ЛР3 МР (Чисельне інтегрування)

Викладач Бойко Л.Т.

5.1. Постановка задачі чисельного інтегрування

Під чисельним інтегруванням розуміють наближене обчислення інтегралів. Якщо підінтегральна функція $f(x)$ має складний аналітичний вираз, або задана таблично, то звичайні методи інтегрування, які вивчаються у математичному аналізі, непридатні, оскільки неможливо побудувати первісну. Тому доводиться обчислювати інтеграли наближено. Формули наближеного обчислення інтегралів називаються ***квадратурними формулами***. Ці формули міняють оператор інтегрування на оператор сумування. Виникаюча при такій заміні похибка називається похибкою квадратурної формули.

У загальному випадку будь-яку квадратурну формулу можна подати у вигляді

$$\int_a^b \rho(x) f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) \ , \ x_i \in [a,b]. \tag{5.1}$$

Тут $\rho(x) \ge 0$ – вагова функція, яка може мати якісь особливості на відрізку інтегрування, наприклад, перетворюватись в нескінченність в деяких точках цього відрізка. Функція $f(x)$ визначена на всьому відрізку інтегрування. Вважаємо, що підінтегральна функція в лівій частині рівності (5.1) така, що інтеграл існує. Сума, що стоїть в правій частині наближеної рівності (5.1), називається ***квадратурною сумою***; A_i – це ***квадратурні коефіцієнти***; x_i – ***квадратурні вузли***.

Параметри x_i, A_i, n вибирають так, щоб або похибка квадратурної формули була по можливості мінімальною, або обчислення за формулою (5.1) були достатньо простими. Різні квадратурні формули відрізняються одна від одної способами вибору параметрів x_i, A_i.

Більшість квадратурних формул базується на заміні підінтегральної функції $f(x)$ алгебраїчними многочленами різного степеня.

Означення. Кажуть, що квадратурна формула (5.1) має ***алгебраїчний степінь точності*** *m*, якщо ця наближена формула стає точною на множині всіх алгебраїчних многочленів не вище *m*-го степеня.

Це означає, що, якщо в наближену формулу (5.1) замість функції $f(x)$ підставити будь-який алгебраїчний многочлен *m*-го степеня, то наближена рівність (5.1) стане точною, тобто

$$\int_a^b \rho(x) P_m(x)dx = \sum_{i=0}^{n} A_i P_m(x_i) \ , \ x_i \in [a,b].$$

Але при цьому наближена рівність (5.1) не для всіх алгебраїчних многочленів степеня $m+1$ буде точною.

Алгебраїчний степінь точності квадратурної формули є мірою точності цієї формули. Оскільки будь-яку неперервну функцію $f(x)$ можна як завгодно точно наблизити алгебраїчними многочленами (за рахунок збільшення степеня многочлена), то слід очікувати, що квадратурні формули, які мають високий алгебраїчний степінь точності, будуть мати високу точність для будь-яких неперервних функцій $f(x)$.

Параметри x_i, A_i можна вибрати так, щоб зробити алгебраїчний степінь точності квадратурної формули якомога вищим. Такі формули називаються квадратурними формулами найвищого степеня точності. Вперше вони були розглянуті Гауссом і тому їх часто називають формулами гауссова типа.

Але якщо вузли x_i вибрати з міркувань зручності (рівномірно розташованими), а коефіцієнти A_i – з міркувань точності, то у випадку $\rho(x)=1$ отримаємо квадратурні формули Ньютона-Котеса.

Якщо вузли x_i вибрати з міркувань точності, а коефіцієнти A_i – з міркувань зручності (всі коефіцієнти однакові), то добудемо квадратурні формули, що носять ім'я Чебишова.

5.2. Інтерполяційні квадратурні формули

Нехай на відрізку інтегрування якось зафіксовані різні між собою вузли $x_i \in [a,b], i=\overline{0,n}$, і будемо вибирати лише коефіцієнти A_i, $i=\overline{0,n}$ так, щоб формула (5.1) була якомога точнішою. Припускаємо, що $f(x) \in C^{(n+1)}[a,b]$, тобто функція $f(x)$ і всі її похідні до $(n+1)$ порядку включно є неперервними на відрізку $[a,b]$. Візьмемо квадратурні вузли як вузли інтерполяції (оскільки вони всі з відрізку інтегрування та всі різні між собою), та побудуємо інтерполяційний многочлен $L_n(x)$ для функції $f(x)$. Будемо мати таку рівність

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

де

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \prod_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n} \frac{x - x_m}{x_i - x_m}, \tag{5.2}$$

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)\cdot \omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}, \qquad \omega_{n+1}(x) = \prod_{m=0}^{n} (x - x_m). \tag{5.3}$$

Розглянемо тепер інтеграл від функції $\rho(x)\cdot f(x)$.

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,dx = \int_a^b \rho(x) L_n(x)\,dx + \int_a^b \rho(x) R_n(x)\,dx. \tag{5.4}$$

Підставимо (5.2), (5.3) в (5.4), одержимо

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b \rho(x) \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq i}}^{n} \frac{x - x_m}{x_i - x_m} \, dx + \int_a^b \rho(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} dx. \quad (5.5)$$

Якщо позначити

$$A_i = \int_a^b \rho(x) \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq i}}^{n} \frac{x - x_m}{x_i - x_m} dx, \quad (5.6)$$

$$r_n = \int_a^b \rho(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi(x)) \cdot \omega_{n+1}(x)}{(n+1)!} dx, \quad (5.7)$$

то інтеграл (5.5) можна переписати у вигляді

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) + r_n. \quad (5.8)$$

Відкинувши в (5.8) похибку r_n, добудемо наближену формулу (5.1).

Означення. Квадратурну формулу (5.1) будемо називати ***інтерполяційною***, якщо квадратурні коефіцієнти $A_i,\ i = \overline{0, n}$ визначаються формулами (5.6). Нагадаємо, що квадратурні вузли при цьому всі різні та всі розташовані на відрізку інтегрування, в усьому іншому вони довільні.

Формулою (5.7) визначається ***похибка інтерполяційної квадратурної формули***. З похибки видно, що алгебраїчний степінь точності інтерполяційної квадратурної формули дорівнює *n*. Збільшити степінь точності можна лише за рахунок вибору вузлів $x_i,\ i = 0, 1, \cdots, n$. Як це зробити буде розглянуто далі в п.5.7.

5.3. Квадратурні формули з рівновіддаленими вузлами

Квадратурні формули при сталій ваговій функції та з рівновіддаленими вузлами називають формулами Ньютона-Котеса в пам’ять того, що вперше вони в достатньо загальному вигляді були розглянуті Ньютоном, коефіцієнти вперше були добуті Котесом при $n = 1,\ 2, \ldots, 10$.

Скінченний відрізок інтегрування $[a, b]$ ділимо на *n* рівних частин довжини $h = (b - a)/n$, точки ділення беремо за вузли інтерполяційної формули. Спростимо вигляд квадратурних коефіцієнтів $A_i,\ i = \overline{0, n}$, які визначаються формулою (5.6), підставивши туди $\rho(x) = 1, \quad x_i = a + ih, \quad x_m = a + mh, \quad x_i - x_m = h(i - m)$. Крім того перейдемо до нової змінної інтегрування *t*, де $x = a + ht$.

