Тема 4. ПОСТРОЕНИЕ КВАДРАТУРНЫХ ФОРМУЛ

И.Г.Бурова

I.G.Burova

St. Petersburg State University

Приближенное вычисление интегралов

Обозначения

Рассматриваем квадратурные формулы вида:

$$\int_a^b p(x)f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

Здесь использованы обозначения:

x_k — узлы квадратурной формулы, $x_k \in [a, b]$

A_k — коэффициенты квадратурной формулы,

$p(x)$ — весовая функция (есть ограничения, о которых будет сказано позднее),

$R(f) = \int_a^b p(x)f(x)dx - \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$ — остаток квадратурной формулы.

Интерполяционные квадратурные формулы
Построение

Вспомним формулу интерполяционного многочлена в форме Лагранжа:

$$f(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k)\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)} + R(f,x),$$

где

$$\omega(x) = (x-x_1)\times\ldots\times(x-x_n)$$

Умножим на весовую функцию (считаем ее неотрицательной, неэквивалентной нулю, кроме того, должны существовать моменты, т.е. $\int_a^b p(x)x^k dx$) и проинтегрируем. Получаем

$$\int_a^b p(x)f(x)dx = \int_a^b p(x)\sum_{k=1}^{n} f(x_k)\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx +$$

$$\int_a^b p(x)R(f,x).$$

Преобразуем это выражение, получаем

$$\int_a^b p(x)f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) + \int_a^b p(x)R(f,x)dx,$$

где

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

Определение

Квадратурная формула, у которой коэффициенты вычисляются по формуле

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

называется интерполяционной квадратурной формулой

Определение

Квадратурная формула имеет алгебраическую степень точности m, если выполнено

$$\int_a^b p(x)f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

для $f(x) = x^i$, $i = 0, \ldots, m$

и это равенство не верно для $f(x) = x^{m+1}$.

Теорема

Для того,чтобы квадратурная формула

$$\int_a^b p(x)f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) + R(f)$$

была интерполяционная необходимо и достаточно, чтобы она была точна, если f многочлен степени не выше $n-1$.

Доказательство. Необходимость.

Пусть формула интерполяционная. Тогда любой многочлен степени не выше $n-1$ может быть представлен в форме

$$P(x)=\sum_{k=1}^{n}P(x_k)\frac{\omega(x)}{(x-x_k)\omega'(x_k)}dx.$$

Если f многочлен степени не выше $n-1$, то в равенстве

$$\int_a^b p(x)f(x)dx=\sum_{k=1}^{n}A_kf(x_k)+R(f)$$

имеем $R(f)=0$,

поэтому

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

где

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

Достаточность.

Имеем — Квадратурная формула точна, если f многочлен степени не выше $n-1$.

$$\int_a^b p(x)f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k).$$

Поэтому для любого f многочлена степени не выше $n-1$, в частности

$$W_m = \frac{\omega(x)}{(x-x_m)\omega'(x_m)}$$

$m = 1, ...n$, имеем

$$\int_a^b p(x)W_m(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k W_m(x_k) = A_m.$$

Теорема доказана.

Простейшие квадратурные формулы
Квадратурная формула прямоугольников

Пусть $c \in [a, b]$
Заменим $f(x)$ на $f(c)$, получаем

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(c).$$

Наиболее употребительны:
$c = b$ — формула правых прямоугольников,
$c = a$ — формула левых прямоугольников,
$c = (a+b)/2$ — формула средних прямоугольников.
Перейдем к остатку квадратурной формулы. Нам потребуется теорема.

Теорема о среднем интегрального исчисления

Если функция $\varphi(x)$ сохраняет знак в $[a,b]$, $f(x)$ – непрерывна, то $\int_a^b f(x)\varphi(x)dx = f(\xi)\int_a^b \varphi(x)dx$, где $\xi \in [a,b]$

В случае левых и правых прямоугольников применим формулу Тейлора

$f(x) = f(a) + (x-a)f'(\xi)$, где $a < \xi < b$.

В случае формулы левых прямоугольников

$$R = \frac{(b-a)^2}{2} f'(\eta)$$

где $a < \eta < b$.

