Курс лекций для групп 111 и 113 **«ВВЕДЕНИЕ В ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ»**

© 1995, 2007 А.В. Абраменков

Лекция 8. Численное интегрирование

1. Общий принцип построения квадратурных формул

Термин «численное интегрирование» используют, говоря о двух совершенно разных задачах — вычислении определенных интегралов и решении дифференциальных уравнений. Здесь речь пойдет о первой из этих задач. Во избежание путаницы понятий, вычисление интеграла часто называют также термином «квадратура», происхождение которого связано с геометрическим смыслом определенного интеграла как площади криволинейной фигуры.

Подавляющее большинство наиболее употребительных квадратурных формул (т. е. формул для приближенного вычисления определенных интегралов) построены по общему принципу. Пусть требуется вычислить интеграл

$$\int_{a}^{b} f(x) \, dx. \tag{1}$$

Выберем на отрезке интегрирования [a, b] набор узлов x_i ($a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b$) и построим по ним многочлен n-й степени $P_n(x)$, интерполирующий подынтегральную функцию. Считая, что $P_n(x)$ приближенно передает поведение f(x) на отрезке [a, b], получим общую формулу

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a}^{b} P_{n}(x) dx.$$

В зависимости от количества узлов и их распределения на [a, b] получатся разные варианты *интерполяционных* квадратурных формул.

Запишем $P_n(x)$ в форме Лагранжа

$$P_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) L_k(x) ,$$

$$L_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \ i \neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{(x_k - x_i)} ,$$

и проинтегрируем сумму почленно:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \int_{a}^{b} P_{n}(x) dx = \sum_{k=0}^{n} \left[f(x_{k}) \int_{a}^{b} L_{k}(x) dx \right] = \sum_{k=0}^{n} w_{k} f(x_{k}), \quad (2)$$

где

$$w_k = \int_a^b L_k(x) \, dx. \tag{3}$$

Таким образом, согласно (2), приближенное значение интеграла (1) можно найти, суммируя значения подынтегральной функции в некоторых точках (узлах) x_k , умноженные на числовые коэффициенты w_k , называемые весами. Уравнение (3) дает способ вычисления весов для произвольного набора узлов. Заметим, что значения весов не зависят от вида подынтегральной функции, поскольку многочлены $L_k(x)$ определяются только количеством и размещением узлов на отрезке [a, b].

Существуют два важных класса интерполяционных квадратурных формул, различающиеся способом выбора узлов — формулы Ньютона–Котеса и формулы Гаусса; они будут рассмотрены ниже.

2. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса

Формулы Ньютона–Котеса получаются, если использовать равноотстоящие узлы, обязательно включающие границы отрезка интегрирования: $x_k = a + kh$ (k = 0, 1, ..., n), где h = (b - a)/n, так что $x_0 = a$, $x_n = b$. Величина h (расстояние между соседними узлами) называется *шагом* численного интегрирования. Первые представители этого семейства формул хорошо известны: при n = 1 получается формула трапеций, при n = 2 — формула Симпсона, при n = 3 — формула Ньютона или

«правило 3/8». Формулы Ньютона–Котеса с более высокими n не имеют индивидуальных названий.

Заметим, что самая простая из квадратурных формул — формула прямоугольников — не относится к формулам Ньютона-Котеса, поскольку основана на многочлене нулевой степени, который строится по единственному узлу. В формулах Ньютона-Котеса минимальное число узлов — два (границы отрезка интегрирования). Что касается формулы прямоугольников, то в случае размещения узла в середине отрезка она является простейшей из формул Гаусса.

Рассмотрим вычисление весов на примере формулы трапеций. Имеем два узла: $x_0 = a$, $x_1 = a + h = b$, h = b - a. В соответствии с уравнением (3) получим:

$$w_0 = \int_a^b L_0(x) dx = \int_a^b \frac{x - x_1}{x_0 - x_1} dx = \int_a^b \frac{x - b}{-h} dx =$$

$$= -\frac{1}{h} \int_{a-h}^0 u du = -\frac{1}{h} \int_{-h}^0 u du = \frac{1}{h} \cdot \frac{h^2}{2} = \frac{1}{2} h.$$

(Здесь мы использовали замену переменной интегрирования u = x - b.) Аналогично,

$$w_1 = \int_a^b L_1(x) dx = \int_a^b \frac{x - x_0}{x_1 - x_0} dx = \int_a^b \frac{x - a}{h} dx =$$

$$= \frac{1}{h} \int_0^{b-a} u du = \frac{1}{h} \int_0^h u du = \frac{1}{h} \cdot \frac{h^2}{2} = \frac{1}{2} h.$$

Таким образом, $w_0 = w_1 = h/2$, и формула трапеций запишется в виде:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx w_0 f(x_0) + w_1 f(x_1) = \frac{h}{2} [f(a) + f(b)]. \tag{4}$$

Обратите внимание, что полученные веса зависят не от абсолютных величин a и b, а лишь от их разности (т. е. от длины отрезка или от шага интегрирования).

Формула Симпсона использует три узла: $x_0 = a$, $x_1 = a + h$, $x_2 = a + 2h = b$, причем h = (b - a)/2. Вычисляя соответствующие веса, получим:

$$w_0 = \int_a^b L_0(x) \, dx = \int_a^b \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} \, dx =$$

$$= \frac{1}{2h^2} \int_a^b (x - a - h)(x - b) \, dx = \frac{1}{3} h,$$

$$w_1 = \int_a^b L_1(x) \, dx = \int_a^b \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} \, dx =$$

$$= -\frac{1}{h^2} \int_a^b (x - a)(x - b) \, dx = \frac{4}{3} h,$$

$$w_2 = \int_a^b L_2(x) \, dx = \int_a^b \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \, dx =$$

$$= \frac{1}{2h^2} \int_a^b (x - a)(x - b + h) \, dx = \frac{1}{3} h.$$

Таким образом, $w_0 = w_2 = h/3$, $w_1 = 4h/3$, и формула Симпсона запишется в виде:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx w_{0} f(x_{0}) + w_{1} f(x_{1}) + w_{2} f(x_{2}) =$$

$$= \frac{h}{3} [f(a) + 4f(a+h) + f(b)].$$
(5)

Как и в случае формулы трапеций, веса зависят только от длины отрезка, но не от самих значений a и b. Легко понять, что это общее свойство формул Ньютона–Котеса, обусловленное равномерным распределением узлов на отрезке.

