Численное интегрирование

к.ф.-м.н. Уткин Павел Сергеевич [1]
e-mail: utkin@icad.org.ru, pavel_utk@mail.ru
(926) 2766560

Данная лекция доступна по адресу
http://mipt.ru/education/chair/computational_mathematics/study/materials/compmath/lectures/

4 октября 2014, МФТИ, Долгопрудный

[1] Конспект Ивана Цыбулина, email: tsybulin@crec.mipt.ru

Постановка задачи

Для заданной функции $f(x)$ вычислить значение определенного интеграла

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

Желательно, чтобы метод численного интегрирования обладал следующими свойствами:

- *Универсальность.* Функция $f(x)$ может быть задана в виде «черного ящика», как способ вычисления $f(x)$ по данному x.
- *Экономичность.* Количество вычислений функции $f(x)$ по возможности должно быть сведено к минимуму.
- *Хорошая обусловленность.* Неустранимые погрешности Δf в значениях $f(x)$ не должны приводить к значительной итоговой ошибке ΔI.

Приложения

Численное интегрирование может применяться для

- интегрирования функций, известных только в некоторых точках, например, полученных в результате измерений;
- интегрирования сложных выражений, не имеющих элементарных первообразных, либо имеющих слишком громоздкие выражения для них;
- построения методов численного решения уравнений в обыкновенных и частных производных (методы конечных элементов, интегро-интерполяционные методы).

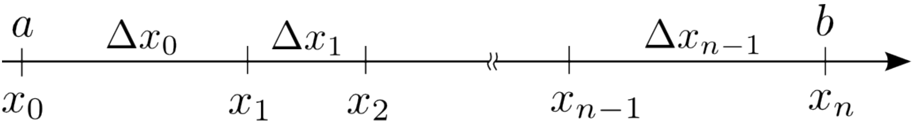
Методы, основанные на определении интеграла

Вспомним, как определяется определенный интеграл Римана. Рассмотрим на отрезке интегрирования $[a, b]$ сетку $a = x_0, x_1, \ldots, x_N = b$. Возьмем от каждого отрезка по одной точке-представителю $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$ и составим интегральную сумму

$$S_N = \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i$$

Значение интеграла определяется как предел при $\max \Delta x_i \to 0$ значений интегральных сумм:

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{\max \Delta x_i \to 0} \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i$$



Формула прямоугольников

Возьмем в качестве приближенного значения интеграла значение некоторой интегральной суммы:

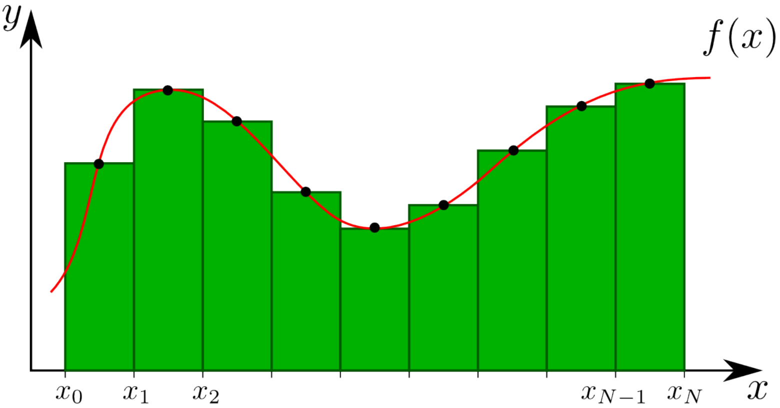
$$\int_a^b f(x)dx \approx S_N = \sum_{i=1}^{N} f(\xi_i)\Delta x_i.$$

Возьмем в качестве ξ_i середину отрезка $[x_{i-1}, x_i]$:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)\Delta x_i.$$

Методы численного интегрирования называют *квадратурными формулами* или просто *квадратурами*. Данный метод называется *формулой средней точки* или *формулой средних прямоугольников*.

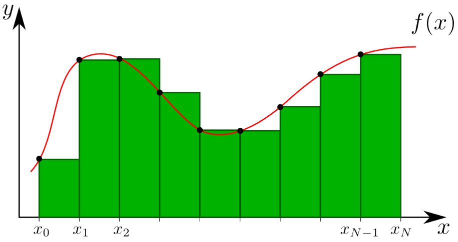
Формула средних прямоугольников

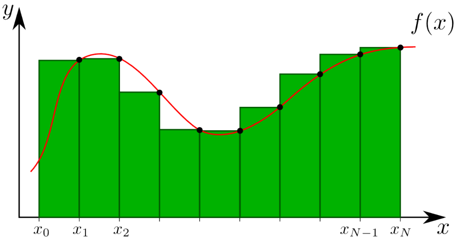


$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)\Delta x_i.$$

Формулы односторонних прямоугольников

Выбор в качестве ξ_i средней точки интервала не принципиален, можно взять, например, левый или правый конец интервала.
Соответствующие формулы называются формулами *левых и правых прямоугольников*.