В случае формулы правых прямоугольников, применяя Теорему о среднем интегрального исчисления, получим

$$R = -\frac{(b-a)^2}{2} f'(\eta)$$

В случае формулы средних прямоугольников, считаем $f \in C^2[a,b]$.
По формуле Тейлора

$$f(x) - f\left(\frac{a+b}{2}\right) = \left(x - \frac{a+b}{2}\right) f'\left(\frac{a+b}{2}\right) + \frac{1}{2}\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 f''(\xi),$$

где $\xi = \xi(x)$ между x и $\frac{a+b}{2}$

Аналогично предыдущему, получаем

$$R\left(f, \frac{a+b}{2}\right) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\eta),$$

где $a < \eta < b$

Составные квадратурные формулы прямоугольников

Разделим промежуток $[a, b]$ на части с шагом $h = \frac{b-a}{n}$, получаем $x_k = a + kh$, $k = 0, \ldots, n$.

На каждом $[x_k, x_{k+1}]$ применим формулу

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx \approx hf(a + \alpha + kh),$$

$k = 0, 1, \ldots, n-1$, где α может принимать значения $\alpha = 0, h, h/2$.

Теперь, принимая во внимание, что

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx.$$

Для формулы левых прямоугольников имеем составную формулу

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} hf(a+kh) + R(f)$$

Остаток квадратурной формулы левых прямоугольников

$$R = \sum_{k=0}^{n-1} \left(\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx - hf(a+kh) \right) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{(b-a)^2}{2n^2} f'(\xi_k).$$

Преобразуем

$$R = \frac{(b-a)^2}{2n^2} \sum_{k=0}^{n-1} f'(\xi_k) = \frac{(b-a)^2}{2n} \frac{f'(\xi_0) + ... + f'(\xi_{n-1})}{n}.$$

Пусть $m = \min\limits_{[a,b]} f(x), \;\; M = \max\limits_{[a,b]} f(x)$,
тогда

$$m \leq \frac{f'(\xi_0) + ... + f'(\xi_{n-1})}{n} \leq M,$$

поэтому существует точка $\eta \in [a, b]$
такая, что

$$f'(\eta) = \frac{f'(\xi_0) + ... + f'(\xi_{n-1})}{n}.$$

Таким образом

$$R = \frac{(b-a)^2}{2n} f'(\eta)$$

Для формулы правых прямоугольников

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} f(a + h + kh) + R(f).$$

Для формулы средних прямоугольников

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{k=0}^{n-1} f(a + h/2 + kh) + R(f),$$

Замечание. Квадратурная формула

$$\int_0^{2\pi} f(x)dx \approx \frac{2\pi}{n} \sum_{k=1}^{n} f\left(\alpha + (k-1)\frac{2\pi}{n}\right)$$

точна для всех тригонометрических полиномов порядка $n-1$. Здесь $\alpha \in [0, 2\pi/n]$.

З а д а ч а

При $c = 0{,}9$, $c = 0{,}1$ вычислить

$$\int_0^{\pi} \ln(1 + 2c\cos(x) + c^2)dx$$

с погрешностью 0.00001

4.2. Квадратурная формула Ньютона—Котеса. Составные квадратурные формулы

4.2.1. Квадратурная формула Ньютона—Котеса

Коэффициенты квадратурной формулы Ньютона—Котеса

$$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\sum_{k=0}^{n} B_k f(x_k)$$

задаются формулами

$$B_k = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!n}\int_0^n \frac{t(t-1)\dots(t-n)}{t-k}dt,$$

а $x_k = a + kh$, $k = 0, 1, \dots, n$, $h = (b-a)/n$.

4.2.2. Составные квадратурные формулы трапеций и Симпсона

Составная формула трапеций имеет вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2n}\Big(f_0 + 2(f_1 + \ldots + f_{n-1}) + f_n\Big).$$

Составная формула Симпсона при четном n:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{3n}\Big(f_0 + 4(f_1 + f_3 + \ldots + f_{n-1}) +$$

$$+2(f_2 + f_4 + \ldots + f_{n-2}) + f_n\Big).$$

З а д а ч а

Какую алгебраическую степень точности имеют эти формулы? Найти экспериментально, составив программу для численного вычисления интеграла.

