# Квадратурные формулы

При необходимости найти значение определённого собственного интеграла от сеточной функции можно воспользоваться одной из множества квадратурных формул, общий вид которых для функций $\mathrm{f}(x)$, заданных на отрезке $[a,b]$, следующий:

$$\int_a^b \varrho(x)\mathrm{f}(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} C_k\,\mathrm{f}(x_k),$$

где $\varrho(x)$ — весовая функция (интегрируемая положительная на отрезке $[a,b]$ функция), $x_k$ — узлы сетки на отрезке $[a,b]$ в количестве $n+1$ штука, $C_k$ — коэффициенты, определяющие квадратурную формулу и не зависящие от интегрируемой функции.

Мы подробно рассмотрим класс квадратурных формул интерполяционного типа. Возникают эти формулы при замене функции под знаком интеграла интерполирующим её полиномом на некой заданной сетке:

$$\int_a^b \varrho(x)\mathrm{f}(x)\,dx \approx \int_a^b \varrho(x)\mathrm{L}_n(x)\,dx = \int_a^b \varrho(x)\sum_{k=0}^{n}\mathrm{f}(x_k)\varphi_k(x)\,dx =$$
$$= \sum_{k=0}^{n}\mathrm{f}(x_k)\int_a^b \varrho(x)\varphi_k(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} C_k\,\mathrm{f}(x_k),$$
$$C_k = \int_a^b \varrho(x)\varphi_k(x)\,dx,$$

где $\varphi(x_k)$ — базисные полиномы, позволяющие представить интерполирующий полином в форме Лагранжа. Определение коэффициентов $C_k$ наглядно показывает, что они не зависят от интегрируемой функции. Если $\mathrm{f}(x)$ — полином степени не выше $n$, то $\mathrm{L}_n(x)$ в точности с ней совпадает, и квадратурная формула интерполяционного типа позволяет получить точное значение интеграла. Интересно отметить обратное утверждение, что если квадратурная формула точна для всех полиномов степени не выше $n$, то эта квадратурная формула обязательно интерполяционного типа.

Допустим, некая квадратурная формула, определяемая набором коэффициентов $D_k$ и узлов $x_k$, точна для полиномов степени не выше $n$:

$$\int_a^b \varrho(x)\mathrm{P}_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} D_k\mathrm{P}_n(x_k).$$

Полином $\mathrm{P}_n(x)$ можно представить в виде линейной комбинации по базисным полиномам $\varphi_k(x)$:

$$\mathrm{P}_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k\varphi_k(x), \qquad a_k = \mathrm{P}_n(x_k).$$

Подстановка линейной комбинации под знак интеграла

$$\int_a^b \varrho(x)\sum_{k=0}^{n}\mathrm{P}_n(x_k)\varphi_k(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n} D_k\mathrm{P}_n(x_k)$$

показывает, что

$$D_k = \int\limits_a^b \varrho(x)\varphi_k(x)\,dx$$

определяются как коэффициенты квадратурной формулы интерполяционного типа.

В случаях, когда $\mathrm{f}(x)$ — полином степени выше $n$ или вовсе не полином, вычисление значения интеграла по квадратурной формуле происходит с погрешностью. Вспомним, что функция погрешности при интерполировании полиномом даётся формулой

$$\mathrm{r}(x) = \mathrm{f}(x) - \mathrm{L}_n(x) = \frac{\mathrm{f}^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\,\omega_n(x).$$

Воспользуемся ей, чтобы определить и оценить погрешность интегрирования:

$$R = \int\limits_a^b \varrho(x)\mathrm{f}(x)\,dx - \int\limits_a^b \varrho(x)\mathrm{L}_n(x)\,dx = \int\limits_a^b \varrho(x)\mathrm{r}(x)\,dx = \int\limits_a^b \varrho(x)\frac{\mathrm{f}^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!}\,\omega_n(x)\,dx,$$

$$|R| \leqslant \frac{M_{n+1}}{(n+1)!}\int\limits_a^b \varrho(x)|\omega_n(x)|\,dx, \qquad M_{n+1} = \max_{x\in[a,b]}\bigl|f^{(n+1)}(\xi(x))\bigr|.$$

Как видим, погрешность определяется не только функцией $\mathrm{f}(x)$, но и узлами сетки $x_k$. Их выбором можно добиться уменьшения погрешности.

