

Глава 2

Вычисление определенных интегралов

Данный семинар знакомит с методами вычисления определенных интегралов типа $I = \int_a^b f(x) dx$.

В общем виде задача решается путем аппроксимации функции $f(x)$ другой функцией $\tilde{f}(x)$, для которой интеграл вычисляется аналитически. При этом мы полагаем, что

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b \tilde{f}(x) dx$$

и

$$|f(x) - \tilde{f}(x)| \leq \varepsilon, \quad x \in [a, b].$$

Погрешность аппроксимации составляет, очевидно величину $\sim \varepsilon|b - a|$.

Введем сетку на интервале интегрирования $[a, b]$, разбив его на N интервалов, и обозначим значение подынтегральной функции в n -й точке разбиения x_n как $f_n = f(x_n)$, $n = 0, \dots, N$. На семинаре рассматриваются методы вычисления определенных интегралов на равномерной сетке — метод трапеций и метод Симпсона, а также один из методов вычисления интегралов на неравномерной сетке — метод квадратур Гаусса—Лежандра. Приводятся соответствующие формулы и оценки погрешности аппроксимации. Кратко рассматриваются также вопросы вычисления интегралов с особенностями и от быстроосциллирующих функций.

2.1 Метод трапеций

Один из самых простых методов аппроксимации подынтегральной функции состоит в ее *кусочно-линейной* интерполяции на *равномерной* сетке с шагом $h = (b - a)/N$ (считаем $a < b$), как показано на рис. 2.1а. При этом интеграл вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} I = \int_a^b f(x) dx &\approx I_T = \int_a^b \tilde{f}(x) dx = \sum_{n=0}^{N-1} 0,5(f_n + f_{n+1})h \\ &= h(0,5f_0 + f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + 0,5f_N), \end{aligned} \quad (2.1)$$

которая называется *формулой трапеций*¹.

¹Аппроксимирующие формулы такого вида, $\sum \alpha_n f_n$, называются *механическими квадратурами* с весами α_n в узлах x_n .

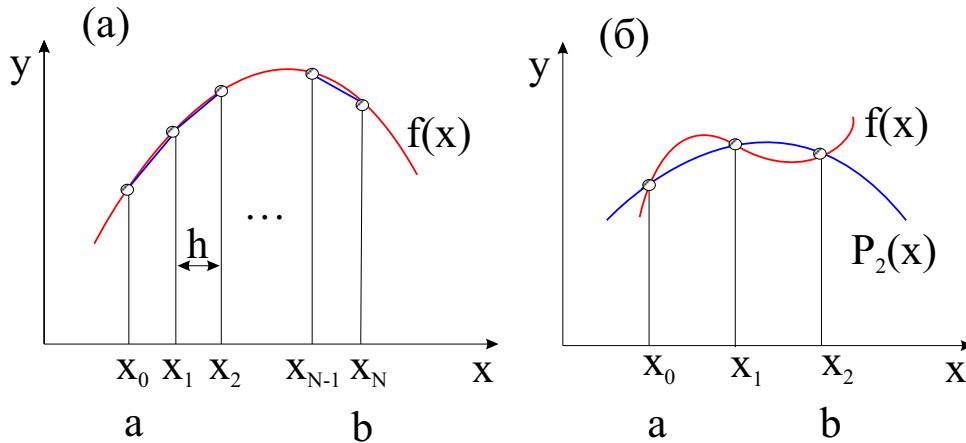


Рис. 2.1: Аппроксимация подынтегральной функции $f(x)$ с помощью (а) кусочно-линейной (метод трапеций) и (б) кусочно-квадратичной (метод Симпсона) интерполирующих функций на равномерной сетке. P_2 — интерполяционный полином Лагранжа второй степени.

