КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

В.В.Попов

ЧИСЕЛЬНЕ ІНТЕГРУВАННЯ

(конспект лекцій для студентів механіко-математичного факультету)

КИЇВ-2008

Квадратурні формули

Розглянемо визначений інтеграл Рімана:

$$I = \int_a^b p(x)u(x)dx\,, \qquad (1)$$

де $p(x)$ – так звана *вагова функція*, що забезпечує головну властивіть підінтегрального виразу, функція $u(x)$ належить певному класу U. В загальному випадку визначеного інтеграла вигляду

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

підінтегральну функцію $f(x)$ представляють добутком $p(x)u(x)$ так, щоб $p(x)$ увібрала в себе всі особливості функції $f(x)$ на проміжку інтегрування $[a,b]$, а функція $u(x)$ була б на цьому проміжку достатньо гладкою. Надалі будемо ввважати добуток $p(x)u(x)$ інтегрованим на $[a,b]$.

Обчислення визначених інтегралів (1) здійснюється просто, якщо відома первісна підінтегральної функції $u(x)$. Але існує багато задач з обчислення визначених інтегралів, де такий підхід ускладнюється певними причинами (обчислення первісної достатньо складно, підінтегральна функція $u(x)$ задана таблично тощо). В цьому випадку обчислення визначених інтегралів здійснюється чисельно. Позначимо через $\widetilde{I}$ і $R(u)$ наближене значення і похибку обчислення інтегралу (1) відповідно, тобто $I = \widetilde{I} + R(u)$.

Основний спосіб чисельного інтегрування полягає в апроксимації підінтегральної функції $u(x)$ такою іншою $\Phi(x)$, щоб, по-перше, можна було просто її проінтегрувати, по-друге, забезпечити бажану точність. Відповідні формули чисельного інтегрування називаються *квадратурними*. Така назва пояснюється, зрозуміло, геометричними тлумаченнями. Квадратурні формули базуються на обчисленні функції $u(x)$ на певній сітці $\Omega = \{x_i, i=0,1,\ldots,n\}$ проміжка $[a,b]$. Найчастіше на практиці застосовуються квадратурні формули такого вигляду:

$$\widetilde{I} = \sum_{i=0}^{n} A_i u(x_i)\,, \qquad (2)$$

де A_i та x_i називаються *коефіцієнтами* та *вузлами* квадратурної формули відповідно. Бажано, щоб коефіцієнти A_i квадратурної формули (2) були одного знаку. Очевидно, в такому випадку оцінка похибок заокруглень - мінімальна. Вузли x_i квадратурної формули (2) попарно різні. Якщо границі a, b проміжку інтегрування належать сітці Ω, то квадратурні формули називають *закритими*, а інакше – *відкритими*. Всього в формулі (2) $2(n+1)$ вільних параметра A_i та x_i. Їх вибором бажано оптимально розпорядитись, щоб похибка методу обчислення визначеного інтегралу була найменшою для всіх функцій $u(x) \in U$.

Існує декілька методів побудови квадратурних формул.

1. Метод забезпечення найвищого степеня точності

Апроксимація підінтегральної функції $u(x)$ *узагальненим многочленом* $\Phi_k(x,\vec{c})$:

$$\Phi_k(x,\vec{c}) = \sum_{i=0}^{k} c_i \varphi_i(x) \qquad (3)$$

приводить до можливості обчислювати *точно* значення визначеного інтегралу (1) при певних послідовно вибраних значеннях параметру k. Якщо поставити за ціль знайти максимальне значення цього параметру $k = r$, при якому формула (2) буде точною для всіх функцій $u(x) \in U$, а для $k = r+1$ - неточною, то можна отримати так звані *квадратурні* *формули найвищого степеня точності*. Якщо $\varphi_i(x)$ – многочлени, то такі формули називаються *квадратурними формулами найвищого алгебраїчного степеня точності*.

2. Метод забезпечення найменшої оцінки залишку в класі функцій.

Для кожної функції $u(x) \in U$ і параметра n похибка $R(u) = R_n(u)$ формули (1) має значення

$$R_n(u) = \int_a^b p(x)u(x)dx - \sum_{i=0}^{n} A_i u(x_i)$$

Якщо поставити за ціль знайти параметри A_i та x_i так, щоб мінімізувати похибку $R_n(u)$ для всіх функції $u(x) \in U$, то можна отримати так звані *квадратурні формули з найменшою оцінкою залишку в класі U*.

Примітки.

1. Можна спростити задачу побудови квадратурних формул (2), якщо зафіксувати частину вільних параметрів. Наприклад, зафіксувати вузли x_i, залишивши ($n+1$) вільних параметрів A_i, При цьому можна вибирати найпростішу сітку вузлів – рівномірну. Інший підхід передбачає фіксацію параметрів A_i (наприклад, поклавши їх значення рівними одиниці), залишивши ($n+1$) вільних параметрів x_i. До такого методу, наприклад, приводить вимога мінімізації середньо-квадратичної похибки формули (2).
2. Якщо врахувати похибку ε при обчисленні значеннь $u_i = u(x_i)$, то можна дістати наступну точну оцінку похибки заокруглень $\left|R_n(u)\right| \le \varepsilon \sum_{i=0}^{n} \left|A_i\right|$, яка не може бути зменшеною. У випадку $u(x) \equiv 1$ з врахуванням правила трикутника приходимо до висновку, що ця похибка буде найменшою при умові знакосталості всіх коефіцієнтів A_i .