$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_{i-1})\Delta x_i.$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\Delta x_i.$$

Составные квадратурные формулы

Построенные формулы прямоугольников являются *составными* квадратурными формулами. Квадратурная формула называется составной, если является результатом применения некоторой элементарной квадратурной формулы к каждому интервалу $[x_{i-1}, x_i]$.

Элементарная квадратура	Составная квадратура
$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$	$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)\Delta x_i$
$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(a)$	$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_{i-1})\Delta x_i$
$\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)f(b)$	$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\Delta x_i$

Будем дальше строить только элементарные квадратурные формулы, составные получаются из них тривиально.

Приближение подынтегральной функции

Пусть подынтегральная функция $f(x)$ хорошо приближается некоторой просто интегрируемой функцией $P(x)$. Тогда

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P(x)dx.$$

В качестве функции $P(x)$ могут выступать

- многочлены;
- тригонометрические многочлены;
- экспоненциальные многочлены и тому подобные.

Остановимся на случае, когда $P(x)$ — многочлен. Тогда задача приближения $f(x)$ с помощью функции $P(x)$ может быть решена, например, с помощью алгебраической интерполяции.

Интерполяционные квадратурные формулы

Введем на отрезке $[a, b]$ некоторую сетку

$$\Omega_s = \{a \leqslant x_0 < x_1 < \cdots < x_s \leqslant b\}.$$

Построим на этой сетке интерполяционный многочлен в форме Лагранжа:

$$P_L(x) = \sum_{k=0}^{s} c_k(x) f(x_k),$$

где $c_k(x)$ — это базисные интерполяционные многочлены Лагранжа:

$$c_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{s} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}.$$

Интегрируя $P_L(x)$ по отрезку $[a, b]$, имеем:

$$\int_a^b P_L(x) dx = (b - a) \sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k), \qquad w_k \equiv \frac{1}{b - a} \int_a^b c_k(x) dx$$

Интерполяционные квадратурные формулы

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_L(x)dx = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k), \qquad w_k \equiv \frac{1}{b-a}\int_a^b c_k(x)dx$$

Утверждение 5.1.

Величины w_k не зависят от конкретных значений a, b, x_i, а зависят лишь от относительного расположения узлов x_i.

Доказательство.

Сделаем замену переменных $x = \frac{a+b}{2} + \xi\frac{b-a}{2}$, $\quad \xi \in [-1, 1]$:

$$w_k = \frac{1}{b-a}\int_a^b \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{s} \frac{x-x_i}{x_k-x_i}dx = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{s} \frac{\xi-\xi_i}{\xi_k-\xi_i}d\xi$$

$\square$

Интерполяционные квадратурные формулы

Вид квадратурной формулы

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

является универсальным, и мог быть написан из общих соображений линейности квадратурной формулы по значениям подынтегральной функции (по аналогии с линейностью самого интеграла).
Величины w_k называются *весами квадратурной формулы*. Веса не зависят от конкретного отрезка интегрирования, и могут быть вычислены на некотором «стандартном» отрезке. Обычно используют отрезок $[0, 1]$ или $[-1, 1]$.
Соответственно x_k называются *узлами квадратурной формулы*. Они также обычно приводятся для стандартного отрезка, а для конкретного отрезка $[a, b]$ они получаются линейным преобразованием.

Формулы Ньютона-Котеса

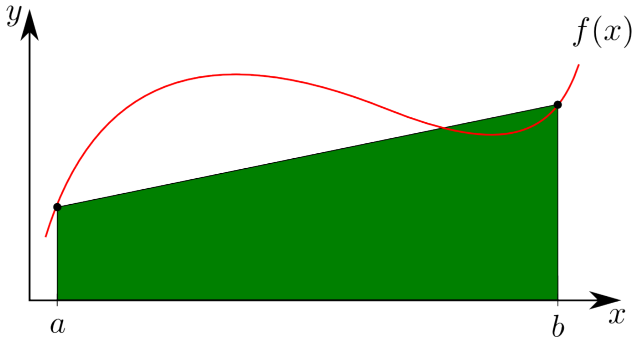
Изучим случай, когда Ω — равномерная сетка:

$$x_i = a + \frac{b-a}{s} i, \quad i = 0, \ldots, s.$$

Интерполяционные квадратурные формулы на такой сетке называются формулами Ньютона-Котеса. Некоторые из них имеют свои названия.

