1 Выделение особенности интегрируемой функции (пункт опережающий свое время)

Рассмотрим $\int\limits_a^b \varphi(x)dx$. Пусть функция $\varphi(x)$ интегрируема, но имеет особенность на (a,b). Как следует поступать в этом случае?
1) Если особая точка функции $\varphi(x)$ находится внутри промежутка (a,b), нужно представить интеграл в виде суммы интегралов, сместив, таким образом, особенность на край.
Далее считаем, что у функции, стоящей под знаком интеграла, особенность находится на конце промежутка интегрирования.
2) Теперь можно выделить особенность одним из двух способов: аддитивным или мультипликативным.
<u>1. Аддитивный способ</u>
Представить исходный интеграл в виде суммы двух интегралов

$$\int\limits_a^b \varphi(x)dx = \int\limits_a^b (\varphi(x) - \psi(x))dx \ + \int\limits_a^b \psi(x)dx,$$

где подынтегральная функция первого интеграла не имеет особенности на $[a,b]$, а второй интеграл легко считается.

Пример 1

Рассмотрим $\int\limits_0^1 \ln(\sin(x))dx$. Подынтегральная функция имеет особенность в нуле. Если вспомнить, что

$$\lim_{x\to 0}\left(\frac{\sin(x)}{x}\right) = 1,$$

возможно такое аддитивное выделение особенности:

$$\int\limits_0^1 \ln(\sin(x))dx = \int\limits_0^1 (\ln(\sin(x)) - \ln(x))dx \ + \int\limits_0^1 \ln(x)dx = \int\limits_0^1 \ln\left(\frac{\sin(x)}{x}\right)dx + \int\limits_0^1 \ln(x)dx.$$

Теперь подынтегральная функция первого интеграла $\ln\left(\frac{\sin(x)}{x}\right)$ не имеет особенности на $[0,1]$, и интеграл можно посчитать, например, используя квадратурную формулу Гаусса.
В то же время, второй интеграл считается:

$$\int\limits_0^1 \ln(x)dx = (x\cdot\ln(x) - x)\Big|_0^1$$

Пример 2

В принципе, интеграл из примера 1 можно посчитать, воспользовавшись формулой интегрирования по частям:

$$\int\limits_0^1 \ln(\sin(x))dx = x\cdot\ln(\sin(x))\Big|_0^1 - \int\limits_0^1 \frac{x}{\sin(x)}\cdot\cos(x)dx.$$

Пример 3

Рассмотрим $\int\limits_0^1 \varphi(x)dx = \int\limits_0^1 x^\alpha f(x)dx$, где $\alpha > -1$, а $f(x)$— гладкая функция (имеет непрерывные производные до порядка $n+1$ включительно. Функция $x^\alpha f(x)$, $\alpha > -1$ имеет интегрируемую особенность в нуле, если $f(x)|_{x=0} \neq 0$, и не имеет производных (даже сама функция рвётся). А если

подынтегральная функция имеет малую гладкость, то приближенное вычисление такого интеграла, даже с использованием квадратурных формул высокой степени точности, будет плохим.
Введём в рассмотрение многочлен

$$P_n(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!} \cdot x + \cdots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \cdot x^n \ .$$

Произведём аддитивное выделение особенности:

$$\int_0^1 x^\alpha f(x)dx = \int_0^1 x^\alpha P_n(x)dx \ + \ \int_0^1 x^\alpha (f(x) - P_n(x))dx \ .$$

Первый интеграл легко берётся, а у функции $x^\alpha(f(x)-P_n(x))$, стоящей под знаком второго интеграла, уже есть производные высоких порядков, и для его приближённого вычисления можно воспользоваться, например, составной квадратурной формулой Симпсона.
Немного поясним, как произошло повышение гладкости: точка $x = 0$ стала для функции $(f - P_n)(x)$ корнем кратности $n+1$, так как, очевидно

$$(f - P_n)^{(s)}\Big|_{x=0} = 0, \quad s = 0, 1, \cdots, n \ .$$

То есть

$$f - P_n \sim \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} \ f^{(n+1)}(\xi) \ ,$$

следовательно,

$$x^\alpha(f - P_n) \sim \frac{x^{n+1+\alpha}}{(n+1)!} \ f^{(n+1)}(\xi) \ .$$

2. Мультипликативный способ
Представить исходный интеграл в виде

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

здесь $f(x)$— гладкая функция (или, хотя бы, непрерывная), а $\rho(x)$ имеет ту же особенность, что и $\varphi(x)$, но обладает свойствами веса. Тогда можно стороить квадратурную формулу с весом.
Пример 4
Рассмотрим $\int\limits_0^1 \ln(x)f(x)dx$. Функция $\rho(x) = \ln(x)$ обладает свойствами веса: знакопостоянство ($\rho(x) \leq 0$), не эквивалентность нулю, существование всех моментов. Тогда квадратурная формала гауссова типа с весом $\rho(x)$, будет иметь вещественные узлы, лежащие внутри $(0, 1)$, а все коэффициенты формулы будут < 0, т.к. $\rho(x) \leq 0$.