2.1.1 Погрешность аппроксимации

Погрешность аппроксимации интеграла с помощью формулы трапеций зависит от гладкости функции f . Если она имеет на интервале $[a, b]$ вторую производную, ограниченную по величине, то погрешность формулы трапеций пропорциональна h^2 и составляет

$$|I_T - I| \leq \frac{h^2}{12} (b - a) \max_{a \leq x \leq b} (|f''(x)|). \quad (2.2)$$

Естественно, снижение требований на гладкость функции приводит к увеличению погрешности. Так, если функция удовлетворяет только требованию непрерывности и ограниченности на отрезке $[a, b]$ ($f(x) < C$), погрешность аппроксимации

$$|I_T - I| \leq \frac{h}{2} (b - a) \max_{a \leq x \leq b} (|f(x)|). \quad (2.3)$$

2.2 Метод Симпсона

Метод трапеций применим для вычисления интегралов от любой непрерывной функции. При этом ее гладкость не является необходимым условием. В то же время функции, рассматриваемые в различных разделах теоретической физики зачастую не только непрерывны, но и однократно или многократно дифференцируемы. Мы уже знаем, что дополнительная гладкость интегрируемой функции приводит в методе трапеций к уменьшению погрешности аппроксимации. Спрашивается, можно-ли использовать это обстоятельство для получения более точных аппроксимаций на той же сетке, без увеличения числа узлов? Ответ на этот вопрос — положительный и простейший предлагаемый метод состоит в использовании *кусочно-квадратичной* функции для интерполяции функции $f(x)$ на интервале $x \in [a, b]$ на *равномерной* сетке с *четным* числом интервалов разбиения $2N$, количеством узлов $2N + 1$ и шагом сетки $h = (b - a)/2N$ (см. рис. 2.1б). При этом на каждой паре интервалов (x_{2n}, x_{2n+1}) и (x_{2n+1}, x_{2n+2}) по значениям $f_{2n}, f_{2n+1}, f_{2n+2}$ строится интерполяционный полином Лагранжа второй степени.

Другими словами, через три соседние точки сетки проводится парабола вида $\tilde{f} = ax^2 + bx + c$, аппроксимирующая исходную функцию на данной паре интервалов². Интеграл от квадратичной аппроксимирующей функции вычисляется аналитически:

$$\int_{x_{2n}}^{x_{2n+2}} \tilde{f} dt = \int_{x_{2n}}^{x_{2n+2}} (ax^2 + bx + c) dt = \frac{h}{3}(f_{2n} + 4f_{2n+1} + f_{2n+2}).$$

Суммируя по интервалам сетки, получаем формулу

$$\begin{aligned} I = \int_a^b f(x) dx &\approx I_S = \int_a^b \tilde{f} dt = \frac{h}{3} \sum_{n=0}^{N-1} (f_{2n} + 4f_{2n+1} + f_{2n+2}) \\ &= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + \dots + 2f_{2N-2} + 4f_{2N-1} + f_{2N}), \end{aligned} \quad (2.4)$$

которая называется *формулой Симпсона*.

2.2.1 Погрешность аппроксимации

Погрешность аппроксимации интеграла с помощью формулы Симпсона зависит от степени гладкости функции $f(x)$. Если она имеет третью производную, то погрешность аппроксимации

$$|I_S - I| \leq \frac{h^3}{3}(b-a) \max_{a \leq x \leq b} (|f^{(3)}(x)|) \quad (2.5)$$

пропорциональна h^3 . Если функция $f(x)$ четырежды дифференцируема, то погрешность аппроксимации уменьшается как h^4 :

$$|I_S - I| \leq \frac{h^4}{180}(b-a) \max_{a \leq x \leq b} (|f^{(4)}(x)|). \quad (2.6)$$

2.2.2 Как практически оценивать погрешность?

Зачастую сложно использовать приведенные выше теоретические оценки для расчета погрешностей аппроксимации и мало кто в действительности рассчитывает необходимые производные и вычисляет затем оптимальный шаг. На практике, если требуется вычислить интеграл с погрешностью ε , то сначала вычисляют интеграл I_N с небольшим числом узлов сетки ($N = 2 \div 3$). Затем удваивают число узлов и снова вычисляют интеграл I_{2N} . Если $|I_{2N} - I_N| < \varepsilon$, то интеграл I_{2N} есть требуемое значение. В противном случае продолжают удваивать число узлов сетки и заново вычислять интеграл, пока требуемое условие не будет достигнуто.

2.3 Формулы Ньютона-Котеса

Продолжая улучшать формулы трапеций и Симпсона на равномерной сетке, можно, идя по тому же пути, получить аппроксимирующие формулы более высоких порядков. Семейство этих формул называется формулами Ньютона-Котеса. Не обсуждая их здесь детально, все же приведем таблицу соответствующих весов функций, используемых в аппроксимирующих формулах (см. табл. 2.1). На практике, однако, аппроксимирующие формулы высоких порядков (более 4–5) обычно не используются из-за существенных ошибок округления.

