Глава 2
Приближенное вычисление интегралов

§1 Интерполяционные квадратурные формулы (ИКФ)

Основной способ приближенного вычисления интегралов — формулы механических квадратур.

Определение. *Формулой механических квадратур* или *квадратурной формулой* называется приближенная формула

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

Здесь *узлы* x_k и *коэффициенты (веса)* A_k не зависят от интегрируемой функции (формула — набор узлов и коэффициентов).

Все узлы считаются различными, и чаще всего $x_k \in [a, b]$, но делать такое предположение, если не оговорено противное, мы не будем.

Более общее понятие — формула механических квадратур с весом $w(x)$. Это

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k). \tag{2}$$

Применения — много интегралов от функций с одним множителем $w(x)$ и выделение стандартных особенностей. Формулу (1) можно считать частным случаем (2) при $w(x) \equiv 1$. Поэтому в этом параграфе рассматривается (2).

Будем обозначать квадратурную сумму формулы (2) через $Q_n(f)$, а погрешность формулы (остаток) через $R_n(f)$:

$$Q_n(f) = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k), \quad R_n(f) = \int_a^b w(x)f(x)dx - Q_n(f).$$

Заметим, что Q_n и R_n обладают свойством линейности:

$$Q_n(a_1 f_1 + a_2 f_2) = a_1 Q_n(f_1) + a_2 Q_n(f_2)$$

$$R_n(a_1 f_1 + a_2 f_2) = a_1 R_n(f_1) + a_2 R_n(f_2).$$

Простейший способ построения (2): произвольно выбираются узлы и значение интеграла считается приближенно равным интегралу от интерполяционного полинома функции f, построенного по этим узлам. Так полученные формулы называются интерполяционно-квадратурными (ИКФ).

Определение. Формула (2) называется ИКФ, если

$$A_k = \int_a^b w(x) l_k(x) dx = \int_a^b w(x) \frac{\omega(x) dx}{(x - x_k)\omega'(x_k)}. \tag{3}$$

Здесь $\omega(x) = (x - x_1) \dots (x - x_n)$.

Таким образом, ИКФ полностью задается указанием ее узлов.

Определение. Говорят, что формула (2) имеет алгебраическую степень точности (АСТ) d, если она точна для всех алгебраических полиномов $p_d \in \mathbb{P}_d$ $(R_n(p_d) = 0)$ и существует хотя бы один полином $p_{d+1} \in \mathbb{P}_{d+1}$, для которого она не точна $(R_n(p_{d+1}) \neq 0)$.

Замечание. Очевидно, что для того чтобы (2) имела АСТ d, необходимо и достаточно, чтобы она была точна для x^j при $j = 0, \dots, d$ и не была точна для x^{d+1} $(R_n(x^k) = 0$ при $k = 0, \dots, d$, $R_n(x^{d+1}) \neq 0)$.

Теорема 1. Для того чтобы формула (2) была ИКФ необходимо и достаточно, чтобы она имела АСТ $d \geq n - 1$.

Доказательство. 1) Необходимость. Произвольно взятый полином p_d представим в виде интерполяционного по узлам x_k и воспользуемся формулой (3).

2) Достаточность. Если АСТ формулы (2) $d \geq n - 1$, то она точна, в частности, для $l_k(x)$, откуда формулы (3). ∎

Замечание. Формула (2) может иметь АСТ $d > n - 1$, но если вес $w(x)$ сохраняет на $[a, b]$ знак, то $d \leq 2n - 1$ (формула не точна для $\omega^2(x)$).

Обозначим через $[A, B]$ наименьший промежуток, содержащий $[a, b]$ и все узлы x_k.

Определение. Говорят, что ФМК *имеет представление остатка в форме Лагранжа*, если существуют такое натуральное m и такая постоянная C, что для любой m раз непрерывно дифференцируемой на $[A, B]$ функции $f(x)$ найдется такая точка $\xi \in [A, B]$, что $R_n(f) = Cf^{(m)}(\xi)$.

Замечание. ФМК может и *не иметь* представления остатка в форме Лагранжа.

Теорема 2. Если ФМК имеет представление остатка в форме Лагранжа, то $m = d + 1$.

Доказательство очевидно.

Теорема 3. Если АСТ формулы (2) есть d, то для любой $f \in C[A, B]$ выполняется оценка

$$|R_n(f)| \leq \left[\int_a^b |w(x)| dx + \sum_{k=0}^{n} |A_k| \right] E_d(f), \qquad (4)$$

где $E_d(f)$ — наилучшее приближение функции f полиномами степени d на промежутке $[A, B]$.

Доказательство. Вычесть из f и прибавить ее полином наилучшего приближения, для которого формула точна. ■

Будем считать, что дана последовательность квадратурных формул

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

(квадратурный процесс). АСТ формулы с номером n считаем равной d_n и сохраним для этих формул обозначения $Q_n(f)$ и $R_n(f)$.

