ЛЕКЦИИ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКЕ

МГТУ им. Н.Э. Баумана
Москва

Квадратурные формулы.

Основная задача: Требуется вычислить интеграл

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

где $f(x)$ - непрерывная функция.

Так как вычислить интеграл в элементарных функциях удается не всегда, то функцию $f(x)$ заменяют на аппроксимирующую ее функцию $\varphi(x,a)$.

Чаще всего $f(x)$ заменяют интерполяционным многочленом:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\varphi_i(x) + r(x).$$

Тогда

$$F = \int_a^b \left(\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\varphi_i(x) + r(x) \right) dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \int_a^b \varphi_i(x)\,dx + \int_a^b r(x)\,dx$$

и

$$F = \sum_{i=0}^{n} c_i f(x_i) + R, \qquad (1)$$

где x_i - узлы интерполяции, c_i - веса, R - остаточный член формулы.

Формула (1) называется **формулой численного интегрирования** или **квадратурной формулой**.

Формула трапеций.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ многочленом Лагранжа 1-ой степени, проходящим через точки $x = a$ и $x = b$.

$$L_1(x) = \frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b).$$

Тогда

$$F = \int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \int\limits_a^b \left(\frac{x-b}{a-b} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b) \right) dx = \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a).$$

Найдем погрешность этой формулы.

Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $\overline{x} = (a+b)/2$:

$$f(x) = f(\overline{x}) + (x-\overline{x})f'(\overline{x}) + \frac{f''(\overline{x})}{2!}(x-\overline{x})^2 + \mathrm{o}(x-\overline{x})^2.$$

Тогда

$$R = \int\limits_a^b f(x)\,dx - \frac{f(a)+f(b)}{2}(b-a) \simeq -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\overline{x}).$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1})\left(f_{i-1} + f_i\right),$$

и

$$R \simeq -\frac{1}{12}\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1})^3 f''(\overline{x_i})$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq h\left(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \dots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2}\right),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1,n}$. А остаток

$$R \simeq -\frac{1}{12}\sum_{i=1}^{n} h^3 f''(\overline{x_i}) \simeq -\frac{1}{12}h^2 \int\limits_a^b f''(x)\,dx = \mathrm{O}(h^2).$$

Т. е. формула трапеций имеет второй порядок точности. Если предположить, что $f''(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leqslant \frac{b-a}{12}h^2 M_2, \quad \text{где} \quad M_2 = \max_{[a,b]}|f''(x)|$$

Формула прямоугольников.

Формула центральных прямоугольников.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a,b]$ многочленом нулевой степени, т.е.

$$f(x) \simeq L_0(x) = f(x_0), \quad \text{где} \quad x_0 = \frac{a+b}{2}.$$

Тогда

$$F = \int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_a^b f(x_0)\,dx = (b-a)f(x_0).$$

Вычислим погрешность данной формулы. Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $x_0 = (a+b)/2$:

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}(x-x_0)^2 + \mathrm{o}(x-x_0)^2.$$

Тогда

$$R = \int_a^b f(x)\,dx - (b-a)f(x_0) \simeq \frac{1}{24}(b-a)^3 f''(x_0)$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) f(x_{i-1/2}), \quad \text{где} \quad x_{i-1/2} = \frac{x_i + x_{i-1}}{2},$$

и

$$R \simeq \frac{1}{24} \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1})^3 f''(x_{i-1/2}).$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq h \sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1/2}),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1, n}$.А остаток

$$R \simeq \frac{1}{24} \sum_{i=1}^{n} h^3 f''(x_{i-1/2}) \simeq \frac{1}{24} h^2 \int\limits_a^b f''(x)\,dx = \mathrm{O}(h^2).$$

Т. е. формула центральных прямоугольников имеет второй порядок точности. Если предположить, что $f''(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leqslant \frac{b-a}{24} h^2 M_2, \quad \text{где} \quad M_2 = \max_{[a,b]} |f''(x)| .$$

Замечания.

- Остаточный член в формуле центральных прямоугольников, по абсолютной величине, примерно в 2-а раза меньше, чем в формуле трапеций. Следовательно, если значения функции одинаково легко вычисляются во всех точках, то лучше вести расчеты по формуле центральных прямоугольников.

- Знаки главного члена погрешности у формулы трапеций и у формулы центральных прямоугольников различны, следовательно, если провести расчеты по каждой из формул, то точное значение интеграла будет лежать между ними.