²Значения коэффициентов a , b , и c легко рассчитываются из условия, что парабола пересекает функцию $f(x)$ (или касается ее) в точках x_{2n} , x_{2n+1} , x_{2n+2} , принимая значения f_{2n} , f_{2n+1} , и f_{2n+2} , соответственно.

Таблица 2.1: Веса в формулах интегрирования Ньютона–Котеса.

Степень полинома	Название формулы	Веса				
1	Формула трапеций	$h/2$	$h/2$			
2	Формула Симпсона	$h/3$	$4h/3$	$h/3$		
3	Формула 3/8 Симпсона	$3h/8$	$9h/8$	$9h/8$	$3h/8$	
4	Формула Милна	$14h/45$	$64h/45$	$24h/45$	$64h/45$	$14h/45$

2.4 Квадратуры Гаусса–Лежандра

До настоящего времени мы рассматривали формулы для численного интегрирования только на равномерных сетках. Это сильно упрощает формулы, но и порождает существенный недостаток этих методов — за счет того, что точки выбираются эквидистантно, происходит быстрое накопление погрешностей аппроксимации. Бороться с этим можно, конечно, уменьшая шаг сетки и, таким образом, увеличивая время расчета интеграла. Это не существенно, если мы вычисляем простые интегралы, однако может стать принципиальным препятствием при вычислении многомерных интегралов. В этом случае возможно также существенно снизить вычислительные затраты, не уменьшая при этом точности расчетов. Делается это при помощи т.н. квадратур высокой точности, к которым относится и квадратура Гаусса–Лежандра.

Идею метода поясняет рис. 2.2. В методе трапеций погрешности аппроксимации суммируются для каждого интервала (рис. 2.2а), причем при заданном шаге мы не можем уменьшить погрешность, поскольку краевые точки интервала жестко заданы. Напротив, в методе высокоточных квадратур функция на искомом интервале аппроксимируется полиномом, который в зависимости от его параметров пересекает искомую функцию в нескольких точках (например, в двух в случае квадратичной функции) и эти точки мы можем подобрать таким образом, чтобы скомпенсировать наилучшим образом погрешности аппроксимации с разными знаками (см. рис. 2.2б). Далее, значение интеграла вычисляется на рассматриваемом интервале как сумма значений функции в данных точках с соответствующими весами (по аналогии с формулами для равномерных сеток). При этом, как правило, высокая точность расчетов достигается уже для аппроксимирующих полиномов невысокой степени (2–6).

В *квадратурах Гаусса–Лежандра* изначально рассматривается задача вычисления интеграла на отрезке $[-1, 1]$:

$$I = \int_{-1}^1 f(x) dx \approx I_G = \sum_{i=0}^{n-1} w_i f(x_i), \quad (2.7)$$

где w_i — веса с которыми берутся значения функции в точках x_i . Положения точек и веса функций вычисляются точно для квадратур любого порядка [7]. На практике, однако, редко используются квадратуры выше 10-го порядка. В табл. 2.4 приведены значения аргумента и соответствующие веса для нескольких первых квадратур.

Как перейти от квадратуры (2.7) для интервала интегрирования $[-1, 1]$ к вычислению интеграла в произвольном интервале? Ответ прост — надо ввести замену переменных