Для виконання всіх цих дій спочатку розглянемо добуток в формулі (5.6).

$$\prod_{\substack{m=0 \\ m \neq i}}^{n} \frac{x - x_m}{x_i - x_m} = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq i}}^{n} \frac{h(t - m)}{h(i - m)} = \prod_{\substack{m=0 \\ m \neq i}}^{n} \frac{(t - m)}{(i - m)} =$$

$$=\frac{\prod\limits_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n}(t-m)}{\prod\limits_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n}(i-m)}=\frac{\prod\limits_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n}(t-m)}{i\cdot(i-1)\cdots1\cdot(-1)(-2)\cdots(i-n)}=\frac{\prod\limits_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n}(t-m)}{i!(-1)^{n-i}(n-i)!}=$$

$$=\frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!}\prod_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n}(t-m). \qquad (5.9)$$

Підставимо добуток (5.9) у формулу (5.6) та перейдемо до нової змінної інтегрування, будемо мати

$$A_i=\frac{(b-a)\cdot(-1)^{n-i}}{n\cdot i!\cdot(n-i)!}\int_0^n\prod_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n}(t-m)dt=(b-a)B_n^i,$$

де

$$B_n^i=\frac{(-1)^{n-i}}{n\cdot i!(n-i)!}\int_0^n\prod_{\substack{m=0\\ m\neq i}}^{n}(t-m)dt. \qquad (5.10)$$

Квадратурна формула Ньютона-Котеса приймає вигляд

$$\int_a^b f(x)dx\approx(b-a)\sum_{i=0}^{n}B_n^i f(x_i). \qquad (5.11)$$

Алгебраїчний степінь точності формули (5.11) дорівнює $n\geq1$. Коефіцієнти (5.10) називаються ***коефіцієнтами Котеса***. Вони мають такі ***властивості.***

1. $\sum\limits_{i=0}^{n}B_n^i=1$.
2. $B_n^i=B_n^{n-i}$, тобто рівновіддалені від кінців коефіцієнти формули Ньютона-Котеса є однаковими.
3. Коефіцієнти B_n^i не залежать від довжини відрізка інтегрування та від підінтегральної функції $f(x)$, тому вони можуть бути обчислені раз і назавжди.

Значення коефіцієнтів B_n^i до $n=20$ можна знайти в книзі [6].

Найбільш поширеними частинними випадками формул Ньютона-Котеса є формула трапецій ($n=1$) та формула Сімпсона ($n=2$).

5.4. Квадратурні формули прямокутників

Це найпростіший варіант інтерполяційної квадратурної формули, коли $n=0$. У цьому випадку не можна скористатися формулою (5.11), бо коефіцієнт (5.10) при $n=0$ невизначений. Тому, як і при побудові загальної інтерполяційної формули, замінимо підінтегральну функцію інтерполяційним многочленом нульового степеня, що побудований по єдиному вузлу $x_0 \in [a,b]$

$$f(x) = f(x_0) + R_0(x).$$

Після інтегрування маємо

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\cdot f(x_0), \quad x_0 \in [a,b]. \tag{5.12}$$

Це квадратурна формула прямокутників. При $x_0 = a$ її називають формулою лівих прямокутників, при $x_0 = b$ – правих прямокутників, при $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$ – центральних (або середніх) прямокутників. Назва випливає з геометричного зображення формули, показаного на рис. 5.1.

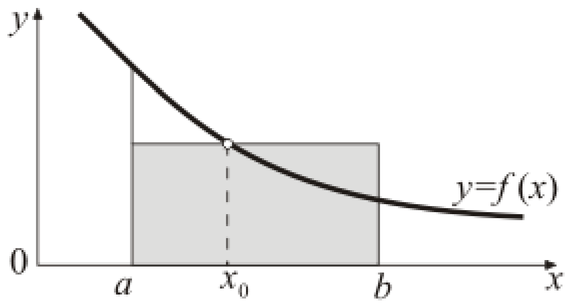

Рис. 5.1. Геометричне зображення формули прямокутників

Як відомо, точне значення інтеграла (ліва частина формули (5.12)) дорівнює площі криволінійної трапеції, що зверху обмежена графіком підінтегральної функції $f(x)$, а наближене значення інтеграла (права частина (5.12)) – це площа прямокутника висоти $f(x_0)$ та ширини $(b-a)$.

За умови, що $f(x) \in C^{(2)}[a,b]$, оцінимо похибку r_0 квадратурної формули. За означенням похибки квадратурної формули маємо з (5.12)

$$r_0 = \int_a^b f(x)dx - (b-a)\cdot f(x_0). \tag{5.13}$$

Функцію $f(x)$ запишемо у вигляді розвинення в ряд Тейлора в околі точки x_0.

$$f(x) = f(x_0) + \frac{(x-x_0)}{1!}f'(x_0) + \frac{(x-x_0)^2}{2!}f''(\eta), \quad \eta \in [a,b].$$

Проінтегруємо обидві частини цієї рівності по відрізку $[a,b]$.

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

$$= (b-a)\cdot f(x_0) + f'(x_0)\cdot\frac{(b-x_0)^2-(a-x_0)^2}{2} + \frac{1}{6} f''(\eta)\cdot\left((b-x_0)^3-(a-x_0)^3\right).$$

Підставимо цей інтеграл в (5.13).

$$r_0 = \frac{1}{2} f'(x_0)\cdot\left((b-x_0)^2-(a-x_0)^2\right) + \frac{1}{6} f''(\eta)\cdot\left((b-x_0)^3-(a-x_0)^3\right). \qquad (5.14)$$

Тепер розглянемо конкретні варіанти вибору точки x_0 в розкладання (5.14).

При $x_0 = b$ (праві прямокутники) :

$$r_0 = -\frac{(b-a)^2}{2} f'(\xi)\ ,\ \xi\in[a,b]. \qquad (5.15)$$

При $x_0 = a$ (ліві прямокутники):

$$r_0 = \frac{(b-a)^2}{2} f'(\eta)\ ,\ \eta\in[a,b]. \qquad (5.16)$$

При $x_0 = \dfrac{a+b}{2}$ (центральні прямокутники):

$$r_0 = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\tau)\ ,\ \tau\in[a,b]. \qquad (5.17)$$

З формул (5.15), (5.16), (5.17) видно, що алгебраїчний степінь точності формул лівих та правих прямокутників дорівнює нулю, а центральних прямокутників – дорівнює одиниці.

При великій довжині відрізка $[a,b]$ формули прямокутників мають невисоку точність. У цих випадках краще користуватися узагальненими формулами прямокутників. Для цього розіб'ємо відрізок $[a,b]$ на m частин з кроком $h_i = x_{i+1} - x_i$, $i = \overline{0, m-1}$. Інтеграл шукаємо як суму інтегралів по всіх цих відрізках, тобто

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx.$$

На кожному відрізку $[x_i, x_{i+1}]$ інтеграл обчислюємо, користуючись однією з квадратурних формул прямокутників. Розглянемо окремі випадки.

Ліві прямокутники.

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1}\left(\left(x_{i+1}-x_i\right)\cdot f(x_i) + \frac{\left(x_{i+1}-x_i\right)^2}{2} f'(\eta_i)\right),\ \eta_i\in\left(x_i, x_{i+1}\right).$$

В останній формулі враховано не тільки наближені значення інтегралів за формулою (5.12), але й залишки за формулою (5.16).

Якщо прийняти, що крок h_i сталий, тобто $h_i = h = (b-a)/n$, та в правій частини останньої квадратурної формули записати окремо суму наближених значень інтегралів та суму залишків, то будемо мати таку формулу

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1}\left(h\cdot f(x_i) + \frac{h^2}{2} f'(\eta_i)\right) = h\sum_{i=0}^{m-1} f(x_i) + \frac{m\cdot h^2}{2}\cdot\frac{1}{m}\sum_{i=0}^{m-1} f'(\eta_i) \quad . \qquad (5.18)$$

Приймемо до уваги неперервність функції $f'(x)$ на $[a,b]$. Нехай

$$m_1 \le f'(x) \le M_1,\ x\in[a,b],$$

тоді існує така точка $\eta\in[a,b]$, що буде правильною рівність $\frac{1}{m}\sum_{i=0}^{m-1} f'(\eta_i) = f'(\eta)$.

Тепер з (5.18) маємо остаточно узагальнену формулу лівих прямокутників (для випадку рівномірного розбиття відрізку інтегрування)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{m}\cdot\sum_{i=0}^{m-1} f(x_i) \ , \qquad (5.19)$$

та похибку цієї формули

$$r_0 = \frac{(b-a)^2}{2m} f'(\eta),\ \eta\in[a,b]. \qquad (5.20)$$

Геометричне тлумачення формули (5.19) показано на рис. 5.2.