Формула левых прямоугольников.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a,b]$ многочленом нулевой степени, т.е.

$$f(x) \simeq L_0(x) = f(a).$$

Тогда

$$F = \int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \int\limits_a^b f(a)\,dx = (b-a)f(a).$$

Вычислим погрешность данной формулы. Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $x_0 = (a+b)/2$:

$$f(x) = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + \mathrm{o}(x-x_0).$$

Тогда

$$R = \int\limits_a^b f(x)\,dx - (b-a)f(a) \simeq \frac{1}{2}(b-a)^2 f'(x_0)$$

Введем разбиение отрезка $[a,b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1})f(x_{i-1}),$$

и

$$R \simeq \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(x_i - x_{i-1})^2 f''(x_{i-1/2}).$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq h\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1}),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1,n}$.А остаток

$$R \simeq \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} h^2 f''(x_{i-1/2}) \simeq \frac{1}{2}h\int\limits_a^b f'(x)\,dx = \mathrm{O}(h).$$

Т. е. формула левых прямоугольников имеет первый порядок точности. Если предположить, что $f'(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leqslant \frac{b-a}{2} h M_1, \quad \text{где} \quad M_1 = \max_{[a,b]} |f'(x)|.$$

Формула правых прямоугольников.

Заменим функцию $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ многочленом нулевой степени, т.е.

$$f(x) \simeq L_0(x) = f(b).$$

Тогда

$$F = \int_a^b f(x)\,dx \simeq \int_a^b f(b)\,dx = (b-a)f(b).$$

Вычислим погрешность данной формулы. Для этого представим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора в окрестности точки $x_0 = (a+b)/2$:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \mathrm{o}(x - x_0).$$

Тогда

$$R = \int\limits_a^b f(x)\,dx - (b-a)f(b) \simeq -\frac{1}{2}(b-a)^2 f'(x_0).$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{n-1} < x_n = b.$$

Тогда

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1}) f(x_i),$$

и

$$R \simeq -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} (x_i - x_{i-1})^2 f''(x_{i-1/2}).$$

Если предположить, что разбиение равномерное, то

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq h \sum_{i=1}^{n} f(x_i),$$

где $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1,n}$.А остаток

$$R \simeq -\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} h^2 f''(x_{i-1/2}) \simeq -\frac{1}{2}h\int\limits_a^b f'(x)\,dx = \mathrm{O}(h).$$

Т. е. формула правых прямоугольников имеет первый порядок точности. Если предположить, что $f'(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leqslant \frac{b-a}{2}hM_1, \quad \text{где} \quad M_1 = \max_{[a,b]}|f'(x)|\,.$$

Замечание. В связи с небольшим порядком точности формул левых и правых прямоугольников, их применение на практика бывает достаточно редким.

Формула Симпсона.

• Разделим отрезок интегрирования $[a, b]$ на четное число частей - $2n$.

• Площадь криволинейной трапеции, соответствующей 2-м отрезкам $[x_{2k}, x_{2k+1}]$ и $[x_{2k+1}, x_{2k+2}]$ и ограниченной кривой $y = f(x)$, заменим площадью криволинейной трапеции, ограниченной многочленом второй степени, проходящим через точки: $M_{2k}(x_{2k}, f_{2k})$, $M_{2k+1}(x_{2k+1}, f_{2k+1})$ и $M_{2k+2}(x_{2k+2}, f_{2k+2})$.

Найдем площадь криволинейной трапеции, ограниченной параболой, проходящей через точки $N_0(-h, y_0)$, $N_1(0, y_1)$ и $N_2(h, y_2)$ и прямыми $x = -h$ и $x = h$. Построим многочлен Лагранжа, проходящий через данные 3-и точки.

$$L_2(x) = \frac{x(x-h)}{2h^2} y_0 - \frac{x^2 - h^2}{h^2} y_1 + \frac{x(x+h)}{2h^2} y_2.$$

Тогда

$$\int_{-h}^{h} L_2(x)\, dx = \frac{h}{3}\left(y_0 + 4y_1 + y_2\right).$$

Введем разбиение отрезка $[a, b]$.

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_{2n-1} < x_{2n} = b.$$

Будем полагать, что данное разбиение равномерное, т. е. $h = x_i - x_{i-1}$, при $i = \overline{1, 2n}$.