Название	Узлы	Веса	Вид
Трапеций	a, b	$1/2$	$(b-a)\dfrac{f(a)+f(b)}{2}$
Симпсона	a, b $\frac{a+b}{2}$	$1/6$ $2/3$	$(b-a)\dfrac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6}$
Правило 3/8	a, b $\frac{2a+b}{3}, \frac{a+2b}{3}$	$1/8$ $3/8$	$\dfrac{f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{a+2b}{3}\right)+f(b)}{8/(b-a)}$

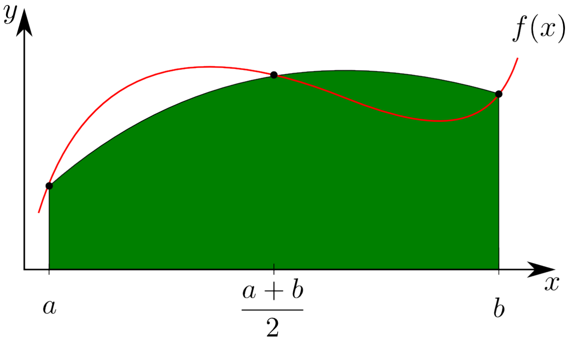
Формула трапеций



Для одного отрезка: $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$

Составная формула: $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1})+f(x_i)}{2}\Delta x_i$

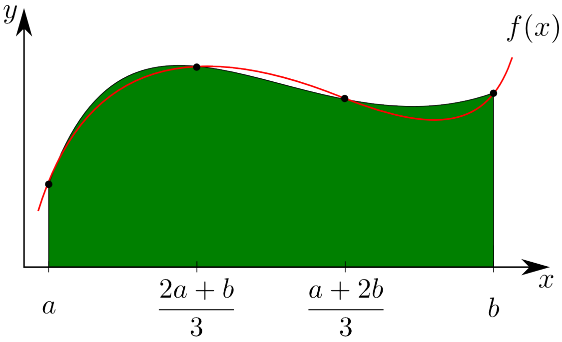
Формула Симпсона



Для одного отрезка: $\int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)}{6}$

Составная формула: $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_{i-1})+4f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}\right)+f(x_i)}{6}\Delta x_i$

Формула «3/8»

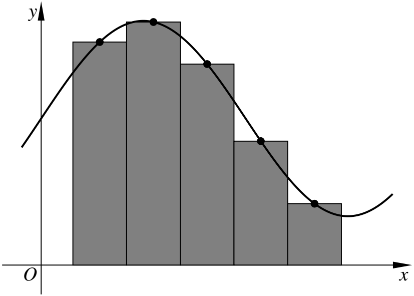


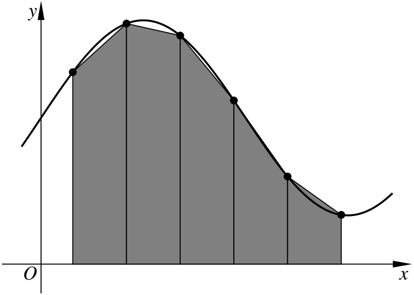
Для одного отрезка: $(b-a)\dfrac{f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{a+2b}{3}\right)+f(b)}{8}$

Составная формула: $\sum\limits_{i=1}^{N}\dfrac{f(x_{i-1})+3f\left(\frac{2x_{i-1}+x_i}{3}\right)+3f\left(\frac{x_{i-1}+2x_i}{3}\right)+f(x_i)}{8}\Delta x_i$

Что точнее?

Попробуйте угадать, какая из двух квадратурных формул точнее:



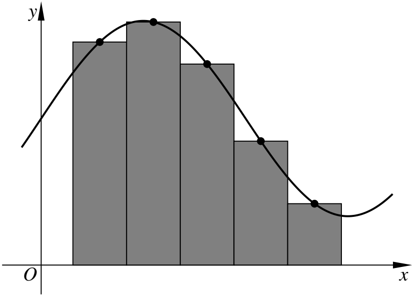


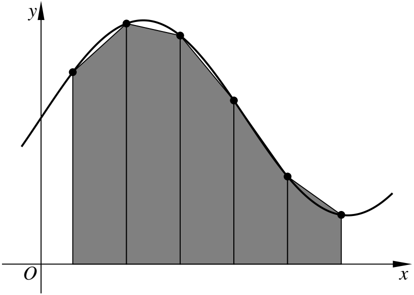
Метод средней точки

Метод трапеций

Что точнее?

