Глава 4. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

§1. Формула Ньютона-Лейбница и численное интегрирование.

Из курса математического анализа Вы знакомы с вычислением определенных интегралов с помощью формулы Ньютона-Лейбница

$$I = \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a). \tag{1}$$

где $F(x)$- любая первообразная подынтегральной функции $f(x)$ на отрезке $[a,b]$. Формула Ньютона-Лейбница играет важную роль, устанавливая связь задачи определенного интегрирования с задачей отыскания первообразной (с задачей неопределенного интегрирования). Она позволяет вычислять интегралы от элементарных функций, первообразные которых тоже являются элементарными функциями. Например,

$$\int_1^2 \frac{dx}{x} = \ln x\Big|_1^2 = \ln 2. \tag{2}$$

Однако существует много простых функций, первообразные которых не выражаются через элементарные функции. В качестве примера можно привести такие функции как e^{-x^2} или $\sin x/x$. Для них описанный способ вычисления определенных интегралов неприменим. Формула Ньютона-Лейбница не позволяет также вычислять интегралы от функций, которые задаются графиком или таблицей. Иными словами, она не дает общего, универсального метода нахождения определенного интеграла от произвольной функции $f(x)$ по ее значениям на отрезке $[a,b]$, она не является алгоритмом решения рассматриваемой задачи.

Универсальные алгоритмы вычисления определенных интегралов дают формулы численного интегрирования или, как их обычно называют, квадратурные формулы (буквально формулы вычисления площадей). Квадратурные формулы имеют вид:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) + R_n. \tag{3}$$

Здесь точки $x_i \in [a,b]$ называют узлами, коэффициенты c_i -весовыми множителями или просто весами, величину R_n - остаточным членом или погрешностью. Узлы и веса подбираются таким образом, чтобы выполнялось предельное равенство:

$$\lim_{n\to\infty} R_n = 0, \text{ так что } \lim_{n\to\infty} \sum_{i=1}^n c_i f(x_i) = I. \tag{4}$$

Суть этого требования заключается в следующем. Если пренебречь в формуле (3) остаточным членом R_n, то получится приближенное равенство:

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n c_i f(x_i). \tag{5}$$

Условие (4), которое называют сходимостью, позволяет сделать погрешность в равенстве (5) меньше любого наперед заданного числа за счет выбора достаточно большого n.Таким образом, открывается возможность вычислить интеграл I с любой наперед заданной точностью по значениям функции $f(x)$, взятым в разных точках x_i отрезка $[a,b]$. Чем выше требование точности, тем больше слагаемых приходится удерживать в сумме. За точность приходится платить увеличением объема вычислений.

В заключение сделаем следующее замечание. Подставляя в формулу (3) функцию $f(x)=1$, получим:

$$(b-a)=\sum_{i=1}^{n} c_i + R_n .$$

Обычно весовые коэффициенты c_i подбираются таким образом, чтобы выполнялось равенство:

$$(b-a)=\sum_{i=1}^{n} c_i ,$$

т. е., чтобы при интегрировании константы равенство (5) было не приближенным, а точным.

В следующих параграфах этой главы мы обсудим методы построения квадратурных формул и с разных сторон разберем проблему оценки их точности.

§2. Квадратурные формулы прямоугольников, трапеций, Симпсона.

2.1. Квадратурные формулы прямоугольников, трапеций, Симпсона и их особенности.

С квадратурными формулами прямоугольников, трапеций, Симпсона Вы уже встречались в курсе математического анализа, поэтому их вывод будет изложен конспективно.

Возьмем произвольное целое число n и разобьем отрезок $[a,b]$, по которому ведется интегрирование, на n равных отрезков длиной $h=(b-a)/n$ точками

$$x_i = a + ih, \quad 0 \le i \le n . \tag{6}$$

Для дальнейшего нам также понадобятся средние точки этих отрезков

$$\xi_i = a + (i-1/2)h, \quad \xi_i \in [x_{i-1}, x_i], \quad 1 \le i \le n . \tag{7}$$

Идея вывода формулы прямоугольников очень проста. Построим с помощью проведенного разбиения интегральную сумму, в которой значения функции $f(x)$ для каждого отрезка $[x_{i-1}, x_i]$ вычисляются в его средней точке ξ_i (7):

$$P_n = \frac{b-a}{n}\sum_{i=1}^{n} f(\xi_i). \tag{8}$$

Принимая во внимание то, что интегральная сумма дает приближенное значение интеграла, можно написать:

$$I = P_n + \alpha_n . \tag{9}$$

В квадратурной формуле (9) узлами являются точки ξ_i (7), все весовые множители одинаковы и равны $h=(b-a)/n$. Для остаточного члена введено специальное обозначение α_n.

Формулу (9) называют формулой прямоугольников. Причина такого названия имеет простой геометрический смысл. Величина P_n (8) представляет собой сумму площадей прямоугольников с одинаковыми основаниями $h=(b-a)/n$ и высотами $f(\xi_i)$. Она аппроксимирует с точностью до α_n площадь криволинейной трапеции, соответствующей исходному интегралу (см. рис. 1).

Идея вывода квадратурных формул трапеций и Симпсона иная. Она заключается в том, чтобы сопоставить подынтегральной функции $f(x)$ близкую ей функцию $g_n(x)$, которую можно проинтегрировать, и приближенно заменить искомый интеграл I интегралом от этой функции.

Рассмотрим, как данная идея реализуется при выводе формулы трапеций. В этом случае в качестве аппроксимирующей функции $g_n(x)$ берется кусочно – линейная функция. На каждом из частичных сегментов $[x_{i-1},x_i]$ она задается формулой

$$g_n(x)=f(x_{i-1})+\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{h}(x-x_{i-1}), \tag{10}$$
$$x\in[x_{i-1},x_i],\quad 1\le i\le n.$$

В граничных точках отрезка $x=x_{i-1}$ и $x=x_i$ функция $g_n(x)$ принимает те же значения, что и функция $f(x)$:

$$g_n(x_{i-1})=f(x_{i-1}),\quad g_n(x_i)=f(x_i), \tag{11}$$

т. е. она осуществляет кусочно – линейную интерполяцию функции $f(x)$ на отрезке $[a,b]$ (см. рис. 2).

Вычислим интеграл:

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} g_n(x)dx=\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left\{f(x_{i-1})+\frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{h}(x-x_{i-1})\right\}dx=\frac{h}{2}\big(f(x_{i-1})+f(x_i)\big). \tag{12}$$

Этот результат имеет простой геометрический смысл: фигура ограниченная снизу отрезком $[x_{i-1},x_i]$ оси x, сверху отрезком прямой (10), с боков вертикальными прямым $x=x_{i-1}$ и $x=x_i$, представляет собой трапецию, площадь которой дается формулой (12).

Интеграл от функции $g_n(x)$ по всему отрезку $[a,b]$ является суммой интегралов (12)

$$\begin{gathered}T_n=\int_a^b g_n(x)dx=\sum_{i=1}^{n}\int_{x_{i-1}}^{x_i} g_n(x)dx=\\ =\frac{b-a}{n}\left\{\frac{1}{2}f(a)+f(x_1)+f(x_2)+\ldots+f(x_{n-1})+\frac{1}{2}f(b)\right\}.\end{gathered} \tag{13}$$

Он дает приближенное значение интеграла I:

$$I=\int_a^b f(x)\,dx=T_n+\beta_n, \tag{14}$$

В квадратурной формуле (14) узлами являются точки x_i (6). Все весовые коэффициенты, кроме двух, одинаковы и равны $h=(b-a)/n$, а весовые коэффициенты при $i=0$ и $i=n$ имеют значения в два раза меньше. Для остаточного члена введено специальное обозначение β_n. Формулу (14) называют квадратурной формулой трапеций. С точностью до β_n она выражает площадь криволинейной трапеции, соответствующую интегралу I, через сумму площадей трапеций (12) (см. рис. 2).

