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 квадратуры 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 $[-1, 1]$:

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

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

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

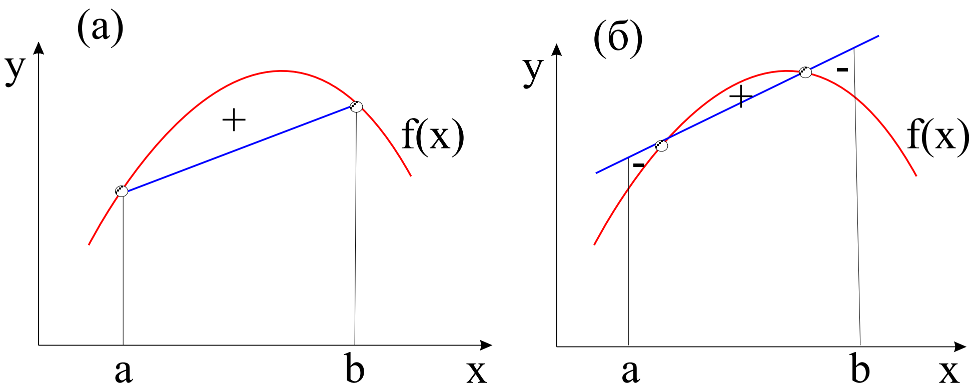

Рис. 2.2: Аппроксимация подынтегральной функции $f(x)$ с помощью (a) кусочно-линейной функции на равномерной сетке (метод трапеций) и (б) полиномиальной интерполирующей функции на неравномерной сетке (метод квадратур). Знаками "+" и "−" отмечены погрешности аппроксимации. Видно, что в методе квадратур 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:

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

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) □

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	$w_0 = 0,171324492$	$x_0 = -0,932469514$	$\sim f^{(12)}(x)$
	$w_1 = 0,360761573$	$x_1 = -0,661209386$	
	$w_2 = 0,467913935$	$x_2 = -0,238619186$	
	$w_3 = 0,467913935$	$x_3 = +0,238619186$	
	$w_4 = 0,360761573$	$x_4 = +0,661209386$	
	$w_5 = 0,171324492$	$x_5 = +0,932469514$	