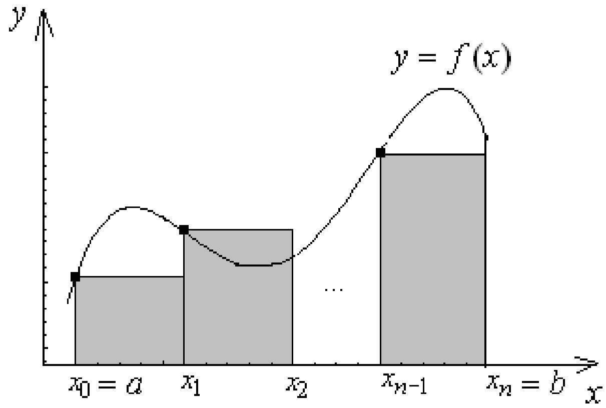

Рис. 5.2. Геометричне зображення формули лівих прямокутників

Аналогічно для квадратурної формули ***правих прямокутників*** отримуємо узагальнену формулу (у випадку рівномірного розбиття відрізка інтегрування)

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{m}\cdot\sum_{i=0}^{m-1} f(x_{i+1}),$$

та похибку

$$r_0 = -\frac{(b-a)^2}{2m} f'(\xi)\ ,\ \xi\in[a,b]. \qquad (5.21)$$

Геометричне зображення показано на рис. 5.3.

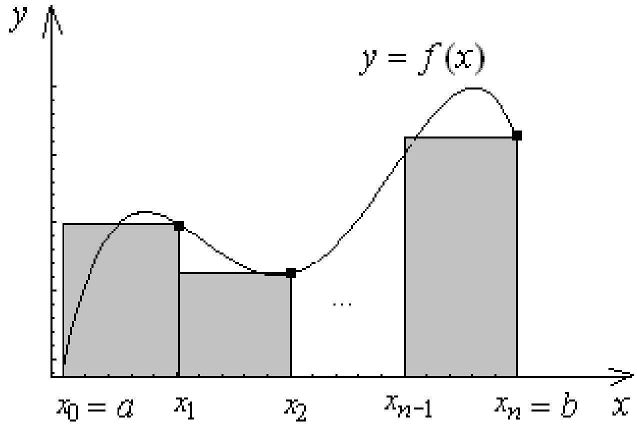

Рис. 5.3. Геометричне зображення формули правих прямокутників

Узагальнена квадратурна формула ***центральних прямокутників*** запишеться у вигляді **.**

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{m} \cdot \sum_{i=0}^{m-1} f\left(\frac{x_{i+1}+x_i}{2}\right) \ .$$

Її залишок має вигляд

$$r_0 = \frac{(b-a)^3}{24m^2} f''(\tau), \ \tau \in [a,b]. \qquad (5.22)$$

Геометричне зображення показано на рис. 5.4.

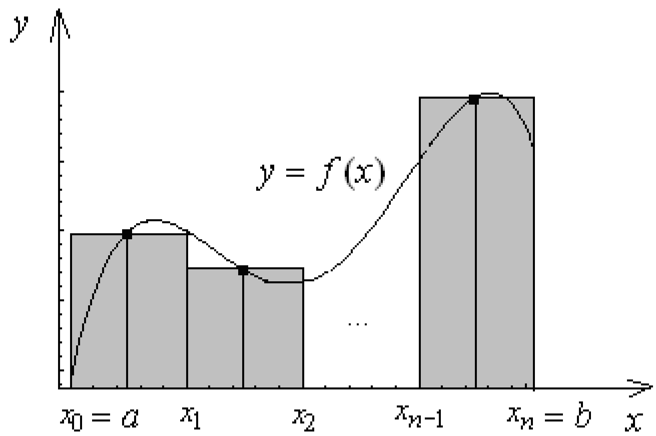

Рис. 5.4. Геометричне зображення формули центральних прямокутників

З формул (5.20), (5.21), (5.22) видно, що із збільшенням m похибка квадратурної формули центральних прямокутників зменшується швидше, ніж формул лівих та правих прямокутників.

5.5. Квадратурні формули трапецій

Нехай в формулі (5.11) $n=1$, тоді ця формула приймає вигляд

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\left(B_1^0 f(x_0) + B_1^1 f(x_1)\right).$$

Два коефіцієнти Котеса знаходимо, враховуючи їх властивості

$$\begin{cases} B_1^0 + B_1^1 = 1, \\ B_1^0 = B_1^1. \end{cases}$$

Остаточно маємо

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{2}\left(f(x_0) + f(x_1)\right). \qquad (5.23)$$

Ця формула відома як ***квадратурна формула трапецій***. Геометрично цю формулу отримаємо, якщо криву $y = f(x)$ замінимо хордою, що проходить через точки M_0, M_1 (рис. 5.5), а значення інтеграла наближено знайдемо як площу прямолінійної трапеції (звідси назва формули).

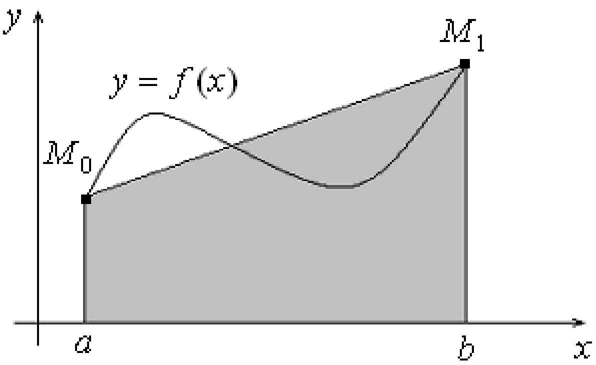

Рис 5.5. Геометричне зображення квадратурної формули трапецій

Похибка квадратурної формули (5.23) випливає з (5.7), якщо взяти $\rho(x)=1$ та $n=1$.

$$r_1 = \frac{1}{2}\int_a^b f''(\xi(x))\cdot(x-a)\cdot(x-b)dx. \qquad (5.24)$$

До обчислення останнього інтеграла застосуємо ***теорему про середнє*** [12, с.114]. Нагадаємо її.

Теорема. Нехай $f(x)$, $g(x)$ – інтегровні на проміжку $[a, b]$ функції, причому $m \le f(x) \le M$, $g(x)$ на всьому проміжку не змінює знак. Тоді

$$\int_a^b f(x)g(x)\,dx = \mu\cdot\int_a^b g(x)\,dx, \quad \text{де } m \le \mu \le M.$$

Якщо $f(x)$ неперервна на $[a, b]$, то ця формула може бути записана у вигляді

$$\int_a^b f(x)\cdot g(x)\,dx = f(c)\cdot\int_a^b g(x)\,dx,\ \text{де}\ c\in[a,b].$$ (кінець теореми)

Застосуємо цю теорему до інтеграла (5.24). За припущенням функція $f''(x)$ є неперервною на $[a,b]$, тому знайдеться така точка $\eta\in[a,b]$, що буде виконуватись рівність

$$\int_a^b f''(\xi(x))\cdot(x-a)\cdot(x-b)dx = f''(\eta)\cdot\int_a^b (x-a)\cdot(x-b)dx = -\frac{(b-a)^3}{6}f''(\eta).$$

Отже,

$$r_1 = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta)\ ,\quad \eta\in[a,\ b]. \tag{5.25}$$

Якщо відрізок $[a,b]$ достатньо великий, то похибка (5.25) квадратурної формули трапецій, як правило, велика. Для збільшення точності розділимо відрізок інтегрування на n частин точками $x_i = a + ih,\ i=\overline{0,n}$, тоді

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1}\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1}\left(\frac{x_{i+1}-x_i}{2}\big(f(x_i)+f(x_{i+1})\big) - \frac{\left(x_{i+1}-x_i\right)^3}{12}f''(\eta_i)\right).$$

Якщо розбиття рівномірне, тобто $h_i = h = (b-a)/n$, то

$$\int_a^b f(x)dx = h\left(\frac{f(x_0)+f(x_n)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right) - \frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i).$$

Запишемо окремо ***узагальнену формулу трапецій*** і окремо ***похибку*** цієї формули.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{n}\left(\frac{f(x_0)+f(x_n)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right). \tag{5.26}$$

$$r_1 = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}\cdot\frac{1}{n}\cdot\sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i).$$