Попробуйте угадать, какая из двух квадратурных формул точнее:





Метод средней точки
Ошибка $\sim 1\%$

Метод трапеций
Ошибка $\sim 2\%$

Степень квадратурной формулы

Будем говорить, что квадратурная формула имеет *алгебраическую степень точности* m, если она *точно* интегрирует все многочлены степени не более m, а некоторые многочлены степени $m+1$ уже нет. Например, формула средней точки имеет алгебраическую степень 1: она точна для всех линейных функций

$$\int_a^b (\alpha x + \beta) dx = (b-a)\beta + \alpha \frac{b^2 - a^2}{2} = (b-a)\left(\alpha \frac{a+b}{2} + \beta\right)$$

и не точна для $3x^2$

$$\int_a^b 3x^2 dx = b^3 - a^3 = (b-a)(a^2 + ab + b^2) \neq (b-a)\frac{3}{4}(a^2 + 2ab + b^2)$$

Условия заданной степени

Утверждение 5.2.

Для того, чтобы квадратурная формула имела алгебраическую степень m необходимо и достаточно, чтобы она точно интегрировала функции $1, x, x^2, \ldots, x^m$.

Доказательство.

Достаточность. Пусть $P_m(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \cdots + \alpha_m x^m$

$$(b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k P_m(x) = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k \sum_{r=0}^{m} \alpha_r x^r =$$
$$= \sum_{r=0}^{m} \alpha_r (b-a) \sum_{k=0}^{s} w_k x^r = \sum_{r=0}^{m} \alpha_r \int_a^b x^r dx = \int_a^b P_m(x) dx$$

Необходимость очевидна. □

Условия заданной степени

Условия из утверждения 5.2 позволяют строить квадратурные формулы степени m, решая систему уравнений (для простоты взят отрезок $[-1, 1]$):

$$\begin{cases} 2\sum\limits_{k=0}^{s} w_k = \int_{-1}^{1} dx = 2 \\ 2\sum\limits_{k=0}^{s} x_k w_k = \int_{-1}^{1} x dx = 0 \\ 2\sum\limits_{k=0}^{s} x_k^2 w_k = \int_{-1}^{1} x^2 dx = \dfrac{2}{3} \\ \vdots \\ 2\sum\limits_{k=0}^{s} x_k^m w_k = \int_{-1}^{1} x^m dx = \dfrac{1+(-1)^m}{m+1} \end{cases}$$

Остаточный член квадратурной формулы

Для краткости обозначим

$$I[f] = (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k), \qquad E[f] = \int_a^b f(x)dx - I[f]$$

Функционал $E[f]$ назовем *остаточным членом квадратуры* или просто, *погрешностью квадратуры*.
Если квадратура имеет алгебраическую степень m, то $E[P_m] \equiv 0$.

Остаточный член квадратурной формулы

Для определения $E[f]$ представим $f(x)$ в виде формулы Тейлора с интегральным остаточным членом:

$$f(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \dots + \frac{f^{(m)}(a)}{m!}(x-a)^m + R_m(x)$$

$$R_m(x) = \int_a^x \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!}(x-t)^m dt = \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!}(x-t)_+^m dt,$$

где[2]

$$z_+ = \max(z,0) = \begin{cases} 0, & z \leqslant 0 \\ z, & z > 0 \end{cases}$$

Так как $f(x) - R_m(x)$ является многочленом степени m, он интегрируется квадратурной формулой точно:

$$E[f] = E[R_m]$$

[2] Условимся, что $0^0 = 0$

Остаточный член квадратурной формулы

Остаточный член квадратурной формулы совпадает с погрешностью интегрирования остаточного члена формулы Тейлора.

$$R_m(x) = \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!}(x-t)_+^m dt,$$

$$E[f] = E[R_m] = \int_a^b R_m(x)dx - (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k R_m(x_k).$$

Подставим выражение для $R_m(x)$ и поменяем последовательность интегрирования:

$$E[f] = \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!} \underbrace{\left[\int_a^b (x-t)_+^m dx - (b-a)\sum_{k=0}^{s} w_k (x_k - t)_+^m\right]}_{Q(t)} dt$$

Остаточный член квадратурной формулы

Итак, остаточный член квадратуры выражен в виде

$$E[f] = \int_a^b \frac{f^{(m+1)}(t)}{m!} Q(t) dt,$$

где

$$Q(t) = \int_t^b (x-t)^m dx - (b-a) \sum_{k:\, x_k > t} w_k (x_k - t)^m$$

— функция, зависящая только от конкретного вида квадратурной формулы и ее степени m. Заметим, что $Q(t)$ достаточно вычислить только для стандартного отрезка $\tau \in [-1, 1]$.

$$Q\left(\frac{a+b}{2} + \tau \frac{b-a}{2}\right) = \left(\frac{b-a}{2}\right)^{m+1} q(\tau)$$

$$q(\tau) = \int_\tau^1 (\xi - \tau)^m d\xi - 2 \sum_{k:\, \xi_k > \tau} w_k (\xi_k - \tau)^m$$