Таблица 1, приведенная в Приложении, содержит узлы и веса формул Ньютона-Котеса вплоть до n=8. Как видно из таблицы, в каждой формуле веса симметричны относительно центрального индекса (первый равен последнему, второй — предпоследнему и т. д.); это непосредственно следует из симметричного расположения узлов на отрезке. Интересно отметить, что все веса для формул с n от 1 до 7 положительны. Таким свойством обладают еще веса при n = 9, тогда как у всех остальных формул (т. е. при n=8 и $n\geqslant 10$ среди весов присутствуют как положительные, так и отрицательные величины, причем их абсолютные значения быстро увеличиваются по мере роста n. Это приводит к росту вычислительной погрешности, связанной с потерей точности за счет взаимного сокращения слагаемых с разными знаками (абсолютные величины слагаемых в квадратурной формуле растут, тогда как их сумма, равная приближенному значению интеграла, должна оставаться практически постоянной). По этой причине формулы Ньютона-Котеса с n > 9на практике не применяются.

3. Погрешность квадратурной формулы

Разница между точным значением интеграла и результатом численного интегрирования называется погрешностью квадратурной формулы:

$$R_n = \int_a^b f(x) dx - \int_a^b P_n(x) dx.$$

В принципе, величину R_n можно найти, интегрируя погрешность интерполяционного многочлена $r_n(x) = f(x) - P_n(x)$, для которой существует выражение

$$r_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x).$$

Однако здесь есть одна трудность. Дело в том, что точка ξ , где вычисляется производная, зависит от положения точки x, в которой проводится интерполяция. Поэтому для правильного интегрирования $r_n(x)$ необходимо знать зависимость $\xi(x)$. Если заменить $f^{(n+1)}(\xi)$ постоянной величиной, равной, например, максимальному значению (n+1)-й производной на отрезке [a,b], то для $r_n(x)$ получится оценка сверху. Ее легко проинтегрировать, но полученная оценка R_n для некоторых квадратурных

формул оказывается сильно завышенной. Чтобы оценить R_n более точно, применяют иные подходы. В качестве примера рассмотрим погрешности элементарной формулы прямоугольников и двух первых формул Ньютона–Котеса.

Разложим подынтегральную функцию в ряд Тейлора в окрестности некоторой (выбранной произвольно) точки ξ на отрезке [a, b]:

$$f(x) = f(\xi) + (x - \xi)f'(\xi) + (x - \xi)^2 \frac{f''(\xi)}{2} + (x - \xi)^3 \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} + (x - \xi)^4 \frac{f^{(4)}(\xi)}{24} + \cdots$$
(6)

Интегрируя обе части этого равенства с заменой переменной интегрирования $u = x - \xi$, получим:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = f(\xi) (b - a) + f'(\xi) \int_{a-\xi}^{b-\xi} u du + \frac{f''(\xi)}{2} \int_{a-\xi}^{b-\xi} u^{2} du + \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} \int_{a-\xi}^{b-\xi} u^{3} du + \frac{f^{(4)}(\xi)}{24} \int_{a-\xi}^{b-\xi} u^{4} du + \cdots$$
(7)

Первое слагаемое в правой части есть не что иное, как приближенное значение интеграла, вычисленное по формуле прямоугольников $I_R = f(x_0) \, (b-a)$, если узел x_0 совпадает с точкой разложения ξ . Таким образом, погрешность формулы прямоугольников можно представить в виде

$$R_{0} = I - I_{R} = f'(\xi) \int_{a-\xi}^{b-\xi} u \, du + \frac{f''(\xi)}{2} \int_{a-\xi}^{b-\xi} u^{2} \, du + \frac{f^{(3)}(\xi)}{6} \int_{a-\xi}^{b-\xi} u^{3} \, du + \frac{f^{(4)}(\xi)}{24} \int_{a-\xi}^{b-\xi} u^{4} \, du + \cdots,$$

где I — точное значение интеграла в левой части уравнения (7).

Рассмотрим важный частный случай, когда в качестве точки ξ взята середина отрезка [a, b], т. е. $\xi = (a+b)/2$. Тогда $a-\xi = -h/2$, $b-\xi = h/2$,

где h = b - a — длина отрезка, и все интегралы от нечетных степеней переменной u в правой части уравнения (7) обращаются в нуль, так что

$$I = \int_{a}^{b} f(x) dx = hf(\xi) + \frac{f''(\xi)}{2} \int_{-h/2}^{h/2} u^{2} du + \frac{f^{(4)}(\xi)}{24} \int_{-h/2}^{h/2} u^{4} du + \dots =$$

$$= hf(\xi) + \frac{1}{24} h^{3} f''(\xi) + \frac{1}{1920} h^{5} f^{(4)}(\xi) + \dots =$$

$$= I_{R} + \frac{1}{24} h^{3} f''(\xi) + \frac{1}{1920} h^{5} f^{(4)}(\xi) + \dots$$
(8)

При достаточно малом h основной вклад в величину погрешности дает первое слагаемое остаточного члена:

$$R_0 = I - I_R \approx \frac{1}{24} h^3 f''(\xi). \tag{9}$$

Заметим, что если узел $x_0 = \xi$ формулы прямоугольников не совпадает с серединой отрезка, то интегралы от нечетных степеней u будут отличны от нуля, и в оценке погрешности старшим окажется член, пропорциональный $f'(\xi)\,h^2$. Таким образом, для формулы прямоугольников оптимальным является размещение узла в середине отрезка, поскольку при этом ошибка становится минимальной.