Величина $\mu = \frac{1}{n}\cdot\sum_{i=0}^{n-1} f''(\eta_i)$ – це середнє арифметичне значень другої похідної в n точках відрізку $[a,b]$. Очевидно, що $m_2\le\mu\le M_2$, де m_2 – найменше, а M_2 – найбільше значення другої похідної $f''(x),\ x\in[a,b]$. Оскільки $f''(x)$ неперервна на $[a,b]$, то в якості своїх значень на $[a,b]$ вона приймає всі проміжні числа між m_2 і M_2. Отже, існує така точка $\xi\in[a,b]$, що $\mu = f''(\xi)$, тобто

$$r_1 = -\frac{(b-a)^3}{12n^2}f''(\xi),\ \ \xi\in[a,b]. \tag{5.27}$$

На рис 5.6 показано геометричне зображення узагальненої формули трапецій (5.26). Точне значення інтеграла, тобто ліва частина наближеної рівності

(5.26), – це площа криволінійної трапеції, що обмежена зверху графіком функції $y = f(x)$. Наближене значення інтеграла (права частина рівності (5.26)) – це площа фігури, що зверху обмежена ламаною $M_0, M_1, \cdots, M_n$.

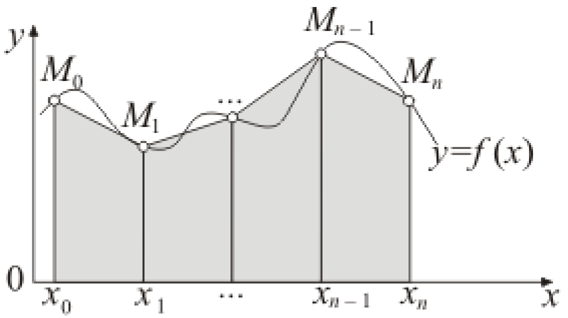

Рис. 5.6. Геометричне зображення узагальненої формули трапецій

З формули (5.27) видно, що чим більшим є число n, тим меншою буде похибка квадратурної формули (5.26). Крім того, з (5.27) видно, що алгебраїчний степінь точності квадратурної формули трапецій дорівнює одиниці (так же, як і формули центральних прямокутників).

5.6. Квадратурні формули Сімпсона

Якщо в квадратурній формулі Ньютона-Котеса (5.11) взяти $n = 2$, то здобудемо таку формулу $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\left(B_2^0 f(x_0) + B_2^1 f(x_1) + B_2^2 f(x_2)\right)$.

За формулою (5.10) знаходимо $B_2^0 = \frac{1}{2 \cdot 2}\int_0^2 (t-1)(t-2)\,dt = \frac{1}{6}$. Враховуючи властивості коефіцієнтів Котеса, знаходимо $B_2^2 = \frac{1}{6}$, $B_2^1 = \frac{4}{6}$. Квадратурна формула приймає вигляд

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{6}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right). \qquad (5.28)$$

Квадратурна формула (5.28) називається ***формулою Сімпсона*** або формулою парабол. Ця формула випливає з геометричного тлумачення інтеграла, якщо криву $y = f(x)$ замінити параболою, що проходить через три точки $M_0(x_0, y_0)$, $M_1(x_1, y_1)$, $M_2(x_2, y_2)$ (на рис.5.7 парабола показана пунктиром) і наближене значення інтеграла обчислювати як площу фігури, що зверху обмежена графіком цієї параболи.

Знайдемо залишковий член квадратурної формули Сімпсона. Для цього з наближеної рівності (5.28) запишемо формулу для похибки

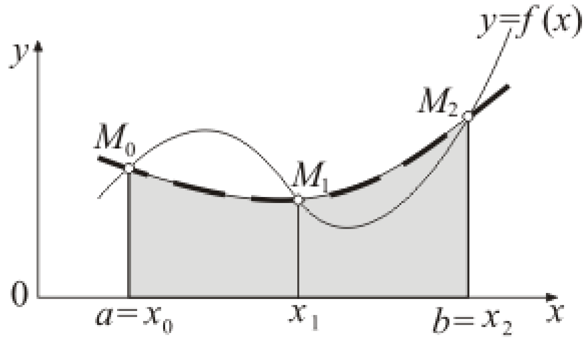

Рис. 5.7. Геометричне зображення квадратурної формули Сімпсона

$$r_2 = \int_a^b f(x)dx - \frac{(b-a)}{6}\left(f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right). \qquad (5.29)$$

Розкладемо функцію $f(x)$ в ряд Тейлора в околі точки x_1, припускаючи функцію $f(x)$ такою, що розкладання можливе.

Отже, ***похибка квадратурної формули Сімпсона*** може бути записана у вигляді

$$r_2 = -\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{1}{90} f^{(IV)}(\eta), \quad \eta \in [a,b]. \qquad (5.32)$$

З (5.32) видно, що алгебраїчний степінь точності квадратурної формули Сімпсона дорівнює трьом, тобто ця формула має підвищений степінь точності.

Формулу Сімпсона також можна застосовувати не до всього відрізка інтегрування, а до окремих його частин. Для цього поділимо відрізок$[a,b]$ на $n = 2m$ частин рівної довжини $h = \dfrac{b-a}{2m}$ кожний, як показано на рис. 5.8.

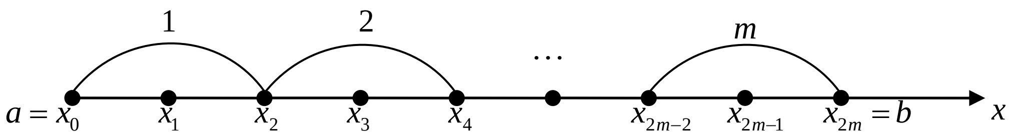

Рис. 5.8. Схема поділу відрізка інтегрування на подвоєні відрізки

Візьмемо k-й подвоєний відрізок, функцію $f(x)$ проінтегруємо по цьому відрізку, використовуючи квадратурну формулу (5.28) з похибкою (5.32).

$$\int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx = \frac{(x_{2k} - x_{2k-2})}{6}\left(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k})\right) -$$

$$-\left(\frac{x_{2k} - x_{2k-2}}{2}\right)^5 \frac{1}{90} f^{(IV)}(\eta_k), \qquad \eta_k \in [x_{2k}, x_{2k-2}].$$

Просумувавши інтеграли по всіх подвоєних відрізках, добудемо узагальнену формулу Сімпсона

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=1}^{m} \int_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)dx = \sum_{k=1}^{m} \left(\frac{(x_{2k} - x_{2k-2})}{6} \left(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k}) \right) \right) -$$

$$-\frac{1}{90} \cdot \sum_{k=1}^{m} \left(\frac{x_{2k} - x_{2k-2}}{2} \right)^5 f^{(IV)}(\eta_k).$$

Якщо прийняти умову, що відстань між будь-якими двома сусідніми вузлами однакова і дорівнює h, то останню формулу можна переписати у більш простому вигляді

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{2h}{6} \sum_{k=1}^{m} \left(f(x_{2k-2}) + 4f(x_{2k-1}) + f(x_{2k}) \right) - \frac{h^5}{90} \cdot \sum_{k=1}^{m} f^{(IV)}(\eta_k) =$$

$$= \frac{(b-a)}{6m} \left(f(x_0) + f(x_{2m}) + 2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k}) + 4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1}) \right) - \frac{h^5 m}{90} f^{(IV)}(\eta), \quad \eta \in [a,b]$$

Тепер запишемо окремо ***узагальнену формулу Сімпсона*** та похибку цієї формули.

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{(b-a)}{6m} \left(f(x_0) + f(x_{2m}) + 2\sum_{k=1}^{m-1} f(x_{2k}) + 4\sum_{k=1}^{m} f(x_{2k-1}) \right). \tag{5.33}$$

$$r_2 = -\left(\frac{b-a}{2} \right)^5 \frac{f^{(IV)}(\eta)}{90m^4}, \quad \eta \in [a,b]. \tag{5.34}$$

Геометричне зображення формули (5.33) показане на рис. 5.9.