Следствие. Если все узлы $x_k^n \in [a, b]$, $\sum_{k=1}^{n} |A_k^n| \leq C$ и $d_n \to \infty$, то для любой $f \in C[a, b]$

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

З а м е ч а н и е. Если $d \geq 0$, то ввиду равенства

$$\sum_{k=0}^{n} A_k^n = \int_a^b w(x)dx$$

в случае $w(x) \geq 0$ и $A_k^n > 0$ оценку (4) можно переписать в виде

$$|R_n(f)| \leq 2 \int_a^b w(x)dx\, E_d(f).$$

Пусть $w(x) \geq 0$. Если среди коэффициентов A_k есть отрицательные, то

$$\sum |A_k| > \int_a^b w(x)dx,$$

и оценка (4) хуже, чем в случае положительных коэффициентов. Отсюда — требование положительности коэффициентов. Это существенно еще в одном отношении. Если значения $f(x_k)$ мы вычисляем с погрешностями ε_k, про которые известно лишь, что $|\varepsilon_k| \leq \varepsilon$, то вызванная этими погрешностями ошибка в квадратурной сумме оценивается через $\sum_{k=0}^{n} |A_k|\varepsilon$, причем эта оценка неулучшаема. Формулами, у которых среди коэффициентов имеются отрицательные, обычно не пользуются.

Задача 1. Пусть АСТ формулы (2) есть d. Найдется ли полином p_{d+2} степени $d+2$, для которого она точна?

Задача 2. Пусть $w(x) \geq 0$ и k узлов формулы (2) принадлежат (a, b), а остальные лежат вне этого промежутка. Показать, что тогда АСТ $d \leq n + k - 1$.

Задача 3. Показать, что квадратурная формула

$$\int_0^1 f(x)dx \approx f(a),$$

где $a \in (0, 1)$ и $a \neq 1/2$, не имеет представления остатка в форме Лагранжа.

§2 Квадратурные формулы с постоянным весом. Формулы Котеса

Пусть квадратурную формулу

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

мы хотим использовать для вычисления интеграла по промежутку $[c, d]$. Сделав в интеграле по $y \in [c, d]$ линейную замену переменной интегрирования $y = \frac{d-c}{b-a}(x-a)+c$ и применив для вычисления полученного интеграла по $[a, b]$ квадратурную формулу (1), мы придем к приближенному равенству (квадратурной формуле)

$$\int_c^d g(y)dy \approx \sum_{k=1}^{n} B_k g(y_k) = Q_n^2(g), \tag{2}$$

где

$$B_k = \frac{d-c}{b-a}A_k, \qquad y_k = \frac{d-c}{b-a}(x_k - a) + c. \tag{3}$$

Определение. ФМК (2) называется *подобной* формуле (1), если узлы и коэффициенты этих формул связаны равенствами (3)

Отметим основные свойства ФМК с постоянным весом и, в частности, свойства подобных формул.

$\langle 1 \rangle$ Если формула (1) точна для постоянных (АСТ$\geq$ 0), то $\sum A_k = b - a$.

$\langle 2 \rangle$ Если формула (2) подобна (1), то и (1) подобна (2).

$\langle 3 \rangle$ АСТ подобных формул совпадают.

Свойства $\langle 1 \rangle$ - $\langle 3 \rangle$ очевидны.

$\langle 4 \rangle$ Если одна из подобных формул есть ИКФ, то и другая тоже.

Это свойство немедленно следует из $\langle 3 \rangle$ и теоремы 1 предыдущего параграфа. Таким образом, если *узлы* интерполяционных квадратурных формул (1) и (2) связаны формулой (3), то эти формулы подобны — соотношения (3) для коэффициентов выполняются автоматически.

$\langle 5 \rangle$ Если (1) есть ИКФ и все ее узлы расположены симметрично (при всех k $x_k + x_{n+1-k} = a + b$), то $A_k = A_{n+1-k}$.

Предыдущее свойство позволяет доказывать это лишь для промежутка $[-1, 1]$, а в этом случае достаточно сослаться на очевидное равенство для фундаментальных полиномов интерполяции в случае симметрично расположенных узлов: $l_k(x) = l_{n+1-k}(-x)$.

$\langle 6 \rangle$ Если узлы ИКФ расположены симметрично, то ее АСТ есть нечетное число.

Действительно, сводя задачу опять к случаю промежутка $[-1, 1]$ и используя предыдущее свойство, легко заметить, что наша формула точна для всех нечетных полиномов.

$\langle 7 \rangle$ Если ФМК (1) имеет представление остатка в форме Лагранжа: $R_n^1(f) = C_1 f^{(m)}(\xi)$, то и (2) имеет такое представление: $R_n^2(g) = C_2 g^{(m)}(\eta)$, где

$$C_2 = \left(\frac{d-c}{b-a}\right)^{m+1} C_1.$$

Действительно, полагая $f(x) = g\left(\frac{d-c}{b-a}(x-a)+c\right)$, имеем

$$\int_c^d g(y)dy = \frac{d-c}{b-a}\int_a^b f(x)dx = \frac{d-c}{b-a}\big[Q_n^1(f) + R_n^1(f)\big] =$$
$$= Q_n^2(g) + \frac{d-c}{b-a} C_1 f^{(m)}(\xi) = Q_n^2(g) + \left(\frac{d-c}{b-a}\right)^{m+1} C_1 g^{(m)}(\eta),$$

где $\eta = \frac{d-c}{b-a}(\xi - a) + c$.