$$\xi = \frac{1}{2}(b+a) + \frac{1}{2}(b-a)x,$$

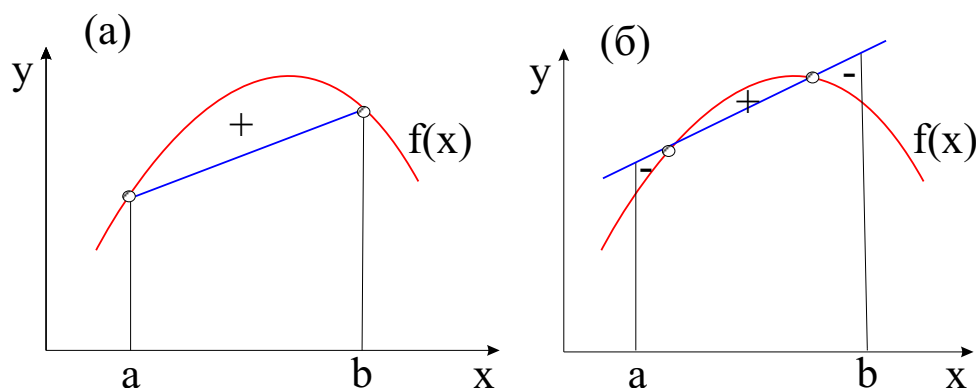


Рис. 2.2: Аппроксимация подынтегральной функции $f(x)$ с помощью (а) кусочно-линейной функции на равномерной сетке (метод трапеций) и (б) полиномиальной интерполирующей функции на неравномерной сетке (метод квадратур). Знаками “+” и “–” отмечены погрешности аппроксимации. Видно, что в методе квадратур погрешности могут быть скомпенсированы за счет выбора оптимальных узлов.

при которой

$$\int_a^b f(\xi) d\xi = \left(\frac{b-a}{2}\right) \int_{-1}^1 f(\xi(x)) dx.$$

Окончательно получаем *квадратуру Гаусса–Лежандра* для произвольного интервала интегрирования:

$$I = \int_a^b f(\xi) d\xi \approx I_G = \left(\frac{b-a}{2}\right) \sum_{i=0}^{n-1} w_i f(\xi_i), \quad (2.8)$$

где

$$\xi_i = \left(\frac{b+a}{2}\right) + \left(\frac{b-a}{2}\right) x_i.$$

Квадратуры Гаусса–Лежандра требуют минимум вычислений для достижения заданной точности интегрирования.

Пример. Вычислим интеграл

$$I = \int_0^\pi 4x^3 dx = x^4 \Big|_0^\pi = \pi^4 = 97,409091.$$

Используя 2-х точечную квадратуру Гаусса–Лежандра, мы получим численный ответ

$$I \approx I_G = \frac{(\pi-0)}{2} \left[4 \left(\frac{\pi+0}{2} - \frac{\pi-0}{2\sqrt{3}} \right)^3 + 4 \left(\frac{\pi+0}{2} + \frac{\pi-0}{2\sqrt{3}} \right)^3 \right] = 97,409091.$$

Результат получается таким же, как и аналитический ответ, с точностью 6 значащих цифр всего за два вычисления функции! (Это не всегда так, к сожалению, см. упражнения к разделу) \square

Таблица 2.2: Весовые коэффициенты и значения аргумента.

Число точек n в квадратуре	Весовые коэффициенты	Значения аргумента	Погрешность аппроксимации
2	$w_0 = 1, 000000000$	$x_0 = -0, 577350269$	$\sim f^{(4)}(x)$
	$w_1 = 1, 000000000$	$x_1 = +0, 577350269$	
3	$w_0 = 0, 555555556$	$x_0 = -0, 774596669$	$\sim f^{(6)}(x)$
	$w_1 = 0, 888888889$	$x_1 = +0, 000000000$	
	$w_2 = 0, 555555556$	$x_2 = +0, 774596669$	
4	$w_0 = 0, 347854845$	$x_0 = -0, 861136312$	$\sim f^{(8)}(x)$
	$w_1 = 0, 652145155$	$x_1 = -0, 339981044$	
	$w_2 = 0, 652145155$	$x_2 = +0, 339981044$	
	$w_3 = 0, 347854845$	$x_3 = +0, 861136312$	
5	$w_0 = 0, 236926885$	$x_0 = -0, 906179846$	$\sim f^{(10)}(x)$
	$w_1 = 0, 478628670$	$x_1 = -0, 538469310$	
	$w_2 = 0, 568888889$	$x_2 = +0, 000000000$	
	$w_3 = 0, 478628670$	$x_3 = +0, 538469310$	
	$w_4 = 0, 236926885$	$x_4 = +0, 906179846$	
6	$w_0 = 0, 171324492$	$x_0 = -0, 932469514$	$\sim f^{(12)}(x)$
	$w_1 = 0, 360761573$	$x_1 = -0, 661209386$	
	$w_2 = 0, 467913935$	$x_2 = -0, 238619186$	
	$w_3 = 0, 467913935$	$x_3 = +0, 238619186$	
	$w_4 = 0, 360761573$	$x_4 = +0, 661209386$	
	$w_5 = 0, 171324492$	$x_5 = +0, 932469514$	

2.5 Интегралы с особенностями

Как применять приведенные выше формулы для вычисления определенных интегралов с особенностями? Например, в случае, когда требуется вычислить интеграл

$$\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}} dx, \quad (2.9)$$

где $f(x)$ — гладкая на интервале интегрирования функция. Подынтегральная функция стремится к бесконечности при $x \rightarrow \infty$ и прямое применение вышеприведенных методов вычисления интеграла, как правило, невозможно.