Формула (8) для величины P_n изначально строилась как интегральная сумма. При выводе формулы (13) для величины T_n понятие интегральной суммы не использовалась. Однако теперь, когда формула уже получена, видно, что величину T_n тоже можно интерпретировать как интегральную сумму. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим разбиение отрезка $[a,b]$ на частичные отрезки точками ξ_i (7). Оно дает $n+1$ отрезок. Два крайних $[a,\xi_1]$ и $[\xi_n,b]$ имеют длину $h/2$, а остальные - длину h. Выберем для образования интегральной суммы на крайних отрезках значения функции $f(x)$ в точках a и b, а на остальных отрезках $[\xi_i,\xi_{i+1}]$ - значения функции $f(x)$ в их средних точках x_i $(1\le i\le n-1)$. Образованная таким образом интегральная сумма соответствует выражению (13) для T_n.

Вывод квадратурной формулы Симпсона развивает описанный подход дальше. Теперь для аппроксимации функции $f(x)$ используется не кусочно – линейное, а кусочно – квадратичное интерполирование.

Будем считать n четным и сгруппируем отрезки $[x_{i-1},x_i]$ парами: первая пара $[a,x_1]$, $[x_1,x_2]$, вторая пара $[x_2,x_3]$, $[x_3,x_4]$ и т. д. Для каждого двойного отрезка $[x_{2j-2},x_{2j}]$ построим интерполяционный полином второй степени в форме Лагранжа, принимающий в узлах x_{2j-2} , x_{2j-1} , x_{2j} значения функции $f(x)$. В результате получим аппроксимирующую функцию $g_n(x)$ на отрезке $[a,b]$ в виде кусочно – квадратичной функции:

$$\begin{gathered}g_n(x)=f\left(x_{2j-2}\right)\frac{\left(x-x_{2j-1}\right)\left(x-x_{2j}\right)}{2h^2}+f\left(x_{2j-1}\right)\frac{\left(x-x_{2j-2}\right)\left(x-x_{2j}\right)}{\left(-h^2\right)}+\\ +f\left(x_{2j}\right)\frac{\left(x-x_{2j-2}\right)\left(x-x_{2j-1}\right)}{2h^2},\\ x\in\left[x_{2j-2},x_{2j}\right],\qquad 1\le j\le n/2.\end{gathered} \tag{15}$$

Проинтегрировав полином второй степени (15) по отрезку $[x_{2j-2},x_{2j}]$, получим

$$\int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} g_n(x)dx = \frac{h}{3}\left\{ f\left(x_{2j-2}\right) + 4f\left(x_{2j-1}\right) + f\left(x_{2j}\right)\right\},\ h = \frac{b-a}{n}. \tag{16}$$

Интеграл от функции $g_n(x)$ по всему отрезку $\left[a,b\right]$ равен сумме интегралов (16)

$$S_n = \int_a^b g_n(x)dx = \sum_{j=1}^{n/2} \int_{x_{2j-2}}^{x_{2j}} g_n(x)dx = \\ = \frac{b-a}{3n}\left\{ f\left(a\right) + 4f\left(x_1\right) + 2f\left(x_2\right) + \ldots + 2f\left(x_{n-2}\right) + 4f\left(x_{n-1}\right) + f\left(b\right)\right\}. \tag{17}$$

(Напомним, что число n должно быть обязательно четным.) Величина S_n (17) дает приближенное значение интеграла I:

$$I = \int_a^b f\left(x\right)dx = S_n + \gamma_n. \tag{18}$$

Узлами квадратурной формулы (17), как и формулы трапеций (14), являются точки x_i (6). Весовые коэффициенты в узлах с четными и нечетными номерами имеют разные значения. Для остаточного члена введено обозначение γ_n. Формула (18) называется квадратурной формулой Симпсона.

Представление (17) для S_n как и представление (13) для T_n, также можно рассматривать как интегральную сумму. Для ее построения нужно разбить отрезок $\left[a,b\right]$ на $(n+1)$ частичный отрезок с помощью n внутренних точек

$$\eta_{2j-1} = x_{2j-1} - 2h/3,\ \eta_{2j} = x_{2j-1} + 2h/3,\ 1 \le j \le n/2 \tag{19}$$

и двух граничных точек

$$\eta_0 = a \text{ и } \eta_{n+1} = b. \tag{20}$$

В результате получаются отрезки $\left[\eta_{i-1},\eta_i\right]$, $1 \le i \le n+1$ различной длины. Два крайних отрезка $\left[a,\eta_1\right]$ и $\left[\eta_n,b\right]$ имеют длину $h/3$. Отрезки, в центре которых лежат точки x_i с четными номерами, - длину $2h/3$, отрезки, в центре которых лежат точки x_i с нечетными номерами, – длину $4h/3$.

Для построения интегральной суммы, соответствующей данному разбиению, возьмем для крайних отрезков значения функции $f(x)$ в точках a и b, для остальных отрезков – значение функции $f(x)$ в их средних точках x_i. В результате получим интегральную сумму в виде выражения (17). Разные длины частичных отрезков приводит к своеобразному чередованию коэффициентов в виде двоек, четверок и единиц в крайних точках.

Заканчивая обсуждение формул (13) для T_n и (17) для S_n, установим полезную для дальнейшего связь между этими величинами

$$S_n = \frac{4}{3}T_n - \frac{1}{3}T_{n/2}. \tag{21}$$

Здесь $T_{n/2}$ - сумма (13) с вдвое меньшим числом слагаемых и, соответственно, с вдвое большим шагом. Благодаря этому при ее образовании в качестве узлов используются точки x_i (6) только с четными номерами. Поскольку в формуле Симпсона n

предполагается обязательно четным, то $n/2$ - целое число, так что выражение $T_{n/2}$ определено.

Соотношение (21) проверяется «в лоб». Из (13) следует, что:

$$\frac{4}{3}T_n = \frac{b-a}{3n}\left\{2f(a)+4f(x_1)+4f(x_2)+\ldots+4f(x_{n-2})+4f(x_{n-1})+2f(b)\right\},$$

$$\frac{1}{3}T_{n/2} = \frac{b-a}{3n}\left\{f(a)+2f(x_2)+\ldots+2f(x_{n-2})+2f(b)\right\}.$$

Вычитая теперь вторую строку из первой, получим равенство (21).

2.2. Сходимость и точность квадратурных формул прямоугольников, трапеций и Симпсона.

После того, как мы установили, что величины P_n , T_n, S_n являются интегральными суммами, проблема сходимости рассмотренных методов численного интегрирования решается элементарно. Их сходимость имеет место для любой интегрируемой функции:

$$\lim_{n\to\infty}\alpha_n = 0,\ \lim_{n\to\infty}P_n = I, \tag{22}$$

$$\lim_{n\to\infty}\beta_n = 0,\ \lim_{n\to\infty}T_n = I. \tag{23}$$

$$\lim_{n\to\infty}\gamma_n = 0\ \ \lim_{n\to\infty}S_n = I. \tag{24}$$

Этот вывод является прямым следствием определения интегрируемости.

Предельные соотношения (22) – (24) доказывают принципиальную возможность вычисления интеграла от произвольной интегрируемой функции каждым из трех методов с любой точностью ε за счет выбора достаточно большого n и, соответственно, малого шага $h=(b-a)/n$.

