Окончательно

$$I = \frac{I_2^2 - I_1 I_3}{2I_2 - (I_1 + I_3)} + O(h^{p+1}) \quad \text{— 2-я формула Эйткена.}$$

Оценим эффективный порядок p точности формулы $(^*)$, для этого рассмотрим отношение разностей уравнений $(^*)$

$$\frac{I_2 - I_1}{I_3 - I_2} = \frac{A\,(1-B)}{AB\,(1-B)} = \frac{1}{B} = \frac{1}{q^p}.$$

Найдем

$$p = \frac{\ln \frac{I_3 - I_2}{I_2 - I_1}}{\ln q} \quad \text{— 3-я формула Эйткена.}$$

Возможно построение и более сложных формул повышения точности выполненных расчётов*1).

§5. Квадратурные формулы Гаусса- Кристоффеля

На построение квадратурных формул интерполяционного типа (2’) можно посмотреть несколько иначе

$$I = \int_a^b f\,(x)\,\rho\,(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} C_i \cdot f\,(x_i) + R_n\,(f) \tag{$2'$}$$

(здесь удобно суммировать именно с $i = 1$ до n).
Будем считать параметрами квадратурной формулы $(2')$ узлы $\{x_i\}$ и веса $\{C_i\}$ — в нашем распоряжении всего $2n$ парметров. Поставим вопрос *о таком выборе параметров* $\{x_i\}$, $\{C_i\}$ *, при которых квадратурная формула* $(2')$ *точна для многочленов максимально возможного порядка, по крайней мере до* $(2n-1)$ *включительно**2).
Покажем как это сделать.

5.1 Выбор узлов квадратурной формулы $\{x_i\}$

Будем считать что вес $\rho(x)$ непрерывен на $[a, b]$. Он может обратиться в ноль или $+\infty$ лишь в граничных точках отрезка. Известно, что

1) Для такого веса $\rho(x)$ существует полная в $L_{2,p}[a, b]$ система алгебраических полиномов $\{P_k(x)\}_{k=\overline{0,\infty}}$, ортоганальная на $[a, b]$ с весом $\rho(x)$, т.е.

$$\int_a^b P_k\,(x)\,P_m\,(x)\,\rho\,(x)\,dx = \delta_{k,m}\,\|P_k\,(x)\|^2_{L_{2p}[a,b]}\,;$$

2) Все нули многочлена $P_k\,(\mu) = 0 \Longleftrightarrow \left\{\mu_i^{(k)}\right\}_{i=\overline{1,k}}$ — действительны и расположены на интервале (a, b).

*1)см.[2 (Бахвалов и др.)] *метод Ричардсона*

*2)т.е. имеет максимальную *степень*

Поступим следующим образом :
Составим по неизвестным пока узлам интегрирования $\{x_i\}_{i=\overline{1,n}}$ многочлен n-ой степени

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

Тогда функция $\varphi(x) = \omega(x)\,P_m(x)$ при $m \leq n-1$ есть многочлен степени k не выше, чем $2n-1$. Для таких многочленов формула $(2')$ Гаусса-Кристоффеля точна (по предположению):

$$\int_a^b \omega(x)\,P_m(x)\,\rho(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} C_k \omega(x_k)\,P_m(x_k) \equiv 0 \Leftrightarrow \omega(x) \perp P_m(x), \qquad (*)$$

т.к. $\omega(x_k) = 0, \forall m \leq n-1$ в силу своего построения.

Следовательно многочлен $\omega(x)$ ортогонален линейной оболочке из функций $P_m(x)$ с $m \leq n-1$. Тем самым $\omega(x)$ ортогонален любому многочлену степени $m \leq n-1$.

С другой стороны, если разложить $\omega(x)$ в ряд по ортогональным многочленам $\{P_k(x)\}$

$$\omega(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k P_k(x)$$

то $(^*)$ можно продолжить

$$(\omega(x), P_m(x)) = 0 = \sum_{k=0}^{n} a_k \int_a^b P_k(x)\,P_m(x)\,\rho(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} a_k \delta_{k,m} \|P_k\|^2 = a_m \|P_m\|^2 .$$

Итак, все $a_k = 0$, кроме a_n и разложение $\omega(x)$ равны нулю. Разложение $\omega(x)$ имеет вид :

$$\omega(x) = A \cdot P_n(x).$$

Мы получили возможность сформировать важный вывод :

1) Узлы $\{x_i\}$ квадратурной формулы Гаусса-Кристоффеля нужно выбирать так, чтобы они совпадали с корнями ортогонального на [a,b] с весом $\rho(x)$ многочлена $P_n(x)$:

$$P_n(\mu) = 0 \Leftrightarrow x_i = \mu_i^{(n)}; \quad i = \overline{1,n}. \qquad (15)$$