В этом случае можно выделить особенность в нуле при помощи простого преобразования

$$\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt{x}} dx = \int_0^1 \frac{f(x) - \varphi(x)}{\sqrt{x}} dx + \int_0^1 \frac{\varphi(x)}{\sqrt{x}} dx,$$

где функция $\varphi(x)$ выбирается так, чтобы первый интеграл в правой части не содержал особенности, а второй — вычислялся аналитически. Это справедливо, например, если в качестве $\varphi(x)$ взять отрезок разложения функции $f(x)$ в ряд Тейлора в точке $x = 0$. Тогда

$$\int_0^1 \frac{f(x) - f(0) - xf'(0)}{\sqrt{x}} dx + f(0) \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx + f'(0) \int_0^1 \sqrt{x} dx.$$

Пример. Для $f(x) = \cos x$ вычисление интеграла (2.9) сводится к вычислению

$$\int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \int_0^1 (\cos x - 1)x^{-1/2} dx + \int_0^1 x^{-1/2} dx.$$

Второе слагаемое справа равно 2, а первое можно вычислить с помощью, например формулы Симпсона, которая дает значение $\approx 1,80905$ \square

2.6 Интегралы от быстроосциллирующих функций

Вычисление интегралов от быстроосциллирующих функций встречается в задачах физики очень часто. Можно конечно вычислять интегралы от быстроосциллирующих функций, напрямую используя рассмотренные выше формулы, однако, это зачастую требует очень больших вычислительных затрат, поскольку шаг интегрирования нужно брать по крайней мере в несколько раз меньше периода осцилляций. Кроме того, вычисления должны проводиться с достаточной точностью, а при интегрировании осциллирующей функции происходит быстрая потеря точности из-за суммирования близких величин с противоположными знаками (интегралы от отдельных полупериодов). Поэтому на практике используется другой прием.

Пример. Рассмотрим вычисление интеграла

$$\int_0^\pi f(x) \sin kx dx, \quad (2.10)$$

где k — большое число, например, 1000. Аппроксимируем гладкую функцию $f(x)$ другой гладкой функцией $\varphi(x)$, для которой интеграл (2.10) вычисляется аналитически. Тогда задача вычисления интеграла от $f(x) \sin kx$ сводится к вычислению

$$\int_0^\pi f(x) \sin kx = \int_0^\pi \varphi(x) \sin kx dx + \int_0^\pi [f(x) - \varphi(x)] \sin kx dx.$$

Если в качестве $\varphi(x)$ взять разложение $f(x)$ в ряд Тейлора, то второе слагаемое справа, как правило, мало и им можно пренебречь \square

2.7 Задание для практической работы

Напишите программу, вычисляющую определенный интеграл от заданной функции с помощью формул трапеций, Симпсона и с использованием квадратур Гаусса—Лежандра. В программе должна быть предусмотрена возможность интерактивного задания параметров задачи — начальной и конечной точек диапазона интегрирования, точности расчетов или количества узлов сетки для формул трапеций и Симпсона, а для метода Гаусса—Лежандра — точности расчетов или числа точек квадратуры (см. рис. 2.3). Для первых двух методов необходимо вывести на экран информацию о числе выполненных итераций для каждого метода, если была задана точность вычислений, и о достигнутой точности, если задано число узлов сетки. Для метода квадратур Гаусса—Лежандра необходимо вывести информацию о достигнутой точности при заданном числе точек или число точек квадратуры, при котором достигается заданная точность (последнее условие может не выполняться при малом числе точек квадратуры).