После общего вывода о сходимости методов перейдем к обсуждению основного вопроса, связанного с организацией реального вычислительного процесса: каким нужно взять n, чтобы добиться при вычислении интеграла нужной точности. Ответ на него требует анализа остаточных членов. При этом на функцию $f(x)$ приходится накладывать дополнительные ограничения, выходящие за рамки предположения об интегрируемости.

Начнем с обсуждения остаточных членов в квадратурных формулах прямоугольников и трапеций. Предположим, что функция $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируема на отрезке $[a,b]$. В курсе математического анализа при этом предположении устанавливаются формулы

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx = f(\xi_i)h + \frac{h^3}{24}f''(\eta_i^*), \tag{25}$$

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)\,dx = \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}h - \frac{h^3}{12}f''(\eta_i^{**}), \tag{26}$$

где η_i^* и η_i^{**} - некоторые точки отрезка $\left[x_{i-1},x_i\right]$. Существование таких точек гарантировано, но их точное положение неизвестно. (См В. А. Ильин, Э. Г. Позняк «Основы математического анализа». М. 1965. С. 389-397.)

Суммируя равенства (25) и (26) по i, получим формулы (9) и (14) со следующими выражениями для остаточных членов

$$\alpha_n = \frac{h^3}{24}\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^*\right), \tag{27}$$

$$\beta_n = -\frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^{**}\right). \tag{28}$$

Рассмотрим суммы

$$h\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^*\right) \text{ и } h\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^{**}\right). \tag{29}$$

Функция $f''(x)$ по предположению непрерывна и, следовательно, интегрируема на отрезке $\left[a,b\right]$. С учетом этого замечания выражения (29) можно рассматривать как интегральные суммы для интеграла $\int\limits_a^b f''(x)dx$. Отсюда следует вывод:

$$\lim_{n\to\infty} h\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^*\right) = \int\limits_a^b f''\left(x\right)dx = f'\left(b\right) - f'\left(a\right), \tag{30}$$

$$\lim_{n\to\infty} h\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^{**}\right) = \int\limits_a^b f''\left(x\right)dx = f'\left(b\right) - f'\left(a\right). \tag{31}$$

Предельные равенства (30) и (31) позволяют записать остаточные члены квадратурных формул прямоугольников и трапеций в виде

$$\alpha_n = \frac{1}{n^2}\left(A + \mu_n\right), \tag{32}$$

$$\beta_n = \frac{1}{n^2}\left(B + \nu_n\right), \tag{33}$$

где

$$A = \frac{\left(b-a\right)^2}{24}\left\{f'\left(b\right) - f'\left(a\right)\right\}, \tag{34}$$

$$\mu_n = \frac{\left(b-a\right)^2}{24}\left\{h\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^*\right) - \int\limits_a^b f''\left(x\right)dx\right\} \to 0, \text{ при } n\to\infty, \tag{35}$$

$$B = -\frac{\left(b-a\right)^2}{12}\left\{f'\left(b\right) - f'\left(a\right)\right\}, \tag{36}$$

$$\nu_n = -\frac{\left(b-a\right)^2}{12}\left\{h\sum_{i=1}^{n} f''\left(\eta_i^{**}\right) - \int\limits_a^b f''\left(x\right)dx\right\} \to 0, \text{ при } n\to\infty. \tag{37}$$

Формулы (32) и (33) выделяют в остаточных членах главные слагаемые A/n^2 и B/n^2, которые при возрастании n стремятся к нулю как n^{-2}. Важно подчеркнуть, что коэффициенты A (34) и B (36) от n не зависят. Дополнительные слагаемые μ_n / n^2 и ν_n / n^2 являются бесконечно малыми более высокого порядка. Если ими пренебречь по сравнению с главными слагаемыми, то получатся простые асимптотические представления остаточных членов

$$\alpha_n \approx An^{-2} \text{ и } \beta_n \approx Bn^{-2}. \tag{38}$$

Их относительная точность возрастает при увеличении n.

Теперь получим другие представления остаточных членов. Из курса математического анализа известно следующее утверждение.

Лемма.

Пусть функция $\varphi(x)$ непрерывна на отрезке $[a,b]$ и пусть $x_1, x_2, \ldots, x_n$ -некоторые точки этого отрезка. Тогда на отрезке $[a,b]$ найдется такая точка η, что

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\varphi(x_i) = \varphi(\eta),\ |\beta_n| \le \frac{(b-a)^3 M_2}{12n^2}. \tag{39}$$

Иными словами, среднее арифметическое значений непрерывной функции в нескольких точках отрезка $[a,b]$, равно ее значению в одной из точек этого отрезка.

Применяя это утверждение к суммам (27) и (28), получим другое представление остаточных членов α_n и β_n:

$$\alpha_n = \frac{(b-a)^3}{24n^2} f''(\eta^*),\ a \le \eta^* \le b, \tag{40}$$

$$\beta_n = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\eta^{**}),\ a \le \eta^{**} \le b. \tag{41}$$

Формулы (40) и (41) не позволяют вычислить остаточные члены: существование точек η^* и η^{**} на отрезке $[a,b]$ гарантировано, но их положение неизвестно. Однако эти формулы можно использовать для оценки остаточных членов. Пусть известно число M_2, которое является мажорантой для второй производной функции $f(x)$:

$$|f''(x)| \le M_2,\ a \le x \le b, \tag{42}$$

тогда равенства (40) и (41) можно заменить неравенствами:

$$|\alpha_n| \le \frac{(b-a)^3 M_2}{24n^2}, \tag{43}$$

$$|\beta_n| \le \frac{(b-a)^3 M_2}{12n^2}. \tag{44}$$

При заданной точности ε они позволяют определить число узлов n, которое нужно использовать при вычислении интеграла по рассматриваемым квадратурным формулам.

В случае, когда вторая производная функции $f(x)$ является знакоопределенной на отрезке $[a,b]$, формулы (40) и (41) позволяют определить знаки остаточных членов. При этом существенно то, что они оказываются противоположными. Пусть, например,

$f''(x)\ge 0$, в этом случае $\alpha_n \ge 0$, $\beta_n \le 0$ так что для интеграла получается двухсторонняя оценка

$$P_n \le I \le T_n. \tag{45}$$

При отрицательной второй производной $f''(x)$ сохраняется двухсторонняя оценка, но знаки неравенств (45) меняются на противоположные. Такие оценки очень удобны, поскольку позволяют легко контролировать точность вычислений: в случае (45) P_n и T_n дают значение интеграла с недостатком и избытком с ошибкой, не превышающей $\varepsilon_n = T_n - P_n$, в противоположном случае P_n и T_n меняются ролями.

Заканчивая обсуждение методов прямоугольников и трапеций, сделаем следующее замечание. Формулы (32), (33), оценки (43), (44) показывают, что в случае дважды непрерывно дифференцируемой подынтегральной функции остаточные члены α_n и β_n убывают как n^{-2}. Однако, если отказаться от этого требования гладкости, то данные результаты теряют силу. В этом случае для интегрируемых функций можно гарантировать стремление остаточных членов к нулю, но нельзя утверждать, что оно происходит со скоростью n^{-2}.

Можно поставить прямо противоположный вопрос. Нельзя ли, повышая требование гладкости подынтегральной функции, увеличить скорость сходимости методов? Ответ на него отрицательный. Предположение о существовании у функции $f(x)$ четырех или шести производных не может изменить формул (32) и (33), так что скорость убывания остаточных членов при возрастании n останется прежней - n^{-2}. Поэтому методы прямоугольников и трапеций называют методами второго порядка точности, добавляя при этом – для дважды непрерывно дифференцируемых функций.

Задача 1.