4.3. Рекомендуется повторить тему ортогональные многочлены

- Вопросы для повторения
- Что такое «ортогональные многочлены»
- Что такое «Моменты»

Далее весовую функцию будем обозначать p(x)

Каким условиям должна удовлетворять «весовая функция»?

4.4. Построение квадратурных формул гауссова типа

Теорема. Для того чтобы квадратурная формула с n узлами была точна на многочленах степени не выше $2n-1$, необходимо и достаточно, чтобы: 1) она была интерполяционная; 2) ее узлы были корнями многочлена $\omega(x) = (x-x_1)\cdot\ldots\cdot(x-x_n)$, такого что

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

для любого многочлена Q_m степени $m = 0, 1, \ldots, n-1$.

З а д а ч а

Построить квадратурную формулу гауссова типа с двумя узлами

$$\int_a^b p(x)f(x)dx \approx A_1 f(x_1) + A_2 f(x_2).$$

Пояснения к решению. Пусть x_1 и x_2 — корни многочлена второй степени $\omega(x)$, т.е. $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)$. Запишем $Q(x)$ в виде $Q(x) = x^2 + sx + r$. Условия ортогональности $Q(x)$ к многочленам нулевой и первой степени на данном промежутке по данному весу запишем в виде

$$\int_a^b p(x)(x^2 + sx + r)dx = 0, \quad \int_a^b p(x)x(x^2 + sx + r)dx = 0.$$

Использовав определение моментов $c_i = \int_a^b p(x)x^i\,dx$, запишем

систему уравнений в виде

$$\begin{cases} c_2 + sc_1 + rc_0 = 0, \\ c_3 + sc_2 + rc_1 = 0. \end{cases}$$

Итак: 1) вычисляем моменты c_i, $i = 0, 1, 2, 3$; 2) решаем систему уравнений и находим неизвестные s, r; 3) находим x_1, x_2; 4) определяем коэффициенты A_1, A_2, например, из условий точности квадратурной формулы на многочленах степени не выше третьей. Условия точности на многочленах нулевой и первой степени дают систему уравнений

$$\begin{cases} A_1 + A_2 = c_0, \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 = c_1. \end{cases}$$

Варианты заданий:

а) $p(x) = x^\alpha$, $\alpha = 1/2, 2, 3$, $a = 0$, $\quad b = 1$;

б) $p(x) = e^x$, $a = 0$, $b = 0{,}5$;

в) $p(x) = \ln(x)$, $a = 0$, $b = 1/2$.

4.3. Квадратурные формулы гауссова типа

4.3.1. Квадратурная формула Гаусса

Квадратурная формула Гаусса

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

имеет своими узлами корни многочлена Лежандра

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

Коэффициенты A_k вычисляются по формуле

$$A_k = \frac{2}{(1-x_k^2)[P_n'(x_k)]^2}, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Приведем узлы и коэффициенты формулы Гаусса для некоторых n:

$$n = 1,$$

$$x_1 = 0,\ A_1 = 2;$$

$$n = 2,$$

$$x_2 = -x_1 = 1/\sqrt{3} \approx 0.5773502692,\ A_1 = A_2 = 1;$$

$$n = 3,$$

$$x_2 = 0,\ A_2 = 8/9,$$
$$x_3 = -x_1 = \sqrt{3/5} \approx 0.7745966692,\ A_1 = A_3 = 5/9;$$

$$n = 4,$$

$$x_3 = -x_2 \approx 0.3399810436,\ A_2 = A_3 \approx 0.6521451549,$$
$$x_4 = -x_1 \approx 0.8611363116,\ A_4 = A_1 \approx 0.3478548451;$$

$$n = 5,$$

$$x_3 = 0,\ A_3 \approx 0.5688888899,$$
$$x_4 = -x_2 \approx 0.5384693101,\ A_2 = A_4 \approx 0.4786286705,$$
$$x_5 = -x_1 \approx 0.9061798459,\ A_1 = A_5 \approx 0.2369268851.$$

Замечание.

$$\int_a^b f(t)dt = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}\right)dx,$$

поэтому

$$\int_a^b f(t)dt \approx \frac{b-a}{2}\sum_{k=1}^{n} A_k f(t_k),$$

где

$$t_k = \frac{b-a}{2}x_k + \frac{b+a}{2},$$

x_k — узлы квадратурной формулы Гаусса, $x_k \in [-1, 1]$, A_k — соответствующие им коэффициенты.

