Лекция 11.**Усложненные квадратурные формулы и их погрешность**

Мы видели, что в квадратурных формулах Ньютона-Котеса нельзя для уменьшения их погрешности увеличивать степень интерполяционного многочлена. Оказывается, что в этом и нет необходимости т.к. погрешность можно уменьшить за счет другого приема - предварительного разбиения интервала интегрирования $[a, b]$ и построенные таким образом квадратурные формулы носят название усложненных квадратурных формул.

Для построения усложненных квадратурных формул для интегрирования функций $f(x) \in C[a,b]^{n+1}$ с весовой $p(x)$-заданного вида, построим следующую процедуру

$\int_a^b f(x)p(x)dx = \{[a,b] \to \omega_n = \{x_i^{(n)} : a \le x_0 \le x_1 \cdots \le x_n \le b\}$и интеграл представим в виде$\} = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x)p(x)dx = \{$ замена переменных

$x = x_i + (x_{i+1} - x_i)t\} = \sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1} - x_i)\int_0^1 f(x_i + (x_{i+1} - x_i)t)p(x_i + (x_{i+1} - x_i)t)dt = \{[0,1] \to \omega_M = \{t_i : t_0 \le 0 \le \cdots \le t_M \le 1\}$

на этой сетке построим квадратурную

формулу Ньютона-Котеса $\} \to$

$\sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1} - x_i)\sum_{k=0}^{M} f(x_i + (x_{i+1} - x_i)t_k)$

$\int_0^1 \frac{\omega_k(t)}{t-t_k}\omega'(t)p(x_i + (x_{i+1} - x_i)t)dt + \sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1} - x_i)\sum_{k=0}^{M}\int_0^1 \frac{f^{M+1}(\xi)}{(M+1)!}p(x_i + (x_{i+1} - x_i)t)\omega_k(t)dt, \xi \in [0,1]$

Первое слогаемое в этой формуле - квадратурная формула, второе -ее погрешность.

Простейшие усложненные квадратурные
формулы и их погрешность для $p(x) = 1$

1. Квадратурная формула трапеций.

$M = 1, \omega_M = \{0, 1\}$

$\int_a^b f(x)dx \to \sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1} - x_i)\frac{1}{2}[f(x_i) + f(x_{i+1})]$

ее погрешность

$D_n^{tr} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f'''(\xi)}{12}(x_{i+1} - x_i)^3$

$h = |x_{i+1} - x_i|$ -однородные сетки $hn = (b - a), \sum_{i=0}^{n-1} h = hn = b - a$

имеем

$\int_a^b f(x)dx \to h[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2}f(x_n)]$

$D_h^{tr} = \frac{b-a}{12}\max_{x\in[a,b]}|f'''(x)|h^2, f(x) \in C^2_{[a,b]} = O(h^2)$

Более точные оценки для функций $f(x) \in C^4_{[a,b]}$ дают для порядка малости

$D_h^{tr} = O(h^2) + O(h^4)$.

2. Усложненная квадратурная формула Симпсона.

$M = 2, \omega_M = \{0, 1/2, 1\}$

$\int_a^b f(x)dx \to \sum_{i=0}^{n-1}(x_{i+1} - x_i)\frac{1}{6}[f(x_i) + 4 * f(\frac{x_i + x_{i+1}}{2}) + f(x_{i+1})]$

ее погрешность

$D_n^{Sim} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f^{(5)}(\xi)}{2880}(x_{i+1} - x_i)^5$

$h = |x_{i+1} - x_i|$ -однородные сетки $hn = (b - a), \sum_{i=0}^{n-1} h = hn = b - a$ $n \to 2n$ -четные имеем $\int_a^b f(x)dx \to \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) \ldots + 4f(x_{2n-1}) + f(x_{2n})]$

$D_h^{Sim} = \frac{b-a}{2880}\max_{x\in[a,b]}|f^{(4)}(x)|h^4, f(x) \in C^4_{[a,b]} = O(h^2)$

Более точные оценки для функций $f(x) \in C^6_{[a,b]}$ дают для порядка малости

$D_h^{Sim} = O(h^4) + O(h^6)$.

3. Сплайн- квадратура. Пусть $f(x) \in C^4_{[a,b]}$

$\int_a^b f(x)dx = \{[a,b] \to \omega_n = \{x_i : a \le x_0 < x_1 \ldots < x_n \le b\}$ сеточную функцию заменим сплайном 3-степени $S_3 = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3\} \to \sum_{i=0}^{n-1}[a_i h_i + b_i\frac{h_i^2}{2} + c_i\frac{h_i^3}{3} + d_i\frac{h_i^4}{4}] + O(h^4)$

$h_i = |x_i - x_{i-1}|, h = \max_i h_i$.