Вычислить по формулам прямоугольников и трапеций при $n=2$ интеграл

$$I = \int_0^{\pi/2} \sin x dx = 1. \tag{46}$$

В данном случае

$$P_2 = \frac{\pi}{4}\left(\sin\frac{\pi}{8} + \sin\frac{3\pi}{8}\right) = 1.026172, \tag{47}$$

$$T_2 = \frac{\pi}{4}\left(\frac{1}{2}\sin 0 + \sin\frac{\pi}{4} + \frac{1}{2}\sin\frac{\pi}{2}\right) = 0.948059. \tag{48}$$

Зная точный ответ (46), найдем погрешности

$$\alpha_2 = \text{-}0.026172 \text{ и } \beta_2 = 0.051941. \tag{49}$$

Вторая производная функции $\sin x$ на отрезке $[0, \pi/2]$ отрицательна, ее модуль не превышает единицы: $M_2 = 1$. Мы видим, что знаки погрешности α_2 и β_2 (49) согласуются с формулами (40) и (41). Они противоположны, так что для интеграла I справедлива двусторонняя оценка, аналогичная (45), но другого знака:

$$T_2 \le I \le P_2. \tag{50}$$

Величина погрешностей (49) удовлетворяет неравенствам (43) и (44):

$$|\alpha_2| \le \frac{1}{96}\left(\frac{\pi}{2}\right)^3 < 0{,}041\,,\ |\beta_2| \le \frac{1}{48}\left(\frac{\pi}{2}\right)^3 < 0{,}081. \tag{51}$$

Перейдем к обсуждению остаточного члена γ_n в методе Симпсона, которое проведем при предположении о четырехкратной непрерывной дифференцируемости подынтегральной функции $f(x)$. Напомним, что в методе Симпсона число точек n выбирается четным, так что $n/2$ является целым числом.

Рассмотрим отрезок двойной длины $2h$, расположенный между точками разбиения (6) с четными номерами $\left[x_{2j-2}, x_{2j}\right]$, $1 \le j \le n/2$. В курсе математического анализа выводится формула:

$$\int\limits_{x_{2j-2}}^{x_{2i}} f(x)\,dx = \frac{h}{3}\left\{f(x_{2j-2}) + 4f(x_{2j-1}) + f(x_{2j})\right\} - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\eta_j), \tag{52}$$

где $\eta_j \in \left[x_{2j-2}, x_{2j}\right]$. Существование такой точки гарантировано, но ее точное положение на отрезке неизвестно.

Суммируя равенства (52) по j, получим квадратурную формулу (18) со следующим выражением для остаточного члена:

$$\gamma_n = -\frac{h^5}{90}\sum_{j=1}^{n/2} f^{(4)}(\eta_j). \tag{53}$$

Из формулы (53), аналогичной формулам (27), (28), можно вывести различные представления остаточного члена и изучить его свойства.

Рассмотрим сумму

$$2h\sum_{j=1}^{n/2} f^{(4)}(\eta_j). \tag{54}$$

Функция $f^{(4)}(x)$ предполагается непрерывной и, следовательно, интегрируемой на отрезке $[a,b]$. С учетом этого сумму (54) можно рассматривать как интегральную сумму для интеграла $\int\limits_a^b f^{(4)}(x)dx$. Отсюда следует вывод

$$\lim_{n\to\infty} 2h\sum_{j=1}^{n/2} f^{(4)}(\eta_j) = \int\limits_a^b f^{(4)}(x)\,dx = f'''(b) - f'''(a). \tag{55}$$

Предельное равенство (55) позволяет записать остаточный член квадратурной формулы Симпсона (53) в виде

$$\gamma_n = \frac{1}{n^4}(C + \sigma_n), \tag{56}$$

$$C = -\frac{(b-a)^4}{180}\left\{f'''(b) - f'''(a)\right\}, \tag{57}$$

$$\sigma_n = -\frac{(b-a)^4}{180}\left\{2h\sum_{j=1}^{n/2} f^{(4)}(\eta_j) - \int\limits_a^b f^{(4)}(x)\,dx\right\} \to 0\text{, при } n \to \infty. \tag{58}$$

Эта формула, как и формулы (32), (33) для методов прямоугольников и трапеций, выделяет в остаточном члене γ_n главное слагаемое C/n^4, которое стремится к нулю как n^{-4}. Коэффициент C (57) не зависит от n. Дополнительное слагаемое σ_n/n^4 является бесконечно малой более высокого порядка. Если им пренебречь, то получится асимптотическое представление остаточного члена

$$\gamma_n \approx Cn^{-4}. \tag{59}$$

Его относительная точность возрастает с увеличением n.

Другое представление остаточного члена γ_n можно вывести с помощью формулы (39). Она позволяет записать формулу (53) в виде

$$\gamma_n = -\frac{(b-a)^5}{180n^4} f^{(4)}(\eta), \tag{60}$$

где η - какая-то точка отрезка $[a,b]$. Вычислить погрешность по формуле (60) нельзя, поскольку положение точки η неизвестно, но можно ее оценить. Пусть $\left|f^{(4)}(x)\right| \le M_4$, тогда

$$|\gamma_n| \le \frac{(b-a)^5 M_4}{180n^4}. \tag{61}$$

Данная оценка позволяет определить, с каким n нужно проводить вычисления, чтобы погрешность не превышала заданной точности ε. Кроме того, если четвертая производная функции $f(x)$ является знакоопределенной, то формула (60) дает знак погрешности, что также может оказаться полезным при организации вычислений.

Метод Симпсона является методом более высокого порядка точности – четвертого. В этом его преимущество перед методами прямоугольников и трапеций, Правда, приведенные выше оценки остаточного члена, требуют большей гладкости подынтегральной функции – она должна быть четыре раза непрерывно дифференцируема.

Задача 2.

Вычислить интеграл (46) по формуле Симпсона при $n = 2$.

В данном случае

$$S_2 = \frac{\pi}{12}\left(\sin 0 + 4\sin\frac{\pi}{4} + \sin\frac{\pi}{2}\right) = 1.002280, \tag{62}$$

$$\gamma_2 = -0.002280. \tag{63}$$

Четвертая производная функции $\sin x$ на отрезке $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ положительна и не превосходит единицы, так что знак погрешности согласуется с формулой (60), а ее величина – с оценкой (61):

$$|\gamma_2| \le \frac{1}{180 \cdot 16}\left(\frac{\pi}{2}\right)^5 < 0.0034.$$

2.3. Апостериорные оценки погрешности при численном интегрировании.

В латинском языке существуют два термина – антонима: *априори* (***a priori***) и *апостериори* (***a posteriori***). Первый означает изначально, независимо от опыта, второй – на основании опыта. Оба они часто используются в вычислительной математике, подразделяя информацию на ту, которая известна до начала вычислений, и ту, которая получается в процессе вычислений.

Оценки погрешности квадратурных формул прямоугольников (43), трапеций (44), Симпсона (61) называют априорными. Они справедливы изначально и предсказывают точность вычисления интеграла независимо от того, будем мы фактически проводить вычисления или нет. Эти результаты позволяют понять структуру остаточных членов, определить скорость их убывания при возрастании n.