Получим теперь оценку погрешности для формулы трапеций. Поместив ξ в середину отрезка [a, b], применим разложение (6) к значениям функции в точках a и b:

$$f(a) = f(\xi) - \frac{h}{2}f'(\xi) + \frac{h^2}{8}f''(\xi) - \frac{h^3}{48}f^{(3)}(\xi) + \frac{h^4}{384}f^{(4)}(\xi) - \cdots,$$

$$f(b) = f(\xi) + \frac{h}{2}f'(\xi) + \frac{h^2}{8}f''(\xi) + \frac{h^3}{48}f^{(3)}(\xi) + \frac{h^4}{384}f^{(4)}(\xi) + \cdots,$$

где h=b-a. Эти выражения получены из (6) с учетом того, что $a-\xi=-h/2,\ b-\xi=h/2$. Подставим их в формулу трапеций:

$$I_T = \frac{h}{2} \left[f(a) + f(b) \right] = h f(\xi) + \frac{h^3}{8} f''(\xi) + \frac{h^5}{384} f^{(4)}(\xi) + \cdots$$
 (10)

Вычитая (10) из разложения (8) для точного значения интеграла, имеем:

$$R_1 = I - I_T = -\frac{h^3}{12}f''(\xi) - \frac{h^5}{480}f^{(4)}(\xi) + \cdots$$

Для достаточно малых h можно ограничиться старшим членом:

$$R_1 = I - I_T \approx -\frac{1}{12} h^3 f''(\xi). \tag{11}$$

Сравнивая оценки (9) и (11), видим, что формула прямоугольников с узлом в середине отрезка имеет точность того же порядка по h, что и формула трапеций, построенная на основе интерполяционного многочлена более высокой степени, причем формула прямоугольников обладает даже некоторым преимуществом, так как числовой коэффициент в выражении погрешности у нее меньше.

Пользуясь приведенными выше разложениями f(a) и f(b), легко получить и оценку погрешности формулы Симпсона.

$$I_S = \frac{h}{6} \left[f(a) + 4f(\xi) + f(b) \right] = hf(\xi) + \frac{h^3}{24} f''(\xi) + \frac{h^5}{1152} f^{(4)}(\xi) + \cdots$$
 (12)

Вычитая (12) из (8), находим:

$$R_2 = I - I_S = -\frac{h^5}{2880} f^{(4)}(\xi) + \cdots$$

Здесь h, как и в предыдущих случаях, соответствует длине отрезка [a, b]. Если перейти к более привычному определению h = (b - a)/2, то последнее выражение превратится в

$$R_2 = I - I_S \approx -\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi). \tag{13}$$

Оценки погрешностей для формул Ньютона-Котеса с большим числом узлов можно найти в таблице 1.

4. Порядок точности квадратурной формулы

Рассмотрим результат применения формул прямоугольников и трапеций в том случае, когда подынтегральная функция представляет собой многочлен первой степени: $f(x) = a_0 + a_1 x$. Согласно выражениям (9) и (11), погрешность в обоих случаях равна нулю, так как равны нулю вторая и более высокие производные f(x). Для формулы трапеций

этот результат представляется тривиальным, поскольку интерполяционный многочлен первой степени, построенный по двум узлам, обязан полностью совпасть с линейной подынтегральной функцией . Однако для формулы прямоугольников, которая основана на замене подынтегральной функции многочленом нулевой степени, то есть постоянной величиной, это не столь очевидно. В отличие от формулы трапеций, погрешность интерполяции здесь не равна нулю, а абсолютно точный результат интегрирования объясняется взаимной компенсацией ошибок на разных участках отрезка [a,b]. Если узел x_0 формулы прямоугольников не совпадает с серединой отрезка, то, как было показано выше, главный член погрешности пропорционален величине $f'(\xi) h^2$, и точно проинтегрировать линейную функцию уже не удастся. Это наглядно продемонстрировано на рис. 1.

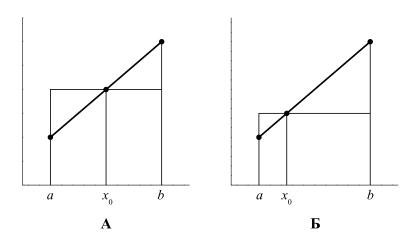


Рис. 1. Интегрирование линейной функции с помощью формулы прямоугольников:

 ${f A}$ — узел x_0 в середине отрезка, суммарная погрешность равна нулю;

 ${f B}$ — узел x_0 не совпадает с серединой отрезка, погрешность отлична от нуля.

На примере формулы прямоугольников видно, что квадратурная формула, полученная в результате замены подынтегральной функции мно-

 $^{^{1}}$ Так как существует единственный многочлен первой степени, принимающий заданные значения в двух точках.

гочленом *п*-й степени, может давать точные результаты при интегрировании многочленов более высоких степеней. Аналогичная ситуация имеет место для формулы Симпсона: из выражения (13) ясно, что она дает точные результаты при интегрировании многочленов до 3-й степени включительно, хотя основана на замене подынтегральной функции интерполяционным многочленом второй степени.

Порядком точности квадратурной формулы называют максимальную степень многочлена, при интегрировании которого данная формула дает точный результат. Согласно этому определению, формула прямоугольников с узлом в середине отрезка и формула трапеций являются квадратурными формулами первого порядка точности; формулы Симпсона и «3/8» имеют третий порядок точности. Из таблицы 1 видно, что все формулы Ньютона–Котеса с нечетным числом узлов имеют такой же порядок точности, как формулы с числом узлов, большим на единицу.