Рассмотрим вариант симметричной сетки. Симметричными называются сетки с нечётным количеством узлов (а значит $n$ чётно), расположенными симметрично относительно середины отрезка $[a,b]$:

$$x_k - a = b - x_{n-k}, \qquad x_{\frac{n}{2}} = \frac{a+b}{2}\,.$$

Преобразуем $\omega_n(x)$, заменив переменную $x$ на $z$:

$$x = z + \frac{a+b}{2}\,, \qquad \omega_n(x) = \prod_{j=0}^{n}(x-x_j) = \prod_{j=0}^{n}(z-z_j) = \psi_n(z),$$

$$-z_j = z_{n-j}, \qquad z_{\frac{n}{2}} = 0.$$

Благодаря симметрии сетки можно записать, что

$$\psi_n(z) = z\prod_{j=0}^{\frac{n}{2}-1}(z-z_j)(z+z_j),$$

и заметить, что $\psi_n(z)$ — нечётная функция: $\psi_n(z) = -\psi_n(-z)$. Аналогично, $\omega_n(x)$ нечётна относительно середины отрезка $[a,b]$. В свою очередь производные $\psi'_n(z)$ и $\omega'_n(x)$ чётны относительно нуля и середины отрезка $[a,b]$, соответственно. Предлагаю показать это самостоятельно.

Теперь, если предположить, что весовая функция $\varrho(x)$ чётна относительно середины отрезка $[a,b]$ (на практике это обычно так), то симметрия сетки передаётся и коэффициентам квадратурной формулы. Действительно, можем записать

$$C_k = \int\limits_a^b \varrho(x)\frac{\omega_n(x)}{(x-x_k)\omega'_n(x_k)}\,dx = \int\limits_{-d}^{d} \varrho\bigl(z + x_{\frac{n}{2}}\bigr)\frac{\psi_n(z)}{(z-z_k)\psi'_n(z_k)}\,dz.$$

Заменив переменную интегрирования под знаком интеграла $z = -\bar{z}$, получим, что

$$C_k = \int\limits_{d}^{-d} \varrho(-\bar{z} + x_{\frac{n}{2}}) \frac{\psi_n(-\bar{z})}{(-\bar{z} - z_k)\psi_n'(z_k)}\,(-1)d\bar{z} = \int\limits_{-d}^{d} \varrho(\bar{z} + x_{\frac{n}{2}}) \frac{\psi_n(\bar{z})}{(\bar{z} - z_{n-k})\psi_n'(z_{n-k})}\,d\bar{z} = C_{n-k}.$$

Квадратурные формулы, основанные на симметричных сетках, точнее минимум на один порядок ($n+2$), если говорить о степени полиномов ($n+1$), для которых квадратурная формула точна. Любой полином степени $n+1$ можно представить в таком виде:

$$P_{n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n+1} \alpha_i \big(x - x_{\frac{n}{2}}\big)^i.$$

Для всех мономов $(x - x_{\frac{n}{2}})^i$ степени не выше $n$ квадратурные формулы интерполяционного типа точны, как сказано выше. Осталось показать, что квадратурная формула интерполяционного типа, основанная на симметричной сетке, также точна для $(x - x_{\frac{n}{2}})^{n+1}$. Заметим, что

$$\int\limits_{a}^{b} \varrho(x) \big(x - x_{\frac{n}{2}}\big)^{n+1}\,dx = 0,$$

так как подынтегральная функция нечётна относительно середины отрезка $[a, b]$ (для симметричных сеток $n+1$ всегда нечётно). Квадратурная формула записывается, как

$$\sum_{k=0}^{n} C_k \big(x_k - x_{\frac{n}{2}}\big)^{n+1} = \sum_{k=0}^{n} C_k z_k^{n+1} = \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}-1} C_k z_k^{n+1} + \sum_{k=\frac{n}{2}+1}^{n} C_{n-k}(-z_{n-k})^{n+1} =$$
$$= \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}-1} C_k z_k^{n+1} - \sum_{k=0}^{\frac{n}{2}-1} C_k z_k^{n+1} = 0.$$

И это показывает, что квадратурные формулы, основанные на симметричных сетках, точны для любого полинома степени $n+1$.