Если вспомнить определение кубического сплайна, то

$a_i = f(x_i), b_i = \frac{f(x_i)-f(x_{i-1})}{h_i} - \frac{h_i}{3}(c_{i+1}+2c_i), d_i = \frac{c_{i+1}-c_i}{3h_i}$, коэффициенты c_i -находятся из системы линейных уравнений с матрицей ленточного типа, методом прогонки

$\int_a^b f(x)dx \to \sum_{i=0}^{n-1}[\frac{h_i}{2}(f(x_i)+f(x_{i+1}) - \frac{h_i^3}{3}(c_i+c_{i+1}) + O(h^4)$

Правило Рунге и уточнение решения по Ричардсону.

Правило является фундаментальным для вычислительной математики и позволяет оценивать точность вычислений, т.е. близость приближенного решения к (неизвестному) точному решению путем сравнения приближенных значений. При этом используются некоторые теоретические оценки погрешности и если этих оценок не имеется - наличие их полагается априори.

Пусть на сетке $\omega_n = \{x_i :, a \leq x_0 < x_1 \cdots < x_n \leq b\}, h = \max_i |x_{i+1} - x_i| < 1$ известно, что точное значение I некоторой величины связано с ее приближенным значением I_h связью вида

$I = I_h + \alpha_q h^q + \alpha_p h^p, p > q, \alpha_q, \alpha_p$-посттоянные, не зависящие от h.

$(1)\omega_{h_1} \to I = I_{h_1} + \alpha_q h_1^q + \alpha_p h_1^p = I_{h_1} + D_{h_1}$

$(2)\omega_{h_2} \to I = I_{h_2} + \alpha_q h_2^q + \alpha_p h_2^p = I_{h_2} + D_{h_2}$

Вычитая из (1) (2), будем иметь

$I_{h_1} - I_{h_2} = \alpha_q h_2^q[(\frac{h_1}{h_2})^q - 1] + \alpha_p h_2^p[(\frac{h_1}{h_2})^p - 1]$

Откуда следует, что

$\alpha_q h_2^q = \frac{I_{h_1} - I_{h_2} - \alpha_p h_2^p[(\frac{h_1}{h_2})^p - 1]}{[(\frac{h_1}{h_2})^q - 1]} \to (2)$ будем иметь

$I - I_{h_2} = \frac{I_{h_1} - I_{h_2} - \alpha_p h_2^p[(\frac{h_1}{h_2})^p - 1]}{[(\frac{h_1}{h_2})^q - 1]} + \alpha_p h_2^p \sim \frac{I_{h_1} - I_{h_2}}{[(\frac{h_1}{h_2})^q - 1]} + O(h^P)$ Откуда следует **правило**, если на сетке ω_h точное значение некоторой величины I связано с приближенным значением I_h соотношением $I = I_h + \alpha_q h^q + \alpha_p h^p$ и приближенные значения I_{h_1}, I_{h_2}, вычисленные на сетках $\omega_{h_1}, \omega_{h_2}$ удовлетворяют соотношению

$\frac{|I_{h_1} - I_{h_2}|}{|(\frac{h_1}{h_2})^q - 1|} < \epsilon$, ϵ-наперед заданное малое число, тогда

$|I - I_{h_2}| < \epsilon$.

Кроме того, оказывается, что с помощью линейной комбинации этих же приближенных значений, можно получить приближенное значение с порядком малости $O(h^p)$. Действительно

$I = \gamma I + (1-\gamma)I = \{(1),(2) \to\} = \gamma I_{h_1} + (1-\gamma)I_{h_2} + \gamma D_{h_1} + (1-\gamma)D_{h_2}$

$\gamma D_{h_1} + (1-\gamma)D_{h_2} = \gamma\alpha_q h_1^q + (1-\gamma)\alpha_q h_2^q + \gamma\alpha_p h_1^p + (1-\gamma)\alpha_p h_2^p$

Приравнивая нулю слагаемое порядка малости $O(h^q)$

$\gamma\alpha_q h_1^q + (1-\gamma)\alpha_q h_2^q = 0$ находим, что

$\bar{\gamma} = \frac{h_2^q}{h_2^q - h_1^q}$ и, следовательно величина

$I_h = \bar{\gamma} I_{h_1} + (1-\bar{\gamma})I_{h_2}$ будет отличатся от точного значения на величину $O(h^p)$. Найденное таким образом приближенное значение и называется уточнением по Ричардсону.