5. Формулы наивысшего порядка точности (формулы Гаусса)

Порядок точности квадратурной формулы, полученной на основе интерполяционного многочлена n-й степени, не может быть ниже, чем n. Действительно, если подынтегральная функция является многочленом степени n, то интерполяционный многочлен, построенный по n+1 узлам, тождественно с ней совпадает, поскольку существует единственный многочлен n-й степени с заданными значениями в n+1 точках. Если подынтегральная функция — многочлен более высокой степени, чем n, то интерполяционный многочлен не может совпасть с ней во всех точках отрезка интегрирования, т. е. погрешность интерполяции будет отличной от нуля. Однако, как видно из приведенных выше примеров, погрешность интегрирования при определенном положении узлов тем не менее может обратиться в нуль из-за взаимной компенсации ошибок. Так, формула прямоугольников имеет первый или нулевой порядок точности в зависимости от того, находится ли ее единственный узел в середине отрезка или нет. Точно так же формула Симпсона имеет третий порядок благодаря выбору равноотстоящих узлов; при другом их расположении порядок может оказаться более низким (вторым).

Выше уже отмечалось, что порядок точности формул Ньютона-Котеса в лучшем случае на единицу выше степени используемого интерполяционного многочлена. Возникает вопрос: можно ли еще больше повысить порядок точности квадратурной формулы по сравнению со степенью интерполяционного многочлена? И если да, то каков максимально возможный порядок при данном числе узлов и как нужно для этого расположить узлы на отрезке интегрирования?

Ответ на эти вопросы дает теорема, которая утверждает, что для формулы с n+1 узлами (т. е. основанной на многочлене n-й степени) максимально возможный порядок точности равен 2n+1. Следовательно, формула прямоугольников при выборе узла в середине отрезка имеет наивысший порядок точности, тогда как формула Симпсона в этом смысле не оптимальна, поскольку при подходящем выборе трех узлов можно получить формулу не 3-го, а 5-го порядка точности! Чтобы достичь наивысшего возможного порядка точности, узлы квадратурной формулы должны совпадать с корнями многочлена (n+1)-й степени, принадлежащего к системе ортогональных многочленов на рассматриваемом отрезке интегрирования. Такие формулы называются формулами Гаусса.

Многочлены $Q_n(x)$ и $Q_m(x)$ степеней n и m называются ортогональными на отрезке [a, b], если

$$\int_{a}^{b} Q_{n}(x) Q_{m}(x) dx = 0 \text{ при } n \neq m.$$
 (14)

Мы скажем, что многочлены $Q_n(x)$ ($n=0,1,2,\ldots$) образуют систему ортогональных многочленов на данном отрезке, если они попарно ортогональны. Все корни таких многочленов действительны, различны и находятся внутри отрезка ортогональности [a,b].

Известна система многочленов, ортогональных на отрезке [-1, 1]. Это так называемые *многочлены Лежандра*. Первые представители это-

го семейства выглядят так:

$$P_0(x) = 1,$$

$$P_1(x) = x,$$

$$P_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1),$$

$$P_3(x) = \frac{1}{2} (5x^3 - 3x),$$

$$P_4(x) = \frac{1}{8} (35x^4 - 30x^2 + 3).$$

Многочлен Лежандра произвольной степени можно построить, последовательно применяя рекуррентное соотношение

$$P_{n+1}(x) = \frac{1}{n+1} \left[(2n+1) x P_n(x) - n P_{n-1}(x) \right].$$

Нетрудно убедиться, что корни первых многочленов Лежандра $P_n(x)$ даются приведенными ниже формулами; вместе с корнями указаны веса квадратурных формул, определенные по уравнению (3).

$$n = 1: \quad x_0 = 0, \qquad w_0 = 2.$$

$$n = 2: \quad -x_0 = x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}, \qquad w_0 = w_1 = 1.$$

$$n = 3: \quad -x_0 = x_2 = \sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_1 = 0, \qquad w_0 = w_2 = \frac{5}{9}, \quad w_1 = \frac{8}{9}.$$

$$n = 4: \quad -x_0 = x_3 = \sqrt{\frac{15 + 2\sqrt{30}}{35}}, \quad w_0 = w_3 = \frac{18 - \sqrt{30}}{36},$$

$$-x_1 = x_2 = \sqrt{\frac{15 - 2\sqrt{30}}{35}}, \quad w_1 = w_2 = \frac{18 + \sqrt{30}}{36}.$$

Корни расположены симметрично относительно середины отрезка; у многочленов нечетных степеней один из корней находится в середине (x=0). Веса, отвечающие симметричным корням, равны между собой.

Таблица 2 (см. Приложение) содержит узлы и веса формул Гаусса вплоть до n=24, т. е. до порядка точности 47 включительно. Приведенные величины содержат не менее 20 значащих цифр, чтобы обеспечить

максимальную точность при вычислениях со всеми доступными типами чисел с плавающей точкой, включая расширенный (80-битовый) формат на процессорах Intel.

Табулированные узлы и веса можно непосредственно применять только при интегрировании на отрезке [-1, 1]. Интеграл на произвольном отрезке [a, b] нужно предварительно привести к стандартному отрезку путем замены переменной:

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2},$$

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^{1} f(x(t)) dt.$$

Тогда

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^{n} w_k f(x_k), \tag{15}$$

где

$$x_k = \frac{b-a}{2} t_k + \frac{b+a}{2} \,, \tag{16}$$

причем t_k и w_k — табличные узлы и веса формулы Гаусса для отрезка [-1, 1].

6. Интегрирование с весовой функцией

Иногда бывает удобно представить подынтегральную функцию в виде произведения:

$$\int_{a}^{b} f(x) \, dx = \int_{a}^{b} g(x) \, p(x) \, dx. \tag{17}$$

Обычно это делают в тех случаях, когда речь идет о некотором семействе интегралов, имеющих сходную структуру. Тогда p(x) выбирают так, чтобы она была общей для всего семейства, и называют весовой функцией. Индивидуальные особенности подынтегральной функции содержатся в g(x).

Представление (17) используют, чтобы построить специализированные квадратурные формулы для данного семейства интегралов. Интерполяционным многочленом $P_n(x)$ заменяют только g(x), а весовую функцию p(x) учитывают при определении весов квадратуры:

$$\int_{a}^{b} g(x) p(x) dx \approx \int_{a}^{b} P_{n}(x) p(x) dx =$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \left[g(x_{k}) \int_{a}^{b} p(x) L_{k}(x) dx \right] = \sum_{k=0}^{n} w_{k} g(x_{k}),$$
(18)

где

$$w_k = \int_a^b p(x) L_k(x) dx.$$
 (19)

При этом вклад от p(x) учитывается точно, а ошибка квадратурной формулы зависит лишь от качества приближения g(x) многочленом.