Інтерполяційні квадратурні формули з фіксованими вузлами

Побудова квадратурних формул

Нехай задана множина попарно різних вузлів $x_i \in [a, b]$ та відповідні значення функції $u_i = u(x_i)$, $i = 0,1, \ldots, n$. Розглянемо наближення підінтегральної функції $u(x)$ інтерполяційним многочленом:

$$u(x) = L_n(x) + r_n(x)\,, \tag{4}$$

де $L_n(x)$ - інтерполяційний многочлен у формі Лагранжа:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^{n} u_i \frac{\varpi(x)}{(x - x_i)\varpi'(x_i)}\quad , \tag{5}$$

Похибку наближення $r_n(x)$ далі будемо використовувати при необхідності в одній з двох форм:

форма розділених різниць

$$r_n(x) = u(x; x_0; x_1; \ldots; x_n)\varpi(x)\,, \tag{6}$$

форма Лагранжа

$$r_n(x) = \frac{u^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\varpi(x)\,. \tag{6'}$$

Тут позначено:

$\varpi(x) = (x - x_0)(x - x_1)...(x - x_n)$,

$u(x; x_0; x_1; ...; x_n)$ – розділена різниця функції $u(x)$.

Використовуючи наближення (4), отримуємо з (1) квадратурну формулу у вигляді (2) та її похибку $R_n(u)$. При цьому коефіцієнти A_i обчислюються так:

$$A_i = \int_a^b \frac{p(x)\varpi(x)}{(x - x_i)\varpi'(x_i)} dx \quad . \tag{7}$$

Похибку $R_n(u)$ можна формально записати у вигляді

$$R_n(u) = \int_a^b u(x; x_0; x_1; ...; x_n) dx \tag{8}$$

або

$$R_n(u) = \int_a^b \frac{u^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \varpi(x) dx \tag{8'}$$

Квадратурні формули, коефіцієнти A_i яких обчислюються за правилом (7), називаються *інтерполяційними*. Похибку $R_n(u)$ ще називають *залишковим членом* квадратурної фомули.

Теорема про інтерполяційні квадратурні формули

Для того, щоб квадратурна формула (*2*) *була інтерполяційною, необхідно і достатньо щоб вона була точною для будь якого многочлена степеня не більше n.*

Доведення.

Передусім зауважимо, що будь-який многочлен $P(x)$ степеня не більше n можна представити у вигляді інтерполяційного многочлену:

$$P(x) = \sum_{i=0}^{n} P_i \frac{\varpi(x)}{(x - x_i)\varpi'(x_i)}, \tag{9}$$

де через P_i позначено значення функції $P(x)$ в вузлах x_i.

Н е о б х і д н і с т ь . Нехай квадратурна формулу (2) – інтерполяційна, а $P(x)$ - будь-який многочлен $P(x)$ степеня не більше n . Тоді, з одного боку при безпосередньому перетворенні інтегралу (1) для функції $u(x) := P(x)$ з врахуванням (8) прийдемо до виразу інтегралу

$$I = \sum_{i=0}^{n} P_i \int_a^b \frac{p(x)\varpi(x)}{(x - x_i)\varpi'(x_i)}, \tag{10}$$

а, з другого боку, його наближене значення через квадратурну формулу (2) з урахуванням виразу (7) для коефіцієнтів

$$\widetilde{I} = \sum_{i=0}^{n} P_i \int_a^b \frac{p(x)\varpi(x)}{(x - x_i)\varpi'(x_i)}. \tag{11}$$

Порівнюючи між собою (10) і (11) приходимо до висновку, що квадратурна інтерполяційна формула (2) дає точне значення інтегралу (1) для будь-якого многочлену $P(x)$ степеня не більше n.

Д о с т а т н і с т ь . Нехай квадратурна формула (2) для будь-якого многочлену $P(x)$ степеня не більше n дає точне значення інтегралу (1). Тоді з врахуванням (8) маємо

$$\sum_{i=0}^{n} P_i A_i = \sum_{i=0}^{n} P_i \int_a^b \frac{p(x)\varpi(x)}{(x - x_i)\varpi'(x_i)}.$$

Для довільних многочленів $P(x)$ ліва та права частини цієї рівності можуть бути рівними лише тоді, коли коефіцієнти A_i обчислюються за правилом:

$$A_i = \int_a^b \frac{p(x)\varpi(x)}{(x-x_i)\varpi'(x_i)}dx \,,$$

що у свою чергу доводить інтерполяційність квадратурної формули за означенням.

Теорема доведена.

Теорема про інтерполяційні квадратурні формули дає можливість знаходження коефіцієнтів A_i методом *невизначених коефіцієнтів*. Дійсно, якщо обчислити точні значення інтегралу (1) для многочленів x^i, $i = 0, 1, 2, \ldots, n$ і прирівняти їх до відповідної квадратурної суми, то отримаємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно чисел A_i з матрицею Вандермонда

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ x_0 & x_1 & \ldots & x_n \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ x_0^{\;n} & x_1^{\;n} & \ldots & x_n^{\;n} \end{pmatrix}$$

і вільними членами $\int_a^b p(x)x^i dx, \quad i = 0,1,\ldots,n$. Ця система має єдиний розв'язок, так як для попарно різних вузлів визначник матриці Вандермонда не дорівнює нулю.

Приклади побудови квадратурних формул

a) Побудувати квадратурну формулу (2) у випадку $p(x) \equiv 1$, $a = -1$, $b = 1$, $n = 1$. Вузли квадратурної формули зафіксувати на проміжку інтегрування симетрично відносно нуля ($|x_0|=|x_1|$).
Розв'язування прикладу.
Система лінійних алгебраїчних рівнянь відносно чисел A_0, A_1 має вигляд

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = 2 \\ A_0 - A_1 = 0 \end{cases}$$

Розв'язок цієї системи: $A_0 = A_1 = 1$, що приводить до квадратурної формули

$$\int_{-1}^{1} u(x)dx \cong u(x_0) + u(x_1) \qquad (12)$$

Отримана квадратурна формула (12) для значень вузлів

$$x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, \qquad x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$$

відома під назвою квадратурної формули Гаусса і є *відкритою*. Для значень вузлів

$$x_0 = -1,\ x_1 = 1$$

формула (12) відома під назвою квадратурної формули *трапеції* і є *закритою*.