5.2 Веса $\{C_i\}$ квадратурной формулы Гаусса-Кристоффеля

Веса квадратурной формулы (2') нетрудно определить, если узлы $\{x_i\}$ уже известны. Для функций $l_m(x)$ — базиса интерполяционных полиномов Лагранжа

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

полиномов $(n-1)$ степени формула Гаусса-Кристоффеля (Г-К) $(2')$ точна. Тогда

$$\int_a^b l_m(x)\,\rho(x)\,dx = \sum_{i=1}^{n} C_i \underbrace{l_m(x_i)}_{\delta_{i,m}} = C_m. \qquad (16)$$

Полученная формула (16) позволяет утверждать, что ($2'$) есть квадратурная формула *интерполяционного типа.*

Замечания: Весовые коэффициенты $\{C_i\}$ (16) формулы Гаусса-Кристоффеля обладают рядом интересных и важных свойств :

1) Рассмотрим функцию $l_m^2(x) \geq 0$. Она многочлен $(2n-2)$-ой степени $\Rightarrow$ формула (2') точна и поэтому :

$$\int_a^b l_m^2\left(x\right)\rho\left(x\right)dx = \sum_{k=1}^{n} C_k l_m^2\left(x_k\right) = C_m > 0, \quad \forall m.$$

2) Если интегрировать $f(x) \equiv 1$, то

$$\int_a^b f\left(x\right)\rho\left(x\right)dx = \sum_{k=1}^{n} C_k = M, \quad \forall n.$$

Совокупность коэффициентов $\{C_k(n)\}$ равномерно по n ограничена.

3) Формулы Гаусса-Кристоффеля называются формулами наивысшей алгебраической степени, поскольку для *произвольного* многочлена степени большей, чем $(2n-1)$, формула с n узлами не может быть точна.

4) *(О погрешности формулы Гаусса-Кристоффеля).* Погрешность формулы ($2'$) Гаусса-Кристоффеля пропорциональна производной порядка низшей неучтенной степени интерполяционного многочлена. Для верхней границы погрешности имеем оценку:

$$|R_n| \approx \left(\frac{2}{5}\right)\frac{b-a}{\sqrt{n}}\left(\frac{b-a}{3^n}\right)^{2n} \cdot M_{2n}; \qquad \text{где} \qquad M_{2n} = \max_{[a,b]}\left|f^{(2n)}\left(x\right)\right|.$$

Формула Гаусса-Кристоффеля расчитана на интегрирование достаточно гладких функций.

5.3 Простейший случай квадратурных формул Гаусса-Кристоффеля (формула средних прямоугольников)

Известно, что весу $\rho(x) \equiv 1$ на $[-1,1]$ отвечает система ортогональных полиномов Лежандра $L_n(x)$. В таком случае

$$\int_a^b f\left(x\right)dx \approx \sum_{k=1}^{n} c_k f\left(x_k\right) = \left|\begin{array}{cc} x = ct+d & dx = cdt \\ a = -c+d & c = \frac{b-a}{2} \\ b = c+d & d = \frac{b+a}{2} \\ \multicolumn{2}{c}{x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}; t \in [-1,1]} \end{array}\right| =$$

$$= c\int_{-1}^{1} F(t)dt \approx c \cdot \sum_{k=1}^{n} \gamma_k F\left(t_k\right); \quad F(t_k) \equiv f(x_k).$$

Зная узлы t_k и веса γ_k находим

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

и
$$c_k = \frac{b-a}{2} \cdot \gamma_k, \quad k = \overline{1,n}$$
узлы и веса исходной квадратурной формулы.

Рассмотрим простейший возможный случай одного узла $n = 1$. Соответствующий многочлен Лежандра $L_1(t) = t$ (проверить !). Его корень: $t = 0 \leftrightarrow t_1 = 0, \mu_1 = 0$, т.о. $x_1 = (b+a)/2$. Вес этого слагаемого в интегральной сумме:
$$\gamma_1 = \int_{-1}^{1} l_1(t)\,dt = \int_{-1}^{1} \frac{(t-t_1)}{(t-t_1)} dt = 2; \quad \Longrightarrow C_1 = \frac{b-a}{2}\gamma_1 = b-a.$$
Итак
$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a)\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) + R_1 \tag{17}$$
формула средних прямоугольников. (Формула открытого типа, точна для многочленов до 1-го порядка включительно).

