qh) = \frac{f'''(\xi)}{3!}h^3 q(q-1)(q-2)$$

где $\xi \in [x_0 \quad x_2]$.

Но здесь нельзя воспользоваться интегральной теоремой о среднем при интегрировании остаточного члена $R_2(x_0+qh)$, как это было в случае $n=1$ (функция $q(q-1)(q-2)$ меняет знак на промежутке $[0,2]$).

Остаточный член формулы Симпсона имеет вид:

$R_2(f)=\dfrac{f^{IV}(\xi)}{90}h^5$, где $\xi\in(x_0\quad x_2)$

$R_2[f]\approx O(h^5)$.

Составные квадратурные формулы

Применение формул Ньютона - Котэса высоких порядков, т.е. при больших значениях параметра $k\in N$ может быть использовано при достаточно высокой гладкости подынтегральной функции $f(x)$. Более употребительными являются квадратурные формулы, получающиеся путем дробления промежутка интегрирования на большое число мелких частей, интегрирование на каждом из которых производится с помощью простейших формул невысокого порядка (формул трапеций и Симпсона).

1. *Общая формула трапеций.*

$\int\limits_a^b f(x)dx=\sum\limits_{i=1}^{n}\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx=\dfrac{h}{2}\sum\limits_{i=1}^{n}(y_{i-1}+y_i)-\dfrac{h^3}{12}\sum\limits_{i=1}^{n}f''(\xi_i)$, где

$\xi_i\in(x_{i-1},x_i)$.

Отсюда следует, что искомое значение интеграла можно приближенно найти по формуле

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n}\left[\frac{1}{2}(y_0+y_1+y_2+\ldots+y_n+\frac{1}{2}y_n)\right]. \qquad (5.18)$$

Погрешность формулы (5.18) равна

$$R_{mp} = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} y''(\xi_i).$$

По обобщенной теореме о среднем значении функции на отрезке существует такая точка $\xi_m \in (a,b)$, что

$$\sum_{i=1}^{n} hy''(\xi_i) = f''(\xi_m)(b-a)$$

Таким образом, остаточный член формулы трапеций (5.18) есть

$$R_{mp} = -\frac{(b-a)}{12}h^2 f''(\xi_m), \quad \xi_m \in [a,b] \to O(h^2). \qquad (5.19)$$

2. *Составная формула Симпсона*.

На основе простейшей формулы Симпсона (5.17) и ее остаточного члена запишем равенство

$$\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)dx = \frac{h}{3}(y_{2i-2}+4y_{2i-1}+y_{2i}) - \frac{h^5}{90}f^{IV}(\xi_i),$$ где

$\xi_i \in (x_{2i-2}, x_{2i})$. (5.20)

Выполнив разбиение (5.3) так, чтобы число элементарных промежутков $n = 2m$ было четным, исходный интеграл представляем суммой интегралов вида (5.20):

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^{m} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x)dx = \frac{h}{3}\sum_{i=1}^{m}(y_{2i-2} + 4y_{2i-1} + y_{2i}) - \frac{h^5}{90}\sum_{i=1}^{m} f^{IV}(\xi_i)$$

Отсюда получается формула численного интегрирования

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2) + \frac{h}{3}(y_2 + 4y_3 + y_4) + \frac{h}{3}(y_{2m-2} + 4y_{2m-1} + y_{2m})$$

,

которая называется формулой Симпсона.

Остаточный член формулы Симпсона

$$R_{симпс} = -\frac{h^4}{180}\sum_{i=1}^{m} 2hf^{IV}(\xi_i) = -\frac{h^4}{180}(b-a)f^{IV}(\xi_c), \quad \xi_c \in [a,b] \to O(h^4)$$

(5.21)

Таким образом, можно сказать, что замена подынтегральной функции $f(x)$ на промежутке интегрирования $[a,b]$, разбитом на n частей с шагом h, кусочно-линейной функцией приводит к приближенному значению интеграла (5.18) с ошибкой, убывающей при $h \to 0$ (согласно(5.19)) по квадратичному закону. Если же сделать кусочно-квадратичную интерполяцию по сдвоенным элементарным промежуткам $[x_0, x_2]$, $[x_2, x_4]$,..., $[x_{2m-2}, x_{2m}]$, то ошибка получаемого приближенного равенства в соответствии с (5.20) будет убывать уже пропорционально четвертой степени (5.21). Этим обусловливается популярность формулы Симпсона, так как повышение порядка точности интерполяции на единицу повлекло повышение точности интегрирования на два порядка.