Рассмотрим, например, вычисление интегралов

$$\int_{-1}^{1} x \sqrt{1-x^2} \, dx, \quad \int_{-1}^{1} (1+2x^3) \sqrt{1-x^2} \, dx, \quad \int_{-1}^{1} e^x \sqrt{1-x^2} \, dx$$

и т. д. Их общей особенностью является то, что на концах отрезка интегрирования производные подынтегральной функции f(x) становятся бесконечными. Так как ни один многочлен $P_n(x)$ при конечных значениях аргумента не может иметь бесконечно больших производных, то $P_n(x)$ не в состоянии правильно передать поведение f(x) вблизи точек $x=\pm 1$. По этой причине обычные квадратурные формулы, будь то формулы Ньютона-Котеса или Гаусса, дают большие погрешности при вычислении интегралов такого типа, а процесс интегрирования с контролем точности, описанный в следующем разделе, сходится очень медленно.

Очевидно, источником неприятностей здесь является множитель $\sqrt{1-x^2}$, входящий во все подынтегральные функции. Именно он ответствен за бесконечные производные на концах отрезка интегрмрования, а остальная часть подынтегральной функции представляет собой либо многочлен, либо (как в последнем примере) гладкую функцию, хорошо

приближаемую многочленом. Поэтому трудности исчезнут, если множитель $\sqrt{1-x^2}$ выделить в весовую функцию и построить специальную квадратурную формулу для подобных интегралов.

Сама формула может быть как ньютон-котесовского, так и гауссовского типа, т.е. иметь в качестве узлов либо равноотстоящие точки, либо корни ортогональных многочленов. Следует, однако, иметь в виду, что в случае формул наивысшего порядка точности (т.е. гауссовых квадратур) придется использовать многочлены, ортогональные относительно интегрирования с данной весовой функцией. Иными словами, условие ортогональности (14) необходимо заменить на

$$\int_{a}^{b} Q_{n}(x) Q_{m}(x) p(x) dx = 0 \quad (n \neq m).$$
 (20)

Поэтому вместо многочленов Лежандра мы будем иметь дело с другими семействами многочленов (ортогональных в смысле условия (20)).

Существует несколько стандартных семейств ортогональных многочленов, различающихся выбором весовой функции p(x) и отрезком интегрирования [a, b]. Наиболее известные из них (встречающиеся в задачах физики и химии) перечислены ниже. Узлы и веса квадратурных формул, построенных на основе этих многочленов, табулированы; их можно найти в справочной литературе². Имеются также программы, позволяющие рассчитывать эти узлы и веса с любой желаемой степенью точности.

- **1. Многочлены Лежандра.** Весовая функция p(x) = 1, отрезок ортогональности [-1, 1]. Мы уже рассматривали это семейство многочленов, порождающее обычные квадратурные формулы Гаусса, которые иногда называют формулами Гаусса—Лежандра.
- **2.** Многочлены Чебышёва. Существуют многочлены Чебышёва первого рода $T_n(x)$ и второго рода $U_n(x)$. Многочлены первого рода ортогональны на отрезке [-1, 1] с весовой функцией $p(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$, второго рода на том же отрезке с весовой функцией $p(x) = \sqrt{1-x^2}$. Таким образом, многочлены Чебышёва второго рода как раз подходят для получения формул наивысшего порядка точности в рассмотренном выше примере.

²См., например, «Справочник по специальным функциям» под ред. М. Абрамовица и И. Стиган, М.: «Наука», 1979; гл. 25, а также приведенный там список литературы

Многочлены Чебышёва $T_n(x)$ были рассмотрены ранее (в лекции об интерполяции); их можно получить по рекуррентному соотношению

$$T_{n+1}(x) = 2x T_n(x) - T_{n-1}(x),$$

начав с частных выражений для степеней 0 и 1: $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$. Многочлены $U_n(x)$ связаны таким же рекуррентным соотношением при $U_0(x) = 1$, $U_1(x) = 2x$.

3. Многочлены Якоби. Весовая функция $p(x) = (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}$ $(\alpha, \beta > -1)$, отрезок ортогональности [-1, 1]. Многочлен Якоби n-й степени обычно обозначают $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$. Первые два многочлена семейства выражаются формулами

$$P_0^{(\alpha,\beta)}(x) = 1, \quad P_1^{(\alpha,\beta)}(x) = \frac{1}{2} \left[\alpha - \beta + (\alpha + \beta + 2) x \right].$$

Многочлен Якоби произвольной степени n можно построить, пользуясь рекуррентным соотношением

$$a P_{n+1}^{(\alpha,\beta)}(x) = (b+cx) P_n^{(\alpha,\beta)}(x) - d P_{n-1}^{(\alpha,\beta)}(x),$$

где коэффициенты a, b, c и d даются выражениями:

$$a = 2(n+1)(\alpha + \beta + n + 1)(\alpha + \beta + 2n),$$

$$b = (\alpha + \beta + 2n + 1)(\alpha^{2} - \beta^{2}),$$

$$c = (\alpha + \beta + 2n + 2)(\alpha + \beta + 2n + 1)(\alpha + \beta + 2n),$$

$$d = 2(\alpha + n)(\beta + n)(\alpha + \beta + 2n + 2).$$

В двух частных случаях $\alpha=\beta=-1/2$ и $\alpha=\beta=1/2$ весовая функция многочленов Якоби совпадает с весовыми функциями многочленов Чебышёва первого и второго рода. Это означает, что $P_n^{(-\frac{1}{2},-\frac{1}{2})}(x)$ может отличаться от $T_n(x)$ только постоянным множителем (возможно, зависящим от n). То же самое можно сказать и о многочленах $P_n^{(\frac{1}{2},\frac{1}{2})}(x)$ и $U_n(x)$.