Задание. *Получить составную формулу средних прямоугольников — формулу (18). Получить оценку погрешности формулы (17).*

§6. Корректность задачи численного интегрирования

Корректность задачи численного интегрирования (2) связана с устойчивостью вычисления интегральной суммы :
$$I_n = \sum_{k=0}^{n} C_k f(x_k).$$
При этом погрешность $\delta f(x)$ подынтегральной функции обуславливает погрешность δI_n интегральной суммы I_n.
$$I_n + \delta I_n = \sum_{k=0}^{n} C_k \left(f(x_k) + \delta f(x_k)\right) \Leftrightarrow \delta I_n = \sum_{k=0}^{n} C_k \delta f(x_k).$$
Поскольку все рассмотренные нами квадратурные формулы были для $f = 1$ точны, то
$$\int_a^b \rho(x)\,dx = M = \sum_{k=0}^{n} C_k > 0,$$
и имеет место равномерная по n ограниченность $\sum^{n} C_k$ последовательности частичных сумм. Тогда
$$|\delta I_n| \le \sum_{k=0}^{n} |C_k|\, |\delta f(x_n)| \le \max_{[a,b]} |\delta f(x_k)| \cdot \sum_{k=0}^{n} |C_k|.$$

Теперь, если все весовые коэффициенты квадратурной формулы (2) знакопостоянны (в частности $C_k > 0$ для формул Г-К), то можно продолжить :

$$|\delta I_n| \leq \max_{[a,b]} |\delta f(x_k)| \cdot M = M \cdot \|\delta f\|_C \,.$$

В этом случае δI_n имеет тот же порядок, что и погрешность в вычислении функции, т.е. вычисления по квадратурной формуле устойчивы.

Если же C_k не знакопостоянны, то может оказаться, что абсолютной сходимости ряда $\sum C_k$ нет и ряд $\sum |C_k|$ расходится.(Нет равномерной по n ограниченности у величины $\sum^\infty |C_k|$ тем самым δI_n может с ростом n неограниченно возрастать).

Отсутствием знакоопределенности обладают коэффициенты Котесса K_i в формуле (4). Тем самым требуется известная аккуратность при использовании формул Ньютона-Котесса при больших n.

§7. Особые случаи использования квадратурных формул

Особые случаи использования квадратурных формул охватывают важные для практических приложений ситуации применения квадратурных формул (перечислим некоторые из них) :

1) подынтегральная функция не обладает достаточной гладкостью, например кусочно-непрерывная;

2) для подынтегральной функции линейная интерполяция или аппроксимация полиномами неточна. Возможно необходимо рассматривать другие методы интерполяции;

3) вычисляется несобственный интеграл;

4) вычисляется интеграл с переменным верхним пределом;

и т.д.

Остановимся на:

7.1 Интегрирование быстроосциллирующих функций (метод Филона)

Рассмотрим интеграл вида :

$$I = \int_a^b f(x)\, e^{iwx} dx \equiv \int_a^b F(x)\, dx,$$

при этом область интегрирования такова, что $w(b-a) \gg 1$; $f(x)$ - достаточно гладкая функция; $w = \text{const}$ — "большая" величина.

Функции $Re\left(f(x)\, e^{iwx}\right)$, и $Im\left(f(x)\, e^{iwx}\right)$ имеют на $[a,b]$ примерно $\frac{w(b-a)}{\pi}$ нулей, ибо фазовый множитель изменяется в области интегрирования на величину порядка $w(b-a)$. Число "периодов" $F(x) \sim \frac{w(b-a)}{2\pi}$; на каждом периоде — 2 корня. Таким образом в области интегрирования порядка $\frac{w(b-a)}{\pi}$ - нулей.

Производная функции $F(x)$ при такой постановке, в главном порядке по w есть величина

$$F^{(p)}(x) \sim w^p$$

и для хорошей аппроксимации интеграла и подынтегральной функции приходится выбирать многочлен высокой степени (в любом случае много узлов сетки).

Из оценки остаточного члена для квадратурных формул интерполяционного типа (например на равномерных сетках (12) и (14)) имеем

$$(wh) \ll 1, \text{ т.е. } h \ll \frac{1}{w}.$$

Это означает, что величина шага $h = \frac{b-a}{n} \ll \frac{1}{w}$ должна быть мала или, что то же самое, должно быть велико $n \gg w\,(b-a) > \frac{w(b-a)}{\pi}$. Таким образом на каждом периоде функции $F(x)$ необходимо брать много узлов сетки. Необходима густая сетка и высокой степени полином, что невыгодно с любой точки зрения – большой объем вычислений, громоздкие формулы и т.д.