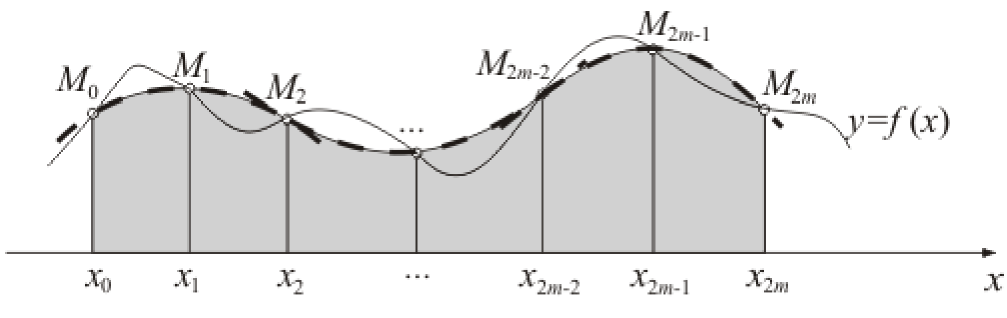

Рис. 5.9. Геометричне зображення узагальненої формули Сімпсона

Наближене значення інтеграла (права частина наближеної рівності (5.33)) – це площа криволінійної трапеції, яка зверху обмежена кусками парабол $M_0 M_1 M_2$, ..., $M_{2m-2} M_{2m-1} M_{2m}$ (крива показана пунктиром). На кожному подвоєному відрізку графік функції $y = f(x)$ наближується своєю параболою.

З формули (5.34) видно, що з ростом m похибка дуже швидко зменшується.

Приклад. Обчислимо наближене значення інтеграла $J = \int\limits_0^1 \sqrt{1+x^2}\, x dx$, використовуючи квадратурні формули прямокутників, трапецій та Сімпсона. Для цього підготуємо таблицю значень підінтегральної функції $f(x) = x\sqrt{1+x^2}$ у точках відрізка [0; 1]. Ці значення наведені в табл. 5.1 з точністю до восьмого або сьомого розряду після коми.

Таблиця 5.1

Значення підінтегральної функції у вузлах

x_i	$f(x_i)$
$x_0 = 0{,}0$	$f(x_0) = 0{,}00000000$
$x_1 = 0{,}1$	$f(x_1) = 0{,}10049875$
$x_2 = 0{,}2$	$f(x_2) = 0{,}20396078$
$x_3 = 0{,}3$	$f(x_3) = 0{,}31320918$
$x_4 = 0{,}4$	$f(x_4) = 0{,}43081316$
$x_5 = 0{,}5$	$f(x_5) = 0{,}55901695$
$x_6 = 0{,}6$	$f(x_6) = 0{,}69971418$
$x_7 = 0{,}7$	$f(x_7) = 0{,}85445885$
$x_8 = 0{,}8$	$f(x_8) = 1{,}0244998$
$x_9 = 0{,}9$	$f(x_9) = 1{,}2108262$
$x_{10} = 1{,}0$	$f(x_{10}) = 1{,}4142135$

Квадратурні формули прямокутників (лівих, правих, центральних) дають такі результати:

$$J_л = 0{,}1 \cdot \sum_{i=0}^{9} f(x_i) = 0{,}53969974; \qquad J_п = 0{,}1 \cdot \sum_{i=1}^{10} f(x_i) = 0{,}68111108;$$

$$J_ц = 0{,}2 \cdot \left(f(x_1) + f(x_3) + f(x_5) + f(x_7) + f(x_9) \right) = 0{,}60760194.$$

У цьому прикладі інтеграл такий, що його точне значення можна обчислити, воно дорівнює (з точністю до сьомого розряду після коми)

$$J_{точне} = \frac{\sqrt{8} - 1}{3} \approx 0{,}6094757.$$

Зауважимо, що хоча формула центральних прямокутників у цьому прикладі використана з вдвічі більшим кроком, ніж формули лівих та правих прямокутників, але результат вийшов ближчим до точного, ніж у двох інших методів.

За квадратурними формулами трапецій та Сімпсона маємо такі результати:

$$J_{трап} = 0{,}1 \cdot \left(\frac{f(x_0) + f(x_{10})}{2} + \sum_{i=1}^{9} f(x_i) \right) = 0{,}61041042;$$

$$J_{Сімпсон} = 0{,}2 \cdot \left(\frac{1}{6}\left(f(x_0) + f(x_{10}) \right) + \frac{4}{6}\left(f(x_1) + f(x_3) + f(x_5) + f(x_7) + f(x_9) \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{2}{6}\left(f(x_2) + f(x_4) + f(x_6) + f(x_8) \right) \right) = 0{,}60947422.$$

Отже, після обчислень за різними квадратурними формулами маємо такі наближені значення інтеграла:

$$J_{ц} = 0{,}60760194; \quad J_{трап} = 0{,}61041046; \quad J_{Сімпсон} = 0{,}60947422.$$

З використаних формул більш точною є формула Сімпсона, оскільки її алгебраїчний степінь точності на дві одиниці більший ніж у формули трапецій. Тому, користуючись апостеріорним методом оцінки похибки, в результаті, добутому за формулою Сімпсона, можна вважати три розряди після коми правильними, а четвертий розряд округленим, тобто

$$J \approx 0{,}6095.$$

Але, якщо порівняти з точним значенням інтеграла, то видно, що насправді результат, добутий за формулою Сімпсона, має п'ять правильних розрядів після коми, шостий розряд округлений.

5.7. Квадратурні формули найвищого алгебраїчного степеня точності

Повернемося до квадратурної формули (5.1). Нагадаємо, що інтерполяційна квадратурна формула, побудована за вузлами $x_0, x_1, \ldots, x_n$, має алгебраїчний степінь точності n тільки за рахунок вибору коефіцієнтів $A_i,\ i = \overline{0, n}$ у вигляді (5.6). При цьому вузли, що розташовані на $[a, b]$ і всі різні між собою, залишились у всьому іншому довільними. Запитаємо себе: «Як розташувати вузли, щоб підвищити точність квадратурної формули?»

Оскільки квадратурна формула (5.1) має ($2n$+2) параметри $x_i, A_i,\ i = \overline{0, n}$, то спробуємо їх використати так, щоб квадратурна формула стала точною для всіх алгебраїчних многочленів до степеня $2n+1$ включно. Для цього беремо многочлен степеня $2n+1$ з довільними коефіцієнтами a_k

$$f(x) = P_{2n+1}(x) = \sum_{k=0}^{2n+1} a_k \cdot x^k$$

і підставимо його до лівої і правої частин формули (5.1):

$$\int_a^b \rho(x) P_{2n+1}(x) dx = \sum_{k=0}^{2n+1} a_k \int_a^b \rho(x) \cdot x^k dx; \tag{5.35}$$

$$\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i) = \sum_{i=0}^{n} A_i \sum_{k=0}^{2n+1} a_k \cdot x_i^k = \sum_{k=0}^{2n+1} a_k \cdot \sum_{i=0}^{n} A_i \cdot x_i^k. \tag{5.36}$$

Тепер підставимо (5.35), (5.36) в (5.1) і напишемо при цьому знак точної рівності. Приходимо до такої умови

$$\sum_{k=0}^{2n+1} a_k \left(\int_a^b \rho(x) \cdot x^k dx - \sum_{i=0}^{n} A_i \cdot x_i^k \right) = 0.$$

Остання умова повинна виконуватися для будь-яких коефіцієнтів a_k, $k = \overline{0, 2n+1}$. Це можливо тільки тоді, коли множник при кожному a_k дорівнює нулю, тобто

$$\int_a^b \rho(x) \cdot x^k dx = \sum_{i=0}^{n} A_i \cdot x_i^k, \; k = 0, 1, \cdots, 2n+1. \tag{5.37}$$

Система (5.37) – це система нелінійних рівнянь відносно x_i, A_i, $i = \overline{0, n}$. Якщо ця система має розв'язок, то квадратурна формула алгебраїчного степеня точності $2n+1$ може бути побудована.