Цікаво, що формально для значень вузлів $x_0 = 0$, $x_1 = 0$ формула (12) перетворюється до відомої квадратурної формули *середніх прямокутників*.

$$\int_{-1}^{1} u(x)dx \cong 2u(x_0)$$

b) Побудувати квадратурну формулу (2) у випадку $p(x) \equiv 1$ для $n = 1$. Вузли квадратурної формули зафіксувати значеннями $x_0 = a$, $x_1 = b$.
Розв'язування прикладу.

Система лінійних алгебраїчних рівнянь відносно чисел A_0, A_1 має вигляд

$$\begin{cases} A_0 + A_1 = b - a \\ A_0 a + A_1 b = \dfrac{b^2 - a^2}{2} \end{cases}$$

Розв'язок цієї системи: $A_0 = A_1 = (b-a)/2$, що приводить до квадратурної формули

$$\int_a^b u(x)dx \cong \frac{b-a}{2}(u(a)+u(b)) \qquad (13)$$

Формула (12) відома під назвою квадратурної формули *трапеції.*

Квадратурні формули Ньютона-Котеса

Розглянемо випадок, коли вагова функція $p(x) \equiv 1$, а вузлова сітка рівномірна. Позначимо через h крок сітки: $h=(b-a)/n$. Для такого випадку інтерполяційні квадратурні формули називаються формулами *Ньютона-Котеса* і мають простий алгоритм їх побудови. Дійсно, введемо нову змінну $q = (x-x_0)/h$. Враховуячи, що $x-x_i = (q-i)h$, $x_j-x_i = (j-i)h$, інтерполяційний поліном Лагранжа в нових змінних запишеться так

$$L_n = \sum_{i=0}^{n} (-1)^{n-i} u_i \frac{q(q-1)...(q-n)}{i!(n-i)!(q-i)}. \qquad (14)$$

Подальше виведення формул для квадратурних коефіцієнтів A_i приведе до рівностей

$$A_i = \frac{(-1)^{n-i} h}{i!(n-i)!} \int_0^n \frac{q(q-1)...(q-n)}{(q-i)} dq .$$

Так звані *коефіцієнти Котеса* (B_i) визначаються рівністю: $A_i = (b-a)B_i$, такщо квадратурна формула (2) може бути переписана у вигляді:

$$\tilde{I} = (b-a)\sum_{i=0}^{n} B_i u(x_i) , \qquad (15)$$

де коефіцієнти Котеса

$$B_i = \frac{(-1)^{n-i}}{i!(n-i)!n} \int_0^n \frac{q(q-1)...(q-n)}{(q-i)} dq \qquad (16)$$

Коефіцієнти Котеса мають такі властивості (✍)[1]:

- $B_i = B_{n-i}$;
- $\sum_0^n B_i = 1$.

Побудуємо декілька квадратурних формул Ньютона-Котеса.

n = 1

Коефіцієнти Котеса: $B_0 = B_1 = 1/2$.

Квадратурна формула:

$$\int_a^b u(x)dx = \frac{b-a}{2}(u(a)+u(b)) \qquad (17)$$

[1] вправа

- формула *трапецій*

n = 2
Коефіцієнти Котеса: $B_0 = B_2 = 1/6$, $B_1 = 4/6$
Квадратурна формула:

$$\int_a^b u(x)dx = \frac{b-a}{6}(u(a) + 4u(\frac{a+b}{2}) + u(b)) \tag{18}$$

- формула *Сімпсона*

n = 3
Коефіцієнти Котеса: $B_0 = B_3 = 1/8$, $B_1 = B_2 = 3/8$
Квадратурна формула:

$$\int_a^b u(x)dx = \frac{b-a}{8}(u(a) + 3u(a+h) + 3u(a+2h) + u(b)) \tag{19}$$

- формула *Ньютона*,або "*трьох восьмих*" ($h = (b-a)/3$)

Для більших значень кількості вузлів квадратурної формули її коефіцієнти набувають "незручних" значень, а для $n = 8$ ці коефіцієнти - навіть різних знаків. Це унеможливлює широке використання відповідних квадратурних формул.

Оцінка похибки квадратурних формул Ньютона-Котеса

З виразу для похибки інтерполяційного многочлену у формі Лагранжа (6') випливає похибка для інтерполяційних квадратурних формул у вигляді

$$R_n(u) = \frac{1}{(n+1)!}\int_a^b p(x)u^{(n+1)}(\xi(x))\varpi(x)dx$$

Якщо скористатись оцінкою похідної $\left|u^{(n+1)}(\xi(x))\right| \le M_{n+1}$ і врахувати додатність вагової функції, можна отримати оцінку похибки $R_n(u)$:

$$\left|R_n(u)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\int_a^b p(x)\left|\varpi(x)\right|dx \tag{20}$$

Для квадратурних формул Ньютона-Котеса оцінка (20) набуває вигляду

$$\left|R_n(u)\right| \le \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\int_a^b \left|\varpi(x)\right|dx \tag{21}$$

Очевидно, для знакосталої на [*a, b*] функції $\omega(x)$ оцінка (21) є точною і не може покращитись. Але знакосталою на [*a, b*] функція $\omega(x)$ може бути лише в двох випадках: при *n=0, n=1.* Випадок *n=0* відповідає квадратурним формулам *прямокутників* з одним вузлом $x_0 \in [a, b]$, причому, враховуючи вимогу знакосталості на [*a, b*] функції $\omega(x)$, в якості значень вузла x_0 можуть бути лише границі проміжку [*a, b*], що відповідає так званим квадратурним формулам *лівих* та *правих* прямокутників. Таким чином, для формул *лівих* та *правих* прямокутників маємо оцінку

$$\left|R_0(u)\right| \le M_1\int_a^b \left|\varpi(x)\right|dx = M_1(b-a)^2/2\,. \tag{22}$$

Випадок *n=1* відповідає квадратурним формулам трапецій. Оцінка похибки в цьому випадку:

$$\left|R_1(u)\right| \le \frac{M_2}{2}\int_a^b \left|\varpi(x)\right|dx = M_2(b-a)^3/12\,. \qquad (23)$$

Для загального випадку вирази залишкового члену формул Ньютона-Котеса можна дещо змінити і отримати цікаві якісні результати. Дійсно, скористаємось похибкою інтерполяційного многочлену у формі (6). Тоді залишковий член формул Ньютона-Котеса можна записати так:

$$R_n(u) = \int_a^b u(x;x_0;...;x_n)\omega(x)dx \qquad (24)$$

Нехай кількість n проміжків – парна. Многочлен $\omega(x)$ в такому випадку має властивість (✍) симетрії $\omega(a+s) = -\omega(b-s)$ відносно середини відрізка інтегрування $[a,b]$.

