ЛЕКЦИЯ 9.1 КВАДРАТУРНЫЕ ФОРМУЛЫ НЬЮТОНА-КОТЕСА

1. Вывод формул Ньютона-Котеса

Постановка задачи остаётся прежней. Надо вычислить приближённое значение интеграла

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

и оценить погрешности приближения.

Общая идея решения заключается в приближении интеграла квадратурной суммой

$$I^* = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i),$$

где x_i – узлы, а A_i – веса формулы.

В этой лекции мы изучим интерполяционные квадратурные формулы Ньютона-Котеса. Принцип их построения очень прост. Подынтегральную функцию f интерполируют на промежутке интегрирования $[a; b]$ некоторой функцией, интеграл от которой легко вычисляется. Тогда приближенное значение искомого интеграла равно интегралу от интерполирующей функции.

Пусть узлы интерполяции x_i идут с постоянным шагом h:

$$x_i = a + ih,$$

$i = 0, \dots, n$, где

$$h = \frac{b-a}{n}.$$

Заменим функцию f интерполяционным многочленом Лагранжа:

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

где

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} \frac{\omega_{n+1}(x) y_i}{(x - x_i)\omega_n'(x_i)}, \tag{1}$$

$$\omega_{n+1}(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i), \tag{2}$$

$$\omega_n'(x_i) = \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} (x_i - x_j), \tag{3}$$

$$y_i = f(x_i).$$

Здесь L_n интерполяционный многочлен Лагранжа, записанный в сокращённой форме; R_n - остаточный член, равный погрешности интерполяции. Он определяется формулой (3) лекции 2.1:

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}\big(\xi(x)\big)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x), \tag{4}$$

где $\xi(x) \in (a;b)$ – некоторая точка внутри отрезка интегрирования, определяемая для каждого x. Тогда

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b L_n(x)dx + \int_a^b R_n(x)dx,$$

т.е. интеграл от остаточного члена есть погрешность приближённого интегрирования.

Произведём замену переменной

$$q = \frac{x - x_0}{h},$$

тогда

$$x = x_0 + qh, \tag{5}$$

$x_0 = a$. Перейдём от x к q во всех разностях в (2), (3):

$$x - x_i = x_0 + qh - (x_0 + ih) = (q - i)h,$$

$$x_i - x_j = (i - j)h,$$

$$\omega_{n+1}(x) = q(q-1)\cdots(q-n)h^{n+1},$$

$$\omega_n'(x_i) = i(i-1)\cdots 1\cdot(-1)(-2)\cdots(i-n)h^n = (-1)^{n-i} i!\,(n-i)!\,h^n. \tag{6}$$

Тогда многочлен Лагранжа (1) можно записать в виде

$$L_n(x_0 + qh) = \sum_{i=0}^{n} \frac{(-1)^{n-i} y_i}{i!\,(n-i)!} \cdot \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{q-i}. \tag{7}$$

Поскольку при $x = a$ $q = 0$, а при $x = b$ $q = n$, интегрирование по новой переменной q будет идти от 0 до n. Приближенное значение интеграла считаем как интеграл от многочлена Лагранжа (7). Тогда, имея в виду, что $dx = hdq$, получаем

$$I \approx I^* = h \int_0^n \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-i} y_i}{i!\,(n-i)!} \cdot \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{q-i} dq.$$

Это и есть формула Ньютона-Котеса. Ее можно записать в виде

$$I \approx I^* = (b-a) \sum_{i=0}^n H_i y_i, \tag{8}$$

где

$$H_i = \frac{1}{n} \cdot \frac{(-1)^{n-i}}{i!\,(n-i)!} \int_0^n \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{q-i} dq - \tag{9}$$

коэффициенты Котеса.

2. Погрешность

Для оценки погрешности произведём ту же замену (5), (6) в остаточном члене (4):

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}\big(\xi(x)\big)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x) = \frac{f^{(n+1)}\big(\xi(q)\big)}{(n+1)!} h^{n+1} q(q-1)\cdots(q-n),$$

$\xi(q)$ в силу замены будет уже зависеть от q. Тогда

$$I - I^* = \int_a^b R_n(x) dx = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!} \int_0^n f^{(n+1)}\big(\xi(q)\big) q(q-1)\cdots(q-n) dq. \tag{10}$$

Для вычисления интеграла в этом выражении можно применить теоремы о среднем значении интеграла. При невозможности применения этой теоремы можно получить верхнюю оценку абсолютной погрешности, используя свойства модуля и интеграла.