Однако недаром говорят, что недостатки являются продолжением достоинств. Постановка задачи численного интегрирования предполагает, что известен алгоритм вычисления подынтегральной функции $f(x)$ при любом значении аргумента x на отрезке $[a,b]$ и все. В оценки же (43), (44), (61) входят константы M_2 и M_4, мажерирующие вторую и четвертую производные функции $f(x)$ в асимптотические формулы (38) и (59) – значения первой и третьей производных в граничных точках отрезка $[a,b]$. Такая информация выходит за рамки первоначальной постановки задач. Чтобы ее получить и использовать в процессе вычислений, нужно провести дополнительное исследование функции $f(x)$. В случае, когда функция $f(x)$ задана сравнительно простой формулой, такое исследование возможно, хотя требует определенных усилий и времени. В случае же, когда она задается графиком, таблицей, определяется как сложная неявная функция и т. д., на этом пути возникают большие или даже непреодолимые трудности. В связи с этим перейдем к обсуждению методов оценки погрешности численного интегрирования, которые не требуют предварительного анализа производных подынтегральной функции. Они используют сопоставление результатов вычислений с разным числом точек n и называются апостериорными (буквально, основанными на опыте, что в данном случае означает основанными на результатах вычислений).

Начнем обсуждение идеи апостериорных оценок погрешности с методов второго порядка – прямоугольников и трапеций. Предположим, что мы провели расчеты по методу прямоугольников с числом точек $n/2$ (n - четное число), а потом с числом точек n и в результате получили два числа - $P_{n/2}$ и P_n. Согласно формулам (9) и (32) это позволяет написать соотношения

$$\begin{aligned} I &= P_{n/2} + \frac{4}{n^2}\left(A + \mu_{n/2}\right), \\ I &= P_n + \frac{1}{n^2}\left(A + \mu_n\right). \end{aligned} \tag{64}$$

Вычитая теперь второе равенство из первого, получим

$$\left(P_{n/2} - P_n\right) + \frac{3}{n^2}A + \frac{1}{n^2}\left(4\mu_{n/2} - \mu_n\right) = 0$$

или

$$\alpha_n = \frac{1}{n^2}\left(A + \mu_n\right) = \frac{1}{3}\left(P_n - P_{n/2}\right) + \frac{4}{3n^2}\left(\mu_n - \mu_{n/2}\right). \qquad (65)$$

Первый член в правой части этого представления остаточного члена нам известен из результатов вычислений. Он является главным. Второй член неизвестен, но он, по сравнению с первым, представляет собой бесконечно малую более высокого порядка. Если им пренебречь, то для погрешности получится простая асимптотическая формула:

$$\alpha_n \approx \frac{1}{3}\left(P_n - P_{n/2}\right). \qquad (66)$$

Ее относительная точность возрастает при увеличении n.

Аналогичные формулы имеют место для погрешности метода трапеций

$$\beta_n = \frac{1}{3}\left(T_n - T_{n/2}\right) + \frac{4}{3n^2}\left(\nu_n - \nu_{n/2}\right) \approx \frac{1}{3}\left(T_n - T_{n/2}\right). \qquad (67)$$

Для метода Симпсона, который является методом четвертого порядка, формулы немного изменяются. Теперь соотношения, аналогичные (64), будут иметь вид:

$$\begin{aligned} I &= S_{n/2} + \frac{16}{n^4}\left(C + \sigma_{n/2}\right), \\ I &= S_n + \frac{1}{n^4}\left(C + \sigma_n\right). \end{aligned} \qquad (68)$$

(Здесь число n предполагается кратным четырем, так что $n/2$ четное число.) Проводя в (68) вычитание второй строки из первой, получим

$$\gamma_n = \frac{1}{n^4}\left(C + \sigma_n\right) = \frac{1}{15}\left(S_n - S_{n/2}\right) + \frac{16}{15n^4}\left(\sigma_n - \sigma_{n/2}\right). \qquad (69)$$

Здесь опять первый член в правой части равенства известен из вычислений. Он является главным. Второй член неизвестен, но он представляет собой бесконечно малую более высокого порядка по сравнению с первым. Если им пренебречь, то получим асимптотическую формулу для приближенного вычисления погрешности по результатам двух вычислений

$$\gamma_n \approx \frac{1}{15}\left(S_n - S_{n/2}\right). \qquad (70)$$

Ее относительная точность возрастает с увеличением n.

Обычно апостериорные оценки погрешности с помощью асимптотических формул (66), (67), (70) включают в компьютерные программы численного интегрирования. Они служат критерием для завершения вычислений после того, как нужная точность достигнута.

В заключение отметим следующее. Можно подставить полученные выражения для остаточных членов (65), (67), (69) в исходные квадратурные формулы (9), (14) и (18). В результате они примут вид:

$$I = \frac{4}{3}P_n - \frac{1}{3}P_{n/2} + \tilde{\alpha}_n, \qquad (71)$$

$$I = \frac{4}{3}T_n - \frac{1}{3}T_{n/2} + \tilde{\beta}_n, \qquad (72)$$

$$I = \frac{16}{15} S_n - \frac{1}{15} S_{n/2} + \tilde{\gamma}_n, \tag{73}$$

где $\tilde{\alpha}_n$, $\tilde{\beta}_n$, $\tilde{\gamma}_n$ - остаточные члены этих модифицированных формул

$$\tilde{\alpha}_n = \frac{4}{3n^2}\left(\mu_n - \mu_{n/2}\right) = o\left(n^{-2}\right), \tag{74}$$

$$\tilde{\beta}_n = \frac{4}{3n^2}\left(\nu_n - \nu_{n/2}\right) = o\left(n^{-2}\right), \tag{75}$$

$$\tilde{\gamma}_n = \frac{16}{15n^2}\left(\sigma_n - \sigma_{n/2}\right) = o\left(n^{-4}\right). \tag{76}$$

Формулы (71), (72), (73), написанные по результатам двух расчетов с числом точек $n/2$ и n, являются асимптотически более точными, чем исходные. В исходных формулах погрешности убывают, соответственно, как n^{-2}, n^{-2}, n^{-4}, в модифицированных формулах погрешности, согласно (74), (75), (76) являются бесконечно малыми более высокого порядка. Однако для исходных формул известны оценки погрешностей (43), (44). (61). Для модифицированных формул в нашем распоряжении оценок нет. Если мы хотим ими пользоваться, то нужно провести соответствующее исследование. Исключение составляет формула (72). Согласно формуле (21) ее можно переписать в виде

$$I = S_n + \tilde{\beta}_n, \tag{77}$$

т. е. модифицированная формула трапеций оказалась просто формулой Симпсона с уже известным остаточным членом $\gamma_n = \tilde{\beta}_n$.

Задача 3.

Вычислить по формуле Симпсона интеграл (46) с $n = 4$. Используя результаты задачи 2, найти приближенную апостериорную погрешность (70).

В данном случае

$$S_4 = \frac{\pi}{24}\left(\sin 0 + 4\sin\frac{\pi}{8} + 2\sin\frac{\pi}{4} + 4\sin\frac{3\pi}{8} + \sin\frac{\pi}{2}\right) = 1.000135, \tag{78}$$

$$\gamma_4 = -0.000135.$$

Апостериорная оценка погрешности по результатам двух расчетов дает

$$\gamma_4 \approx \frac{1}{15}\left(S_4 - S_2\right) = -0.000143.$$

Несмотря на маленькое число точек, она хорошо согласуется с фактической погрешностью (78), сосчитанной «в лоб» по известному значению интеграла (46).

Задача 4.

Используя результаты решения задач 2 и 3, посчитать интеграл (46) по модифицированной формуле Симпсона (73).

В данном случае

$$I \approx \frac{16}{15} S_4 - \frac{1}{15} S_2 = 0.999992\,, \tag{79}$$

$$\tilde{\gamma}_4 = 0.000008\,.$$

Модифицированная формула Симпсона (73) без дополнительных вычислений позволила на порядок улучшить результат, полученный по обычной формуле Симпсона. Отметим, что погрешности при расчетах по формулам (78) и (79) имеют противоположные знаки.

§3. Квадратурные формулы Гаусса.