Введем функцію $\Omega(x) = \int_a^x \omega(x)dx$. Очевидно, $\Omega(a) = \Omega(b) = 0$. Виявляється, що більше нулів функція $\Omega(x)$ на проміжку інтегрування не має (✍). Довести це твердження можна, розглянувши послідовність чисел I_i – абсолютних значень інтегралів від $\omega(x)$ по проміжкам розбиття $\Delta_i = 1, 2,..., n/2$ (до середини проміжку інтегрування). Ця послідовність виявляється спадною, що і доводить твердження про відсутність нулів функції $\Omega(x)$ для $x \in (a, b)$. Інакше кажучи, функція $\Omega(x)$ – знакостала. Знайти знак функції $\Omega(x)$ можна просто: він співпадає із знаком функції $\omega(x)$ на проміжку $[a, a+h] = [x_0, x_1]$. У свою чергу знак функції $\omega(x) = (x-x_0)(x-x_1)... (x-x_n)$ на вказаному проміжку для парних n – додатній. Отже, $\Omega(x)>0$ при $x \in (a, b)$.

Тепер перетворимо вираз (24) для залишкового члену інтегруванням за частинами та використанням теореми про середнє. Отримаємо

$$R_n(u) = -u'(\eta;x_0;...;x_n)\int_a^b \Omega(x)dx, \qquad a < \eta < b\,. \qquad (25)$$

Для подальших перетворень скористаємось відомим зв'язком між розділеною різницею та похідною функції (✍):

$$u(x_0;x_1;...;x_n) = \int_0^1 dt_1 ... \int_0^{t_{n-1}} dt_n u^{(n)}(x_0 + \sum_{k=1}^n t_k(x_k - x_{k-1}))\,.$$

Для координат $x;x_0;...;x_0+nh$ ця рівність приймає вид

$$u(x;x_0;...;x_0+nh) = \int_0^1 dt_1 ... \int_0^{t_n} dt_{n+1} u^{(n+1)}(x + t_1(x_0 - x) + h\sum_{k=2}^{n+1} t_k)\,,$$

звідки після диференціювання по x знаходимо

$$u'(x;x_0;...;x_0+nh) = \int_0^1 dt_1 ... \int_0^{t_n} dt_{n+1}(1-t)u^{(n+2)}(x + t_1(x_0 - x) + h\sum_{k=2}^{n+1} t_k)\,,$$

а після послідовного застосування теореми про середнє до всіх інтегралів(✍) маємо остаточно:

$$u'(x;x_0;...;x_0+nh) = \frac{u^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}, \xi \in (a,b)$$

Тепер, враховуючи

$$\int_a^b \Omega(x)dx = \mathrm{x}\Omega(\mathrm{x})\Big|_\mathrm{a}^\mathrm{b} - \int_a^b x\Omega'(x)dx = -\int_a^b x\omega(x)dx\,,$$

з (25) знайдемо

$$R_n(u) = \frac{u^{(n+2)}(\xi)}{(n+2)!}\int_a^b x\omega(x)dx, \qquad a<\xi<b \tag{26}$$

Інтеграл в (26) – від'ємний. Дійсно,

$$sign(\int_a^b x\omega(x)dx) = -sign(\int_a^b \Omega(x)dx) = -1\,.$$

Один з висновків отриманого результату (26) полягає в тому, що алгебраїчна точність формул Ньютона-Котеса зростає на 1 при *парній* кількості n ділянок розбиття проміжку інтегрування і становить $(n+1)$, тобто, для всіх многочленів степеня до $(n+1)$ включно квадратурні формули Ньютона-Котеса точні. Наприклад, формули Сімпсона будуть точними не тільки для многочленів другого степеня, але і для многочленів третього степеня.

Нехай кількість n проміжків – *непарна*. Для похибки формул Ньютона-Котеса можна отримати такий вигляд [2]:

$$R_n(u) = \frac{u^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b \omega(x)dx, \qquad a<\xi<b \tag{27}$$

Як приклад, отримаємо похибку формул Ньютона-Котеса для конкретних значень n.

***n = 1* (*формула трапецій*).**

$$R_1(u) = \frac{u''(\xi)}{2}\int_a^b \omega(x)dx = -\frac{u''(\xi)}{12}h^3$$

Тут доречно відмітити випадок, коли друга похідна функції $u(x)$ – знакостала. Якщо $u''(x)>0$ ($u''(x)<0$), $x\in[a,\ b]$, то похибка від'ємна (додатня) і квадратурна формула трапецій (17) дає наближений результат завишений (занижений) . Це збігається і з геметричним тлумаченням квадратурної формули трапецій (Рис. 1).

