



ЛЕКЦИИ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКЕ

Е. С. Тверская

МГУ им. Н.Э. Баумана
Москва

Квадратурные формулы.

Основная задача: Требуется вычислить интеграл

$$F = \int_a^b f(x) dx,$$

где $f(x)$ - непрерывная функция.

Так как вычислить интеграл в элементарных функциях удается не всегда, то функцию $f(x)$ заменяют на аппроксимирующую ее функцию $\varphi(x, a)$.

Чаще всего $f(x)$ заменяют интерполяционным многочленом:

$$f(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)\varphi_i(x) + r(x).$$

Тогда

$$F = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^n f(x_i)\varphi_i(x) + r(x) \right) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b \varphi_i(x) dx + \int_a^b r(x) dx$$

и

$$F = \sum_{i=0}^n c_i f(x_i) + R, \quad (1)$$

где x_i - узлы интерполяции, c_i - веса, R - остаточный член формулы.

Формула (1) называется **формулой численного интегрирования** или **квадратурной формулой**.

Формула трапеций.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ многочленом Лагранжа 1-ой степени, проходящим через точки $x = a$ и $x = b$.

$$L_1(x) = \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b).$$

Тогда

$$F = \int_a^b f(x) dx \simeq \int_a^b \left(\frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b) \right) dx = \frac{f(a) + f(b)}{2} (b-a).$$

Найдем погрешность этой формулы.

Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $\bar{x} = (a + b)/2$:

$$f(x) = f(\bar{x}) + (x - \bar{x})f'(\bar{x}) + \frac{f''(\bar{x})}{2!}(x - \bar{x})^2 + o(x - \bar{x})^2.$$

Тогда

$$R = \int_a^b f(x) dx - \frac{f(a) + f(b)}{2}(b - a) \simeq -\frac{1}{12}(b - a)^3 f''(\bar{x}).$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})(f_{i-1} + f_i),$$

и

$$R \simeq -\frac{1}{12} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})^3 f''(\bar{x}_i)$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int_a^b f(x) dx \simeq h \left(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \cdots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2} \right),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1, n}$. А остаток

$$R \simeq -\frac{1}{12} \sum_{i=1}^n h^3 f''(\bar{x}_i) \simeq -\frac{1}{12} h^2 \int_a^b f''(x) dx = O(h^2).$$

Т. е. формула трапеций имеет второй порядок точности. Если предположить, что $f''(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leq \frac{b-a}{12} h^2 M_2, \quad \text{где} \quad M_2 = \max_{[a,b]} |f''(x)|$$

Формула прямоугольников.

Формула центральных прямоугольников.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ многочленом нулевой степени, т.е.

$$f(x) \simeq L_0(x) = f(x_0), \quad \text{где} \quad x_0 = \frac{a+b}{2}.$$

Тогда

$$F = \int_a^b f(x) dx \simeq \int_a^b f(x_0) dx = (b-a)f(x_0).$$

Вычислим погрешность данной формулы. Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $x_0 = (a+b)/2$:

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + o(x-x_0)^2.$$

Тогда

$$R = \int_a^b f(x) dx - (b-a)f(x_0) \simeq \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(x_0)$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1/2}), \quad \text{где } x_{i-1/2} = \frac{x_i + x_{i-1}}{2},$$

и

$$R \simeq \frac{1}{24} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})^3 f''(x_{i-1/2}).$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int_a^b f(x) dx \simeq h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1/2}),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1, n}$. А остаток

$$R \simeq \frac{1}{24} \sum_{i=1}^n h^3 f''(x_{i-1/2}) \simeq \frac{1}{24} h^2 \int_a^b f''(x) dx = O(h^2).$$

Т. е. формула центральных прямоугольников имеет второй порядок точности. Если предположить, что $f''(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leq \frac{b-a}{24} h^2 M_2, \quad \text{где} \quad M_2 = \max_{[a,b]} |f''(x)|.$$

Замечания.

- Остаточный член в формуле центральных прямоугольников, по абсолютной величине, примерно в 2-а раза меньше, чем в формуле трапеций. Следовательно, если значения функции одинаково легко вычисляются во всех точках, то лучше вести расчеты по формуле центральных прямоугольников.

- Знаки главного члена погрешности у формулы трапеций и у формулы центральных прямоугольников различны, следовательно, если провести расчеты по каждой из формул, то точное значение интеграла будет лежать между ними.