3.1. Задача построения оптимальных квадратурных формул.

Точность квадратурной формулы определяется выбором узлов и весовых коэффициентов. Например, формулы трапеций и Симпсона имеют одинаковые узлы, но различные веса и, как следствие, их точность оказывается разной. В связи с этим естественно возникает задача поиска наилучшей квадратурной формулы с заданным числом узлов n. Обсудим постановку и решение такой задачи в формулировке Гаусса: построить квадратурную формулу с числом узлов n, которая является точной для любого полинома степени $(2n-1)$ или ниже. Такая постановка задачи вполне оправдана: квадратурная формула, точная для полиномов, будет хорошо работать для гладких функций.

Переходя к решению задачи, поставленной Гауссом, будем считать, что интеграл предварительно приведен к стандартной форме, когда областью интегрирования является отрезок $[-1,1]$. С учетом этого замечания запишем искомую квадратурную формулу в виде:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} c_i f(x_i) + \delta_n\,, \tag{80}$$

где x_i узлы, $x_i \in [-1,1]$, c_i весовые коэффициенты, δ_n остаточный член. Для любого полинома степени $(2n-1)$ остаточный член в формуле (80) должен быть равен нулю. На протяжении этого параграфа каждый раз, когда мы будем говорить о произвольных полиномах какой-нибудь степени, всегда будем включать в их число полиномы более низких степеней, не оговаривая это особо.

Полагая последовательно $f(x) = 1, x, x^2, \ldots, x^{2n-1}$ и принимая во внимание, что для этих функций, согласно требованию Гаусса, остаточный член должен равняться нулю, получим:

$$\int_{-1}^{1} x^m dx = \frac{1}{(m+1)}\left\{1 + (-1)^m\right\} = \sum_{i=1}^{n} c_i x_i^m\,,\ 0 \le m \le 2n-1\,. \tag{81}$$

Соотношения (81) представляют собой систему $2n$ нелинейных уравнений с $2n$ неизвестными, в качестве которых выступают узлы x_i и веса c_i $(1 \le i \le n)$.

Уравнение (81), соответствующее индексу $m = 0$, дает

$$\sum_{i=1}^{n} c_i = 2\,. \tag{82}$$

Таким образом, сумма весовых коэффициентов в квадратурной формуле Гаусса при любом n равна двум.

Задача 5.

Составить и решить систему уравнений (81) для квадратурной формулы Гаусса с одним узлом.

В этом случае в задаче подлежат определению два параметра: узел x_1 и весовой коэффициент c_1. Система уравнений для их определения получается из (81) при $m=0$ и $m=1$:

$$\begin{cases} c_1 = 2 \\ c_1 x_1 = 0 \end{cases}.$$

Ее решение имеет вид: $x_1 = 0$, $c_1 = 2$, так что искомая квадратурная формула запишется следующим образом:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = 2f(0) + \delta_1. \tag{83}$$

Выбор в качестве единственного узла средней точки отрезка $[-1,1]$ выглядит по соображениям симметрии вполне естественно. Требование, чтобы сумма весовых коэффициентов равнялась двум (82), определяет в данном случае единственный весовой коэффициент c_1. Квадратурная формула (83) является точной для любой линейной функции $Q_1 = a_0 + a_1 x$.

3.2. Полиномы Лежандра

Мы решили систему уравнений (81) при $n=1$. Однако решить ее «в лоб» в общем случае при произвольном n сложно. Поэтому мы будем вынуждены воспользоваться обходным путем. Для этой цели нам понадобятся полиномы Лежандра, с которыми Вы уже встречались в курсе линейной алгебры. Они определяются формулами

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n. \tag{84}$$

Выпишем, используя эту формулу, несколько первых полиномов Лежандра

$$P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x,\ P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2},\ P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x. \tag{85}$$

Полиномы Лежандра обладают следующими свойствами:

1. Полином Лежандра $P_n(x)$ номера n является полиномом n -ой степени, обладающим той же четностью, что и n:

$$P_n(-x) = (-1)^n P_n(x). \tag{86}$$

2. Полиномы Лежандра $P_n(x)$ в точках $x = \pm 1$ принимают следующие значения:

$$P_n(1) = 1,\ P_n(-1) = (-1)^n.$$

3. Полином Лежандра $P_n(x)$ имеет на интервале $(-1,1)$ n простых корней. В силу свойства 1 корни располагаются симметрично относительно точки $x=0$.

4. Любой полином $Q_m(x)$ степени $m<n$ ортогонален к полиному Лежандра $P_n(x)$ на сегменте $[-1,1]$:

$$\int_{-1}^{1} Q_m(x) P_n(x) dx = 0. \tag{87}$$

Докажем перечисленные свойства.
1. Свойство 1 напрямую следует из формулы (84).

2. Представим выражение $(x^2-1)^n$ в виде произведения

$$(x^2-1)^n = (x+1)^n (x-1)^n$$

и выполним n - кратное дифференцирование. В результате получим:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \sum_{k=0}^{n} \left(C_n^k\right)^2 n! (x+1)^{n-k} (x-1)^k. \tag{88}$$

Все члены этой суммы, кроме нулевого, содержат множители$(x-1)^k$: $1 \le k \le n$ и при $x=1$ обращаются в ноль, а нулевой член дает нужное равенство: $P_n(1)=1$. Второе равенство следует из (86): $P_n(-1)=(-1)^n$.

3. Функция $(x^2-1)^n$ обращается на концах отрезка $[-1,1]$ в ноль. Согласно теореме Ролля ее первая производная должна иметь по крайней мере один ноль на интервале $(-1,1)$. Кроме того, производная обращается в ноль в граничных точках $x=\pm 1$. Применяя таким же образом теорему Ролля ко второй производной $\left\{(x^2-1)^n\right\}''$, убеждаемся в том, что она имеет два нуля на интервале $(-1,1)$ и обращается в ноль в граничных точках $x=\pm 1$.

Будем продолжать этот процесс, пока не дойдем до n -ой производной выражения $(x^2-1)^n$. Эта производная определяет полином Лежандра с точностью до множителя. Она должна иметь n корней на интервале $(-1,1)$. Поскольку число корней равно степени полинома, все они должны быть простыми. Корни, как мы уже отмечали выше, располагаются на интервале $(-1,1)$ симметрично относительно его средней точки $x=0$.

4. Подставим в интеграл (87) представление полинома Лежандра (84) и проинтегрируем по частям. В результате получим:

$$J = \frac{1}{2^n n!}\int_{-1}^{1} Q_m(x)\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2-1\right)^n dx =$$

$$= \frac{1}{2^n n!}\left\{ Q_m(x)\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\left(x^2-1\right)^n\Bigg|_{-1}^{1} - \int_{-1}^{1}\frac{dQ_m(x)}{dx}\frac{d^{n-1}}{dx^{n-1}}\left(x^2-1\right)^n dx \right\}.$$

Подстановки на концах отрезка $\left[-1,1\right]$ обращаются в ноль, поскольку степень n у выражения $\left(x^2-1\right)^n$ больше $\left(n-1\right)$-го порядка производной.

Выполняя процедуру интегрирования по частям $m+1 \le n$ раз, получим:

$$J = \left(-1\right)^{m+1}\frac{1}{2^n n!}\int_{-1}^{1}\frac{d^{m+1}Q_m(x)}{dx^{m+1}}\frac{d^{n-m-1}}{dx^{n-m-1}}\left(x^2-1\right)^n dx = 0.$$

Здесь под знаком интеграла в качестве множителя стоит $\left(m+1\right)$-ая производная от полинома m-ой степени $Q_m(x)$, тождественно равная нулю. Ортогональность доказана.