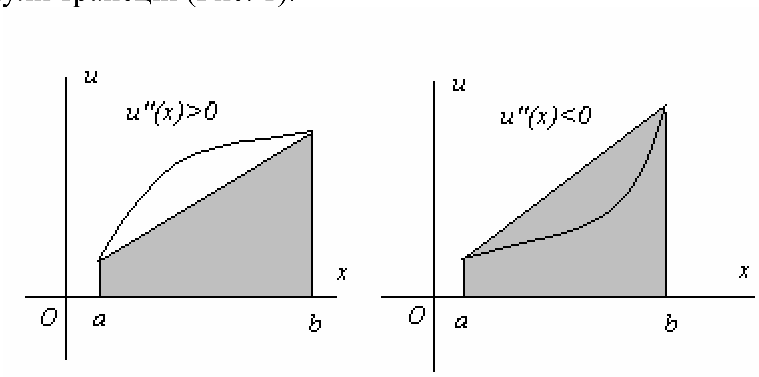

Рис. 1. Геометричне тлумачення квадратурної формули трапецій

***n = 2* (*формула Сімпсона*).**

$$R_2(u) = \frac{u^{(4)}(\xi)}{24}\int_a^b x\omega(x)dx = -\frac{u^{(4)}(\xi)}{90}h^5$$

Узагальнені інтерполяційні квадратурні формули

З попередніх результатів отримали проблему чисельного інтегрування: чим точніша алгебраїчна точність інтерполяційних квадратурних формул з фіксованими вузлами, тим більше їх похибка заокруглень. Щоб уникнути такої проблеми будують так звані *узагальнені* інтерполяційні квадратурні формули. Ідея їх побудови полягає в тому, що проміжок інтегрування розбивають на m рівних частин і до кожної з них застосовують одну з отриманих інтерполяційних квадратурних формул з фіксованими вузлами (найчастіше – формули трапецій або Сімпсона):

$$I = \sum_{i=1}^{m} (\widetilde{I}^{(i)}) + \sum_{i=1}^{m} (R_n^{(i)}(u)) = I_m + R_{n,m}(u). \qquad (28)$$

Перший доданок I_m в (28) утворює узагальнену квадратурну формулу, а другий $R_{n,m}(u)$ – її похибку. Зауважимо, що всього відрізків розбиття проміжку $[a, b]$ інтегрування буде $N=mn$, такщо крок h розбиття має значення $h = (b-a)/N$.

Узагальнена квадратурна формула трапецій

В цьому випадку параметр $n = 1$, тобто $N=m$.. Побудуємо узагальнену квадратурну формулу трапецій:

$$I_m = \sum_{i=1}^{m} \frac{b_i - a_i}{2}(u(a_i) + u(b_i)) \qquad (29)$$

$$R_{1,m} = -\sum_{i=1}^{m} \frac{(b_i - a_i)^3}{12} u''(\xi_i) \qquad (30)$$

Тут a_i, b_i – границі i-го відрізку ($i = 1, 2,\dots, m$) розбиття проміжку $[a, b]$ інтегрування, $\xi_i \in [a_i, b_i]$. Так як подальшого розбитяя цих відрізків метод трапецій не передбачає, то $a_i=x_{i-1}$, $b_i=x_i$, Врахуємо далі, що довжини всіх відрізків $[a_i, b_i]$ однакові і дорівнюють h. Нарешті, вважаючи другу похідну функції $u(x)$ неперервною, можна використати рівність

$$\sum_{i=1}^{m} u''(\xi_i) = mu''(\xi) = \frac{b-a}{h} u''(\xi), \text{ де } \xi \in [a, b].$$

Тепер все готово, щоб остаточно отримати з (29) і (30) узагальнену формулу трапецій та її похибку відповідно:

$$I_m = h\left(\frac{u(x_0) + u(x_m)}{2} + \sum_{i=1}^{m-1} u(x_i)\right), \qquad (31)$$

$$R_{1,m} = -(b-a)\frac{h^2}{12} u''(\xi). \qquad (32)$$

Узагальнена квадратурна формула Сімпсона

В цьому випадку параметр $n = 2$, тобто $N=2m$.. Побудуємо узагальнену квадратурну формулу Сімпсона:

$$I_m = \sum_{i=1}^{m} \frac{b_i - a_i}{6}\left(u(a_i) + 4u\left(\frac{a_i + b_i}{2}\right) + u(b_i)\right), \qquad (33)$$

$$R_{2,m} = -\sum_{i=1}^{m} \frac{(b_i - a_i)^5}{90} u^{(4)}(\xi_i). \qquad (34)$$

Тут a_i, b_i – границі i-го відрізку ($i = 1, 2,\dots, m$) розбиття проміжку $[a, b]$ інтегрування, $\xi_i \in [a_i, b_i]$. За квадратурною формулою Сімпсона кожний з цих відрізків ділиться навпіл, то $a_i = x_{2i-2}$, $(a_i + b_i)/2 = x_{2i-1}$, $b_i = x_{2i}$, Врахуємо далі, що довжини всіх відрізків $[a_i, b_i]$ однакові і дорівнюють $2h$. Нарешті, вважаючи функцію $u^{(4)}(x)$ неперервною на $[a, b]$, можна використати рівність

$$\sum_{i=1}^{m} u^{(4)}(\xi_i) = m u^{(4)}(\xi) = \frac{b-a}{2h} u^{(4)}(\xi) \text{, де } \xi \in [a,\ b].$$

Тепер з рівностей (33) і (34) отримаємо узагальнену формулу Сімпсона та її похибку відповідно:

$$I_m = \frac{h}{3}(u(x_0) + u(x_{2m}) + 4\sum_{i=1}^{m} u(x_{2i-1}) + 2\sum_{i=1}^{m-1} u(x_{2i})), \tag{35}$$

$$R_{2,m} = -(b-a)\frac{h^4}{180} u^{(4)}(\xi_i). \tag{36}$$

Інтерполяційні квадратурні формули найвищого алгебраїчного степеня точності

Побудуємо квадратурні формули найвищого алгебраїчного степеня точності вигляду (2) з тою лише різницею, що індекс коефіцієнтів та вузлів змінюється в межах від *1* до *n,* тобто:

$$\widetilde{I} = \sum_{i=1}^{n} A_i u(x_i) \tag{2'}$$

Ці зміни вигляду квадратурної формули – несуттєві і пояснюються лише деяким спрощенням використання індексів в подальшому.