Пусть, например, $n = 1$; тогда $x_0 = a$, $x_1 = b$, $h = b - a$. Вычисляем коэффициенты Котеса (9):

$$H_0 = \frac{-1}{1} \int_0^1 \frac{q(q-1)}{q} dq = \frac{1}{2}; H_1 = \int_0^1 \frac{q(q-1)}{q-1} dq = \frac{1}{2}.$$

Подставляя их в (8), получаем приближённое значение интеграла:

$$I^* = (b-a) \frac{y_0 + y_1}{2} = (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2}.$$

Это знакомая нам формула трапеций. Правда, она здесь применена ко всему отрезку интегрирования. Но если по ней вычислить интеграл на частичном отрезке, а потом просуммировать, мы получим ровно ту же составную формулу из прошлой лекции. Найдём её погрешность:

$$I - I^* = \frac{(b-a)^3}{2!}\int\limits_0^1 f''\big(\xi(q)\big)q(q-1)dq.$$

Теперь применим обобщённую теорему о среднем значении.

Теорема 1 (обобщённая теорема о среднем значении интеграла). Пусть функции f и g интегрируемы на отрезке $[a;b]$, $m_1 \le f(x) \le m_2$, $x \in [a;b]$; g знакопостоянна на этом отрезке. Тогда существует такое число γ, что $m_1 \le \gamma \le m_2$ и

$$\int\limits_a^b f(x)g(x)dx = \gamma\int_a^b g(x)dx.$$

Возьмём в качестве f функцию f'', а g - $q(q-1)$. Пусть функция f дважды непрерывно дифференцируема на $[a;b]$. Тогда f'' удовлетворяет условию теоремы, кроме того, для любого γ, такого, что

$$\min_{x\in[a;b]} f''(x) \le \gamma \le \max_{x\in[a;b]} f''(x),$$

существует такое число $\xi \in [a;b]$, что $\gamma = f''(\xi)$. Произведение $q(q-1)$ отрицательно на $[0;1]$. Тогда

$$\int\limits_0^1 f''\big(\xi(q)\big)q(q-1)dq = f''(\xi)\int\limits_0^1 q(q-1)dq = -\frac{f''(\xi)}{6},$$

остаточный член равен интегрирования

$$I - I^* = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\xi),$$

$\xi \in [a;b]$. Отсюда следует оценка абсолютной погрешности:

$$\Delta I^* = |I - I^*| \le \frac{(b-a)^3}{12}M_2 = \frac{M_2}{12}(b-a)h^2,$$

где

$$M_2 = \max_{x\in[a;b]}|f''(x)|.$$

Тут сделана подстановка $b - a = h$. Пришли к оценке погрешности формулы трапеций из теоремы 3 лекции 8.2.

Теперь возьмём интерполяционный многочлен Лагранжа второй степени, т.е. $n = 2$. Тогда

$$h = \frac{b-a}{2},$$

$$x_0 = a, x_1 = \frac{a+b}{2}, x_2 = b.$$

Считаем коэффициенты Котеса (9):

$$H_0 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2!} \int_0^2 \frac{q(q-1)(q-2)}{q} dq = \frac{1}{6};\ H_1 = \frac{1}{2} \cdot \frac{(-1)}{1} \int_0^2 \frac{q(q-1)(q-2)}{q-1} dq = \frac{2}{3};$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2!} \int_0^2 \frac{q(q-1)(q-2)}{q-2} dq = \frac{1}{6}.$$

Тогда по формуле (8) получаем приближение интеграла:

$$I^* = (b-a)\left(\frac{1}{6}y_0 + \frac{2}{3}y_1 + \frac{1}{6}y_2\right) = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right).$$

Это формула Симпсона. Вычислив по ней приближённо интеграл на каждом частичном отрезке и сложив полученные значения, мы придём к формуле, полученной в лекции 8.1.

Погрешность приближённого интегрирования (10) равна

$$I - I^* = \frac{h^4}{6} \int_0^2 f'''\big(\xi(q)\big) q(q-1)(q-2) dq.$$

Применить теорему о среднем для её оценки, как это было сделано для формулы трапеций, нельзя, т.к. произведение $q(q-1)(q-2)$ меняет знак на отрезке интегрирования $[0; 2]$. Оценка погрешности формулы, приведённая в лекции 8.2, получается применением в формуле Ньютона-Котеса интерполяционного многочлена Эрмита третьей степени с кратными узлами. Естественно, что применение формулы Эрмита приводит к той же формуле Симпсона.

Теперь пусть $n = 3$, тогда

$$h = \frac{b-a}{3}.$$

Коэффициенты Котеса равны

$$H_0 = \frac{1}{3} \cdot \frac{(-1)}{3!} \int_0^3 (q-1)(q-2)(q-3) dq = \frac{1}{8};$$

$$H_1 = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2!} \int_0^3 q(q-2)(q-3)dq = \frac{3}{8}; H_2 = \frac{1}{3} \cdot \frac{(-1)}{2!} \int_0^3 q(q-1)(q-3)dq = \frac{3}{8};$$

$$H_3 = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{3!} \int_0^3 q(q-1)(q-2)dq = \frac{1}{8};$$

отсюда получаем приближённый интеграл:

$$I^* = \frac{b-a}{8}(f(a) + 3f(a+h) + 3f(a+2h) + f(b)).$$

Эта формула называется «формула три восьмых». Получить её остаточный член с помощью теоремы о среднем нельзя: она неприменима по той же причине, что в предыдущем примере. Его можно найти с помощью других интерполяций или же оценить по модулю.