Сделаем важное замечание. Соотношение ортогональности (87) справедливо, в частности, в случае, когда в качестве полинома $Q_m(x)$ взят полином Лежандра $P_m(x)$:

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)dx = 0 \text{, при } m < n .$$

Фактически в этом условии ортогональности не важно, какой именно из двух индексов m или n больше, а какой меньше. Важно лишь, что они не равны. Таким образом, из свойства 4 вытекает следствие.

Следствие 1.

Полиномы Лежандра образуют систему полиномов, ортогональных на отрезке $\left[-1,1\right]$

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)dx = 0 \text{, } \textit{при } m \ne n . \tag{89}$$

Из линейной алгебры известно, что система полиномов, ортогональных на некотором множестве, определена однозначно с точностью до множителей. Поэтому следствию 1 можно сопоставить обратное утверждение.

Следствие 2

Любая система полиномов, ортогональных на отрезке $\left[-1,1\right]$, *совпадает с точностью до множителя с системой полиномов Лежандра.*

3.3. Узлы и весовые коэффициенты квадратурных формул Гаусса.

Изучив свойства полиномов Лежандра, перейдем к решению основной задачи – определению узлов и весовых коэффициентов квадратурных формул Гаусса. Составим полином n-ой степени

$$\omega_n(x) = \left(x-x_1\right)\left(x-x_2\right)\cdots\left(x-x_n\right), \tag{90}$$

где x_i - искомые узлы. Возьмем произвольный полином $Q_m(x)$ степени $m < n$, помножим его на полином $\omega_n(x)$ и проинтегрируем произведение по отрезку $\left[-1,1\right]$ с помощью квадратурной формулы (80). Поскольку это произведение представляет собой полином степени $m+n \le 2n-1$, формула Гаусса должна быть для него точной. В результате согласно (90) получим:

$$\int_{-1}^{1} Q_m(x)\omega_n(x)dx = \sum_{i=1}^{n} c_i Q_m(x_i)\omega_n(x_i) = 0. \tag{91}$$

Мы видим, что полином $\omega_n(x)$ ортогонален к любому полиному степени $m<n$ в том числе и к полиномам Лежандра индекса $m<n$. Это означает, что он с точностью до множителя совпадает с n-ым полиномом Лежандра: $\omega_n(x)=A_nP_n(x)$. Отсюда следует вывод: узлы квадратурной формулы Гаусса являются корнями полинома Лежандра $P_n(x)$. Напомним, что корни полиномов Лежандра располагаются на интервале $(-1,1)$ симметрично относительно его средней точки $x=0$.

Для того, чтобы подсчитать весовые коэффициенты c_i, введем специальные полиномы

$$Q_{n-1,m}(x) = \frac{(x-x_1)\cdots(x-x_{m-1})(x-x_{m+1})\cdots(x-x_n)}{(x_m-x_1)\cdots(x_m-x_{m-1})(x_m-x_{m+1})\cdots(x_m-x_n)}. \tag{92}$$

Каждый из них является полиномом степени $(n-1)$. В числителе у него стоит полином $\omega_n(x)$ с опущенным множителем $(x-x_m)$, в знаменателе - значение числителя в точке $x=x_m$. В результате такой структуры полином $Q_{n-1,m}(x)$ в точках x_i удовлетворяет соотношениям:

$$Q_{n-1,m}(x_i) = \begin{cases} 0, & i \ne m \\ 1, & i = m \end{cases}. \tag{93}$$

Для полинома $Q_{n-1,m}(x)$ квадратурная формула Гаусса должна быть точной. С учетом (93) это дает

$$\int_{-1}^{1} Q_{n-1,m}(x)dx = \sum_{i=1}^{n} c_i Q_{n-1,m}(x_i) = c_m. \tag{94}$$

В результате получаем следующее интегральное выражение для весовых коэффициентов квадратурной формулы Гаусса:

$$c_m = \int_{-1}^{1} Q_{n-1,m}(x)dx = \int_{-1}^{1} \frac{(x-x_1)\cdots(x-x_{m-1})(x-x_{m+1})\cdots(x-x_n)}{(x_m-x_1)\cdots(x_m-x_{m-1})(x_m-x_{m+1})\cdots(x_m-x_n)}dx. \tag{95}$$

3.4. Исследование квадратурной формулы.

Нам осталось решить последний вопрос – доказать, что квадратурная формула, у которой в качестве узлов x_i берутся корни полинома Лежандра, а весовые коэффициенты c_i вычисляются по формулам (95), действительно решают задачу Гаусса, являясь точной для любого полинома степени $(2n-1)$.

Проведем доказательство в два этапа. Сначала докажем, что такая формула является точной для любого полинома $Q_{n-1}(x)$ степени $(n-1)$. Такой полином можно представить в виде суммы специальных полиномов (92)

$$Q_{n-1}(x)=\sum_{m=1}^{n}Q_{n-1}(x_m)Q_{n-1,m}(x). \tag{96}$$

Справедливость данного разложения вытекает из следующих соображений. Здесь левая и правая части равенства совпадают в n точках $x_i, 1\le i\le n$. Но, если два полинома $(n-1)$-ой степени совпадают в n точках, то они тождественно равны.

Интегрируя равенство (96) по отрезку $[-1,1]$, получим

$$\int_{-1}^{1}Q_{n-1}(x)dx=\sum_{m=1}^{n}Q_{n-1}(x_m)\int_{-1}^{1}Q_{n-1,m}(x)dx=\sum_{m=1}^{n}c_mQ_{n-1}(x_m). \tag{97}$$

Итак, для полиномов $(n-1)$-ой степени утверждение доказано.

Теперь рассмотрим произвольный полином $Q_{2n-1}(x)$ степени $(2n-1)$. Разделим его с остатком на полином Лежандра $P_n(x)$ и представим в виде:

$$Q_{2n-1}(x)=P_n(x)q_{n-1}(x)+r_{n-1}(x), \tag{98}$$

где $q_{n-1}(x)$ и $r_{n-1}(x)$ полиномы степени $(n-1)$. Проинтегрировав равенство (98) по отрезку $[-1,1]$, будем иметь:

$$\begin{aligned}&\int_{-1}^{1}Q_{2n-1}(x)dx=\int_{-1}^{1}\left\{P_n(x)q_{n-1}(x)+r_{n-1}(x)\right\}dx=\int_{-1}^{1}r_{n-1}(x)dx=\\&=\sum_{i=1}^{n}c_ir_{n-1}(x_i)=\sum_{i=1}^{n}c_i\left\{P_n(x_i)q_{n-1}(x_i)+r_{n-1}(x_i)\right\}=\sum_{i=1}^{n}c_iQ_{2n-1}(x_i).\end{aligned} \tag{99}$$

Поясним выполненные преобразования. Интеграл $\int_{-1}^{1}P_n(x)q_{n-1}(x)dx$ опущен, поскольку полином Лежандра $P_n(x)$ ортогонален к любому полиному $(n-1)$-ой степени. Оставшийся интеграл от полинома $r_n(x)$ вычислен с помощью квадратурной формулы (97). Выше уже доказано, что для полиномов степени $(n-1)$ она является точной. Последний переход заключается в том, что в сумму $\sum_{i=1}^{n}c_ir_{n-1}(x_i)$ добавлены слагаемые $P_n(x_i)q_{n-1}(x_i)$. Они не меняют значения суммы, поскольку все равны нулю: ведь узлами квадратурной формулы являются корни полинома Лежандра $P_n(x)$.