Формула левых прямоугольников.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ многочленом нулевой степени, т.е.

$$f(x) \simeq L_0(x) = f(a).$$

Тогда

$$F = \int_a^b f(x) dx \simeq \int_a^b f(a) dx = (b - a)f(a).$$

Вычислим погрешность данной формулы. Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $x_0 = (a + b)/2$:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + o(x - x_0).$$

Тогда

$$R = \int_a^b f(x) dx - (b - a)f(a) \simeq \frac{1}{2}(b - a)^2 f'(x_0)$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1}),$$

и

$$R \simeq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})^2 f''(x_{i-1/2}).$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int_a^b f(x) dx \simeq h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1, n}$. А остаток

$$R \simeq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n h^2 f''(x_{i-1/2}) \simeq \frac{1}{2} h \int_a^b f''(x) dx = O(h).$$

Т. е. формула левых прямоугольников имеет первый порядок точности. Если предположить, что $f'(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leq \frac{b-a}{2} h M_1, \quad \text{где} \quad M_1 = \max_{[a,b]} |f'(x)|.$$

Формула правых прямоугольников.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ многочленом нулевой степени, т.е.

$$f(x) \simeq L_0(x) = f(b).$$

Тогда

$$F = \int_a^b f(x) dx \simeq \int_a^b f(b) dx = (b-a)f(b).$$

Вычислим погрешность данной формулы. Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $x_0 = (a+b)/2$:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + o(x - x_0).$$

Тогда

$$R = \int_a^b f(x) dx - (b-a)f(b) \simeq -\frac{1}{2}(b-a)^2 f'(x_0).$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1}) f(x_i),$$

и

$$R \simeq -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - x_{i-1})^2 f''(x_{i-1/2}).$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int_a^b f(x) dx \simeq h \sum_{i=1}^n f(x_i),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1, n}$. А остаток

$$R \simeq -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n h^2 f''(x_{i-1/2}) \simeq -\frac{1}{2} h \int_a^b f'(x) dx = O(h).$$

Т. е. формула правых прямоугольников имеет первый порядок точности. Если предположить, что $f'(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leq \frac{b-a}{2} h M_1, \quad \text{где} \quad M_1 = \max_{[a,b]} |f'(x)|.$$

Замечание. В связи с небольшим порядком точности формул левых и правых прямоугольников, их применение на практика бывает достаточно редким.

Формула Симпсона.

- Разделим отрезок интегрирования $[a, b]$ на четное число частей - $2n$.
- Площадь криволинейной трапеции, соответствующей 2-м отрезкам $[x_{2k}, x_{2k+1}]$ и $[x_{2k+1}, x_{2k+2}]$ и ограниченной кривой $y = f(x)$, заменим площадью криволинейной трапеции, ограниченной многочленом второй степени, проходящим через точки: $M_{2k}(x_{2k}, f_{2k})$, $M_{2k+1}(x_{2k+1}, f_{2k+1})$ и $M_{2k+2}(x_{2k+2}, f_{2k+2})$.

Найдем площадь криволинейной трапеции, ограниченной параболой, проходящей через точки $N_0(-h, y_0)$, $N_1(0, y_1)$ и $N_2(h, y_2)$ и прямыми $x = -h$ и $x = h$. Построим многочлен Лагранжа, проходящий через данные 3-и точки.

$$L_2(x) = \frac{x(x-h)}{2h^2}y_0 - \frac{x^2-h^2}{h^2}y_1 + \frac{x(x+h)}{2h^2}y_2.$$

Тогда

$$\int_{-h}^h L_2(x) dx = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + y_2).$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_{2n-1} < x_{2n} = b.$$

Будем полагать, что данное разбиение равномерное, т. е. $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1, 2n}$.