$\langle 8 \rangle$ Если АСТ подобных формул (1) и (2) есть μ и $R_n^1(x^{\mu+1}) = r$, то

$$R_n^2(y^{\mu+1}) = \left(\frac{d-c}{b-a}\right)^{\mu+2} r.$$

Достаточно доказать это свойство при $[a, b] = [0, 1]$. Ввиду линейности R_n^2 имеем:

$$R_n^2(y^{\mu+1}) = R_n^2\big((y-c)^{\mu+1}\big) =$$
$$(d-c)\left[\int_0^1 (d-c)^{\mu+1} x^{\mu+1} dx - \sum_{k=1}^n (d-c)^{\mu+1} x_k^{\mu+1}\right] =$$
$$(d-c)^{\mu+2} R_n^1(x^{\mu+1}).$$

Прежде чем переходить к конкретным ФМК с постоянным весом, докажем лемму, которая полезна при выводе представления остаточных членов.

Лемма. Пусть $q(x)$ – интегрируемая функция, причем $q(x) \geq 0$, функция $g(x)$ непрерывна на $[a,b]$ и $\xi(x)$ – произвольное (без каких-либо предположений о непрерывности) отображение промежутка $[a,b]$ в себя. Если написанный ниже интеграл I существует, то найдется такая точка $\eta \in [a,b]$, что

$$I = \int_a^b q(x) g\big(\xi(x)\big) dx = \int_a^b q(x) dx \cdot g(\eta).$$

Доказательство. Положим $M = \max g(x)$, $m = \min g(x)$. Тогда

$$m \leq I \Big/ \int_a^b q(x) dx = G \leq M.$$

Будучи непрерывной, функция g принимает в некоторой точке η значение, равное G. ■

Формулой средних прямоугольников называется ИКФ с единственным узлом — серединой промежутка интегрирования:

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right) \tag{4}$$

Из самого определения видно, что формулы средних прямоугольников для всех промежутков подобны. Легко видеть, что АСТ этих формул $d \geq 1$ (они точны для постоянных, являются ИКФ и “узел расположен симметрично”). Представление остатка получим сначала для промежутка $[-1,1]$. Для $f \in C^{(2)}[-1,1]$, используя лемму, имеем:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \int_{-1}^1 \big(f(0) + x f'(0) + \frac{1}{2} x^2 f''(\xi(x))\big) dx = 2f(0) + \frac{1}{3} f''(\eta).$$

Согласно свойству $\langle 7 \rangle$ в случае промежутка $[a,b]$ остаточный член (4) имеет представление $R(f) = \frac{(b-a)^3}{24} f''(\eta)$. Отсюда следует, что АСТ формулы прямоугольников есть 1.

Формулами Котеса называются ИКФ, узлами которых являются концы промежутка интегрирования и точки деления промежутка на $(n-1)$ равных частей (число узлов n). Формула полностью определяется промежутком и числом узлов. Все формулы Котеса с одним числом узлов подобны. Для АСТ d согласно теореме 1 из §1 и свойству $\langle 6 \rangle$ получаются оценки: при четном n $d \geq n-1$, при нечетном — $d \geq n$. В действительности в этих неравенствах можно поставить знак равенства (без доказательства).

Обратимся к частным случаям формул Котеса. Начнем с $n = 2$. Узлы этой формулы — a и b, и поскольку коэффициенты равны ($\langle 5 \rangle$) и в сумме дают $b-a$, то сама она имеет вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}\big[f(a)+f(b)\big]$$

и ввиду очевидного геометрического смысла называется *формулой трапеций*. Представление остатка этой формулы получим сначала для $[0,1]$. Для $f \in C^{(2)}[0,1]$, используя теорему о представлении остаточного члена интерполяции, имеем

$$f(x) = P_1(x) - x(1-x)f''(\xi)/2,$$

где P_1 — интерполяционный полином функции f, построенный по узлам 0 и 1. Поэтому, опять используя лемму и равенство

$$Q_2(f) = Q_2(P_1) = \int_a^b P_1(x)dx,$$

имеем

$$R_2(f) = \int_0^1 f(x)dx - Q_2(f) = -\int_0^1 \frac{x(1-x)}{2} f''(x(\xi))dx = -\frac{1}{12}f''(\eta),$$

откуда для произвольного промежутка

$$R_2(f) = -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta).$$

Этим, в частности, доказано равенство $d = 1$ для формулы трапеций.

При $n = 3$ формула Котеса называется *формулой Симпсона.* Построим ее сначала для промежутка $[-1, 1]$. В этом случае узлы формулы -1, 0 и 1, а коэффициенты удовлетворяют равенствам: $A_1 = A_3$, $A_1 + A_2 + A_3 = 2$. Поскольку

$$A_2 = \int_{-1}^{1} l_2(x)dx = \int_{-1}^{1} (1 - x^2)dx = \frac{4}{3},$$

то $A_1 = A_3 = 1/3$ и для произвольного промежутка формула Симпсона выглядит так:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6}\left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right].$$

Выведем представление остаточного члена сначала для $[-1, 1]$. Для функции $f \in C^{IV}[-1, 1]$ построим эрмитовский интерполяционный полином $P_3(x)$ по узлам -1 и 1 первой кратности и 0 — второй. Тогда

$$f(x) = P_3(x) + \frac{1}{4!}\Omega(x)f^{IV}(\xi), \quad \Omega(x) = -x^2(1 - x^2),$$

и так как

$$Q_3(f) = Q_3(P_3) = \int_{-1}^{1} P_3(x)dx,$$

то

$$R_3(f) = -\frac{1}{4!}\int_{-1}^{1} x^2(1 - x^2)f^{IV}(\xi(x))dx = -\frac{1}{90}f^{IV}(\eta)$$

и в случае произвольного промежутка $[a, b]$

$$R_3(f) = -\frac{1}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{IV}(\eta).$$

Этим доказано и равенство $d = 3$ для формулы Симпсона.