Квадратурные формулы наивысшего порядка точности для отрезка [-1, 1] с весовой функцией $p(x) = (1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}$ называют формулами Гаусса–Якоби.

4. Многочлены Лагерра. Весовая функция $p(x) = e^{-x}$, отрезок ортогональности $[0, \infty]$. Многочлен Лагерра n-й степени обозначают

 $L_n(x)$. Многочлены Лагерра нулевой и первой степеней выражаются формулами:

$$L_0(x) = 1$$
, $L_1(x) = 1 - x$.

Многочлен произвольной степени n можно получить по рекуррентному соотношению

$$(n+1)L_{n+1}(x) = (2n+1-x)L_n(x) - nL_{n-1}(x).$$

Квадратурные формулы наивысшего порядка точности для отрезка $[0,\infty]$ с весовой функцией $p(x)=e^{-x}$ называют формулами Гаусса-Лагерра (или просто формулами Лагерра). Корни многочленов Лагерра любой степени конечны. Поэтому, хотя речь идет об интегралах с бесконечным верхним пределом, узлы квадратурной формулы остаются конечными. Например, для формулы с 24 узлами (47-го порядка точности) наибольшая величина x_k равна приблизительно 81.5. У формул более низких порядков точности максимальные значения x_k еще меньше. Это делает квадратурные формулы Лагерра весьма удобными для практических вычислений.

Заметим, что многочлены Лагерра вместе с множителем e^{-x} входят в точные или приближенные волновые функции, описывающие поведение электронов в поле одного или нескольких ядер. Расчет различных физических свойств (например, энергии) атомов и молекул требует интегрирования выражений, содержащих произведения волновых функций. По этой причине квадратурные формулы Гаусса—Лагерра играют важную роль в вычислительных методах квантовой химии.

5. Многочлены Эрмита. Весовая функция $p(x) = e^{-x^2}$, отрезок ортогональности $[-\infty, \infty]$. Многочлен Эрмита n-й степени обозначают $H_n(x)$ (от оригинального написания фамилии Hermite). Многочлены Эрмита низших степеней выражаются формулами:

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x.$$

Многочлен произвольной степени n можно получить по рекуррентному соотношению

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x).$$

Квадратурные формулы Гаусса-Эрмита, как и формулы Лагерра, позволяют вычислять интегралы с бесконечными пределами, пользуясь только конечными (и сравнительно небольшими) значениями узлов x_k .

Многочлены Эрмита (вместе с множителем e^{-x^2}) входят в выражения волновых функций квантового гармонического осциллятора; они используются также в некоторых приближенных методах расчета колебаний молекул. Квадратурные формулы Эрмита удобны для вычисления интегралов, возникающих в подобных задачах.

7. Повышение точности интегрирования и контроль погрешности

Есть две возможности уменьшить погрешность интегрирования. Вопервых, можно повысить порядок точности квадратурной формулы, применяя интерполяционный многочлен более высокой степени и располагая оптимальным образом узлы. Во-вторых, при фиксированном порядке можно уменьшить длину отрезка.

Возможности первого подхода ограничены. Как уже отмечалось выше, свойства весов формул Ньютона–Котеса делают их непригодными для практического использования при порядке точности выше 9. У формул Гаусса веса всегда положительны, поэтому здесь нет вычислительных погрешностей, обусловленных потерей точности из-за сокращения значащих цифр. На практике применяются формулы весьма высоких порядков (существуют таблицы узлов и весов гауссовых квадратур вплоть до n=96). Вспомним, однако, что процесс интерполяции не всегда сходится. Согласно теореме Фабера, при любом варианте выбора узлов найдутся подынтегральные функции, для которых повышение степени интерполирующего многочлена будет приводить к ухудшению результатов.

Второй подход (уменьшение длины отрезка) является более универсальным. Отрезок [a, b] разбивают на несколько меньших отрезков (подынтервалов), и интеграл представляют в виде суммы интегралов по элементарным отрезкам:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \int_{a}^{X_{1}} f(x) dx + \int_{X_{1}}^{X_{2}} f(x) dx + \dots + \int_{X_{m}}^{b} f(x) dx, \qquad (21)$$

где X_1, X_2, \ldots, X_m — границы подынтервалов внутри [a, b]. По мере увеличения числа подынтервалов и сокращения их размеров погрешность

вычисления отдельного элементарного интеграла сокращается, но количество таких интегралов растет. Очевидно, общая погрешность интегрирования равна сумме погрешностей интегралов по элементарным отрезкам (подынтервалам). С уменьшением размеров подынтервалов суммарная погрешность будет уменьшаться, если ошибка каждого из слагаемых в сумме (21) убывает быстрее, чем растет их число. Количество подынтервалов обратно пропорционально h, а ошибка элементарного интеграла даже в случае наиболее грубых квадратурных формул прямоугольников и трапеций убывает как h^3 .

Рассмотрим для примера организацию вычислений по формуле Симпсона с разбиением области интегрирования на подынтервалы. Вначале применим элементарную формулу ко всему отрезку [a, b], взяв три узла $x_0 = a$, $x_1 = a + h_0$, $x_2 = a + 2h_0 = b$, где $h_0 = (b - a)/2$:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{h_0}{3} \left[f(a) + 4f(a + h_0) + f(b) \right]. \tag{22}$$

Затем разобьем отрезок [a, b] на две равные части $[a, x_1]$ и $[x_1, b]$, одновременно уменьшив шаг вдвое: $h_1 = h_0/2 = (b-a)/4$. Заметим, что $x_1 = a + h_0 = a + 2h_1$. Добавив к прежним узлам два новых, являющихся средними точками подынтервалов, получим обобщенную формулу Симпсона для 5 узлов:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \int_{a}^{a+2h_{1}} f(x) dx + \int_{a+2h_{1}}^{b} f(x) dx \approx$$

$$\approx \frac{h_{1}}{3} \left[f(a) + 4f(a+h_{1}) + f(a+2h_{1}) \right] +$$

$$+ \frac{h_{1}}{3} \left[f(a+2h_{1}) + 4f(a+3h_{1}) + f(b) \right] =$$

$$= \frac{h_{1}}{3} \left[f(a) + 4f(a+h_{1}) + 2f(a+2h_{1}) + 4f(a+3h_{1}) + f(b) \right].$$

Поскольку узел $a+2h_1$, являющийся общей границей подынтервалов, входит в оба элементарных интеграла, то соответствующее слагаемое входит в суммарную формулу с коэффициентом 2.