Следовательно,

$$\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x) dx \simeq \frac{h}{3}(f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k}).$$

Тогда

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\simeq \frac{h}{3} \sum_{k=1}^n (f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k}) = \\ &= \frac{b-a}{6n} (f_0 + f_{2n} + 2[f_2 + f_4 + \dots + f_{2n-2}] + 4[f_1 + f_3 + \dots + f_{2n-1}]). \end{aligned}$$

Найдем погрешность этой формулы:

$$R_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx - \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}).$$

Для этого представим функцию $f(x)$ первыми 5-ю членами разложения в окрестности точки x_i с остаточным членом в форме Пеано.

$$f(x) = f(x_i) + (x - x_i)f'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}f''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!}f'''(x_i) + \frac{(x - x_i)^4}{4!}f^{IV}(x_i) + o(x - x_i)^4.$$

Тогда

$$R_i = \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x) dx - \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}) \simeq -\frac{1}{90}h^5 f^{IV}(x_i).$$

Данная погрешность получена на частичном отрезке разбиения. На всем отрезке $[a, b]$ погрешность будет иметь вид:

$$R \simeq -\frac{1}{90} \sum_{i=1}^n h^5 f^{IV}(x_{2i-1}) = -\frac{1}{180} h^4 \int_a^b f^{IV}(x) dx = O(h^4).$$

Если предположить, что $f^{IV}(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leq \frac{b-a}{180} h^4 M_4, \quad \text{где} \quad M_4 = \max_{[a,b]} |f^{IV}(x)|.$$

Квадратурные формулы интерполяционного типа.

Определение. Если заменить $f(x)$ интерполяционным многочленом сразу на всем отрезке интегрирования $[a, b]$, то полученная таким образом формула называется **квадратурной формулой интерполяционного типа**.

Построенные формулы центральных прямоугольников, трапеций и Симпсона являются частным случаем квадратурных формул интерполяционного типа при $n = 0, 1, 2$.

Заменим функцию $f(x)$ интерполяционным многочленом

$$f(x) \simeq L_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)} f(x_k).$$

Тогда

$$\int_a^b L_n(x) dx = \sum_{k=0}^n \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx f(x_k) = \sum_{k=0}^n c_k f(x_k).$$

Таким образом, квадратурная формула

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{k=0}^n c_k f(x_k)$$

является квадратурной формулой интерполяционного типа тогда и только тогда, когда

$$c_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx.$$

Оценка погрешности.

Получим выражение для погрешности квадратурной формулы интерполяционного типа.

Так как

$$f(x) = L_n(x) + r(x),$$

то

$$F = \sum_{k=0}^n c_k f(x_k) + R,$$

где

$$R = \int_a^b r(x) dx = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b f^{(n+1)}(\xi) \omega(x) dx.$$

Отсюда приходим к следующей оценке погрешности квадратурной формулы интерполяционного типа

$$|R| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} \int_a^b \omega(x) dx,$$

где $M_{n+1} = \max_{x \in [a, b]} |f^{(n+1)}(x)|$.

Тогда справедливо следующее утверждение:

Квадратурная формула интерполяционного типа, построенная с помощью $n + 1$ узла: x_0, x_1, \dots, x_n гарантированно точна для любого многочлена степени n .

Теорема. Если квадратурная формула

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{k=0}^n d_k f(x_k)$$

точна для любого многочлена степени n , то она является квадратурной формулой интерполяционного типа.

◀ Достаточно показать, что $d_k = c_k$ при $k = \overline{0, n}$.

Для этого рассмотрим многочлены

$$\varphi_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)}, \quad k = \overline{0, n}.$$

Вычисли интегралы

$$I_k = \int_a^b \varphi_k(x) dx.$$

Так как квадратурная формула точна для любого многочлена степени n ,
то

$$I_k = \sum_{l=0}^n d_l \varphi_k(x_l).$$

Поскольку

$$\varphi_k(x_l) = \begin{cases} 0, & k \neq l, \\ 1, & k = l, \end{cases}$$

получаем $I_k = d_k$, при $k = \overline{0, n}$. С другой стороны

$$I_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx = c_k.$$

Таким образом, $d_k = c_k$ при $k = \overline{0, n}$. ►

Формула Гаусса.

Было показано. Квадратурная формула

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{k=1}^n c_k f(x_k)$$

точна для любого многочлена степени $n - 1$.

Основная задача. За счет выбора узлов интерполяции получить квадратурные формулы, которые будут точны для многочленов степени выше $n - 1$.

Потребуем, чтобы формула была точна для любого многочлена степени m . Данное требование эквивалентно условию:

$$\sum_{k=1}^n c_k x_k^\alpha = \int_a^b x^\alpha dx, \quad \alpha = 0, 1, \dots, m.$$

Таким образом получаем систему из $m + 1$ уравнения с $2n$ неизвестными:

$$c_1, c_2, \dots, c_n; \quad x_1, x_2, \dots, x_n.$$

Потребуем, чтобы число уравнений равнялось числу неизвестных, т. е. $m = 2n - 1$.