### Квадратурные формулы Ньютона–Котеса

Квадратурные формулы интерполяционного типа, основанные на равномерной сетке, называются формулами Ньютона–Котеса. Их коэффициенты вычисляются следующим образом:

$$C_k = \int\limits_{a}^{b} \varrho(x) \frac{\omega_n(x)}{(x - x_k)\omega_n'(x_k)}\,dx.$$

Сделаем замену переменной интегрирования $x = a + th$, где $h$ — шаг сетки. Тогда

$$C_k = \int\limits_{0}^{n} \varrho(a + th) \frac{\widetilde{\omega}_n(t)}{(t - k)\widetilde{\omega}_n'(k)}\,h\,dt.$$

Заметим, что

$$\widetilde{\omega}_n'(k) = \prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n} (k - j) = (-1)^{n-k} k!(n-k)!\,, \qquad h = \frac{b-a}{n}\,.$$

И окончательно получаем:

$$C_k = (b-a)A_k^{(n)}, \qquad A_k^{(n)} = \frac{(-1)^{n-k}}{k!(n-k)!}\,\frac{1}{n}\int\limits_0^n \varrho(a+th)\frac{\widetilde{\omega}_n(t)}{t-k}\,dt.$$

Коэффициенты $A_k^{(n)}$ называются коэффициентами Котеса и чаще всего применяются при весовой функции, тождественно равной единице, когда они не зависят от интервала интегрирования. Их можно определить один раз, записать и использовать для вычисления разных интегралов. Помимо непосредственного расчёта по формуле, можно построить систему линейных уравнений для поиска значений коэффициентов $A_k^{(n)}$. Найдём значения интегралов от $x^i$, $i=0,\ldots,n$ на отрезке $[0,1]$ с единичной весовой функцией:

$$\int\limits_0^1 x^i\,dx = \sum_{k=0}^{n} A_k^{(n)} x_k^i = \sum_{k=0}^{n} A_k^{(n)}\left(\frac{k}{n}\right)^i = \frac{1}{i+1}\,.$$

В итоге получаем систему $n+1$ линейного уравнения для $n+1$ неизвестного, решением которой являются коэффициенты Котеса. Смотрите приложенный скрипт для системы компьютерной алгебры *Maxima*.

Приведём несколько примеров. Случай $n=0$ выделяется, в расчётных формулах возникают неопределённости типа $\frac{0}{0}$, считаем их равными единице:

$$n=0, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\,\mathrm{f}\left(\frac{a+b}{2}\right), \qquad \text{формула прямоугольников,}$$

$$n=1, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{\mathrm{f}(a)+\mathrm{f}(b)}{2}\,, \qquad \text{формула трапеций,}$$

$$n=2, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{\mathrm{f}(a)+4\mathrm{f}\left(\frac{a+b}{2}\right)+\mathrm{f}(b)}{6}\,, \qquad \text{формула Симпсона.}$$

Квадратурные формулы Ньютона–Котеса при чётных $n$ относятся к классу симметричных, описанных ранее. Предлагаю оценить точность для формулы прямоугольников и формулы трапеций самостоятельно. Для этого используйте формулу

$$R = \int\limits_a^b \big(\mathrm{f}(x) - \mathrm{L}_n(x)\big)\,dx,$$

и заменяйте $\mathrm{f}(x)$ формулой Тейлора относительно $\mathrm{f}\left(\frac{a+b}{2}\right)$ в первом случае и $\mathrm{f}(x)$, $\mathrm{f}(b)$ относительно $\mathrm{f}(a)$ во втором. В результате сможете убедиться, что представленная формула прямоугольников точнее формулы трапеций.

Можно заметить, что при $n=8$ и $n \geqslant 10$ среди коэффициентов Котеса появляются отрицательные. Пока все коэффициенты в квадратурной формуле одного знака, погрешности округления, возникающие в результате вычислений, сказываются на результате незначительно. Это называется численной устойчивостью. Если же коэффициенты разных знаков, то погрешность округления может неконтролируемо возрастать, так как коэффициенты уже неограниченны по модулю и могут быть велики. Это численная неустойчивость, которой желательно избегать. Не используйте формулы Ньютона–Котеса при $n \geqslant 10$.