Приведем еще без вывода формулу Котеса при $n = 4$, называемую *правилом 3/8 Ньютона*:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{8}\left(f(a) + 3f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + 3f\left(\frac{a+2b}{3}\right) + f(b)\right),$$

$$R_4(f) = -\frac{2}{405}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f^{IV}(\eta).$$

Начиная с $n = 9$ среди коэффициентов формул Котеса появляются отрицательные, и при $n \to \infty$ сумма абсолютных величин коэффициентов быстро стремится к бесконечности. Поэтому при больших n формулы Котеса не находят применения.

Задача. Показать, что если ИКФ имеет АСТ, равную $n-1$ (n — число узлов) и имеет представление остатка в форме Лагранжа, то в этом представлении

$$C = \frac{1}{n!}\int_a^b \omega(x)dx, \qquad \omega(x) = \prod(x - x_k).$$

§3 Составные формулы

Рассматривается ситуация, когда для вычисления интеграла

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

мы хотим применить формулу

$$\int_0^1 g(x)dx = \sum_{j=1}^{n} A_j g(x_j) + R(g) = Q(g) + R(g), \tag{2}$$

узлы которой принадлежат промежутку интегрирования: $x_j \in [0,1]$, но формула, подобная (2), не дает нужной точности. Тогда можно разбить промежуток $[a,b]$ на N равных частей и к интегралу по каждой части применить формулу, подобную (2). Это приводит нас к формуле

$$I = h\sum_{k=0}^{N-1}\sum_{j=1}^{n} A_j f(y_k + hx_j) + R_N(f) = Q_N(f) + R_N(f), \tag{3}$$

где $h = (b-a)/N$, $y_k = a + kh$. Формула (3) называется *составной или большой*, а формула (2) по отношению к ней *исходной*. Составная формула содержит Nn узлов, если хотя бы одна из точек 0, 1 не является узлом для формулы (2), и $N(n-1)+1$ узел в противном случае.

Основные свойства составных формул.

$\langle 1 \rangle$ Остаток $R_N(f)$ формулы (3) представим в виде

$$R_N(f) = \sum_{k=0}^{N-1} R_N^k(f), \quad R_N^k(f) = \int_{y_k}^{y_{k+1}} f(x)dx - h\sum_{j=1}^{n} A_j f(y_k + hx_j),$$

причем $R_N^k(f)$ — это остатки квадратурных формул, подобных (2).

$\langle 2 \rangle$ Если (2) имеет АСТ d и $R(x^{d+1}) = r$ (очевидно, что $r \neq 0$), то $R_N(x^{d+1}) = (b-a)h^{d+1}r$.

Доказательство. Воспользоваться предыдущим свойством и свойством $\langle 8 \rangle$ подобных формул (§2).

$\langle 3 \rangle$. АСТ формул (2) и (3) совпадают.

Доказательство. Очевидно, что АСТ формулы (3) не меньше, чем формулы (2). Обратное немедленно вытекает из предыдущего свойства. ■

$\langle 4 \rangle$. Если формула (2) имеет представление остатка в форме Лагранжа:

$$R(g) = Cg^{(m)}(\xi),$$

то и (3) имеет такое представление:

$$R_N(f) = C_N f^{(m)}(\eta),$$

где

$$C_N = C(b-a)h^m.$$

Доказательство. Применяя свойство $\langle 7 \rangle$ подобных формул, имеем

$$\begin{aligned} R_N^k(f) =& h^{m+1} C f^{(m)}(\eta_k), \quad \eta_k \in (y_k, y_{k+1}), \\ R_N(f) =& h^{m+1} C \sum_{k=0}^{N-1} f^{(m)}(\eta_k), \end{aligned}$$

и так как найдется такая точка η, что $\sum_{k=0}^{N-1} f^{(m)}(\eta_k) = N f^{(m)}(\eta)$, (используется непрерывность функции $f^{(m)}$) и $Nh = b - a$, то этим свойство доказано. ■

Далее рассматривается *последовательность* составных формул: исходная формула считается фиксированной, а $N \to \infty$.

$\langle 5 \rangle$. Для того чтобы для любой непрерывной функции f последовательность квадратурных сумм сходилась к интегралу (т.е. $R_N(f) \to 0$), необходимо и достаточно, чтобы исходная формула (2) была точна для постоянных[1].

Доказательство. 1) Достаточность. Представим квадратурную сумму в виде

$$Q_N(f) = \sum_{j=1}^{n} A_j \sum_{k=0}^{N-1} h f(y_k + h x_j).$$

Каждая внутренняя сумма здесь есть сумма Римана для рассматриваемого интеграла и потому при $N \to \infty$ к нему сходится. Остается воспользоваться тем, что $\sum A_j = 1$.

2) Необходимость. Для функции $f(x) \equiv 1$ имеем

$$Q_N(1) = h \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{j=1}^{n} A_j = (b-a) \sum_{j=1}^{n} A_j,$$

и так как $Q_N(1) \to (b-a)$, то $\sum A_j = 1$ ■

Определение Будем говорить, что для функции f последовательность квадратурных формул (3) сходится с порядком m, если найдется такая постоянная C, что при всех $N \quad |R_N(f)| \le C h^m$.