Следовательно,

$$\int\limits_{x_{2k-2}}^{x_{2k}} f(x)\,dx \simeq \frac{h}{3}(f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k}).$$

Тогда

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \frac{h}{3}\sum_{k=1}^{n}(f_{2k-2} + 4f_{2k-1} + f_{2k}) =$$

$$= \frac{b-a}{6n}(f_0 + f_{2n} + 2[f_2 + f_4 + \cdots + f_{2n-2}] + 4[f_1 + f_3 + \cdots + f_{2n-1}]).$$

Найдем погрешность этой формулы:

$$R_i = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)\,dx - \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}).$$

Для этого представим функцию $f(x)$ первыми 5-ю членами разложения в окрестности точки x_i с остаточным членом в форме Пеано.

$$f(x) = f(x_i) + (x - x_i)f'(x_i) + \frac{(x - x_i)^2}{2!}f''(x_i) + \frac{(x - x_i)^3}{3!}f'''(x_i) + \\ + \frac{(x - x_i)^4}{4!}f^{IV}(x_i) + \mathrm{o}(x - x_i)^4.$$

Тогда

$$R_i = \int\limits_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)\,dx - \frac{h}{3}(f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}) \simeq -\frac{1}{90}h^5 f^{IV}(x_i).$$

Данная погрешность получена на частичном отрезке разбиения. На всем отреке $[a, b]$ погрешность будет иметь вид:

$$R \simeq -\frac{1}{90}\sum_{i=1}^{n} h^5 f^{IV}(x_{2i-1}) = -\frac{1}{180}h^4 \int\limits_a^b f^{IV}(x)\,dx = \mathrm{O}(h^4).$$

Если предположить, что $f^{IV}(x)$ - кусочно-непрерывная функция, то

$$|R| \leqslant \frac{b-a}{180} h^4 M_4, \quad \text{где} \quad M_4 = \max_{[a,b]} \left| f^{IV}(x) \right|.$$

Квадратурные формулы интерполяционного типа.

Определение. Если заменить $f(x)$ интерполяционным многочленом сразу на всем отрезке интегрирования $[a, b]$, то полученная таким образом формула называется **квадратурной формулой интерполяционного типа.**

Построенные формулы центральных прямоугольников, трапеций и Симпсона являются частным случаем квадратурных формул интерполяционного типа при $n = 0,\ 1,\ 2.$

Заменим функцию $f(x)$ интерполяционным многочленом

$$f(x) \simeq L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} f(x_k).$$

Тогда

$$\int\limits_a^b L_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx\, f(x_k) = \sum_{k=0}^{n} c_k f(x_k).$$

Таким образом, квадратурная формула

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{k=0}^{n} c_k f(x_k)$$

является квадратурной формулой интерполяционого типа тогда и только тогда, когда

$$c_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx.$$

Оценка погрешности.

Получим выражение для погрешности квадратурной формулы интерполяционного типа.

Так как

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

то

$$F = \sum_{k=0}^{n} c_k f(x_k) + R,$$

где

$$R = \int\limits_a^b r(x)\,dx = \frac{1}{(n+1)!}\int\limits_a^b f^{(n+1)}(\xi)\omega(x)\,dx.$$

Отсюда приходим к следующей оценке погрешности квадратурной формулы интерполяционного типа

$$|R| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\int\limits_a^b \omega(x)\,dx,$$

где $M_{n+1} = \max\limits_{x\in[a,b]} |f^{(n+1)}(x)|$.

Тогда справедливо следующее утверждение:

Квадратурная формула интерполяционного типа, построенная с помощью $n+1$ узла: x_0, x_1,...,x_n гарантированно точна для любого многочлена степени n.

Теорема. Если квадратурная формула

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{k=0}^{n} d_k f(x_k)$$

точна для любого многочлена степени n, то она является квадратурной формулой интеполяционного типа.

◀ Достаточно показать, что $d_k = c_k$ при $k = \overline{0,n}$.

Для этого рассмотрим многочлены

$$\varphi_k(x) = \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}, \quad k = \overline{0,n}.$$

Вычисли интегралы

$$I_k = \int\limits_a^b \varphi_k(x)\,dx.$$

Так как квадратурная формула точна для любого многочлена степени n, то

$$I_k = \sum_{l=0}^{n} d_l \varphi_k(x_l).$$

Поскольку

$$\varphi_k(x_l) = \begin{cases} 0, & k \neq l, \\ 1, & k = l, \end{cases}$$

получаем $I_k = d_k$, при $k = \overline{0, n}$. С другой стороны

$$I_k = \int_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx = c_k.$$

Таким образом, $d_k = c_k$ при $k = \overline{0, n}$. ►

Формула Гаусса.

Было показано. Квадратурная формула

$$\int_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{k=1}^{n} c_k f(x_k)$$

точна для любого многочлена степени $n-1$.

Основная задача. За счет выбора узлов интерполяции получить квадратурные формулы, которые будут точны для многочленов степени выше $n-1$.

Потребуем, чтобы формула была точна для любого многочлена степени m. Данное требование эквивалентно условию:

$$\sum_{k=1}^{n} c_k x_k^{\alpha} = \int_a^b x^{\alpha}\,dx, \quad \alpha = 0, 1, \ldots m.$$

Таким образом получаем систему из $m+1$ уравнения с $2n$ неизвестными:

$$c_1, c_2, \ldots, c_n; \quad x_1, x_2, \ldots, x_n.$$

Потребуем, чтобы число уравнений равнялось числу неизвестных, т. е. $m = 2n - 1$.