З системи (5.37) видно, що x_i, A_i, $i = \overline{0, n}$ залежать від вагової функції $\rho(x)$. Для дуже великої множини вагових функцій розв'язок (5.37) знайдено.

Підійдемо до побудови квадратурної формули найвищого алгебраїчного степеня точності інакше. Для цього доведемо декілька теорем [6].

Теорема 1. Для того, щоб квадратурна формула (5.1) була формулою найвищого алгебраїчного степеня точності необхідно і достатньо, щоб виконувалися дві такі умови:

1) квадратурна формула (5.1) повинна бути інтерполяційною, тобто коефіцієнти A_i, $i = \overline{0, n}$ повинні обчислюватись за формулою (5.6);
2) вузли $x_0, x_1, \ldots, x_n$ повинні бути такими, щоб алгебраїчний поліном $\omega_{n+1}(x) = \prod_{m=0}^{n} (x - x_m)$ був ортогональним на проміжку $[a, b]$ з вагою $\rho(x)$ до будь-якого многочлена степеня не вище n, тобто $\int_a^b \rho(x) \omega_{n+1}(x) Q_n(x) \cdot dx = 0$.

Доведення. *Необхідність*. Приймаємо, що квадратурна формула (5.1) є точною для всіх алгебраїчних поліномів степеня $2n+1$. Покажемо, що звідси випливає виконання умов 1), 2) теореми. Дійсно, якщо квадратурна формула (5.1) є точною для всіх алгебраїчних поліномів степеня $2n+1$, то вона буде точною для всіх алгебраїчних поліномів степеня n. Значить вона є інтерполяційною.

Для доведення умови 2) виберемо функцію $f(x)$ у вигляді

$$f(x) = P_{2n+1}(x) = \omega_{n+1}(x) \cdot Q_n(x),$$

де $Q_n(x)$ – довільний алгебраїчний поліном степеня n. Ця функція $f(x)$ у всіх вузлах набуває нульових значень. Підставимо $f(x)$ до квадратурної формули (5.1)

$$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)Q_n(x) \cdot dx = \sum_{k=0}^{n} A_k \cdot f(x_k) = 0.$$

Отже, приходимо до умови 2).

Достатність. Нехай виконуються умови 1), 2) теореми. Покажемо, що звідси випливає – квадратурна формула (5.1) є точною для всіх алгебраїчних поліномів степеня $2n+1$.

Візьмемо довільний многочлен $P_{2n+1}(x)$ степеня $2n+1$. Поділимо його на $\omega_{n+1}(x)$ і запишемо у вигляді

$$f(x) = P_{2n+1}(x) = \omega_{n+1}(x) \cdot Q_n(x) + r_n(x).$$

Тут $Q_n(x)$, $r_n(x)$ – многочлени степеня n. Оскільки $\omega_{n+1}(x_k) = 0$, то $f(x_k) = r_n(x_k)$, $k = \overline{0,n}$. Підставимо $f(x)$ під інтеграл формули (5.1), маємо

$$\int_a^b \rho(x) f(x) \cdot dx = \int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)Q_n(x) \cdot dx + \int_a^b \rho(x) r_n(x) \cdot dx =$$

$$= \sum_{k=0}^{n} A_k \cdot r_n(x_k) = \sum_{k=0}^{n} A_k \cdot f(x_k),$$

тобто квадратурна формула є точною. Теорема доведена.

Отже, питання про побудову квадратурної формули, що має алгебраїчний степінь точності $2n+1$, зводиться до побудови многочлена $\omega_{n+1}(x) = \prod_{m=0}^{n}(x - x_m)$, який має вказану властивість ортогональності. Доведемо, що такий многочлен $\omega_{n+1}(x)$ існує, причому зараз зручніше подавати його у вигляді розкладання за степенями x.

Теорема 2. Нехай вагова функція $\rho(x)$ не змінює знак на $[a, b]$, і не є тотожнім нулем, наприклад, $\rho(x) \geq 0$, $\forall x \in [a,b]$ і $\int_a^b \rho(x) \cdot dx > 0$. Крім того, нехай існують інтеграли $\int\limits_a^b \rho(x)\cdot x^k dx < \infty, \quad k = 0,1,\cdots,2n+1$. Тоді при всякому n = 0, 1, ... існує єдиний многочлен $\omega_{n+1}(x) = x^{n+1} + a_1 x^n + a_2 x^{n-1} + \cdots + a_{n+1}$ ортогональний з вагою $\rho(x)$ на $[a, b]$ до всякого многочлена степеня не вище n.

Доведення. Ортогональність до будь-якого многочлена степеня не вище n еквівалентна ортогональності до функцій $1,\ x,\ x^2,\cdots,\ x^n$. Умови ортогональності до цих степенів дають таку систему лінійних алгебраїчних рівнянь для відшукання коефіцієнтів a_k, $k = \overline{0,n+1}$

$$\int\limits_a^b \rho(x)\left(x^{n+1} + a_1 x^n + a_2 x^{n-1} + \cdots + a_{n+1}\right)\cdot x^i dx = 0, \quad i = 0,1,\cdots,n.$$

Отримана СЛАР є неоднорідною і має єдиний розв'язок, якщо відповідна однорідна система має тільки тривіальний розв'язок. Розглянемо однорідну СЛАР

$$\int\limits_a^b \rho(x)\left(a_1 x^n + a_2 x^{n-1} + \cdots + a_{n+1}\right)\cdot x^i dx = 0, \quad i = 0,1,\cdots,n.$$

Помножимо i-е рівняння на a_{n+1-i} та просумувавши за всіма значеннями індексу $i = \overline{0,n}$, добудемо рівність

$$\int\limits_a^b \rho(x)\left(a_1 x^n + a_2 x^{n-1} + \cdots + a_{n+1}\right)^2 dx = 0 \quad \Rightarrow \quad \sum_{i=0}^{n} a_{n+1\text{-}i} x^i = 0,$$

оскільки за припущенням теореми $\rho(x) \ge 0,\ \forall x \in [a,b]$ і $\int\limits_a^b \rho(x)\cdot dx > 0$. Звідси випливає, що $a_{n+1-i} = 0,\ i = \overline{0,n}$, тобто однорідна система має тільки тривіальний розв'язок. А це означає, що визначник СЛАР не дорівнює нулю і неоднорідна СЛАР має єдиний розв'язок. Теорема доведена.

Залишається перевірити, чи будуть нулі многочлена $\omega_{n+1}(x)$, побудованого за умовами ортогональності, належати відрізку $[a, b]$.

Теорема 3. Нехай вагова функція не змінює знак на $[a, b]$, наприклад, $\rho(x) \ge 0,\ \forall x \in [a,b]$ і $\int\limits_a^b \rho(x)\cdot dx > 0$. Многочлен $\omega_{n+1}(x)$ є ортогональним на проміжку $[a, b]$ з вагою $\rho(x)$ до будь-якого многочлена степеня не вище n. Тоді всі нулі многочлена $\omega_{n+1}(x)$ належать відрізку $[a, b]$ та всі різні між собою.

Доведення. Припустимо супротивне. Нехай не всі нулі многочлена $\omega_{n+1}(x)$ належать $[a, b]$. При переході через нулі парної кратності многочлен $\omega_{n+1}(x)$ знак не змінює. Ті нулі $\omega_{n+1}(x)$, які розташовані на $[a, b]$ і мають непарну кратність, позначимо

$$\xi_0, \xi_1, \ldots, \xi_m, \quad m < n.$$

Побудуємо многочлен $P_{m+1}(x) = \prod_{i=0}^{m}(x - \xi_i)$. Його степінь $m+1 < n+1$, тому за властивістю ортогональності повинна виконуватись умова

$$\int_a^b \rho(x)\omega_{n+1}(x)P_{m+1}(x) \cdot dx = 0.$$

З іншого боку – ця умова виконуватись не може, бо $\omega_{n+1}(x)$ і $P_{m+1}(x)$ мають на $[a, b]$ однакові точки зміни знаку, а значить їхній добуток не змінює знак на $[a, b]$ і перетворюється в нуль лише у скінченій кількості точок. Отже, припущення, що деякі нулі $\omega_{n+1}(x)$ можуть не належати $[a, b]$ або бути кратними, є неправильним. Залишається варіант, що всі нулі $\omega_{n+1}(x)$ різні і всі належать $[a, b]$. Теорема доведена.