Часть I
Приближенное вычисление определенных интегралов

В этой главе нас будет интересовать вычисление значения определенного интеграла.
Например, рассмотрим интеграл вида

$$\int_a^b \varphi(x)\,\mathrm{d}x.$$

Если подынтегральная функция задана аналитически, такой определенный интеграл часто удается вычислить с помощью первообразной по формуле Ньютона–Лейбница

$$\int_a^b \varphi(x)\,\mathrm{d}x = F(x)\big|_a^b = F(b) - F(a).$$

Однако этот подход не работает, например, в следующих случаях:

1) первообразную нельзя выразить в элементарных функциях, как в случае для $\varphi(x) = \sin x/x$, $\varphi(x) = 1/\ln x$ или $\varphi(x) = e^{-x^2}$;
2) у нас нет аналитического представления подынтегральной функции, а есть только ее значения в отдельных точках (опять функция задана таблично).

Приближенное вычисление определенных интегралов осуществляют при помощи *квадратурных формул* (сокращенно — *квадратур*). Далее мы будем рассматривать интегралы более общего вида (смотри пункт про мультипликативное выделение особенности интегрируемой функции):

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x,$$

где функцию $\rho(x)$ будем называть *весовой функцией* или *весом*, если она не эквивалентна тождественному нулю на (a, b) и для которой существуют (сходятся) все интегралы следующего вида

$$\exists\, \mu_k = \int_a^b x^k \rho(x)\,\mathrm{d}x, \quad k = 0, 1, \ldots.$$

Определение
Квадратурной формулой (далее сокращенно КФ) назовем формулу вида:

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{k=1}^{N} \underset{\text{коэфф-т}}{A_k} \cdot f(\underset{\text{узел}}{x_k}) \tag{1}$$

В правой части КФ стоит конечная *квадратурная* сумма, значение которой принимается в качестве приближенного значения интеграла. При вычислении значения квадратурной суммы основные трудозатраты состоят в нахождении значений $f(x_k)$.

Определение
Погрешностью КФ (1) назовем разность между точным и приближенным значением интеграла:

$$R_N(f) = \int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x - \sum_{k=1}^{N} A_k f(x_k).$$

Определение
Будем говорить, что КФ (1) *точна* для функции $f(x)$, если $R_N(f) = 0$, и *не точна* в противном случае.

Замечание
1) (a, b) не обязательно конечен, это может быть и вся вещественная ось, или полуось (главное, чтобы отыскиваемый интеграл имел конечное значение на (a, b);
2) узлы КФ x_k попарно различны, не обязательно принадлежат (a, b) и даже не обязательно вещественны;
3) КФ строится для фиксированных $\rho(x)$ и (a, b);
4) если у подынтегральной функции нет особенностей, считают вес $\rho(x) \equiv 1$;
5) задать КФ – это указать узлы и коэффициенты при фиксированном N.

2 Интерполяционные квадратурные формулы

Все квадратурные формулы, которые мы будем рассматривать в этой главе основаны на идее замены функции $f(x)$ ее интерполяционным полиномом, построенным по попарно различным узлам $x_1, x_2, \ldots, x_N$, значения в которых известны или легко вычислимы $f(x_1), \ldots, f(x_N)$.