На практике $h_2 = h_1/2, \qquad \gamma = 0.5$.

Правило Рунге на практике следует применять с осторожностью, т.к. например в процессе вычисления интегралов могу встречаться функции с дельтообразной особенностью для которых выбор сеток неочевиден. (графический рис.) В стандартных программах, когда говорят о вычислении интеграла с заданной точностью имеют в виду применение правила Рунге и соответствующие алгоритмы называют адаптивными.

Интегралы с особенностями Очевидно, что несобственные интегралы, не вычисляются по простейшим квадратурным формулам и для преодоления трудностей их вычисления часто помогают различные приемы, например, аналитические методы

1. Интегрирование по частям

$\int_0^{10} \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx = \cos(x)(2\sqrt{x})|_0^{10} + 2\int_0^{10} \sqrt(x)\sin(x)dx$

в данном случае избавились от особенности

2. Замена переменной

$\int_0^c \frac{\cos(x)}{\sqrt(x)} dx = \{x = t^2\} = \int_0^{c^2} \frac{\cos(t^2)}{t} 2t dt =$

$2\int_0^{c^2} \cos(t^2) dt$

в данном случае мы избавились от особенности, но получили неприятности при вычислении интеграла для больших c.

3. Использование рядов.

$\int_0^{10} \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx = \int_0^c \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx + \int_c^{10} \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx$

И для вычисления первого интеграла с особенностью

$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \cdots$

Тогда

$\int_0^c \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx = \int_0^c \frac{1}{\sqrt{x}} dx - \int_0^c \frac{x^{3/2}}{2!} dx + \int_0^c \frac{x^{7/2}}{4!} dx - \cdots$

Каждый из интегралов в правой части вычисляется по формуле Ньютона-Лейбница и вопрос вычисления интеграла с особенностью сводится к вычислению ряда.

Использование весовых функций

Очень часто для вычисления интегралов требуется выделить весовую функцию и построить квадратурную формулу в соответствующем виде. Например, интегралы от быстро осциллирующих функций

$\int_a^b f(x) \sin(\omega x) dx, \int_a^b f(x) \cos(\omega x) dx$

Здесь удобно интерполяционным многочленом заменить функцию $f(x)$, а функции $\sin(\omega x), \cos(\omega x)$ взять в качестве весовых.

Кратные интегралы Вычисление интеграла по некоторой области D

$I^{(m)} = I^{(m)}(f, D) = \int \cdots \int\limits_D f(x_1, x_2, \cdots, x_m) dx_1 \cdots dx_m$

можно свести к вычислению определенных интегралов $\int_a^b f(x) dx$ Однако сложность соответствующих алгоритмов и число арифметических операций для вычисления интеграла с заданной точностью возрастает с ростом размерности и дополнительное затруднение возникает для областей общего вида. Наиболее распространенным в этом случае алгоритме является метод Монте-Карло. Суть метода в следующем. Будем считать, что область интегрирования лежит внутри единичного куба $D_1 = \{|x_i| < 1, i = \overline{1, n}\}$. Доопределим функцию $f(x), x = (x_1 < \cdots, x_n)$ вне области D нулем. Пусть далее имеется датчик случайных чисел, который выдает случайные числа, лежащие на отрезке $[0, 1]$ с плотностью распределения вероятности, равной единице. С помощью этого датчика построим последовательность точек $P_k, k = 1, 2, \cdots$ и составим числовую последовательность

$S_k = \frac{1}{k} \sum_{j=0}^k f(P_j)$.

Легко представить, что при произвольном $\epsilon > 0$ вероятность того, что погрешность $I^{(m)} - S_k$ меньше ϵ

$|I^{(m)} - S_k| < \epsilon$

$P(|I^{(m)} - S_k|, \epsilon) \to_{k \to 0} 1$

с ростом числа k испытаний стремится к единице. Имеются соответствующие теоремы.

Погрешность вычислений при этом имеет порядок малости $O(\frac{1}{\sqrt{k}})$.

Смысл метода особенно нагляден если $n = 2, f(x) = 1$. Интеграл в этом случае -площадь области D, а S_k - отношение числа тех точек $P_1, P_2, \cdots, P_k$, котрые попали в область D, к числу всех точек. Очевидно, что это отношение приблизительно равно площади области D, поскольку площадь всего квадрата куда попадают точки, равна единице.

Привлекательность метода -в логической простоте алгоритма, который не усложняется с ростом размерности и усложнением области интегрирования. Однако в случае простых областей и узких классов функций метод проигрывает методам учитывающих эту специфику.