Итак, построенная квадратурная формула действительно является точной для любого полинома степени $(2n-1)$, т. е. задача Гаусса решена. На оценке погрешности квадратурных формул Гаусса мы останавливаться не будем, однако задачи, к разбору которых переходим, показывают, что эти формулы обеспечивают для гладких функций очень высокую точность.

Задача 5.

Построить квадратурную формулу Гаусса с двумя и тремя узлами.

Выведем сначала квадратурную формулу с двумя узлами. Узлы определяются как корни второго полинома Лежандра, выражение для которого мы выписывали выше (85). В данном случае имеем:

$$x_1 = -1/\sqrt{3}\,,\ x_2 = 1/\sqrt{3}\,. \tag{100}$$

Узлы расположены симметрично относительно точки $x = 0$.

Весовые коэффициенты рассчитываются по формуле (95):

$$c_1 = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_2}{x_1 - x_2}\,dx = \int_{-1}^{1} \frac{x - 1/\sqrt{3}}{-2\sqrt{3}}\,dx = 1\,, \tag{101}$$

$$c_2 = \int_{-1}^{1} \frac{x - x_1}{x_2 - x_1}\,dx = \int_{-1}^{1} \frac{x + 1/\sqrt{3}}{2\sqrt{3}}\,dx = 1\,.$$

Они равны между собой, а их сумма, в соответствии с общим соотношением (82), равна двум. В результате искомая квадратурная формула принимает вид:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = f\left(-1/\sqrt{3}\right) + f\left(1/\sqrt{3}\right) + \delta_2\,. \tag{102}$$

Она является точной для любого полинома третьей степени.

Перейдем теперь к выводу квадратурной формулы Гаусса с тремя узлами. Согласно формуле (85) для третьего полинома Лежандра ее узлами являются числа:

$$x_1 = -\sqrt{3/5}\,,\ x_2 = 0\,,\ x_3 = \sqrt{3/5}\,. \tag{103}$$

Остается подсчитать весовые коэффициенты:

$$c_1 = \int_{-1}^{1} \frac{x\left(x - \sqrt{3/5}\right)}{\left(-\sqrt{3/5}\right)\left(-2\sqrt{3/5}\right)}\,dx = \frac{5}{9},$$

$$c_2 = \int_{-1}^{1} \frac{\left(x + \sqrt{3/5}\right)\left(x - \sqrt{3/5}\right)}{-3/5}\,dx = \frac{8}{9}, \tag{104}$$

$$c_3 = \int_{-1}^{1} \frac{\left(x + \sqrt{3/5}\right)x}{\left(\sqrt{3/5}\right)\left(2\sqrt{3/5}\right)}\,dx = \frac{5}{9}.$$

В результате квадратурная формула Гаусса с тремя узлами запишется в виде:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{3/5}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{3/5}\right) + \delta_3. \tag{105}$$

Она является точной для любого полинома пятой степени.

Задача 6.

Вычислить по формулам Симпсона и Гаусса при $n = 2$ интеграл:

$$\int_{-1}^{1} e^x\,dx = 2sh1 = 2.350402\,.$$

Сравнить результаты численного интегрирования с точным значением интеграла и между собой.

Формулы Симпсона и Гаусса дают в данном случае следующие результаты:

$$S_2 = \frac{1}{3}\left(e^{-1} + 4 + e\right) = \frac{4}{3} + \frac{2}{3}ch1 = 2.362054,$$

$$\gamma_2 = -0.011651,$$

$$G_2 = \left(e^{-1/\sqrt{3}} + e^{1/\sqrt{3}}\right) = 2ch\frac{1}{\sqrt{3}} = 2.342696,$$

$$\delta_2 = 0.007706.$$

Мы видим, что даже с двумя узлами формула Гаусса дает хороший ответ. Его точность выше точности ответа, полученного по формуле Симпсона.

В заключение сделаем следующее замечание. Несмотря на высокую точность квадратурных формул Гаусса, при компьютерных расчетах ими пользуются сравнительно редко. Дело в том, что для применения метода Гаусса нужно либо ввести в компьютер до начала расчетов корни полинома Лежандра и весовые коэффициенты, либо составить специальную подпрограмму для их вычисления. В результате потери человеческого и машинного времени на подготовку программы к основному расчету, связанному с вычислением интеграла, могут не окупиться точностью метода Гаусса. Вычисление интеграла по более простой схеме метода Симпсона имеет с этой точки зрения преимущество.

§4. Построение первообразной с помощью численного интегрирования.

Формулы Ньютона-Лейбница (1) позволяет выразить значение определенного интеграла от функции $f(x)$ через ее первообразную $F(x)$. В математическом анализе устанавливается и прямо противоположная возможность: первообразная функции $f(x)$, непрерывной на отрезке $[a,b]$, может быть записана в виде определенного интеграла с переменным верхним пределом:

$$F(x) = \int_{x_0}^{x} f(t)\,dt. \tag{106}$$

Здесь x_0, x - две точки отрезка $[a,b]$, причем нижний предел интегрирования x_0 предполагается фиксированным, верхний x - переменным. В случае непрерывной функции $f(x)$ функция $F(x)$, определенная с помощью интеграла (106), является дифференцируемой и ее производная равна $f(x)$:

$$F'(x) = \frac{d}{dx}\left(\int_{x_0}^{x} f(t)\,dt\right) = f(x). \tag{107}$$

Формула (106) в сочетании с какой-нибудь формулой численного интегрирования, например, Симпсона, представляет собой универсальный алгоритм построения первообразной. Приведем два примера, иллюстрирующие этот алгоритм.

Функция $f(x) = \sin x/x$ непрерывна и, следовательно, имеет первообразные. Они не могут быть выражены через элементарные функции, но представление в виде интеграла с переменным верхним пределом для них справедливо. Одну из первообразных мы получим, выбирая нижний предел интегрирования $x_0 = 0$. Ее называют интегральным синусом и обозначают

$$Si(x) = \int_0^x \frac{\sin t}{t} dt .$$

Интегральный синус определен на всей числовой прямой, является нечетной функцией x, имеет конечные предельные значения на бесконечности

$$\lim_{x \to \pm\infty} Si(x) = \pm \frac{\pi}{2} .$$

Согласно (107)

$$Si'(x) = \sin x / x .$$

По знаку производной легко определить области возрастания и убывания функции, разделенные точками экстремума $x_k = k\pi$ $(k = \pm 1, \pm 2, \ldots)$. Методы численного интегрирования позволяют вычислить значения $Si(x)$ при любом x. График интегрального синуса при $x \geq 0$ приведен на рис. 3.

В качестве второго примера рассмотрим функцию ошибок $erf(x)$, играющую важную роль в теории вероятности. Ее обозначение образовано с помощью первых букв английского названия функции ошибок – error function. Подобно интегральному синусу, функция ошибок вводится в виде интеграла с переменным пределом от функции e^{-x^2}, которая не имеет первообразных в классе элементарных функций:

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt .$$

Функция ошибок определена на всей числовой прямой, является нечетной функцией x, имеет конечные предельные значения на бесконечности:

$$\lim_{x \to \pm\infty} erf(x) = \pm 1 .$$

Согласно (107)

$$erf'(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} .$$

Производная всюду положительная, следовательно, функция ошибок монотонно возрастает. Ее график приведен на рис. 4.

Существует ряд других специальных функций, которые вводятся как интегралы с переменным верхним пределом. Не будем останавливаться на их описании, отметим лишь, что разобранные примеры показывают, насколько условно деление функций на элементарные и неэлементарные. По существу, чтобы работать с какой-нибудь функцией, нужно знать ее свойства и иметь алгоритм вычисления при любом значении аргумента. С этой точки зрения применение интегрального синуса или функции ошибок ничем не отличается от применения привычных нам элементарных функций.