Остаточный член квадратурной формулы

Если $Q(t) > 0$ (< 0) на всем отрезке $[a, b]$, то из теоремы об интегральном среднем,

$$E[f] = \frac{f^{(m+1)}(\zeta)}{m!} \int_a^b Q(t)dt = \frac{f^{(m+1)}(\zeta)(b-a)^{m+2}}{2^{m+2}m!} \int_{-1}^{1} q(\tau)d\tau, \quad \zeta \in [a, b]$$

$$|E[f]| \leqslant \frac{M_{m+1}(b-a)^{m+2}}{2^{m+2}m!} \left| \int_{-1}^{1} q(\tau)d\tau \right|$$

Если $Q(t)$ меняет знак, то неулучшаемая оценка выглядит так:

$$|E[f]| \leqslant \frac{M_{m+1}(b-a)^{m+2}}{2^{m+2}m!} \int_{-1}^{1} |q(\tau)|d\tau.$$

Остаточные члены стандартных формул

Формула	m	$q(\tau)$	$E[f]$
Левых прямоугольников	0	$1-\tau$	$\frac{f'(\zeta)(b-a)^2}{2}$
Правых прямоугольников	0	$-1-\tau$	$-\frac{f'(\zeta)(b-a)^2}{2}$
Средней точки	1	$\frac{(1-\lvert\tau\rvert)^2}{2}$	$\frac{f''(\zeta)(b-a)^3}{24}$
Трапеций	1	$\frac{\tau^2-1}{2}$	$-\frac{f''(\zeta)(b-a)^3}{12}$
Симпсона	3	$\frac{(\lvert\tau\rvert-1)^3(1+3\lvert\tau\rvert)}{12}$	$-\frac{f^{IV}(\zeta)(b-a)^5}{2880}$
Правило «3/8»	3	$\begin{cases} \frac{9\tau^4-1}{36}, & \lvert\tau\rvert \leqslant 1/3 \\ \frac{(\lvert\tau\rvert-1)^3\lvert\tau\rvert}{4}, & \lvert\tau\rvert > 1/3 \end{cases}$	$-\frac{f^{IV}(\zeta)(b-a)^5}{6480}$

Остаточный член составной формулы

Для элементарных квадратурных формул степени m остаточный член имеет вид

$$E[f] = \frac{f^{(m+1)}(\zeta)(b-a)^{m+2}}{C} \quad \text{либо} \quad |E[f]| \leqslant \frac{M_{m+1}(b-a)^{m+2}}{C}.$$

Найдем соответствующее выражение для составной квадратурной формулы с равномерным шагом $\Delta x_i = h = \text{const}$:

$$\tilde{E}[f] = \sum_{i=1}^{N} \frac{f^{(m+1)}(\zeta_i)h^{m+2}}{C} = (b-a)\frac{f^{(m+1)}(\zeta)h^{m+1}}{C}, \quad \zeta \in [a,b].$$

$$|\tilde{E}[f]| \leqslant \sum_{i=1}^{N} \frac{M_{m+1}\Delta x_i^{m+2}}{C} \leqslant \frac{M_{m+1}\max\Delta x_i^{m+1}}{C}\sum_{i=1}^{N}\Delta x_i = (b-a)\frac{M_{m+1}h^{m+1}}{C}.$$

Последнее выражение верно и для неравномерной сетки, если $h \equiv \max\Delta x_i$ — максимальный шаг сетки.

Порядок сходимости

Теперь ясна связь между алгебраическим порядком квадратурной формулы и порядком сходимости:

Утверждение 5.3.

Для составной квадратурной формулы алгебраической степени m ее остаточный член стремится к нулю как $O(h^{m+1})$, где h — шаг сетки составной формулы. Иначе говоря, формула имеет *порядок сходимости* $m+1$.

Недостаточная гладкость

Если $m+1$-я производная функции $f(x)$ не ограничена, остаточный член квадратурной формулы m-ой степени может стремиться к нулю медленнее, чем $O(h^{m+1})$. Остаточный член может быть найден тем же способом, но с заменой m на $m' < m$, где $m'+1$ — число ограниченных производных у $f(x)$.