Определение. Полученные таким образом квадратурные формулы называются **квадратурными формулами наивысшей алгебраической точности** или **формулами Гаусса**. Эти формулы точны для любого многочлена степени $2n - 1$.

Рассмотрим многочлен общего вида

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n).$$

Запишем критерий того, что квадратурная формула

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{k=1}^n c_k f(x_k)$$

является квадратурной формулой Гаусса.

Теорема. Квадратурная формула точна для любого многочлена степени $m = 2n - 1$ тогда и только тогда, когда выполнены два условия:

1. многочлен $\omega(x)$ ортогонален любому многочлену $q(x)$ степени меньше n , т. е.

$$\int_a^b \omega(x)q(x) dx = 0;$$

2. квадратурная формула является квадратурной формулой интерполяционного типа, т. е.

$$c_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

◀ **Необходимость.** Пусть формула точна для любого многочлена степени $2n - 1$. Следовательно, она точна для многочлена $\omega(x)q(x)$ степени не выше $2n - 1$, т. е.

$$\int_a^b \omega(x)q(x) dx = \sum_{k=1}^n c_k \omega(x_k)q(x_k) = 0.$$

Таким образом, требование ортогональности выполнено.

Так как, по предположению, квадратурная формула точна для любого многочлена степени $2n - 1$, то она будет точна и для многочлена степени $n - 1$. Следовательно, она является квадратурной формулой интерполяционного типа (согласно предыдущей теореме).

Достаточность. Пусть $f(x)$ - произвольный многочлен степени $2n - 1$. Тогда, согласно правилу деления многочленов

$$f(x) = \omega(x)q(x) + r(x),$$

где $q(x)$ и $r(x)$ - многочлены степени не выше $n - 1$. При этом

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b \omega(x)q(x) dx + \int_a^b r(x) dx = \int_a^b r(x) dx.$$

Так как $r(x)$ - многочлен степени не выше $n - 1$ и, по предположению, квадратурная формула является квадратурной формулой интерполяционного типа, то

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{k=1}^n c_k r(x_k) = \sum_{k=1}^n c_k (f(x_k) - \omega(x_k)q(x_k)) = \sum_{k=1}^n c_k f(x_k).$$

Таким образом, квадратурная формула точна для любого многочлена степени $2n - 1$. ►

Замечание. Использование доказанной теоремы упрощает построение формул Гаусса. Для этого достаточно условие ортогональности переписать в виде

$$\int_a^b \omega(x)x^\alpha dx = 0, \quad \alpha = 0, 1, \dots, n - 1.$$

Таким образом узлы в формулах Гаусса x_1, x_2, \dots, x_n можно найти из условия ортогональности.

А коэффициенты c_k по формуле

$$c_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx, \quad k = 1, 2, \dots, n.$$

Существование и единственность квадратурной формулы наивысшей алгебраической точности.

Представим искомый многочлен $\omega(x)$ в виде

$$\omega(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_{n-1}x^{n-1} + x^n.$$

Тогда условие ортогональности примет следующий вид:

$$\int_a^b (a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_{n-1}x^{n-1} + x^n) x^\alpha dx = 0, \quad \alpha = 0, 1, \dots, n-1.$$

Данное условие представляет собой СЛАУ относительно неизвестных коэффициентов a_0, a_1, \dots, a_{n-1} .

Покажем, что соответствующая однородная система

$$\int_a^b (a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_{n-1}x^{n-1}) x^\alpha dx = 0, \quad \alpha = 0, 1, \dots, n-1.$$

имеет единственное решение

$$a_0 = a_1 = \dots = a_{n-1}.$$

Умножим полученную систему на a_α и просуммируем по всем α .

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=0}^{n-1} a_\alpha \int_a^b \left(\sum_{k=0}^{n-1} a_k x^k \right) x^\alpha dx &= \int_a^b \left(\sum_{\alpha=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} a_\alpha a_k x^k x^\alpha \right) dx = \\ &= \int_a^b \left(\sum_{l=0}^{n-1} a_l x^l \right)^2 dx = 0. \end{aligned}$$

Последнее равенство возможно лишь в случае

$$a_0 = a_1 = \dots = a_{n-1}.$$