## Квадратурные формулы Гаусса

Поставим задачу при заданном $n$ построить квадратурную формулу наибольшего возможного порядка точности (необязательно интерполяционного типа). Для этого мы можем варьировать наряду с $C_k$ и узлы сетки $x_k$ и пытаться сделать квадратурную формулу точной для полиномов наибольшей возможной степени $m > n$. Возьмём набор линейно независимых полиномов $x^i$, $i = 0, \dots, m$, для каждого элемента этого набора посчитаем интеграл по отрезку $[a, b]$ и потребуем, чтобы квадратурная формула была точна:

$$\int\limits_a^b \varrho(x) x^i \, dx = \sum_{k=0}^{n} C_k x_k^i.$$

Получаем систему из $m+1$ нелинейного уравнения относительно $2n+2$ неизвестных $C_k$, $x_k$. Чтобы система разрешалась однозначно, положим $m = 2n+1$. Для разных весовых функций будут получаться разные решения.

На практике чаще всего работают с весовой функцией, тождественно равной единице. Произведём замену переменной $x = a + (b-a)y$ и посчитаем интеграл для некого полинома $\mathrm{P}(y)$ степени не выше $2n+1$:

$$\int\limits_0^1 \mathrm{P}(y) \, dy = \frac{1}{b-a} \int\limits_a^b \mathrm{P}\left(\frac{x-a}{b-a}\right) \, dx = \sum_{k=0}^{n} \overline{C}_k P(y_k), \qquad \overline{C}_k = \frac{C_k}{b-a}\,.$$

Полином $\mathrm{P}(y)$ можно представить в виде:

$$P(y) = \omega_n(y) \mathrm{Q}(y) + \mathrm{R}(y), \qquad \omega_n(y) = \prod_{j=0}^{n} (y - y_k),$$

где $\mathrm{Q}(y)$ и $\mathrm{R}(y)$ — некие полиномы степени не выше $n$. Тогда получаем, что

$$\int\limits_0^1 \mathrm{P}(y) \, dy = \int\limits_0^1 \big(\omega_n(y) \mathrm{Q}(y) + \mathrm{R}(y)\big) \, dy = \sum_{k=0}^{n} \overline{C}_k \omega_n(y_k) \mathrm{Q}(y_k) + \sum_{k=0}^{n} \overline{C}_k \mathrm{R}(y_k).$$

Первая сумма по определению $\omega(y)$ равна нулю, и обе суммы должны соответствовать своему интегралу, ведь мы потребовали, чтобы квадратурная формула была точна для любого полинома степени не выше $2n+1$:

$$\int\limits_0^1 \omega_n(y) \mathrm{Q}(y) \, dy = \sum_{k=0}^{n} \overline{C}_k \omega_n(y_k) \mathrm{Q}(y_k) = 0, \qquad \int\limits_0^1 \mathrm{R}(y) \, dy = \sum_{k=0}^{n} \overline{C}_k \mathrm{R}(y_k).$$

Из второго равенства следует, что наша квадратурная формула интерполяционного типа, так как точна для любого полинома степени не выше $n$, а значит коэффициенты $\overline{C}_k$ вычисляются по формулам

$$\overline{C}_k = \int\limits_0^1 \frac{\omega_n(y)}{(y - y_k) \omega_n'(y_k)} \, dy.$$

Из первого равенства следует, что $\omega_n(y)$ должен быть ортогонален любому полиному степени не выше $n$ на отрезке $[0, 1]$. Таким свойством для весовой функции, тождественно равной единице, обладают только представители семейства смещённых полиномов Лежандра:

$$\omega_n(y) = \frac{(2n+2)!}{(n+1)!} \frac{d^{n+1}}{dy^{n+1}} \Big( y^{n+1} (y-1)^{n+1} \Big).$$

Нормировочный множитель подобран так, чтобы коэффициент при старшей степени был равен единице. Все корни этих полиномов вещественны и умещаются на отрезке $[0,1]$. Если узлы сетки разместить в этих корнях, то можно сильно повысить точность квадратурной формулы интерполяционного типа. Коэффициенты $\overline{C}_k$ можно вычислять по прямым формулам, а можно составить систему линейных уравнений, как мы сделали для коэффициентов Котеса:

$$\int\limits_0^1 y^i \, dy = \sum_{k=0}^{n} \overline{C}_k y_k^i = \frac{1}{i+1}\,, \qquad i = 0, \ldots, n.$$

Смотрите приложенный скрипт для системы компьютерной алгебры *Maxima*.