Оценки остаточного члена при недостаточной гладкости

Построим для формулы Симпсона ($m = 3$) оценку остаточного члена для функции $f(x)$ только с тремя ($m' = 2$) ограниченными производными. Построим функцию $q(\tau)$:

$$q(\tau) = \int_{\tau}^{1} (\xi - \tau)^{m'} d\xi - 2 \sum_{xi_k > \tau} w_k (\xi_k - \tau)^{m'} =$$

$$= \frac{(1-\tau)^3}{3} - \frac{1}{3}(1-\tau)^2 - \frac{4}{3}(-\tau)_+^2 = -\frac{\tau(1-\tau)^2}{3} - \frac{1}{3}(|\tau| - \tau)^2 =$$

$$= -\tau \frac{(|\tau| - 1)^2}{3}$$

Функция $q(\tau)$ не знакопостоянна на $[-1, 1]$, и, следовательно,

$$|E[f]| \leq \frac{M_3 (b-a)^4}{2^4 \cdot 2!} \int_{-1}^{1} |q(\tau)| d\tau = \frac{M_3 (b-a)^4}{576}$$

Оценки остаточного члена при недостаточной гладкости

Построим для формулы Симпсона ($m = 3$) оценку остаточного члена для функции $f(x)$ только с двумя ($m' = 1$) ограниченными производными. Построим функцию $q(\tau)$:

$$q(\tau) = \int_{\tau}^{1} (\xi - \tau)^{m'} d\xi - 2 \sum_{xi_k > \tau} w_k (\xi_k - \tau)^{m'} =$$

$$= \frac{(1-\tau)^2}{2} - \frac{1}{3}(1-\tau) - \frac{4}{3}(-\tau)_+ = \frac{(1-3\tau)(1-\tau)}{6} - \frac{2}{3}(|\tau| - \tau) =$$

$$= \frac{1}{6} + \frac{\tau^2}{2} - 2\frac{|\tau|}{3}$$

Функция $q(\tau)$ не знакопостоянна на $[-1, 1]$, и, следовательно,

$$|E[f]| \leq \frac{M_2 (b-a)^3}{2^3 \cdot 1!} \int_{-1}^{1} |q(\tau)| d\tau = \frac{M_2 (b-a)^3}{81}$$

Апостериорные оценки

- Построенные формулы и оценки для остаточного члена интегрирования являются априорными[3]. На практике оценить максимум нужной производной бывает сложно или вообще невозможно (например, функция $f(x)$ — «черный ящик»).
- Широкое распространение получили способы оценить ошибку прямо в процессе вычислений. Оценки такого типа называются апостериорными[4].
- Пусть I^* — точное значение интеграла, а I_h — приближенное значение, вычисленное на сетке с шагом h по квадратурной формуле порядка p (то есть степени $p-1$):

$$I^* = I_h + E[f] = I_h + (b-a)\frac{f^{(p)}(\zeta)h^p}{C}$$

[3] лат. a priori — «от предшествующего», оценки известны до вычислений.
[4] лат. a posteriori — «из последующего»

Правило Рунге

Сделаем предположение, что в выражении

$$I^* = I_h + E[f] = I_h + (b-a)\frac{f^{(p)}(\zeta)h^p}{C}$$

точка ζ слабо зависит от h:

$$I^* = I_h + ch^p + o(h^p),$$

где c — константа и не зависит от h. Величина

$$\varepsilon_h = ch^p$$

может считаться главным членом ошибки (то есть ошибкой с точностью до бесконечно малой по h поправки).

Правило Рунге

Вычислим интеграл несколько раз на серии сгущающихся сеток с шагами $h, h/2, h/4, \ldots$:

$$
\begin{aligned}
I^* &= I_h + \varepsilon_h + o(h^p) = I_h + ch^p + o(h^p) \\
I^* &= I_{h/2} + \varepsilon_{h/2} + o(h^p) = I_{h/2} + 2^{-p}ch^p + o(h^p) \\
I^* &= I_{h/4} + \varepsilon_{h/4} + o(h^p) = I_{h/4} + 2^{-2p}ch^p + o(h^p) \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

Заметим, что разность приближенных значений интегралов позволяет оценить разность главных членов соответствующих погрешностей:

$$
\Delta_{h/2} \equiv I_{h/2} - I_h = \varepsilon_h - \varepsilon_{h/2} + o(h^p) = (2^p - 1)\varepsilon_{h/2} + o(h).
$$

Правило Рунге

Правило Рунге позволяет просто оценить главный член погрешности вычислении интеграла на мелкой сетке:

$$\varepsilon_{h/2} = \frac{I_{h/2} - I_h}{2^p - 1} + o(h).$$

Использование правила Рунге требует осторожности. Требуется контролировать что *фактический порядок сходимости* численного метода соответствует номинальному p. Фактический порядок p^* может в силу некоторых обстоятельств (например, недостаточная гладкость $f(x)$) быть меньше номинального порядка сходимости p. Простейший способ контроля — следить за выполнением соотношения

$$p^* \equiv \log_2 \frac{\Delta_h}{\Delta_{h/2}} \approx p.$$

Использование правила Рунге, пример 1

Интегрирование методом Симпсона $p = 4$ функции $\frac{1}{\sqrt{x}}$ на $[1, 9]$.