$\langle 6 \rangle$. Для того чтобы для любой m раз непрерывно дифференцируемой функции f ($f \in C^{(m)}$) последовательность (3) сходилась с порядком m, необходимо и достаточно чтобы для АСТ исходной формулы d выполнялось неравенство $d \ge m - 1$.

---

[1]Это может быть выражено также словами: АСТ формулы (2) ≥ 0 или $\sum A_j = 1$.

Доказательство[2]. 1. Достаточность. Пусть $f \in C^{(m)}$ произвольна, $d \geq m-1$. Положим $M = \max_{[a,b]} |f^{(m)}(x)|$ и на каждом промежутке $[y_k, y_{k+1}]$ запишем $f(x)$ по формуле Тейлора:

$$f(x) = f(y_k) + (x-y_k)f'(y_k) + \cdots + \frac{(x-y_k)^{m-1}}{(m-1)!} f^{(m-1)}(y_k) + \frac{(x-y_k)^m}{m!} f^{(m)}(\xi_k) = \\ = p_{m-1}(x) + \frac{(x-y_k)^m}{m!} f^{(m)}(\xi_k).$$

Здесь $p_{m-1} \in \mathbb{P}_{m-1} \subseteq \mathbb{P}_d$, причем

$$\|f - p_{m-1}\|_{C[y_k, y_{k+1}]} \leq \frac{M}{m!} h^m,$$

так что и наилучшее приближение функции f полиномами степени не выше d на промежутке $[y_k, y_{k+1}]$ удовлетворяет неравенству

$$E_d(f; [y_k, y_{k+1}]) \leq \frac{M}{m!} h^m.$$

Используя оценку остатка квадратурной формулы через наилучшее приближение (теорема 3 из §1), теперь имеем

$$R_N^k(f) \leq \left[h + h \sum |A_j|\right] E_d(f; [y_k, y_{k+1}]) \leq \left[1 + \sum |A_j|\right] \frac{M h^{m+1}}{m!}.$$

Суммируя все эти оценки: $R_N(f) \leq C h^m$, где $C = M(b-a)[1 + \sum |A_j|]/m!$.

2. Необходимость. Согласно свойству $\langle 2 \rangle$ остаток $R_N(f)$ для функции $f(x) = x^{d+1}$ есть $(b-a)h^{d+1} r$ и в случае $d < m-1$ окажется $R_N(f)/h^m \to \infty$ ■

Как видно из доказательства, в части необходимости это утверждение допускает усиление: слова “для любой m раз непрерывно дифференцируемой функции” можно заменить на “для любого полинома”.

---

[2] Если исходная формула имеет представление остатка в форме Лагранжа, то свойство $\langle 6 \rangle$ легко следует из этого представления.

Наиболее употребительными являются составные формулы средних прямоугольников, трапеций и Симпсона. Выпишем эти формулы. При этом представление остаточного члена сразу же получается из представления остаточного члена исходной формулы применением свойства $\langle 4\rangle$. Конечно, приводимые формулы для остатка верны лишь в том случае, если подынтегральная функция нужное число раз непрерывно дифференцируема.

Составная формула средних прямоугольников:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\sum_{k=1}^{N} f\left(a+\frac{2k-1}{2}h\right),$$

$$h=\frac{b-a}{N}, \quad R(f)=\frac{b-a}{24}h^2 f''(\xi).$$

Составная формула трапеций:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}f(a)+h\sum_{k=1}^{N-1} f(a+kh)+\frac{h}{2}f(b),$$

$$h=\frac{b-a}{N}, \quad R(f)=-\frac{b-a}{12}h^2 f''(\xi).$$

Как видно из представления остатков этих двух формул, если вторая производная функции f сохраняет на $[a,b]$ знак, то квадратурные суммы средних прямоугольников и трапеций дают двухсторонние приближения к интегралу.

Составная формула Симпсона:

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

$$\frac{h}{3}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{N-1} f(a+2kh)+4\sum_{k=1}^{N} f\big(a+(2k-1)h\big)+f(b)\right],$$

$$h=\frac{b-a}{2N}, \quad R(f)=-\frac{b-a}{180}h^4 f^{IV}(\xi).$$

Задача. Показать, что свойства $\langle 3\rangle$ и $\langle 4\rangle$ составных формул (второе из них с изменением представления для C_N) сохраняются и в том случае, если составная формула строится на основе *неравномерного* разбиения отрезка $[a,b]$ на части.

§4 Квадратурные формулы гауссова типа

Вернемся к рассмотрению формул с весом $w(x)$. На всем протяжении параграфа функцию w будем считать суммируемой, неотрицательной и отличной от нуля на множестве положительной меры. Квадратурная формула с n узлами содержит $2n$ параметров — кроме узлов еще и коэффициенты. Требование, чтобы ее АСТ была не ниже d, налагает на эти параметры $d+1$ условие (точность для x^j, $j = 0, \dots, d$). Поэтому можно рассчитывать на существование квадратурной формулы с n узлами и АСТ $2n-1$. О таких формулах и идет речь в этом параграфе. Но сначала некоторые вспомогательные сведения.

Для полиномов f, g определим скалярное произведение:

$$(f, g) = \int_a^b w(x) f(x) g(x) dx.$$

Оно обладает обычными свойствами скалярного произведения: 1) линейность по каждому аргументу, 2) $(g, f) = (f, g)$, 3) $(f, f) \geq 0$, и $(f, f) = 0$ тогда и только тогда, когда $f(x) \equiv 0$. Полиномы f и g назовем ортогональными, если $(f, g) = 0$. Если f ортогонален g_1 и g_2, то он ортогонален и $\alpha_1 g_1 + \alpha_2 g_2$.