Итак, квадратурные формулы Ньютона-Котеса получаются интегрированием интерполяционного многочлена, приближающего подынтегральную функцию. Они имеют общий вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i^{(n)} y_i, \tag{11}$$

$$A_i^{(n)} = (b-a)B_i^{(n)},$$

$$B_i^{(n)} = \frac{1}{n} \cdot \frac{(-1)^{n-i}}{i!\,(n-i)!} \int_0^n \frac{q(q-1)\dots(q-n)}{q-i} dq,$$

где $y_i = f(x_i) = f(a+ih)$. Коэффициенты $B_i^{(n)}$, как нетрудно заметить, не зависят от отрезка интегрирования, поэтому их можно заранее вычислить. Некоторые из них, полученные в примерах выше, приведены в таблице 1.

Возможно применение других интерполяционных многочленов. Тогда получаются отличные от рассмотренных нами формулы. Они также называются формулами Ньютона-Котеса. Ранее упоминалась формула Эрмита с кратными узлами. Она позволяет не только получить формулу Симпсона, но и вычислить её остаточный член.

Достаточно трудоемко, но можно привести формулы Ньютона-Котеса (11) к виду

$$\int_a^b f(x)dx = B_n h \sum_{i=0}^{n} a_i^{(n)} f(x_i) + r_n(h),$$

где

Табл. 1. Коэффициенты $B_i^{(n)}$ некоторых формул Ньютона-Котеса

n	$B_0^{(n)}$	$B_1^{(n)}$	$B_2^{(n)}$	$B_3^{(n)}$	$B_4^{(n)}$	Формула
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$				Трапеций
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$			Симпсона
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$		«Три восьмых»
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{12}{90}$	$\frac{32}{90}$	$\frac{7}{90}$	

$$r_n(h) = \int_a^b R_n(x)dx = \frac{h^{n+2}}{(n+1)!}\int_0^n f^{(n+1)}\big(\xi(q)\big)q(q-1)\cdots(q-n)dq.$$

Коэффициенты B_n, $a_i^{(n)}$ для разных n приведены в таблице 2 (ξ – некоторая точка из отрезка интегрирования $[a; b]$).

Табл. 2. Коэффициенты B_n, $a_i^{(n)}$ для некоторых n и остаточные члены формулы

n	B_n	$a_0^{(n)}$	$a_1^{(n)}$	$a_2^{(n)}$	$a_3^{(n)}$	$a_4^{(n)}$	$a_5^{(n)}$	$r_n(h)$
1	$\frac{1}{2}$	1	1					$-\frac{h^3}{12}f''(\xi)$
2	$\frac{1}{3}$	1	4	1				$-\frac{h^5}{90}f^{IV}(\xi)$
3	$\frac{3}{8}$	1	3	3	1			$-\frac{3h^5}{80}f^{IV}(\xi)$
4	$\frac{2}{45}$	7	32	12	32	7		$-\frac{8h^7}{945}f^{VI}(\xi)$
5	$\frac{5}{288}$	19	75	50	50	75	19	$-\frac{275h^7}{12096}f^{VI}(\xi)$

При $n \le 7$ и $n = 9$ все коэффициенты положительные, при $n = 8, 10$ среди них встречаются отрицательные. Было установлено, что при больших n есть как положительные, так и отрицательные коэффициенты. По этой причине формулы Ньютона-Котеса при больших n не применяются для интегрирования на всем отрезке. Используют так называемые составные формулы: отрезок интегрирования разбивается на частичные отрезки; на каждом применяется формула Ньютона-Котеса низкого порядка, а затем результаты складываются. Простейшие квадратурные формулы относятся к составным формулам Ньютона-Котеса.

Пример. Оценим приближённо интеграл

$$\int_2^4 x^2 \sin x \, dx.$$

Точное значение интеграла, вычисленное с помощью первообразной, равно $I = -1{,}373$; приближение по формуле Ньютона-Котеса (8), (9) для $n = 3$ (формула «три восьмых») равно $IK^* = -1{,}267$. Погрешность равна $\Delta IK^* = |I - IK^*| = 0{,}106$, а предельная погрешность как оценка модуля остаточного члена формулы Ньютона-Котеса есть $\bar{\Delta} IK^* = 0{,}133$ (по формуле $r_n(h)$ из таблицы 2).

Значение, вычисленное по формуле Ньютона-Котеса для $n = 4$, равно $IK_1^* = -1{,}375$; погрешность равна $\Delta IK_1^* = 0{,}002$. А погрешность по остаточному члену формулы Ньютона-Котеса (см. табл. 2) $\bar{\Delta} IK_1^* = 0{,}003$.