Теперь по этой таблице строится единственный многочлен степени не выше $(N-1)$, обозначим его $P_{N-1}(f;x) = P_{N-1}(x)$. Тогда

$$\begin{aligned} f(x) &= P_{N-1}(x) + r_{N-1}(x) \\ &= \text{погрешность, как известно, имеет представление} \\ r_{N-1}(x) &= \frac{f^{(N)}(\xi)}{N!}\omega_N(x), \quad \xi \in \min\max\{x; x_1, \ldots, x_N\}, \ \omega_N(x) = (x-x_1)\cdots(x-x_N). \end{aligned}$$

Заменим $f(x)$ под знаком интеграла этой суммой, имеем

$$\begin{aligned} \int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x &= \int_a^b \rho(x) \sum_{k=1}^N \ell_{kN}(x) f(x_k)\,\mathrm{d}x + \int_a^b \rho(x) r_{N-1}(x)\,\mathrm{d}x \\ &= \sum_{k=1}^N f(x_k) \underbrace{\int_a^b \rho(x)\ell_{kN}(x)\,\mathrm{d}x}_{A_k} + \underbrace{\int_a^b \rho(x)\frac{f^{(N)}(\xi)}{N!}\omega_N(x)\,\mathrm{d}x}_{R_N(f)} \end{aligned}$$

и окончательно

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^N A_k f(x_k) + \underset{\text{погрешность}}{R_N(f)} \tag{2}$$

мы получили *интерполяционную квадратурную формулу.*

Определение

Интерполяционной КФ назовем формулу вида (2), узлы которой попарно различны, а коэффициенты закреплены выражениями

$$A_k = \int_a^b \rho(x)\ell_{kN}(x)\,\mathrm{d}x,$$

где

$$\ell_{kN}(x) = \frac{\omega_N(x)}{(x-x_k)\omega_N'(x_k)}.$$

При этом погрешность такой КФ автоматически задается формулой

$$R_N(f) = \int_a^b \rho(x)\frac{f^{(N)}(\xi)}{N!}\omega_N(x)\,\mathrm{d}x.$$

Замечание

При фиксированных $\rho(x)$ и (a,b) набором своих узлов $x_1, x_2, \ldots, x_N$ интерполяционная КФ определяется однозначно.

Теорема (критерий ИКФ)

Чтобы формула вида (1) была интерполяционной КФ, необходимо и достаточно чтобы она была точна для любого многочлена степени не выше $(N-1)$. То есть $\forall\ Q_{N-1}(x)$ верно

$$\int_a^b \rho(x) Q_{N-1}(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{k=1}^N A_k Q_{N-1}(x_k).$$

Доказательство:

НЕОБХОДИМОСТЬ: Пусть КФ (1) интерполяционная, рассмотрим $f(x) = Q_{N-1}(x)$. Очевидно интерполяционный многочлен степени не выше $(N-1)$ совпадет при этом с самой функцией, то есть

$P_{N-1}(Q_{N-1},x) \equiv Q_{N-1}(x)$. Тогда погрешность интерполяции $r_{N-1}(x) \equiv 0$, и, следовательно, погрешность КФ $R_N(Q_{N-1}) = \int_a^b \rho(x) \cdot 0 \,\mathrm{d}x = 0$.
Необходимость доказана.

ДОСТАТОЧНОСТЬ: Пусть КФ (1) точна для любого $Q_{N-1}(x)$. Возьмем $Q_{N-1}(x) = \ell_{kN}(x)$. Помним, что

$$\ell_{kN}(x_j) = \begin{cases} 0 & k \neq j \\ 1 & k = j \end{cases}.$$

Посчитаем

$$\int_a^b \rho(x) Q_{N-1}(x) \,\mathrm{d}x = \int_a^b \rho(x) \ell_{kN}(x) \,\mathrm{d}x = \sum_{j=1}^{N} A_j \ell_{kN}(x_j) = A_k.$$

То есть все коэффициенты A_k удовлетворяют формулам для коэффициентов ИКФ из определения.
Достаточность доказана.
Теорема доказана.

Определение
Алгебраической степенью точности (далее АСТ) КФ вида (1) назовем целое неотрицательное число d, такое, что $R_N(x^j) = 0, \quad j = 0, 1, \ldots, d$ и $R_N(x^{d+1}) \neq 0$. Другими словами, это максимальная степень алгебраического многочлена, для которого формула точна.

Пример
Существуют КФ, у которых нет АСТ. Рассмотрим КФ вида

$$\int_0^1 f(x) \,\mathrm{d}x \approx 2f(3).$$

Очевидно, что подстановка в нее $f(x) \equiv 1$ приводит к неверному равенству.

Следствие 1:
АСТ ИКФ с N узлами (обозначим ее d_N) удовлетворяет неравенству $d_N \geq (N-1)$.

Следствие 2:
У любой ИКФ всегда есть АСТ, так как она будет точна для констант.

Можно ли получить оценку сверху для d_N?
Можно, но при дополнительном ограничении на вес.