Отметим очевидный факт: если q_k — полиномы степени в точности k, то любой полином $p_n \in \mathbb{P}_n$ допускает представление $p_n(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k q_k(x)$.

Теорема 1. Существует и притом единственный с точностью до постоянного множителя полином $\omega_n(x)$, ортогональный всем $q_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$. Полиномы ω_n называются ортогональными полиномами.

Доказательство. Положим $\omega_0 = 1$.

1) Существование. Метод индукции. При $n = 1$ достаточно положить $\omega_1 = x - a$, где $a = (x, 1)/(1, 1)$. Пусть для $k = 1, \dots, n-1$ существование ω_k уже доказано. Полином

$$\omega_n(x) = x^n - a_{n-1}\omega_{n-1}(x) - \dots - a_0\omega_0(x), \quad a_k = (x^n, \omega_k)/(\omega_k, \omega_k),$$

ортогонален полиномам ω_k, а значит, и всем $q_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$.

2) Единственность. От противного. Пусть ω_n и ω'_n — два ортогональных полинома со старшими коэффициентами a_n и a'_n. Тогда $\omega_n/a_n - \omega'_n/a'_n$ — многочлен степени не выше $n-1$, ортогональный сам себе и потому тождественно равный нулю, так что $\omega'_n = (a'_n/a_n)\omega_n$. ■

Теорема 2. Все корни ортогонального многочлена $\omega_n(x)$ вещественны, различны и принадлежат (a, b).

Доказательство. Убедимся, что ω_n имеет на (a, b) n точек перемены знака. Пусть их $m < n$ и это $x_1, \ldots, x_m$. Тогда положим $q_m(x) = (x - x_1) \ldots (x - x_m) \in \mathbb{P}_{n-1}$. Функция $w(x)\omega_(x)q_m(x)$ сохраняет на (a, b) знак, и потому $(\omega_n, q_m) \neq 0$, что противоречит ортогональности. ■

Теорема 3. Для того чтобы квадратурная формула

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

имела АСТ $2n-1$, необходимо и достаточно:

1) (1) есть ИКФ,

2) узлы x_k суть корни ортогонального полинома ω_n.

Доказательство. 1) Необходимость первого условия следует из теоремы об АСТ ИКФ. Докажем необходимость второго. Пусть (1) точна для всех $p \in \mathbb{P}_{2n-1}$. Положим $\omega_n(x) = (x - x_1) \ldots (x - x_n)$ и пусть $q_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$ произволен. Тогда $\omega_n q_{n-1} \in \mathbb{P}_{2n-1}$ и потому

$$(\omega_n, q_{n-1}) = \sum_{k=1}^{n} A_k \omega_n(x_k) q_{n-1}(x_k) = 0,$$

так что ω_n — ортогональный полином.

2) Достаточность. Пусть выполнены условия 1) и 2). Покажем, что (1) точна для всех полиномов степени $2n-1$. Возьмем любой такой полином $P_{2n-1}(x)$ и по узлам x_k построим для него интерполяционный полином $r_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$, так что $r_{n-1}(x_k) = P_{2n-1}(x_k)$, $k = 1, \ldots, n$. Полином $P_{2n-1} - r_{n-1}$ имеет точки x_k своими корнями, и потому делится на $\omega_n(x) = c(x - x_1) \ldots (x - x_n)$, так что

$P_{2n-1}(x) = \omega_n(x)q_{n-1}(x) + r_{n-1}(x)$, где $q_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$ — соответствующее частное. Учитывая, что (1) как ИКФ точна для всех полиномов степени не выше $n-1$, имеем

$$\int_a^b w(x)P_{2n-1}(x)dx = \int_a^b w(x)\omega_n(x)q_{n-1}(x)dx + \int_a^b w(x)r_{n-1}(x)dx =$$
$$= \int_a^b w(x)r_{n-1}(x) = \sum_{k=1}^n A_k r_{n-1}(x_k) =$$
$$\sum_{k=1}^n A_k P_{2n-1}(x_k).$$

Поскольку квадратурная формула с неотрицательным весом и n узлами не может иметь АСТ больше $2n-1$, то этим теорема доказана. ■

Определение. Формула (1), имеющая при n узлах АСТ $2n-1$, называется *формулой гауссова типа* или *формулой наивысшей степени точности*.

Следствие. При наложенных на вес $w(x)$ условиях при каждом n формула гауссова типа существует и единственна.

Отметим свойства формул гауссова типа.

$\langle 1 \rangle$ Коэффициенты такой формулы положительны: $A_k > 0$.

Доказательство. Для полиномов $l_k^2(x)$, где $l_k(x)$ — фундаментальные полиномы интерполяции по узлам x_k ($l_k(x_j) = \delta_{kj}$), имеющие степень $n-1$, формула точна. Поэтому

$$0 < \int_a^b w(x)l_k^2(x)dx = \sum_{j=1}^n A_j l_k^2(x_j) = A_k. \quad ■$$

$\langle 2 \rangle$ Формула гауссова типа имеет представление остатка в форме Лагранжа:

$$R_n(f) = C_n f^{(2n)}(\xi), \quad C_n = \frac{1}{(2n)!}\int_a^b w(x)\omega_n^2(x)dx,$$

где $\omega_n(x)$ — ортогональный полином со старшим коэффициентом, равным единице.