Определение. Полученные таким образом квадратурные формулы называются **квадратурными формулами наивысшей алгебраической точности** или **формулами Гаусса**. Эти формулы точны для любого многочлена степени $2n-1$.

Рассмотрим многочлен общего вида

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \ldots (x - x_n).$$

Запишем критерий того, что квадратурная формула

$$\int\limits_a^b f(x)\,dx \simeq \sum_{k=1}^{n} c_k f(x_k)$$

является квадратурной формулой Гаусса.

Теорема. Квадратурная формула точна для любого многочлена степени $m = 2n-1$ тогда и только тогда, когда выполнены два условия:

1. многочлен $\omega(x)$ ортогонален любому многочлену $q(x)$ степени меньше n, т. е.

$$\int\limits_a^b \omega(x)q(x)\,dx = 0;$$

2. квадратурная формула является квадратурной формулой интерполяционного типа, т. е.

$$c_k = \int\limits_a^b \frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx, \quad k = 1, 2, \ldots n.$$

◄ **Необходимость.** Пусть формула точна для любого многочлена степени $2n-1$. Следовательно, она точна для многочлена $\omega(x)q(x)$ степени не выше $2n-1$, т. е.

$$\int_a^b \omega(x)q(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} c_k\omega(x_k)q(x_k) = 0.$$

Таким образом, требование ортогональности выполнено.

Так как, по предположению, квадратурная формула точна для любого многочлена степени $2n-1$, то она будет точна и для многочлена степени $n-1$. Следовательно, она является квадратурной формулой интерполяционного типа (согласно предыдущей теореме).

Достаточность. Пусть $f(x)$ - произвольный многочлен степени $2n-1$. Тогда, согласно правилу деления многочленов

$$f(x) = \omega(x)q(x) + r(x),$$

где $q(x)$ и $r(x)$ - многочлены степени не выше $n-1$. При этом

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \omega(x)q(x)\,dx + \int_a^b r(x)\,dx = \int_a^b r(x)\,dx.$$

Так как $r(x)$ - многочлен степени не выше $n-1$ и, по предположению, квадратурная формула является квадратурной формулой интерполяционного типа, то

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} c_k r(x_k) = \sum_{k=1}^{n} c_k\left(f(x_k) - \omega(x_k)q(x_k)\right) = \sum_{k=1}^{n} c_k f(x_k).$$

Таким образом, квадратурная формула точна для любого многочлена степени $2n-1$. ▶

Замечание. Использование доказанной теоремы упрощает построение формул Гаусса. Для этого достаточно условие ортогональности переписать в виде

$$\int_a^b \omega(x)x^{\alpha}\,dx = 0, \quad \alpha = 0, 1, \ldots, n-1.$$

Таким образом узлы в формулах Гаусса $x_1, x_2, \ldots, x_n$ можно найти из условия ортогональности.

А коэффициенты c_k по формуле

$$c_k = \int\limits_a^b \frac{\omega(x)}{(x - x_k)\omega'(x_k)} dx, \quad k = 1, 2, \dots n.$$

Существование и единственность квадратурной формулы наивысшей алгебраической точности.

Представим искомый многочлен $\omega(x)$ в виде

$$\omega(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_{n-1} x^{n-1} + x^n.$$

Тогда условие ортогональности примет следующий вид:

$$\int\limits_a^b \left(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_{n-1} x^{n-1} + x^n\right) x^\alpha \, dx = 0, \quad \alpha = 0, 1, \dots, n - 1.$$

Данное условие представляет собой СЛАУ относительно неизвестных коэффицентов $a_0, a_1, \dots, a_{n-1}$.

Покажем, что соответствующая однородная система

$$\int_a^b \left(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_{n-1} x^{n-1}\right) x^\alpha \, dx = 0, \quad \alpha = 0, 1, \ldots, n-1.$$

имеет единственное решение

$$a_0 = a_1 = \ldots = a_{n-1}.$$

Умножим полученную систему на a_α и просуммируем по всем α.

$$\sum_{\alpha=0}^{n-1} a_\alpha \int_a^b \left(\sum_{k=0}^{n-1} a_k x^k\right) x^\alpha \, dx = \int_a^b \left(\sum_{\alpha=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1} a_\alpha a_k x^k x^\alpha\right) dx =$$

$$= \int_a^b \left(\sum_{l=0}^{n-1} a_l x^l\right)^2 dx = 0.$$

Последнее равенство возможно лишь в случае

$$a_0 = a_1 = \ldots = a_{n-1}.$$