Якщо вузли квадратурної формули (2') зафіксовані, то з попереднього відомо, що ця формула дає точні результати для будь-якого алгебраїчного многочлену степеня не більше *n-1.* При збільшенні вільних параметрів за рахунок *n* вузлів можна сподіватись на підвищення її алгебраїчного степеня точності квадратурної формули (2') до *2n-1*. Однак сподіватись на випадок, коли квадратурна формула (2') буде точною для будь-якого алгебраїчного многочлену степеня *2n* не можна. Це пояснюється одним прикладом: якщо в якості функції $u(x)$ вибрати алгебраїчний многочлен степеня *2n* $\varpi^2(x) = [(x-x_1)(x-x_2)...(x-x_n)]^2$, то за квадратурною формулою (2') маємо нульове значення визначеного інтегралу (1), але, очевидно, точне значення цього інтегралу – додатнє. Таким чином, якщо виявиться, що алгебраїчна степінь точності дорівнює *2n-1*, то ця степінь – найвища.

Теорема про квадратурні формули найвищого алгебраїчного степеня точності

Введем *скалярний добуток* функцій $u(x)$ і $v(x)$:

$$(u,v) = \int_a^b p(x)u(x)v(x)dx. \tag{37}$$

Функції $u(x)$ і $v(x)$ називаються *ортогональними* на проміжку інтегрування $[a,\ b]$ з вагою $p(x)$, якщо їх скалярний добуток дорівнює нулю.

Відповідь на питання щодо найвищого алгебраїчного степеня точності квадратурних формул дає наступна т е о р е м а .

Для того, щоб алгебраїчна степінь точності квадратурної формули (2') дорівнювала 2n-1, необхідно і достатньо щоб вона була інтерполяційною і многочлен $\varpi(x) = (x-x_1)(x-x_2)...(x-x_n)$ *на проміжку інтегрування* $[a,\ b]$ *був ортогональний з вагою* $p(x)$ *до всіх многочленів* $Q(x)$ *степеня не більше n-1.*

Доведення.

Н е о б х і д н і с т ь . Нехай алгебраїчна степінь точності квадратурної формули (2') дорівнює *2n-1.* Це припущення означає, що квадратурна формула (2') буде точною також для всіх многочленів степеня не більше *n-1*, що одразу на основі теореми про інтерполяційні квадратурні формули приводить до твердження: квадратурна формула (2') – інтерполяційна. Візьмемо будь-який многочлен $Q(x)$ степеня не більше n-1 і утворимо многочлен $P(x)$ степеня не більше $2n$-1: $P(x) = \omega(x)\ Q(x) + R(x)$, де $R(x)$ – будь-який многочлен степеня не більше n-1. Використовуючи многочлен $P(x)$ в якості функції $u(x)$ під інтегралом (1) та припущення щодо точності квадратурної формули, отримаємо з (2')

$$I = \sum_{i=1}^{n} A_i(\omega(x_i)Q(x_i) + R(x_i)) = \sum_{i=1}^{n} A_i R(x_i)\ , \tag{38}$$

де коефіцієнти A_i обчислюються за правилом (7). З іншого боку, безпосередньо з інтегралу (1) маємо

$$I = \int_a^b p(x)\omega(x)Q(x)dx + \int_a^b R(x)dx\,. \tag{39}$$

Так як $R(x)$ – будь-який многочлен степеня не більше n-1, то на основі теореми про інтерполяційні квадратурні формули маємо рівність

$$\int_a^b R(x)dx = \sum_{i=1}^{n} A_i R(x_i)\,,$$

де коефіцієнти A_i обчислюються за правилом (7). Врахування цієї рівності при порівнянні (38) і (39) приводить до висновку

$$\int_a^b p(x)\omega(x)Q(x)dx = 0\,,$$

що означає ортогональність функції $\omega(x)$ до многочлену $Q(x)$. Так як цей многочлен – будь-який степеня не більше n-1, то це остаточно доводить необхідні умови теореми.

Д о с т а т н і с т ь . Нехай квадратурна формула (2') – інтерполяційна і функція $\omega(x)$ на проміжку інтегрування $[a, b]$ ортогональна з вагою $p(x)$ до будь-якого многочлену $Q(x)$ степеня не більше n-1. Візьмемо $P(x)$ – будь-який многочлен степеня не більше $2n$-1. Цей многочлен представимо у вигляді $P(x) = \omega(x)\ Q(x) + R(x)$, де $R(x)$ – многочлен степеня не більше n-1. Тоді безпосередньо з інтегралу (1) враховуючи ортогональність $\omega(x)$ і $Q(x)$ маємо

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

Так як квадратурна формула (2') – інтерполяційна, то маємо лацюг точних перетворень останнього інтегралу

$$\int_a^b R(x)dx = \sum_{i=1}^{n} A_i R(x_i) = \sum_{i=1}^{n} A_i(\omega(x_i)Q(x_i) + R(x_i)) = \sum_{i=1}^{n} A_i P(x_i)$$

Таким чином,

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

тобто квадратурна формула (2') точна для будь-якого многочлену $P(x)$ степеня не більше $2n$-1.

Теорема доведена.

Похибка квадратурних формул найвищого алгебраїчного степеня точності

Т е о р е м а . Якщо функція $u(x) \in C^{2n}[a, b]$, то існує така точка $\xi \in [a, b]$, що похибка $R(u)$ квадратурної формули найвищого алгебраїчного степеня точності має вигляд

$$R(u) = \frac{u^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b p(x)\omega^2(x)dx \tag{40}$$

Доведення.