Приведём несколько примеров:

$$n = 0, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\, dx \approx (b-a)\, \mathrm{f}\left( \frac{a+b}{2} \right),$$

$$n = 1, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\, dx \approx (b-a) \frac{\mathrm{f}\Big( \frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} a + \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} b \Big) + \mathrm{f}\Big( \frac{\sqrt{3}-1}{2\sqrt{3}} a + \frac{\sqrt{3}+1}{2\sqrt{3}} b \Big)}{2},$$

$$n = 2, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\, dx \approx (b-a) \frac{5\mathrm{f}\Big( \frac{5+\sqrt{15}}{10} a + \frac{5-\sqrt{15}}{10} b \Big) + 8\mathrm{f}\Big( \frac{a+b}{2} \Big) + 5\mathrm{f}\Big( \frac{5-\sqrt{15}}{10} a + \frac{5+\sqrt{15}}{10} b \Big)}{18}.$$

## Квадратурные формулы Радо и Лобатто

Квадратурные формулы Радо и Лобатто строятся по тому же принципу, что и квадратурные формулы Гаусса, только учитываются дополнительные ограничения на узлы сетки. Полагается, что либо первый узел $y_0 = 0$ (первая формула Радо), либо последний узел $y_n = 1$ (вторая формула Радо), либо оба заданы: $y_0 = 0$, $y_n = 1$ (формула Лобатто). Заданные узлы сокращают количество переменных в системе нелинейных уравнений, и приходится понижать степень полиномов, чтобы квадратурные формулы оставались точными. Максимально достижимая степень для формул Радо — $2n$, для формул Лобатто — $2n-1$.

Узлы сеток располагаются в узлах соответствующих полиномов:

$$\text{Радо I} \qquad \omega_n(y) = \frac{(2n+1)!}{(n+1)!} \frac{d^n}{dy^n} \Big( y^{n+1} (y-1)^n \Big),$$

$$\text{Радо II} \qquad \omega_n(y) = \frac{(2n+1)!}{(n+1)!} \frac{d^n}{dy^n} \Big( y^n (y-1)^{n+1} \Big),$$

$$\text{Лобатто III} \qquad \omega_n(y) = \frac{(2n)!}{(n+1)!} \frac{d^{n-1}}{dy^{n-1}} \Big( y^n (y-1)^n \Big).$$

А коэффициенты рассчитываются той же системой линейных уравнений для формулы Гаусса. Смотрите приложенный скрипт для системы компьютерной алгебры *Maxima*.

Несколько примеров формул Радо I:

$$n=0, \quad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\,\mathrm{f}(a),$$

$$n=1, \quad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{\mathrm{f}(a)+3\mathrm{f}\big(\frac{a+2b}{3}\big)}{4},$$

$$n=2, \quad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{4\mathrm{f}(a)+\big(16+\sqrt{6}\big)\mathrm{f}\left(\frac{4+\sqrt{6}}{10}a+\frac{6-\sqrt{6}}{10}b\right)+\big(16-\sqrt{6}\big)\mathrm{f}\left(\frac{4-\sqrt{6}}{10}a+\frac{6+\sqrt{6}}{10}b\right)}{36}.$$

Несколько примеров формул Радо II:

$$n=0, \quad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\,\mathrm{f}(b),$$

$$n=1, \quad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{3\mathrm{f}\big(\frac{2a+b}{3}\big)+\mathrm{f}(b)}{4},$$

$$n=2, \quad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{\big(16-\sqrt{6}\big)\mathrm{f}\left(\frac{6+\sqrt{6}}{10}a+\frac{4-\sqrt{6}}{10}b\right)+\big(16+\sqrt{6}\big)\mathrm{f}\left(\frac{6-\sqrt{6}}{10}a+\frac{4+\sqrt{6}}{10}b\right)+4\mathrm{f}(b)}{36}.$$

Несколько примеров формул Лобатто III:

$$n=0, \qquad \text{не существует},$$

$$n=1, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{\mathrm{f}(a)+\mathrm{f}(b)}{2},$$

$$n=2, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{\mathrm{f}(a)+4\mathrm{f}\big(\frac{a+b}{2}\big)+\mathrm{f}(b)}{6},$$

$$n=3, \qquad \int\limits_a^b \mathrm{f}(x)\,dx \approx (b-a)\frac{\mathrm{f}(a)+5\mathrm{f}\left(\frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5}}a+\frac{\sqrt{5}-1}{2\sqrt{5}}b\right)+5\mathrm{f}\left(\frac{\sqrt{5}-1}{2\sqrt{5}}a+\frac{\sqrt{5}+1}{2\sqrt{5}}b\right)+\mathrm{f}(b)}{12}.$$