Отже, з теорем 1, 2, 3 випливає, що при $\rho(x) \geq 0,\ \forall x \in [a,b]$ квадратурна формула (5.1), що є точною для всіх алгебраїчних поліномів степеня $2n+1$, може бути побудована при будь-якій кількості вузлів $(n+1)$, $n = 0, 1, \ldots$, причому така формула буде єдиною при кожному n.

Доведемо, що при сформульованих вище умовах число $(2n+1)$ буде найвищим алгебраїчним степенем точності формули (5.1).

Теорема 4. Якщо вага $\rho(x) \geq 0,\ \forall x \in [a,b]$, то ні при яких $x_i, A_i,\ i = \overline{0,n}$ наближена формула (5.1) не може бути точною для всіх алгебраїчних многочленів степеня $(2n+2)$.

Доведення. За вузлами $x_0, x_1, \ldots, x_n$ побудуємо алгебраїчний поліном $\omega_{n+1}(x) = \prod_{m=0}^{n}(x - x_m)$. Розглянемо многочлен $f(x) = \left(\omega_{n+1}(x)\right)^2$ степеня $(2n+2)$. Він додатний всюди на $[a, b]$ і перетворюється в нуль лише у вузлах $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Тоді $\int_a^b \rho(x) \cdot f(x)dx > 0$ оскільки добуток $\rho(x)f(x) \geq 0$ і приймає значення нуль лише у скінченній кількості точок. Права частина формули (5.1) дорівнює нулю, оскільки $f(x_k) = 0$. Тому рівність (5.1) для алгебраїчного многочлена степеня $(2n+2)$ залишається наближеною. Теорема доведена.

Теорема 5. Нехай вагова функція $\rho(x)$ не змінює знак на $[a, b]$, наприклад, $\rho(x) \geq 0, \quad \forall x \in [a,b], \ \int\limits_a^b \rho(x) \cdot dx > 0$ і квадратурна формула (5.1) має найвищий алгебраїчний степінь точності. Тоді всі її коефіцієнти $A_i > 0, \quad i = \overline{0,n}$.

Доведення. Розглянемо функцію

$$f_i(x) = \left(\prod_{\substack{m=0 \\ m \neq i}}^{n} \frac{x - x_m}{x_i - x_m} dx \right)^2 = P_{2n}(x),$$

яка є алгебраїчним поліномом степеня $2n$. Для цієї функції буде справджуватися рівність

$$f_i(x_k) = \begin{cases} 0, & k \neq i, \\ 1, & k = i. \end{cases}$$

Оскільки $f(x)$ є поліномом степеня $2n$, то квадратурна формула буде точною для цієї функції $f(x)$, тобто

$$0 < \int\limits_a^b \rho(x) f_i(x) dx = \sum_{k=0}^{n} A_k f_i(x_k) = A_i, \quad i = \overline{0,n} \ .$$

Як видно з формули (5.6), квадратурні коефіцієнти $A_i, \ i = \overline{0,n}$ не залежать від тієї функції, яка інтегрується, і якщо вони додатні для однієї функції, то будуть додатними і для інших функцій. Теорема доведена.

Теорема 6. Нехай вагова функція $\rho(x)$ не змінює знак на $[a, b]$, наприклад, $\rho(x) \geq 0, \quad \forall x \in [a,b]$ і $\int\limits_a^b \rho(x) \cdot dx > 0$, функція $f(x) \in C^{(2n+2)}[a,b]$. Тоді $\exists$ точка $\xi \in [a, b]$ така, що похибку $r_n = \int\limits_a^b \rho(x) f(x) dx - \sum\limits_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$ квадратурної формули найвищого алгебраїчного степеня точності можна буде подати у вигляді

$$r_n = f^{(2n+2)}(\xi) \cdot \int\limits_a^b \frac{\rho(x) \cdot \omega_{n+1}^2(x)}{(2n+2)!} \cdot dx, \ \xi \in [a,b].$$

Доведення можна знайти в [6].

Зробимо ***висновок*** з попередніх теорем. Для того, щоб квадратурна формула (5.1) була точною для всіх алгебраїчних многочленів степеня не вище $2n+1$, необхідно і достатньо щоб виконувались умови:

- квадратурна формула (5.1) повинна бути інтерполяційною, тобто коефіцієнти $A_i,\ i=\overline{0,n}$ повинні обчислюватись за формулою (5.6);
- вузли $x_0,\ x_1,\ldots,\ x_n$ повинні збігатися з нулями многочлена $Q_{n+1}(x)$, що належить до системи многочленів $\left\{Q_i(x)\right\}_{i=0}^{\infty}$, ортогональних на проміжку $[a,\ b]$ з вагою $\rho(x)$, тобто

$$\int_a^b \rho(x)Q_i(x)Q_j(x)\cdot dx = \begin{cases} const > 0, & i=j, \\ 0, & i \neq j\ . \end{cases} \tag{5.38}$$

Це означає, що многочлен $\omega_{n+1}(x)$ тільки сталим множником відрізняється від многочлена $Q_{n+1}(x)$.

Отже, можна сформулювати такий ***теоретичний алгоритм*** використання квадратурних формул найвищого алгебраїчного степеня точності.

1. Для заданого інтеграла визначаємося з ваговою функцією $\rho(x) \geq 0$.
2. Для вагової функції $\rho(x)$ беремо систему многочленів $\left\{Q_i(x)\right\}_{i=0}^{\infty}$ таких, що виконуються умови (5.38). Якщо потрібно, то відрізок інтегрування $[a,\ b]$ приводимо до стандартного вигляду.
3. Вибираємо n.
4. Знаходимо нулі алгебраїчного многочлена $Q_{n+1}(x)$. Це будуть вузли $x_0,\ x_1,\ldots,\ x_n$ квадратурної формули (5.1).
5. За формулами (5.6) обчислюємо коефіцієнти $A_i,\ i=\overline{0,n}$.
6. Знаючи вузли та коефіцієнти, обчислюємо квадратурну суму $\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$.

   Це і є наближене значення інтеграла.

На практиці користуються вже готовими таблицями [8], керуючись таким алгоритмом:

1. Для заданого інтеграла визначаємося з ваговою функцією $\rho(x)$. Якщо потрібно, то відрізок інтегрування $[a,\ b]$ приводимо до стандартного вигляду. Щоб з’ясувати, який відрізок є стандартним, звертаємось до відповідної таблиці [8].
2. Вибираємо n.
3. Для вагової функції ρ(x) та вибраного n беремо з таблиць координати вузлів $x_0,\ x_1,\ldots,\ x_n$ та значення коефіцієнтів $A_i,\ i=\overline{0,n}$.
4. Обчислюємо квадратурну суму $\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$. Це і є наближене значення інтеграла.

Квадратурна формула Гаусса – це окремий випадок квадратурної формули найвищого алгебраїчного степеня точності при $\rho(x) \equiv 1$, та $[a, b] = [-1, +1]$. Останнє припущення не обмежує загальності, оскільки довільний відрізок $[a, b]$ можна перевести у відрізок $[-1, +1]$ заміною змінної інтегрування.

Відомо, що системою ортогональних з вагою $\rho(x) \equiv 1$ на відрізку $[-1, +1]$ многочленів є многочлени Лежандра [8]

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \cdot \frac{d^n}{dx^n}\left((x^2-1)^n\right).$$

За цією формулою знаходимо: $P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = \frac{1}{2} \cdot \frac{d}{dx}(x^2-1) = x$. Далі зручніше користуватися рекурентною формулою

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1) \cdot x \cdot P_n(x) - nP_{n-1}(x), \quad n = 1,2,\cdots.$$

Отже, маємо $P_2(x) = \frac{3}{2} \cdot x^2 - \frac{1}{2}$ і т. п.

Вузли квадратурної формули Гаусса повинні бути коренями рівняння $P_{n+1}(x) = 0$. Але корені (або нулі) многочленів Лежандра відомі, треба звертатись до таблиць [8, с.158 – 159].