Побудуємо інтерполяційний многочлен $H(x)$ Ерміта за значеннями функції $u(x)$ і її першої похідної в вузлах x_i, $i=1, 2, \ldots, n$. Можна показати, що похибка $r(x)$ інтерполювання має вигляд

$$r(x) = \frac{u^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\omega^2(x).$$

Степінь многочлена $H(x)$ не вище $2n-1$, тому квадратурна формула найвищого алгебраїчного степеня точності для нього буде точною, тобто маємо ланцюг перетворень

$$\int_a^b p(x)u(x)dx = \int_a^b p(x)H(x)dx + \int_a^b p(x)\frac{u^{(2n)}(\eta)}{(2n)!}\omega^2(x)dx = \{\textit{використовуємо теорему про середнє}\} =$$

$$= \sum_{i=1}^n A_i H(x_i) + \frac{u^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b p(x)\omega^2(x)dx = \sum_{i=1}^n A_i u(x_i) + \frac{u^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b p(x)\omega^2(x)dx.$$

Теорема доведена.

Побудова квадратурних формул найвищого алгебраїчного степеня точності

Існують три основні методи побудови квадратурних формул найвищого алгебраїчного степеня точності, що ідейно засновані на теоремі про квадратурні формули найвищого алгебраїчного степеня точності:

1. Використання теореми про квадратурні формули найвищого алгебраїчного степеня точності для пробних функцій.
   Теорема дає можливість побудувати систему $2n$ нелінійних алгебраїчних рівнянь відносно чисел A_i і x_i. А саме, вибираючи в якості функції $u(x)$ *пробні фунцкії* - многочлени x^i, $i = 0, 1, \ldots, 2n-1$, маємо систему рівнянь
   $$\sum_{j=1}^n A_j x_j^i = \int_a^b p(x)x^i dx, \qquad i = 0,1,\ldots,2n-1.$$

2. Ортогоналізація функцій на $[a, b]$ з вагою $p(x)$.
   Процес знаходження чисел A_i і x_i можна розбити на два етапи: спочатку знайти вузли x_i а потім по формулам (7) коефіцієнти A_i. Етап знаходження вузлів x_i у свою чергу розбивається на два:
   - побудова функціїї $\omega(x)$, яка була б на проміжку інтегрування $[a, b]$ ортогональниою з вагою $p(x)$ до всіх многочленів $Q(x)$ степеня не більше $n-1$;
   - знаходження нулів функціїї $\omega(x)$.

   Реалізація методу вимагає використання методів побудови ортогональних функцій (наприклад, процес ортогоналізації Грама-Шмідта) та методів розв'язування алгебраїчних рівнянь (наприклад, відокремлення коренів з подальшим використанням методу Ньютона)
3. Використання відомих ортогональних многочленів.
   Для певних вагових функцій відомі відповідні ортогональні многочлени. (наприклад, ортогональні многочлени Лєжандра на проміжку [-1, 1] – у випадку вагової функції $p(x)\equiv 1$). Тому попередній метод можна спростити, безпосереднім використанням нулів цих многочленів

Розглянемо приклад побудови квадратурних формул найвищого алгебраїчного степеня точності з використанням процесу ортогоналізації.

Побудувати квадратурну формулу найвищого алгебраїчного степеня точності з ваговою функцією $p(x) = 1+x^2$ *на проміжку інтегрування* $[0,1]$ *з трьома вузлами та оцінити похибку побудованої формули. За допомогою побудованої квадратурної формули обчислити значення визначеного інтегралу*

$$I = \int_0^1 p(x)\cos(x)dx$$

і порвняти це значення з точним. Точність обчислень $\varepsilon = 10^{-4}$.

Під час розв'язування прикладу систематично використовуються так звані *моменти*: $\mu_i = \int_0^1 p(x)x^i dx, \quad i = 0,1,...,2n.$

За постановкою задачі $n = 3$, значить всього 7 моментів. Але для побудови ортогонального многочлена, обчислення коефіцієнтів, оцінки похибки використовуються відносні моменти $\overline{\mu}_i = \mu_i / \mu_0, \;\; i = 1,2,...,2n$. Обчислимо ці числа. Після інтегрування маємо формули для моментів

$$\mu_i = \frac{2(i+2)}{(i+1)(i+3)}, \qquad i = 0,1,...,6$$

та їх відносних значень

$$\overline{\mu}_i = \frac{3(i+2)}{2(i+1)(i+3)}, \qquad i = 0,1,...,6$$

Обчислення затакими формулами зведені в таблицю

i	μ_i	μ_i/μ_0
0	1,3333	1,0000
1	0,7500	0,5625
2	0,5333	0,4000
3	0,4167	0,3125
4	0,3429	0,2571
5	0,2917	0,2188
6	0,2540	0,1905

Далі можна скористатись процесом побудови ортогональних функцій Грама-Шмідта, але всі проміжні ортогональні многочлени не знайдуть в подальшому свого використання. Тому тут, коли важливий кінцевий результат, можна спростити процес ортогоналізації, побудувавши лише один многочлен $\omega(x)$ третього степеня, який буде ортогональний до базових степеневих функцій x^i , $i = 0, 1, 2.$ Будемо шукати $\omega(x)$ у вигляді з невідомими коіфіцієнтами $\omega(x) = x^3 + a_2x^2 + a_1x + a_0.$ Коефіцієнти a_2, a_1, a_0 знайдемо з умов ортогональності $\omega(x)$ до степеневих функцій x^i , $i = 0, 1, 2.$ В результаті приходимо до системи лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) відносно невідомих коефіцієнтів з такою розширеною матрицею

$$\left(\begin{array}{ccc|c} \overline{\mu}_2 & \overline{\mu}_1 & 1 & -\overline{\mu}_3 \\ \overline{\mu}_3 & \overline{\mu}_2 & \overline{\mu}_1 & -\overline{\mu}_4 \\ \overline{\mu}_4 & \overline{\mu}_3 & \overline{\mu}_2 & -\overline{\mu}_5 \end{array}\right)$$