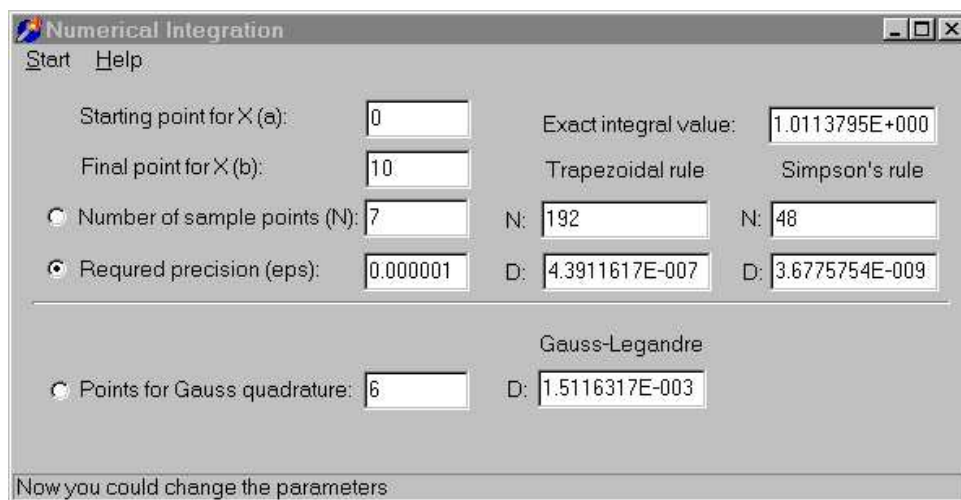


Рис. 2.3: Пример работы программы численного интегрирования.

В качестве примера рассмотреть подынтегральную функцию $f(x) = 1/(2 + x^2)$, интеграл от которой вычисляется аналитически:

$$I = \int \frac{1}{2 + x^2} dx = g(x) = \frac{\arctan(x/\sqrt{2})}{\sqrt{2}}. \quad (2.11)$$

Обозначим погрешность вычисления интеграла по формуле трапеций, Симпсона и с помощью квадратур Гаусса–Лежандра как d_T , d_S и d_G , так что

$$d_T = |I_T - I|, \quad d_S = |I_S - I|, \quad d_G = |I_G - I|.$$

Упражнение 1

Вычислите интеграл (2.11) для различных пределов интегрирования $[a, b]$ по методу трапеций и Симпсона. Сравните ошибки d_T , d_S методов при заданном числе узлов сетки. Вычислите также ошибки, используя практический прием, описанный выше. Есть ли разница? Как результаты ваших вычислений согласуются с формулами для оценки ошибок? Проверьте, что при $a \rightarrow -\infty$, $b \rightarrow +\infty$ ошибки методов практически не отличаются. Почему?

Упражнение 2

Вычислите интеграл (2.11) для различных пределов интегрирования $[a, b]$ по методу квадратур Гаусса–Лежандра. Исследуйте, как ошибка метода зависит от числа используемых для расчета квадратуры точек и от величины и симметрии диапазона интегрирования (относительно нулевой точки). Как можно увеличить точность вычисления интеграла для большого или несимметричного диапазона? Сравните точность метода с расчетами по методу трапеций и Симпсона.

Упражнение 3

Повторите предыдущие упражнения для других подынтегральных функций: $\sin x$, $\log x$ и др.

Упражнение 4

Вычислите интеграл от быстроосциллирующей функции

$$\int_0^{\pi} e^{-x} \sin kx \, dx$$

для различных значений k по методу Симпсона, а затем используя прием, описанный в разделе 2.6, заменяя функцию e^{-x} ее интерполяционным полиномом второй степени (третьей степени). Совпадает ли точность расчетов с ожидаемой? Сравните с точным значением интеграла, который равен

$$\int_0^{\pi} e^{-x} \sin kx \, dx = \frac{k}{1+k^2} - \frac{e^{-\pi}(k \cos k\pi + \sin k\pi)}{1+k^2}.$$

Литература

- [1] Р. П. Федоренко, *Введение в вычислительную физику*. — М.: Изд-во Моск. физ.-техн. ин-та, 1994.
- [2] Х. Гулд, Я. Тоболчик, *Компьютерное моделирование в физике*. В 2-х частях. Пер. с англ. — М.: Мир, 1990.
- [3] Д. В. Хеерман, *Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике*. Пер. с англ. — М.: Наука, 1990.
- [4] К. Биндер, Д. В. Хеерман, *Моделирование методом Монте-Карло в статистической физике*. Пер. с англ. — М.: Наука, 1995.
- [5] Н. С. Бахвалов, *Численные методы*. — М.: Наука, 1975.
- [6] Н. Н. Калиткин, *Численные методы*. — М.: Наука, 1978.
- [7] Г. Корн, Т. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров*. — М.: Физматгиз, 1968.
- [8] А. Н. Матвеев, *Механика и теория относительности*. — М.: Высш. шк. 1986.