З а д а ч а

Вычислить интеграл с помощью квадратурной формулы Гаусса

$$\int_0^1 \frac{dt}{1+t^2} = \pi/4$$

с погрешностью 10^{-5}.

5.3.2. Квадратурная формула Мелера

Квадратурная формула Мелера имеет вид

$$\int_{-1}^{1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x)dx \approx \pi/n \sum_{k=1}^{n} f(x_k),$$

где

$$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right), \quad k = 1, \ldots, n.$$

З а д а ч а

Вычислить интегралы

$$\int_{-1}^{1} \frac{e^{2t}dt}{\sqrt{1-t^2}}, \quad \int_{-1}^{1} \frac{dt}{(1+t^2)\sqrt{1-t^2}}$$

с погрешностью 10^{-5}.

4.3.3. Квадратурная формула Чебышева—Эрмита

Квадратурная формула

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

имеет своими узлами корни многочлена Чебышева—Эрмита

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}.$$

Коэффициенты вычисляются по формуле

$$A_k = \frac{2^{n+1} n! \sqrt{\pi}}{\left(H_n'(x_k)\right)^2}.$$

Приведем узлы и коэффициенты формулы для некоторых n:

$$n = 4,$$

$$-x_1 = x_4 \approx 1.6506801239,\ A_1 = A_4 \approx 0.08131283545,$$
$$-x_2 = x_3 \approx 0.5246476233,\ A_2 = A_3 \approx 0.8049140900;$$

$$n = 5,$$

$$x_3 = 0,\ A_3 \approx 0.9453087205,$$
$$x_4 = -x_2 \approx 0.9585724646,\ A_2 = A_4 \approx 0.3936193232,$$
$$x_5 = -x_1 \approx 2.0201828705,\ A_1 = A_5 \approx 0.01995324206.$$

4.3.4. Квадратурная формула Чебышева—Лагерра

Квадратурная формула

$$\int_0^{+\infty} x^\alpha e^{-x} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k)$$

имеет своими узлами корни многочлена Чебышева—Лагерра

$$L_n^{(\alpha)}(x) = (-1)^n x^{-\alpha} e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^{\alpha+n} e^{-x}).$$

Коэффициенты вычисляются по формулам

$$A_k = \frac{n!\Gamma(\alpha + n + 1)}{x_k((L_n^{(\alpha)}(x_k))')^2}.$$

Замечание. Обратите внимание на нормировку многочлена Чебышева-Лагерра !

Приведем узлы и коэффициенты формулы для некоторых n при $\alpha = 0$:

$$n = 4,$$

$$\begin{aligned}
&x_1 \approx 0.3225476896,\ A_1 \approx 0.6031541043,\\
&x_2 \approx 1.7457611012,\ A_2 \approx 0.3574186924,\\
&x_3 \approx 4.5366202969,\ A_3 \approx 0.0388879085,\\
&x_4 \approx 9.3950709123,\ A_4 \approx 0.0005392947;
\end{aligned}$$

$$n = 5,$$

$$\begin{aligned}
&x_1 \approx 0.2635603197,\ A_1 \approx 0.5217556106,\\
&x_2 \approx 1.4134030591,\ A_2 \approx 0.3986668111,\\
&x_3 \approx 3.5964257710,\ A_3 \approx 0.0759424497,\\
&x_4 \approx 7.0858100059,\ A_4 \approx 0.0036117558,\\
&x_5 \approx 12.6408008443,\ A_5 \approx 0.0000233700.
\end{aligned}$$

З а д а ч а

Вычислить интегралы

$$\int_0^{+\infty} \frac{e^{-t}dt}{2+t}, \quad \int_0^{+\infty} \frac{e^{-t}t\ dt}{1-e^{-2t}}$$

при $n = 4, 5$.

Успехов при построении квадратурных формул!