Продолжая процесс разбиения исходного отрезка, разделим каждый из подынтервалов пополам; получим 4 подынтервала, внутренними гра-

ницами которых являются прежние узлы $a+h_1$, $a+2h_1$ и $a+3h_1$. Величина шага сократится вдвое $(h_2=h_1/2)$, и появятся 4 новых узла в серединах подынтервалов. В результате получим формулу с 9 узлами:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \int_{a}^{a+2h_2} f(x) dx + \int_{a+2h_2}^{a+4h_2} f(x) dx + \int_{a+4h_2}^{b} f(x) dx + \int_{a+6h_2}^{b} f(x) dx \approx$$

$$\approx \frac{h_2}{3} \left[f(a) + 4f(a+h_2) + 2f(a+2h_2) + 4f(a+3h_2) + + 2f(a+4h_2) + 4f(a+5h_2) + 2f(a+6h_2) + + 4f(a+7h_2) + f(b) \right]. \tag{23}$$

Каждый раз после удвоения числа подынтервалов все прежние узлы (кроме границ отрезка a и b) становятся границами подынтервалов, и соответствующие значения функции входят в новую формулу с коэффициентом 2. Значения функции во вновь добавленных узлах войдут в формулу с коэффициентом 4.

Таким образом, можно предложить экономичный алгоритм получения последовательных приближений к значению интеграла, при котором ни одно из ранее вычисленных значений подынтегральной функции не будет вычисляться повторно.

Прежде всего разобьем содержимое квадратных скобок в формуле (23) на три частичных суммы:

$$S_1 = f(a) + f(b)$$
 — сумма значений функции на границах отрезка интегрирования, которая входит во все формулы без изменений;

$$S_2 = f(a+h) + f(a+3h) + \cdots$$
 — сумма значений функции в серединах подынтервалов, т.е. во вновь добавленных узлах;

$$S_3 = f(a+2h) + f(a+4h) + \cdots$$
 — сумма значений функции на границах подынтервалов, т. е. во всех узлах предыдущего приближения, находящихся строго внутри отрезка $[a, b].$

Очередное приближение к интегралу запишется через частичные суммы следующим образом:

$$\int_{a}^{b} f(x) dx \approx \frac{h}{3} (S_1 + 4S_2 + 2S_3). \tag{24}$$

Величину S_1 достаточно вычислить один раз. Сумма S_2 вычисляется для каждого нового разбиения отрезка интегрирования на подынтервалы (число слагаемых в ней равно числу подынтервалов). Сумма S_3 содержит все ранее вычисленные значения функции (кроме входящих в S_1). При переходе к новому приближению в S_3 сохраняются прежние слагаемые и добавляются те, которые перед этим входили в S_2 , т. е. новое значение S_3 получается сложением предыдущих величин S_3 и S_2 .

Пусть I — точное значение интеграла, I_h — приближенное значение, полученное по обобщенной формуле Симпсона с шагом h, а R_h — погрешность этого значения, так что

$$I = I_h + R_h. (25)$$

Пусть, наконец, $I_{h/2}$ — следующее приближение, вычисленное с шагом h/2. Если пренебречь изменением 4-й производной f(x) на протяжении отрезка [a, b] (или принять для нее оценку сверху), то при уменьшении шага в два раза погрешность элементарного интеграла сократится в $2^5 = 32$ раза, а число слагаемых в формуле (21) увеличится вдвое, так что суммарная ошибка уменьшится в 16 раз. Поэтому можно написать

$$I = I_{h/2} + \frac{R_h}{16} \,. \tag{26}$$

Вычитая уравнение (26) из (25), получим:

$$I_h - I_{h/2} = \frac{15}{16} R_h \approx R_h.$$
 (27)

Таким образом, разность двух последовательных приближений к интегралу дает оценку погрешности значения, вычисленного с шагом h. Выражение (27) называется формулой Рунге для погрешности численного интегрирования.

Окончательно алгоритм интегрирования с контролем точности по Рунге выглядит следующим образом:

1. Подготовительная стадия.

N=1; количество подынтервалов на отрезке [a,b] h=(b-a)/2; начальное значение шага интегрирования $S_1=f(a)+f(b);$ сумма значений функции на границах отрезка $S_3=0;$ на первом этапе отсутствуют границы подынтервалов $I=S_1\,h;$ начальная оценка интеграла по формуле трапеций

2. Вычисление очередного приближения.

$$I_{\text{old}} = I;$$
 сохранить предыдущее приближение $S_2 = f(a+h) + f(a+3h) + \cdots;$ N слагаемых для новых узлов $I = h (S_1 + 4S_2 + 2S_3)/3;$ приближенное значение интеграла

- 3. Контроль погрешности (ε заданный критерий точности). Если $|I-I_{\mathrm{old}}|\leqslant \varepsilon$, то закончить процесс, иначе выполнить шаг 4.
 - 4. Переход к новому приближению.

 $S_3 = S_3 + S_2;$ сумма значений функции в прежних узлах N = 2N; удвоить число подынтервалов h = h/2; уменьшить шаг интегрирования в два раза перейти к шагу 2; продолжить цикл последовательных приближений

Приложение. Узлы и веса квадратурных формул Ньютона-Котеса и Гаусса.