Доказательство. Для $f \in C^{(2n)}[a,b]$ построим эрмитовский интерполяционный полином $P_{2n-1} \in \mathbb{P}_{2n-1}$ по узлам x_k кратности 2. Тогда

$$f(x) - P_{2n-1}(x) = \frac{\Omega_{2n}(x)}{(2n)!} f^{(2n)}(\eta(x)), \quad \big(\Omega_{2n}(x) = \omega_n^2(x)\big)$$

и т.к. $R_n(P_{2n-1}) = 0$, так что $R_n(f) = R_n(f - P_{2n-1})$, и $Q_n(f) = Q_n(P_{2n-1})$, то

$$R_n(f) = \int_a^b w(x) \frac{\Omega_{2n}(x)}{(2n)!} f^{(2n)}(\eta(x)) dx = \frac{1}{(2n)!} \int_a^b w(x)\omega_n^2(x) dx\, f^{(2n)}(\xi)$$

(мы воспользовались леммой из §2). ■

⟨3⟩ Для остатка справедлива оценка

$$R_n(f) \leq 2 \int_a^b w(x) dx\, E_{2n-1}(f).$$

Это — непосредственное следствие теоремы 3 из §1.

⟨4⟩ Для любой непрерывной функции $f \in C[a,b]$ при $n \to \infty$

$$Q_n(f) \to \int_a^b w(x) f(x) dx.$$

Это немедленно следует из⟨3⟩.

Определение. Квадратурная формула гауссова типа для промежутка $[-1,1]$ с весом $w(x) \equiv 1$ называется *квадратурной формулой Гаусса*.

Замечание. Для любого промежутка $[a,b]$ формула гауссова типа с весом $w(x) \equiv 1$ подобна формуле Гаусса. Обычно формулы, подобные формуле Гаусса, также называют формулами Гаусса.

Определение. *Многочленом Лежандра* степени n называется

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

Теорема 4. Многочлен Лежандра есть ортогональный на промежутке $[-1, 1]$ с весом $w(x) \equiv 1$ полином. Его старший коэффициент равен единице.

Доказательство. То, что P_n есть полином степени n со старшим коэффициентом единица, очевидно. Покажем ортогональность. Учитывая, что при $k < n$

$$\frac{d^k}{dx^k} (x^2 - 1)^n \Big|_{x=\pm 1} = 0,$$

и интегрируя по частям, для любого полинома $q_{n-1} \in \mathbb{P}_{n-1}$ имеем

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) q_{n-1}(x) dx = \frac{n!}{(2n)!} \int_{-1}^{1} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n q_{n-1}(x) dx =$$
$$= (-1)^n \frac{n!}{(2n)!} \int_{-1}^{1} P_n(x) \frac{d^n}{dx^n} q_{n-1}(x) dx = 0,$$

т.к. $\frac{d^n}{dx^n} q_{n-1}(x) \equiv 0$. ■

Корни многочлена Лежандра являются узлами квадратурной формулы Гаусса. Сам этот многочлен в зависимости от четности или нечетности n является четной или нечетной функцией. Поэтому (см. также свойство $\langle 5 \rangle$ из §2) верна

Теорема 5. Узлы квадратурной формулы Гаусса симметричны (при нумерации в порядке возрастания $x_k = -x_{n+1-k}$), а коэффициенты при симметричных узлах равны ($A_k = A_{n+1-k}$).

Лемма. Справедливо равенство

$$I_n = \int_{-1}^{1} (1 - x^2)^n dx = 2 \frac{(2n)!!}{(2n+1)!!}.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Применяя интегрирование по частям, имеем

$$I_n = \int_{-1}^{1} (1-x^2)^{n-1}(1-x^2)dx = I_{n-1} - \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} x[2x(1-x^2)^{n-1}]dx =$$

$$= I_{n-1} + \frac{1}{2n}\int_{-1}^{1} x[(1-x^2)^n]'dx = I_{n-1} - \frac{1}{2n}I_n,$$

так что $I_n = \frac{2n}{2n+1}I_{n-1}$ и остается применить метод математической индукции, учитывая, что $I_o = 2$. ■

Следствие. Справедливо равенство

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

Д о к а з а т е л ь с т в о. Интегрируя по частям:

$$J_n = \frac{n!}{(2n)!}\int_{-1}^{1} P_n(x)[(x^2-1)^n]^{(n)}dx =$$

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

(здесь учтено, что $P_n^{(n)}(x) \equiv n!$), и остается воспользоваться леммой. ■

Теорема 6. Для квадратурной формулы Гаусса при $f \in C^{(2n)}[-1,1]$ справедливо представление остатка

$$R_n(f) = C_n f^{(2n)}(\xi), \quad C_n = \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{(2n+1)[(2n)!]^3}.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Согласно свойству $\langle 2\rangle$ доказываемое представление имеет место при $C_n = \frac{1}{(2n)!}J_n$. Остается воспользоваться доказанным следствием и равенствами

$$(2n)!! = 2^n n!, \quad (2n+1)!! = \frac{(2n+1)!}{(2n)!!} = \frac{(2n+1)(2n)!}{2^n n!} \quad ■$$

З а м е ч а н и е 1. Постоянные C_n очень быстро убывают. Приведем несколько первых из них:

$$C_2 = \frac{1}{135}, \quad C_3 = \frac{1}{15750} \quad C_4 = \frac{1}{3472875}.$$

З а м е ч а н и е 2. При $n = 1$ формула Гаусса совпадает с формулой средних прямоугольников.