N	I_h	$\Delta_h = I_h - I_{2h}$	$\varepsilon_h = \Delta_h/(2^4 - 1)$	p^*
40	4.0000010223489	$\star$	$\star$	$\star$
80	4.0000000647720	$-9.57577 \cdot 10^{-7}$	$-6.38385 \cdot 10^{-8}$	$\star$
160	4.0000000040624	$-6.07096 \cdot 10^{-8}$	$-4.04731 \cdot 10^{-9}$	3.98
320	4.0000000002541	$-3.80827 \cdot 10^{-9}$	$-2.53885 \cdot 10^{-10}$	3.99
640	4.0000000000159	$-2.38246 \cdot 10^{-10}$	$-1.58831 \cdot 10^{-11}$	4.00
1280	4.0000000000010	$-1.48832 \cdot 10^{-11}$	$-9.92214 \cdot 10^{-13}$	4.00
2560	4.0000000000001	$-8.91731 \cdot 10^{-13}$	$-5.94487 \cdot 10^{-14}$	4.06
5120	4.0000000000000	$-1.16351 \cdot 10^{-13}$	$-7.75676 \cdot 10^{-15}$	2.94
10240	3.9999999999999	$-1.28342 \cdot 10^{-13}$	$-8.55612 \cdot 10^{-15}$	-0.14

Точное значение $I = \int_1^9 \frac{dx}{\sqrt{x}} = 4.$

Использование правила Рунге, пример 2

Интегрирование методом Симпсона $p = 4$ функции $3 - \sqrt{x}$ на $[0, 9]$.

N	I_h	$\Delta_h = I_{2h} - I_h$	$\varepsilon_h = \Delta_h/(2^4 - 1)$	p^*
40	9.0030633904588	$\star$	$\star$	$\star$
80	9.0010830724831	$-1.98032 \cdot 10^{-3}$	$-1.32021 \cdot 10^{-4}$	$\star$
160	9.0003829239736	$-7.00149 \cdot 10^{-4}$	$-4.66766 \cdot 10^{-5}$	1.50
320	9.0001353840708	$-2.47540 \cdot 10^{-4}$	$-1.65027 \cdot 10^{-5}$	1.50
640	9.0000478654974	$-8.75186 \cdot 10^{-5}$	$-5.83457 \cdot 10^{-6}$	1.50
1280	9.0000169230090	$-3.09425 \cdot 10^{-5}$	$-2.06283 \cdot 10^{-6}$	1.50
2560	9.0000059831870	$-1.09398 \cdot 10^{-5}$	$-7.29321 \cdot 10^{-7}$	1.50
5120	9.0000021153757	$-3.86781 \cdot 10^{-6}$	$-2.57854 \cdot 10^{-7}$	1.50
10240	9.0000007478989	$-1.36748 \cdot 10^{-6}$	$-9.11651 \cdot 10^{-8}$	1.50

Точное значение $I = \int_0^9 3 - \sqrt{x} dx = 9.$

Степень интерполяционных формул

Утверждение 5.4

Формулы интерполяционного типа, построенные по $s+1$ узлу гарантированно будут иметь алгебраическую степень не менее s.

Доказательство.

На сетке из $s+1$ узла интерполяция точно восстанавливает многочлены до степени s включительно. Следовательно, и квадратурная формула будет интегрировать их точно. □

Формулы Ньютона-Котеса с нечетным количеством узлов имеют степень на 1 выше, чем гарантируется утверждением 5.4:

Формула	Количество узлов, $s+1$	Алгебраическая степень, m
Трапеций	2	$1 = s$
Симсона	3	$3 > s$
Правило «3/8»	4	$3 = s$

Условия повышения степени

Пусть $I[f] = \sum_{k=0}^{s} w_k f(x_k)$ — интерполяционная квадратурная формула.

Рассмотрим произвольный многочлен $P(x)$, степени выше s. Разделим его с остатком на многочлен $\omega(x) = \prod_{k=0}^{s}(x - x_k)$:

$$P(x) = V(x)\omega(x) + Z(x).$$

Многочлен $Z(x)$ имеет степень не выше s, и, следовательно, интегрируется точно $E[Z] = 0$. Тогда ошибка интегрирования $P(x)$ составляет

$$E[P] = E[V\omega] = \int_a^b V(x)\omega(x)dx - I[V\omega] = \int_a^b V(x)\omega(x)dx$$

Квадратурная формула для $V(x)\omega(x)$ дает 0 поскольку эта функция обнуляется во всех узлах x_k.