Естественно желание построить разумные составные квадратурные формулы. Мы воспользуемся некоторой априорной информацией о поведении амплитуды $f(x)$ подынтегральной функции. Если амплитуда $f(x)$ медленно меняется за период фазового сомножителя, то можно использовать составные квадратурные формулы, в которых на каждом частичном интервале (порядка периода и больше !) используется интерполяционный многочлен для $f(x)$ невысокой степени, и дальнейшее интегрирование выполняется *точно!* Такой подход приводит к *квадратурным формулам Филона.*

Пусть интервал $[a, b]$ разбит на N частей точками

$$a = x_0 < x_1 < ... < x_N = b.$$

На k-ом частичном интервале $[x_{k-1}, x_k]$ построим интерполяционный полином $P_q\,(x)$ по $(q+1)$ узлу (необязательно замкнутого типа) для $f(x)$. Тогда :

$$I_N = \sum_{k=1}^{N} I_k = \sum_{k=1}^{N} \int_{x_{k-1}}^{x_k} P_q\,(x)\, e^{iwx} dx.$$

Собственно формулы Филона получаются при $q = 2$ (при квадратичной интерполяции). Мы ограничемся случаем $q = 1$ (линейная интерполяция). Запишем интерполяционный полином в форме интерполяционного полинома Ньютона на тех же узлах $\{x_{k-1}, x_k\}$.

$$P_1\,(x) = N_1\,(x) = f\,(x_{k-1}) + (x - x_{k-1})\, f\,(x_{k-1}, x_k) = y_{k-1} + \frac{y_k - y_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}\,(x - x_{k-1})\,.$$

Тогда

$$I_k = \int_{x_{k-1}}^{x_k} N_1\,(x)\, e^{iwx} dx = \int_{x_{k-1}}^{x_k} \left(y_{k-1} + \frac{y_k - y_{k-1}}{x_k - x_{k-1}}\,(x - x_{k-1}) \right) e^{iwx} dx =$$

$$= y_{k-1} \frac{e^{iwx}}{iw}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} + \frac{y_k - y_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} \left\{ (x - x_{k-1})\, \frac{e^{iwx}}{iw}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} - \int_{x_{k-1}}^{x_k} \frac{e^{iwx}}{iw} dx \right\} =$$

$$= \frac{y_{k-1}}{iw}\left(e^{iwx_k} - e^{iwx_{k-1}}\right) + (y_k - y_{k-1})\, \frac{e^{iwx_k}}{iw} - \frac{y_k - y_{k-1}}{x_k - x_{k-1}} \frac{e^{iwx}}{(iw)^2}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} =$$

$$= -\frac{F_{k-1}}{iw} + \frac{F_k}{iw} + \frac{y_k - y_{k-1}}{w^2 h_k}\left(e^{iwx_k} - e^{iwx_{k-1}}\right) = \left| \begin{array}{c} x_{k-1} = x_k - \frac{h_k}{2} - \frac{h_k}{2} = x_{k-1/2} - \frac{h_k}{2} \\ x_k = x_k - \frac{h_k}{2} + \frac{h_k}{2} = x_{k-1/2} + \frac{h_k}{2} \end{array} \right| =$$

$$= \frac{F_k - F_{k-1}}{iw} + \frac{y_k - y_{k-1}}{w^2 h_k} e^{iwx_{k-1/2}} \cdot \sin\frac{wh_k}{2} \cdot 2i;$$

Теперь осталось просуммировать I_k по k:

$$I_N = \sum_{k=1}^{N} I_k = \frac{1}{iw}\left(F_1 - F_0 + F_2 - F_1 + \ldots + F_N - F_{N-1}\right) + \frac{2i}{w^2}\sum_{k=1}^{N}\frac{\sin\frac{wh_k}{2}}{h_k}\left(y_k - y_{k-1}\right)e^{iwx_{k-1/2}} =$$

$$= \frac{F_N - F_0}{iw} + \frac{2i}{w^2}\sum_{k=1}^{N}\frac{\sin\frac{wh_k}{2}}{h_k}\left(y_k - y_{k-1}\right)e^{iwx_{k-1/2}} \quad \text{- формула Филона.} \qquad (19)$$

Замечания:

а) упростить полученную формулу для случая равномерной сетки $h_k = h = const$ ... $\Rightarrow$ формула (20).

б) при $hw \ll 1$ формула (19), (20) переходит в обобщенную формулу трапеций (что естественно) и имеет погрешность $R = O\left(h^2\right)$. Однако это требует рассмотрения слишком малого шага $h \ll 1/w$.

Если же $\frac{1}{w} < h \ll 1$, то погрешность формулы (19) имеет порядок $R = O\left(\frac{Nf''(\xi)}{w^3}\right)$ *1) и она малая величина, если $f''\left(\xi\right)$ мало, т.е. характер изменения амплитуды $f(x)$ близок к линейному.

В таком случае возможно интегрирование с достаточно большим шагом $h > \frac{1}{w}$ (порядка длины волны и более).

*1) из $R_k = \int_{x_{k-1}}^{x_k} f''(\xi)/(2!)(x - x_{k-1})(x - x_k)e^{iwx}dx \sim \frac{1}{w^3}$ следует оценка остаточного члена в формуле Филона