Таблица 1. Квадратурные формулы Ньютона-Котеса (n — степень интерполяционного многочлена)

Формула	n	Beca $w_k = A \cdot B_k$	Погрешность
трапеций	1	A = h/2; $B_0 = B_1 = 1.$	$-\frac{1}{12}h^3f''(\xi)$
Симпсона	2	A = h/3; $B_0 = B_2 = 1, B_1 = 4.$	$-\frac{1}{90} h^5 f^{(4)}(\xi)$
Ньютона	3	A = 3h/8; $B_0 = B_3 = 1, B_1 = B_2 = 3.$	$-\frac{3}{80} h^5 f^{(4)}(\xi)$
	4	A = 2h/45; $B_0 = B_4 = 7, B_1 = B_3 = 32,$ $B_2 = 12.$	$-\frac{8}{945}h^7f^{(6)}(\xi)$
	5	A = 5h/288; $B_0 = B_5 = 19, B_1 = B_4 = 75,$ $B_2 = B_3 = 50.$	$-\frac{275}{12096} h^7 f^{(6)}(\xi)$
	6	A = h/140; $B_0 = B_6 = 41, B_1 = B_5 = 216,$ $B_2 = B_4 = 27, B_3 = 272.$	$-\frac{9}{1400}h^9f^{(8)}(\xi)$
	7	A = 7h/17280; $B_0 = B_7 = 751, B_1 = B_6 = 3577,$ $B_2 = B_5 = 1323, B_3 = B_4 = 2989.$	$-\frac{8183}{518400}h^9f^{(8)}(\xi)$
	8	A = 4h/14175; $B_0 = B_8 = 989, B_1 = B_7 = 5888,$ $B_2 = B_6 = -928, B_3 = B_5 = 10496,$ $B_4 = -4540.$	$-\frac{2368}{467775} h^{11} f^{(10)}(\xi)$

Примечание: h = (b-a)/n; ξ — некоторая точка на отрезке интегрирования [a, b]. В частности, для формул трапеций и Симпсона ξ совпадает с серединой отрезка: $\xi = (a+b)/2$ (см. вывод в разделе 3).

Ниже приведены узлы и веса квадратурных формул Гаусса. На отрезке [-1, 1] узлы расположены симметрично относительно точки x = 0, поэтому ради экономии места в таблице даны значения лишь для правой половины отрезка $(x \geqslant 0)$. На самом деле каждому положительному узлу x_k соответствует отрицательный узел $-x_k$, причем оба они имеют одинаковый вес w_k .

Если формула Гаусса применяется к произвольному конечному отрезку [a, b], то табличные узлы x_k преобразуются в $[(b-a)x_k + (b+a)]/2$, а все веса умножаются на (b-a)/2.

Таблица 2. Квадратурные формулы Гаусса для отрезка [-1, 1] (n- количество узлов)

n	Узлы	Beca
1	0.0	2.0
2	0.577350269189625764509	1.0
3	0.0 0.774596669241483377036	0.888888888888888888 0.55555555555555555
4	0.339981043584856264803 0.861136311594052575224	0.652145154862546142627 0.347854845137453857373
5	0.0 0.538469310105683091036 0.906179845938663992798	0.5688888888888888888 0.478628670499366468041 0.236926885056189087514
6	0.238619186083196908631 0.661209386466264513661 0.932469514203152027812	0.467913934572691047390 0.360761573048138607570 0.171324492379170345040
7	0.0 0.405845151377397166907 0.741531185599394439864 0.949107912342758524526	0.417959183673469387755 0.381830050505118944950 0.279705391489276667901 0.129484966168869693271
8	0.183434642495649804939 0.525532409916328985818 0.796666477413626739592 0.960289856497536231684	0.362683783378361982965 0.313706645877887287338 0.222381034453374470544 0.101228536290376259153

Таблица 2. Продолжение

n	Узлы	Beca
9	0.0	0.330239355001259763165
	0.324253423403808929039	0.312347077040002840069
	0.613371432700590397309	0.260610696402935462319
	0.836031107326635794299	0.180648160694857404058
	0.968160239507626089836	0.081274388361574411972
10	0.148874338981631210885	0.295524224714752870174
	0.433395394129247190799	0.269266719309996355091
	0.679409568299024406234	0.219086362515982043996
	0.865063366688984510732	0.149451349150580593146
	0.973906528517171720078	0.066671344308688137594
12	0.125233408511468915472	0.249147045813402785001
	0.367831498998180193753	0.233492536538354808761
	0.587317954286617447297	0.203167426723065921749
	0.769902674194304687037	0.160078328543346226335
	0.904117256370474856678	0.106939325995318430960
	0.981560634246719250691	0.047175336386511827195
16	0.095012509837637440185	0.189450610455068496285
	0.281603550779258913230	0.182603415044923588867
	0.458016777657227386342	0.169156519395002538189
	0.617876244402643748447	0.149595988816576732082
	0.755404408355003033895	0.124628971255533872052
	0.865631202387831743880	0.095158511682492784810
	0.944575023073232576078	0.062253523938647892863
	0.989400934991649932596	0.027152459411754094852
20	0.076526521133497333755	0.152753387130725850698
	0.227785851141645078080	0.149172986472603746788
	0.373706088715419560673	0.142096109318382051329
	0.510867001950827098004	0.131688638449176626898
	0.636053680726515025453	0.118194531961518417312
	0.746331906460150792614	0.101930119817240435037
	0.839116971822218823395	0.083276741576704748725
	0.912234428251325905868	0.062672048334109063570
	0.963971927277913791268	0.040601429800386941331
	0.993128599185094924786	0.017614007139152118312

Таблица 2. Продолжение

n	У злы	Beca
24	0.064056892862605626085	0.127938195346752156974
	0.191118867473616309159	0.125837456346828296121
	0.315042679696163374387	0.121670472927803391204
	0.433793507626045138487	0.115505668053725601353
	0.545421471388839535658	0.107444270115965634783
	0.648093651936975569252	0.097618652104113888270
	0.740124191578554364244	0.086190161531953275917
	0.820001985973902921954	0.073346481411080305734
	0.886415527004401034213	0.059298584915436780746
	0.938274552002732758524	0.044277438817419806169
	0.974728555971309498198	0.028531388628933663181
	0.995187219997021360180	0.012341229799987199547