Условия повышения степени

Для многочлена

$$P(x) = V(x)\omega(x) + Z(x)$$

ошибка квадратурной формулы составляет

$$E[P] = \int_a^b V(x)\omega(x)dx.$$

Например, для формулы Симпсона последний интеграл обнуляется, если $V(x) = V$ — константа

$$\int_a^b V(x)(x-a)(x-b)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)dx =$$

$$= V\int_a^b (x-a)(x-b)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)dx = 0$$

Стало быть, формула Симпсона будет точной для всех многочленов, которые при делении на $\omega(x)$ дают в частном константу, то есть для всех многочленов степени $s+1$.

Условия повышения степени

Причина повышения порядка формулы Симпсона — в удачном расположении узлов квадратуры.

Задача

Разместить узлы $x_k, \quad k = 0, \ldots, s$ квадратуры так, чтобы интеграл

$$\int_a^b V(x)\omega(x)dx$$

обнулялся для произвольного многочлена $V(x)$ как можно большей степени d.

Если удастся так расположить узлы квадратуры, то она будет иметь алгебраический порядок $m = s + d + 1$.

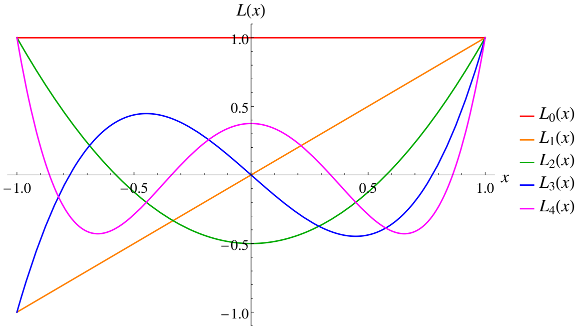
Ортогональные многочлены

Построим такой многочлен $\omega(x)$, который был бы ортогонален многочленам $1, x, \ldots, x^s$ в смысле

$$(x^r, \omega(x)) \equiv \int_a^b x^r \omega(x) dx = 0, \qquad r = 0, \ldots, s$$

Для построения такого многочлена $\omega(x)$ можно использовать процесс ортогонализации Грама-Шмидта для набора функций $1, x, \ldots, x^{s+1}$. В результате ортогонализции из многочлена x^{s+1} получится многочлен $\omega(x) = x^{s+1} + \ldots$, ортогональный всем функциям $1, x, \ldots, x^s$, а следовательно, и любому многочлену $V(x)$ степени $\deg V \leqslant s$.

Многочлены Лежандра



Многочлены Лежандра $L_m(x)$ ортогональны

$$\int_{-1}^{1} L_m(x) L_n(x) dx = \frac{2}{n+1}\delta_{nm}.$$

Каждый многочлен $L_m(x)$ имеет m различных действительных корней на отрезке $[-1, 1]$.

Многочлены Лежандра

Построенный многочлен $\omega(x) = C_{s+1} L_{s+1} \left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right)$, где C_{s+1} — некоторый несущественный нормировочный множитель.
Использование в качестве узлов квадратурной формулы корней многочлена Лежандра позволяет добиться обнуления всех интегралов

$$\int_a^b V(x)\omega(x)dx$$

при $\deg V(x) \leqslant s$, то есть повысить степень квадратуры до $2s+1$, то есть почти вдвое по сравнению с формулами с произвольным выбором узлов.
Для $\deg V(x) = s+1$ никакой выбор узлов не обеспечит обнуления интеграла (достаточно взять $V(x) = \omega(x)$). Стало быть, максимальная степень квадратуры с $s+1$ узлом — $2s+1$.

Формулы Гаусса

Формулами Гаусса называются интерполяционные квадратурные формулы, имеющие максимальную алгебраическую степень для данного числа узлов. Формула Гаусса с K узлами имеет степень $2K-1$ и порядок $2K$. Формулы Гаусса обычно приводят для стандартного отрезка $[-1,1]$:

Число узлов, K	Узлы x_k	Веса w_k	$E[f]$
1	0	1	$\frac{f''(\zeta)(b-a)^3}{24}$
2	$\pm\frac{1}{\sqrt{3}}$	$1/2$	$\frac{f^{IV}(\zeta)(b-a)^5}{4320}$
3	0 $\pm\frac{\sqrt{15}}{5}$	$4/9$ $5/18$	$\frac{f^{VI}(\zeta)(b-a)^7}{2016000}$

Простейшая формула Гаусса совпадает с формулой средней точки. Узлы формул Гаусса не содержат крайних точек отрезка интегрирования.

Список использованных источников

1. *Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков.* Численные методы. 3-е издание, Москва. БИНОМ, Лаборатория знаний, 2004, 636 с.
2. *Н.Н. Калиткин, Е.А. Альшина.* Численные методы: в 2 кн. Кн. 1 Численный анализ. Москва, Издательский центр «Академия», 2013, 304 с.
3. *И.П. Мысовских.* Интерполяционные кубатурные формулы. Москва. Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1981, 336 с.