Розв'язок СЛАР: $a_0 = -0{,}0569;\; a_1 = 0{,}6449;\; a_2 = -1{,}5460.$ Тепер можна приступати до знаходження коренів многочлену $\omega(x)$. Але перед безпосереднім їх обчисленням необхідно корені відділити. Відомо, що ортогональні многочлени мають дійсні корені на проміжку ортогоналізації. Значить, необхідно визначитись з трьома проміжками коренів $\omega(x)$. Процедуру відділення коренів можна здійснити безпосереднім обчисленням $\omega(x)$ з певним кроком на проміжку інтегрування. Зміни знаку $\omega(x)$ будуть вказувати на проміжки відділення коренів цієї функції. Більше того, необхідно відділити корені так, щоб були виконані всі умови використання певного чисельного методу розв'язування алгебраїчного рівняння. Виберем метод Ньютона. Тоді на проміжках відділених коренів перша та друга похідні функції $\omega(x)$ повинні бути знакосталоми, а початкове наближення x_0 вибирається з умови $\omega(x_0)\ \omega''(x_0) > 0$. Таким чином, отримаємо такі проміжки та початкові наближення коренів за методом Ньютона:

i	Ліва межа a_i	Права межа b_i	$sign(\omega(a_i))$	$sign(\omega(b_i))$	$sign(\omega''(x))$, $x \in [a_i, b_i]$	x_0
1	0,11	0,13	-1	+1	-1	0,11
2	0,52	0,53	+1	-1	+1	0,52
3	0,89	0,91	-1	+1	+1	0,91

Розрахункові формули методу Ньютона такі:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{\omega(x_{i-1})}{\omega'(x_{i-1})}, \qquad i = 1,2,...$$

Оцінка похибки наближеного розв'язку метода Ньютона має вид

$$\left|\xi - x_i\right| \le \frac{M_2}{2m_1}\left|x_i - x_{i-1}\right|^2,$$

де M_2 і m_1 - максимальне і мінімальне за модулем значення другої і першої похідної функції $\omega(x)$ на проміжках відділених коренів. Таким чином, умова закінчення ітерацій буде

$$\frac{M_2}{2m_1}\left|x_i - x_{i-1}\right|^2 \le \varepsilon,$$

Значення M_2 і m_1 для даних прикладу на проміжках відділених коренів зведені в таблицю

i	$[a_i\ b_i]$	m_1	M_2
1	[0,11; 0,13]	0,2937	2,4320
2	[0,52; 0,53]	0,1511	0,2913
3	[0,89; 0,91]	0,2694	2,3681

Систематичне застосування методу Ньютона при $\varepsilon = 10^{-4}$ на кожному з трьох проміжків приводить до вузлів квадратурної формули (2'):

$$x_1 = 0{,}1201;\ x_2 = 0{,}5270;\ x_3 = 0{,}8989.$$

Коефіцієнти квадратурної формули (2') обчислюються за формулою (7), де також використовуються обчислені вище моменти. Наприклад,

$$A_1 = \frac{\mu_2 - (x_2 + x_3)\mu_1 + x_2 x_3 \mu_0}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_3)}.$$

Аналогічна структура і інших коефіцієнтів. Після їх обчислення маємо:

$$A_1 = 0{,}3014;\ A_2 = 0{,}5750;\ A_3 = 0{,}4569.$$

Формула побудована. Оцінку похибки $R(u)$ обчислимо за формулою (40). Маємо:

$$R(u) = Cu^{(6)}(\xi),$$

де константа обчислюється так

$$C = \frac{1}{6!}\int_a^b p(x)\omega^2(x)dx = \frac{1}{6!}\int_0^1 p(x)\omega(x)x^3dx = \frac{1}{6!}(\mu_6 + a_2\mu_5 + a_2\mu_4 + a_2\mu_3) = 0{,}6491*10^{-5}.$$

Квадратурні формули типу Гаусса

Квадратурні формули найвищого алгебраїчного степеня точності для випаку постійної вагової функції відомі як *формули типу Гаусса*.

Розглянемо інтеграл (1) при $p(x) \equiv 1$ для стандартного проміжку інтегрування

$$I = \int_{-1}^{1} u(x)dx \tag{1'}$$

Ортогональні многочлени на проміжку $[-1,\ 1]$ з постійною вагою відомі. Це многочлени Лєжандра

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n(x^2-1)^n}{dx^n} \tag{41}$$

Обчислення многочленів Лєжандра легко здійснити, якщо використати відомі рекурентні співвідношення

$$P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x), n = 1,2,\ldots. \tag{42}$$

де $P_0(x)$ і $P_1(x)$ знаходяться з рівності (41). Перші декілька многочленів Лєжандра такі:

$$1;\ x;\ (3x^2-1)/2;\ (5x^3-3x)/2.$$

Для $n = 1$ формула типу Гаусса співпадає з формулою центральних прямокутників:

$$\tilde{I} = 2u(0).$$

Похибка цієї формули становить

$$R(u) = u''(\xi)/3, \quad \xi \in [-1,1]$$

Для $n = 2$ формула типу Гаусса має коефіцієнти $A_1 = A_2 = 1$, а вузли $x_1 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, \quad x_2 = \frac{\sqrt{3}}{3}$:

$$\tilde{I} = u(-\frac{\sqrt{3}}{3}) + u(\frac{\sqrt{3}}{3}).$$

Похибка цієї формули становить

$$R(u) = u^{(4)}(\xi)/135, \quad \xi \in [-1,1].$$

З огляду на квадратурні формули типу Гаусса можна зробити деякі висновки при їх порівнянні з квадратурними формулами Ньютона-Котеса:

- найпростіші формули типу Гаусса і Ньютона-Котеса збігаються (формула центральних прямокутників);
- двоточкова формула типу Гаусса за похибкою близька до триточкової формули Сімпсона.

Література

1. Крылов В.И. Приближенное вычисление интегралов – М.: Наука, 1967. – 500с.
2. Лабораторні роботи та домашні завдання для самостійної роботи з дисципліни "Методи обчислень" для студентів механіко-математичного факультету / Упорядники: В.В.Попов, Б.П.Довгий, Є.С.Вакал. – К.: 2007. – 32с.

Зміст

Для приміток