Отже, ***квадратурна формула Гаусса*** має вигляд

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \tag{5.39}$$

причому квадратурні вузли та коефіцієнти $\{x_i, A_i\}_{i=0}^{n}$ при $n = \overline{1, 10}$ наведені в табл. 5.2.

Таблиця 5.2

Вузли та коефіцієнти квадратурної формули Гаусса

n	x_i	A_i
1	$x_0 = -0{,}57735\ 02691\ 89625\ 76451$ $x_1 = -x_0$	$A_0 = 1{,}00000\ 00000\ 00000\ 00000$ $A_1 = A_0$
2	$x_0 = -0{,}77459\ 66692\ 41483\ 37704$ $x_1 = 0{,}00000\ 00000\ 00000\ 00000$ $x_2 = -x_0$	$A_0 = 0{,}55555\ 55555\ 55555\ 55556$ $A_1 = 0{,}88888\ 88888\ 88888\ 88889$ $A_2 = A_0$
3	$x_0 = -0{,}86113\ 63115\ 94052\ 57522$ $x_1 = -0{,}33998\ 10435\ 84856\ 26480$ $x_2 = -x_1;\ x_3 = -x_0$	$A_0 = 0{,}34785\ 48451\ 37453\ 85737$ $A_1 = 0{,}65214\ 51548\ 62546\ 14263$ $A_2 = A_1;\ \ A_3 = A_0$

4	$x_0 = -0{,}90617\ 98459\ 38663\ 99280$ $x_1 = -0{,}53846\ 93101\ 05683\ 09104$ $x_2 = 0{,}00000\ 00000\ 00000\ 00000$ $x_3 = -x_1;\ x_4 = -x_0$	$A_0 = 0{,}23692\ 68850\ 56189\ 08751$ $A_1 = 0{,}47862\ 86704\ 99366\ 46804$ $A_2 = 0{,}56888\ 88888\ 88888\ 88889$ $A_3 = A_1;\ \ A_4 = A_0$
5	$x_0 = -0{,}93246\ 95142\ 03152\ 02781$ $x_1 = -0{,}66120\ 93864\ 66264\ 51366$ $x_2 = -0{,}23861\ 91860\ 83196\ 90863$ $x_3 = -x_2;\ x_4 = -x_1;\ x_5 = -x_0$	$A_0 = 0{,}17132\ 44923\ 79170\ 34504$ $A_1 = 0{,}36076\ 15730\ 48138\ 60757$ $A_2 = 0{,}46791\ 39345\ 72691\ 04739$ $A_3 = A_2;\ \ A_4 = A_1;\ \ A_5 = A_0$
6	$x_0 = -0{,}94910\ 79123\ 42758\ 52453$ $x_1 = -0{,}74153\ 11855\ 99394\ 43986$ $x_2 = -0{,}40584\ 51513\ 77397\ 16691$ $x_3 = 0{,}00000\ 00000\ 00000\ 00000$ $x_4 = -x_2;\ x_5 = -x_1;\ x_6 = -x_0$	$A_0 = 0{,}12948\ 49661\ 68869\ 69327$ $A_1 = 0{,}27970\ 53914\ 89276\ 66790$ $A_2 = 0{,}38183\ 00505\ 05118\ 94495$ $A_3 = 0{,}41795\ 91836\ 73469\ 38776$ $A_4 = A_2;\ \ A_5 = A_1;\ \ A_6 = A_0$
7	$x_0 = -0{,}96028\ 98564\ 97536\ 23168$ $x_1 = -0{,}79666\ 64774\ 13626\ 73959$ $x_2 = -0{,}52553\ 24099\ 16328\ 98582$ $x_3 = -0{,}18343\ 46424\ 95649\ 80494$ $x_4 = -x_3;\ \ x_5 = -x_2;\ \ x_6 = -x_1;$ $x_7 = -x_0$	$A_0 = 0{,}10122\ 85362\ 90376\ 25915$ $A_1 = 0{,}22238\ 10344\ 53374\ 47054$ $A_2 = 0{,}31370\ 66458\ 77887\ 28734$ $A_3 = 0{,}36268\ 37833\ 78361\ 98297$ $A_4 = A_3;\ \ A_5 = A_2;\ \ A_6 = A_1;$ $A_7 = A_0$
8	$x_0 = -0{,}96816\ 02395\ 07626\ 08984$ $x_1 = -0{,}83603\ 11073\ 26635\ 79430$ $x_2 = -0{,}61337\ 14327\ 00590\ 39731$ $x_3 = -0{,}32425\ 34234\ 03808\ 92904$ $x_4 = 0{,}00000\ 00000\ 00000\ 00000$ $x_5 = -x_3;\ x_6 = -x_2;\ x_7 = -x_1;\ x_8 = -x_0$	$A_0 = 0{,}08127\ 43883\ 61574\ 41197$ $A_1 = 0{,}18064\ 81606\ 94857\ 40406$ $A_2 = 0{,}26061\ 06964\ 02935\ 46232$ $A_3 = 0{,}31234\ 70770\ 40002\ 84007$ $A_4 = 0{,}33023\ 93550\ 01259\ 76316$ $A_5 = A_3;\ A_6 = A_2;\ A_7 = A_1;\ A_8 = A_0$

Закінчення таблиці 5.2

n	x_i	A_i
9	$x_0 = -0{,}97390\ 65285\ 17171\ 72008$ $x_1 = -0{,}86506\ 33666\ 88984\ 51073$ $x_2 = -0{,}67940\ 95682\ 99024\ 40623$ $x_3 = -0{,}43339\ 53941\ 29247\ 19080$ $x_4 = -0{,}14887\ 43389\ 81631\ 21089$ $x_5 = -x_4;\ \ x_6 = -x_3;\ \ x_7 = -x_2;$ $x_8 = -x_1;\ \ x_9 = -x_0$	$A_0 = 0{,}06667\ 13443\ 08688\ 13759$ $A_1 = 0{,}14945\ 13491\ 50580\ 59315$ $A_2 = 0{,}21908\ 63625\ 15982\ 04400$ $A_3 = 0{,}26926\ 67193\ 09996\ 35509$ $A_4 = 0{,}29552\ 42247\ 14752\ 87017$ $A_5 = A_4;\ \ A_6 = A_3;\ \ A_7 = A_2;$ $A_8 = A_1;\ \ A_9 = A_0$

10	$x_0 = -0{,}97822\ 86581\ 46056\ 99280$ $x_1 = -0{,}88706\ 25997\ 68095\ 29908$ $x_2 = -0{,}73015\ 20055\ 74049\ 32409$ $x_3 = -0{,}51909\ 61292\ 06811\ 81593$ $x_4 = -0{,}26954\ 31559\ 52344\ 97233$ $x_5 = 0{,}00000\ 00000\ 00000\ 00000$ $x_6 = -x_4$; $x_7 = -x_3$; $x_8 = -x_2$; $x_9 = -x_1$; $x_{10} = -x_0$	$A_0 = 0{,}05566\ 85671\ 16173\ 66648$ $A_1 = 0{,}12558\ 03694\ 64904\ 62464$ $A_2 = 0{,}18629\ 02109\ 27734\ 25143$ $A_3 = 0{,}23319\ 37645\ 91990\ 47992$ $A_4 = 0{,}26280\ 45445\ 10246\ 66218$ $A_5 = 0{,}27292\ 50867\ 77900\ 63071$ $A_6 = A_4$; $A_7 = A_3$; $A_8 = A_2$; $A_9 = A_1$; $A_{10} = A_0$

Якщо відрізок [a, b] відрізняється від відрізка [–1,+1], то робимо заміну $x = \frac{b+a}{2} + t\frac{b-a}{2}$. Квадратурна формула (5.39) приймає вигляд

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f(x(t))dt \approx \frac{b-a}{2}\sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \quad \text{де} \quad x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2}t_i .$$

Квадратурні вузли t_i та квадратурні коефіцієнти A_i, $i = \overline{0,n}$ беремо з таблиці 5.2 для кожного n.