З а м е ч а н и е 3. При $n = 2$ в представление остаточного члена формулы Гаусса, как и для формулы Симпсона, входит 4-ая производная, но коэффициенты при них имеют противоположные знаки. Поэтому если четвертая производная функции сохраняет знак на промежутке интегрирования, то квадратурные суммы Гаусса (при $n = 2$) и Симпсона дают двусторонние приближения к интегралу. То же относится и к построенным на основе этих формул составным квадратурным формулам.

Задача 1. Доказать ортогональность многочленов Чебышева на промежутке $[-1, 1]$ с весом $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$.

Задача 2. Пусть x_k и A_k $(k = 1, \dots, n)$ — узлы и коэффициенты формулы гауссова типа, $\widehat{\omega}_k(x)$ $(k = 0, 1, \dots)$ — ортогональные полиномы, нормированные условием $(\widehat{\omega}_k, \widehat{\omega}_k) = 1$. Доказать, что

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \sqrt{A_1}\widehat{\omega}_0(x_1) & \sqrt{A_2}\widehat{\omega}_0(x_2) & \dots & \sqrt{A_n}\widehat{\omega}_0(x_n) \\ \sqrt{A_1}\widehat{\omega}_1(x_1) & \sqrt{A_2}\widehat{\omega}_1(x_2) & \dots & \sqrt{A_n}\widehat{\omega}_1(x_n) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sqrt{A_1}\widehat{\omega}_{n-1}(x_1) & \sqrt{A_2}\widehat{\omega}_{n-1}(x_2) & \dots & \sqrt{A_n}\widehat{\omega}_{n-1}(x_n) \end{pmatrix} \; -$$

ортогональная матрица $(\mathcal{A}\mathcal{A}^T = E)$.

Задача 3. Используя предыдущую задачу, показать, что коэффициенты квадратурной формулы гауссова типа можно вычислять по формулам:

$$A_k = \left(\sum_{j=0}^{n-1} \widehat{\omega}_j^2(x_k) \right)^{-1}.$$

§5 Интегрирование периодических функций

Рассмотрим задачу построения квадратурных формул вида

$$\int_a^{a+2\pi} f(x)dx \approx \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k) \qquad (1)$$

для интегрирования 2π-периодических функций. Ввиду периодичности стоящий слева интеграл не зависит от a, а узлы формулы можно считать принадлежащими некоторому промежутку длиной 2π: $x_1 < x_2 < \cdots < x_n < x_1 + 2\pi$.

Периодические функции естественно приближать тригонометрическими полиномами, и мы будем говорить, что (1) имеет тригонометрическую степень точности d, если она точна для всех тригонометрических полиномов порядка не выше d и неточна хоть для одного полинома порядка $d+1$, т.е. она точна для функций $1, \cos x, \sin x, \ldots, \cos dx, \sin dx$ и неточна хотя бы для одной из функций $\cos(d+1)x, \sin(d+1)x$.

Теорема 1. Тригонометрическая степень точности формулы (1) не более, чем $n-1$.

Доказательство. Функция

$$T_n(x) = \prod_{k=1}^{n} \bigl(1 - \cos(x - x_k)\bigr)$$

есть тригонометрический полином порядка n. Он принимает лишь неотрицательные значения, и интеграл от него положителен. В то же время во всех узлах он обращается в нуль, и квадратурная сумма равна нулю, так что (1) не точна для этого тригонометрического полинома. ■

Теорема 2. Квадратурная формула

$$\int_a^{a+2\pi} f(x)dx \approx h \sum_{k=0}^{n-1} f(\alpha + kh) = Q_n(f) \quad (h = 2\pi/n) \tag{2}$$

при любом α имеет тригонометрическую степень точности $n-1$.

Доказательство. Достаточно убедиться, что (2) точна для функций e^{imx} при $m = 0, \ldots, n-1$. При $m = 0$ ($e^{i0x} = 1$) интеграл и квадратурная сумма равны 2π. Пусть $1 \le m \le n-1$. Тогда интеграл равен нулю. Подсчитаем квадратурную сумму.

$$\frac{1}{h} Q_n(e^{imx}) = \sum_{k=0}^{n-1} e^{im(\alpha+kh)} = e^{im\alpha} \sum_{k=0}^{n-1} e^{imkh} = e^{im\alpha} \frac{1 - e^{inmh}}{1 - e^{imh}} = 0,$$

т.к. $e^{imnh} = e^{i2\pi m} = 1$, а поскольку $0 < mh < 2\pi$, то $e^{imh} \neq 1$. ■

З а м е ч а н и е 1. Формулу (2) называют *формулой наивысшей тригонометрической степени точности.*

З а м е ч а н и е 2. Как уже отмечалось, для периодических функций интеграл, стоящий в правой части (2), не зависит от a. Если считать $a = \alpha - h/2$, то (2) есть составная формула средних прямоугольников. Если считать $a = \alpha$ и переписать квадратурную сумму в виде

$$Q_n(f) = h\left(\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + \frac{1}{2}f(a+2\pi)\right),$$

то (2) предстанет, как составная формула трапеций. Таким образом, при интегрировании периодических функций составные формулы прямоугольников и трапеций имеют наивысшую тригонометрическую степень точности.